ФИЗИЧЕСКИЙ
ФАКУЛЬТЕТ
МГУ ИМЕНИ
М.В. ЛОМОНОСОВА

teach-in
ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ. ЧАСТЬ 1

СИЛАЕВ
ПЕТР КОНСТАНТИНОВИЧ

ФИЗФАК МГУ

КОНСПЕКТ ПОДГОТОВЛЕН СТУДЕНТАМИ, НЕ ПРОХОДИЛ ПРОФ. РЕДАКТУРУ И МОЖЕТ СОДЕРЖАТЬ ОШИБКИ. СЛЕДИТЕ ЗА ОБНОВЛЕНИЯМИ НА VK.COM/TEACHINMSU.

ЕСЛИ ВЫ ОБНАРУЖИЛИ ОШИБКИ ИЛИ ОПЕЧАТКИ, ТО СООБЩИТЕ ОБ ЭТОМ, НАПИСАВ СООБЩЕСТВУ VK.COM/TEACHINMSU.

БЛАГОДАРИМ ЗА ПОДГОТОВКУ КОНСПЕКТА
СТУДЕНТКУ ФИЗИЧЕСКОГО ФАКУЛЬТЕТА МГУ
ГЕОРГИЕВСКУЮ ЕКАТЕРИНУ ПАВЛОВНУ

Оглавление

2 Лекции 1 и 2. Операторы. Матричное представление. 6
2.1 Спектральное разложение 6
2.2 Унитарные операторы 8
2.3 Координатное и импульсное представление 10
2.4 Матричное представление 11
2.5 Теория измерений 12
3 Лекция 3. Чистые и смешанные состояния. 16
3.1 Свойства следа 16
3.2 Свойства матрицы плотности 16
3.3 Неполяризованное состояние 19
3.4 Поляризованное состояние 20
3.5 Принцип суперпозиции 24
4 Лекция 4. Вероятностная интерпретация 26
4.1 Редукция волновой функции 29
4.2 Совместимые наблюдаемые 29
4.3 Полный набор наблюдаемых 32
4.4 Соотношение неопределенности 33
5 Лекция 5. Смешанные состояния. Матрица плотности. 37
5.1 Теория измерений для составных систем 38
5.2 Парадоксы квантовой теории 44
6 Лекция 6. Динамическая система квантовой механики. 47
6.1 Матрицы Паули 47
6.2 Квантовая телепортация 49
6.3 Динамика 50
6.4 Интегралы движения и симметрия 53
7 Лекция 7. Представление Гейзенберга. 56
7.1 Уравнение Гейзенберга 56
7.2 Теорема о вырожденном спектре 59
7.3 Формальное решение уравнения Гейзенберга. Оператор эволюции. 60
8 Лекция 8. Представление Шрёдингера. 66
8.1 Решение уравнения Гейзенберга 66

8.2 Представление Шрёдингера . . . 68
8.3 Одномерное движение материальной точки . . . 71
9 Лекция 9. Непрерывный спектр. . . . 75
9.1 Математическое отступление о непрерывном спектре . . . 75
9.2 Оператор со смешанным спектром . . . 78
9.3 Импульсное представление . . . 79
9.4 Общие свойства одномерного стационарного уравнения Шрёдингера 82
10 Лекция 10. Дискретный спектр. . . . 86
10.1 Решение уравнения Шрёдингера. Сшивание функций. . . . 86
10.2 Нестационарное уравнение Шрёдингера. Уравнение непрерывности. 94
11 Лекция 11. Нестационарное уравнение Шрёдингера. . . . 96
11.1 Нестационарное уравнение Шрёдингера. Уравнение непрерывности. 96
11.2 Рассеяние . . . 98
11.3 Движение волновых пакетов . . . 102
12 Лекция 12. Нестационарное уравнение Шрёдингера. . . . 106
12.1 Решение нестационарного уравнения Шрёдингера. . . . 106
12.2 Классический предел квантовой теории . . . 108
12.3 Периодический потенциал . . . 113
13 Лекция 13. Одномерное движение. . . . 116
13.1 Периодический потенциал . . . 116
13.2 Вариационный принцип Ритца и вариационный метод Ритца . . . 120
13.3 Приближение Венцера-Краммерса-Бриюллена (ВКБ) . . . 123
14 Лекция 14. Нестационарное уравнение Шрёдингера. . . . 124
14.1 Приближение Венцера-Краммерса-Бриюллена (ВКБ) . . . 124
14.2 Правила квантования Бора-Зоммерфельда . . . 131
15 Лекция 15. Потенциальный барьер и потенциальная яма. . . . 134
15.1 Правила квантования Бора-Зоммерфельда . . . 134
15.2 Нормировочный коэффициент для квазиклассической волновой функции . . . 136
15.3 Прохождение сквозь барьер . . . 137
15.4 Расщепление уровней в двойной яме . . . 140
16 Лекция 16. Теория моментов. . . . 144
16.1 Расщепление уровней в двойной яме . . . 144
16.2 Теория моментов . . . 148
17 Лекция 17. Орбитальный момент. . . . 154
17.1 Теория моментов . . . 154
17.2 Сложение моментов . . . 157
17.3 Пример сложения моментов . . . 161
17.4 Классификация операторов . . . 162

18 Лекция 18. Скалярный оператор, оператора поворота. 163
18.1 Скалярный оператор 163
18.2 Матричные элементы скалярного оператора 164
18.3 Матричные элементы векторного оператора 166
19 Лекция 19. Центрально-симметричное поле. 172
19.1 Неприводимые тензора 172
19.2 Аналог теоремы Вигнера–Эккарта 174
19.3 Трёхмерное движение материальной точки 175
19.4 Центрально-симметричный потенциал 177
19.5 Падение на центр 180
20 Лекция 20. Уравнение Паули. 183
20.1 Падение на центр 183
20.2 Движение в магнитном поле 186
20.3 Эффект Ааронова-Бома 190

Лекции 1 и 2. Операторы. Матричное представление.

Спектральное разложение

Любой эрмитов оператор с чисто дискретным спектром имеет базис собственных векторов:

$$A\,|\alpha_n\rangle = a_n\,|\alpha_n\rangle \tag{2.1}$$

В этом базисе матрица оператора приобретает вид:

$$A = \begin{pmatrix} a_1 & & & 0 \\ & a_2 & & \\ & & a_3 & \\ 0 & & & \ddots \end{pmatrix} \tag{2.2}$$

Однако данное представление не может быть использовано как спектральное разложение, так как оно жёстко привязано к базису.
Ранее было доказано, что $|\alpha_2\rangle\langle\alpha_2|$ является проектором на одномерное пространство, которое образуется базисным вектором $\alpha_2\rangle$. При этом, если перейти в указанный ранее базис, получим:

$$|\alpha_2\rangle\langle\alpha_2| = \begin{pmatrix} 0 & & & & 0 \\ & 1 & & & \\ & & 0 & & \\ & & & 0 & \\ 0 & & & & \ddots \end{pmatrix} \tag{2.3}$$

Таким образом, в самом общем случае оператор $\hat{A}$ (вне зависимости от базиса) может быть записан в виде:

$$\hat{A} = a_1\,|\alpha_1\rangle\langle\alpha_1| + a_2\,|\alpha_2\rangle\langle\alpha_2| + \ldots = \sum_n a_n\,|\alpha_n\rangle\langle\alpha_n| \tag{2.4}$$

Запись

$$\hat{A} = \sum_n a_n\,|\alpha_n\rangle\langle\alpha_n| \tag{2.5}$$

является спектральным разложением эрмитова оператора с дискретным спектром.

Пусть дана волновая функция $|\alpha\rangle$. Известно, что при измерении физической величины A с вероятностью 1 будем получать результат a_5. При измерении же $f(\hat{A})$ получим $f(a_5)$.

Таким образом, можно записать определение функции от оператора следующим образом:

$$f(\hat{A}) \equiv \sum f(a_n) \, |\alpha_n\rangle \, \langle\alpha_n| \tag{2.6}$$

Пример. Рассмотрим

$$A = \begin{pmatrix} -1 & & & & 0 \\ & 2 & & & \\ & & -3 & & \\ & & & 4 & \\ 0 & & & & \ddots \end{pmatrix} \tag{2.7}$$

Тогда, в соответствии с определением $f(\hat{A})$ можно получить:

$$\theta(A) = \begin{pmatrix} 0 & & & & 0 \\ & 1 & & & \\ & & 0 & & \\ & & & 1 & \\ 0 & & & & \ddots \end{pmatrix} \tag{2.8}$$

Определим, при каких условиях определения функции от оператора через ряд Тейлора и через спектральное представление совпадают. В базисе собственных векторов функция от оператора имеет вид:

$$f(\hat{A}) = \begin{pmatrix} f(a_1) & & 0 \\ & f(a_2) & \\ 0 & & \ddots \end{pmatrix} \tag{2.9}$$

Допустим, что для всех собственных значений ряд Тейлора для функции f сходится. Тогда получим:

$$f(\hat{A}) = \begin{pmatrix} f(a_1) & & 0 \\ & f(a_2) & \\ 0 & & \ddots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(0) + \frac{f'(0)}{1!}a_1^1 + \frac{f''(0)}{2!}a_1^2 + \ldots & & 0 \\ & f(0) + \frac{f'(0)}{1!}a_2^1 + \ldots & \\ 0 & & \ddots \end{pmatrix} =$$

$$= f(0) + \frac{f'(0)}{1!}\begin{pmatrix} a_1 & & 0 \\ & a_2 & \\ 0 & & \ddots \end{pmatrix} + \frac{f''(0)}{2!}\begin{pmatrix} a_1^2 & & 0 \\ & a_2^2 & \\ 0 & & \ddots \end{pmatrix} + \ldots\ldots \tag{2.10}$$

Заметим, что

$$\begin{pmatrix} a_1 & & 0 \\ & a_2 & \\ 0 & & \ddots \end{pmatrix} = A, \quad \begin{pmatrix} a_1^2 & & 0 \\ & a_2^2 & \\ 0 & & \ddots \end{pmatrix} = A^2, \ \ldots \tag{2.11}$$

Таким образом,

$$f(\hat{A}) = f(0) + \frac{f'(0)}{1!}A^1 + \frac{f''(0)}{2!}A^2 + ... \tag{2.12}$$

Замечание. Пусть дана функция одного оператора: $sin2\hat{A}$. Её свойства в точности повторяют свойства такой же функции, взятой от числа. То есть:

$$\sin 2\hat{A} = 2\sin\hat{A}\cos\hat{A} \tag{2.13}$$

В данном случае это можно доказать с помощью любого из двух определений. В случае спектрального разложения (решая спектральную задачу) для каждого собственного значения получим соответствующее свойство функции, взятой от числа. В случае определения через ряд Тейлора можно заметить, что для степеней оператора верно: $\hat{A}^n\hat{A}^m \equiv \hat{A}^{n+m}$.

Однако, в случае некоммутирующих операторов описанные свойства не выполняются:

$$\left(\hat{A}+\hat{B}\right)^2 \neq \hat{A}^2 + 2\hat{A}\hat{B} + \hat{B}^2 \tag{2.14}$$

Унитарные операторы

Унитарный оператор удовлетворяет соотношению:

$$U^\dagger = U^{-1} \tag{2.15}$$

то есть при эрмитовом сопряжении матрица оператора переходит в обратную.

Таким образом, унитарные операторы реализуют повороты. Рассмотрим повороты на плоскости:

$$x' = xcos\varphi - ysin\varphi \tag{2.16}$$

$$y' = ycos\varphi + xsin\varphi \tag{2.17}$$

Рассмотрим случай изменения базиса. Пусть есть унитарный оператор $\hat{U}$, построим новый базис $|U_n\rangle$ из старого базиса $|n\rangle$:

$$|U_n\rangle \equiv \hat{U}\,|n\rangle \tag{2.18}$$

Убедимся, что $\hat{U}$ действительно является базисом. Эрмитово сопрягаем равенство (1.19):

$$\langle U_n| = \langle n|\,U^\dagger$$

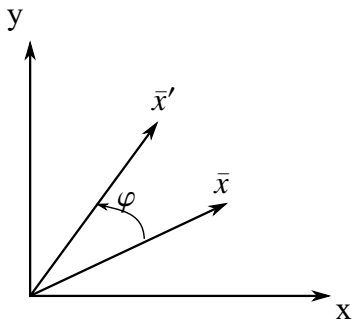


Рис. 2.1: Поворот вектора.

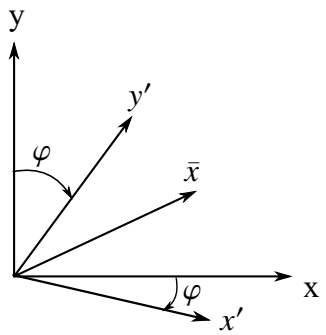


Рис. 2.2: Поворот системы координат.

Тогда

$$\langle U_m | U_n \rangle = \langle m | U^\dagger U | n \rangle = \langle m | n \rangle = \delta_{mn}$$

Так как $U^\dagger = U^{-1}$.

Выясним, как выглядят новые базисные вектора в старом базисе. Рассмотрим первый вектор:

$$\langle n | U_1 \rangle = \langle n | U | 1 \rangle = U_{n_1} \tag{2.19}$$

Таким образом, U_1 - первый столбец унитарной матрицы U:

$$|U_1\rangle = \begin{pmatrix} U_{11} \\ U_{21} \\ U_{31} \\ . \\ . \\ . \end{pmatrix}$$

Значит, соорудив новый базис, можно построить унитарный оператор таким образом, что его матрица в первом столбце содержит коэффициенты разложения нового базиса по старому для первого базисного вектора, второй столбец - для второго базисного вектора и т.д.

Замечание. Строки унитарного оператора тоже являются базисом.

Теперь рассмотрим преобразование с точки зрения изменения векторов (а не базиса). В новом базисе коэффициенты разложения по этому новому базису произвольного вектора ψ примут вид:

$$\langle U_n | \psi \rangle = \langle n | U^\dagger | \psi \rangle \tag{2.20}$$

Обозначим: $|\psi'\rangle = U^\dagger |\psi\rangle$.

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

Рассмотрим, как преобразуются матрицы. В новом базисе

$$A'_{mn} = \langle U_m | A | U_n \rangle = \langle m | U^\dagger A U | n \rangle \tag{2.21}$$

Значит, закон преобразования оператора при унитарном повороте имеет вид

$$\hat{A}' = U^\dagger A U \tag{2.22}$$

Замечание. Ни одна физически наблюдаемая величина не может измениться в результате унитарного поворота. **Замечание.** Скалярное произведение инвариантно относительно вращений:

$$\langle \psi' | \chi' \rangle = \langle \psi | \chi \rangle \tag{2.23}$$

$$\langle \psi' | A' | \chi' \rangle = \langle \psi | A | \chi \rangle \tag{2.24}$$

Следовательно, вероятности перехода и среднее значение физических величин не изменяются при унитарных преобразованиях.
Спектральная задача также не изменяется при унитарном преобразовании:

$$A' | \alpha'_n \rangle = a_n | \alpha'_n \rangle \tag{2.25}$$

$$A | \alpha_n \rangle = a_n | \alpha_n \rangle \tag{2.26}$$

Координатное и импульсное представление

В квантовой механике выбор базиса называется представлением. Из сказанного выше следует, что все представления являются унитарно эквивалентными, то есть все представления, которые получены в разных представлениях, должны совпадать. Представление выбирается из соображений удобства.

В случае координатного представления в качестве базиса используется базис собственных векторов оператора координат:

$$\psi(x) \equiv \langle x | \psi \rangle \tag{2.27}$$

$$\hat{x} | x \rangle = x | x \rangle \tag{2.28}$$

Аналогично для импульсного представления используется базис собственных векторов оператора импульса:

$$\psi(p) = \langle p | \psi \rangle \tag{2.29}$$

Переход от координатного к импульсному представлению реализуется через преобразование Фурье. Значит, оператор, реализующий преобразование Фурье, должен

быть унитарным оператором. Покажем это.
Пусть имеется некоторое преобразование, которое сохраняет скалярное произведение для любых векторов гильбертова пространства ψ и ξ:

$$\langle\psi'|\chi'\rangle = \langle\psi|\, U^{\dagger}U\,|\chi\rangle = \langle\psi|\chi\rangle \tag{2.30}$$

Отсюда вытекает унитарность оператора, так как в качестве ψ и ξ нужно брать базисные вектора. В случае совпадения матриц совпадают и операторы. Путём перебор всех базисных векторов слева и справа можно показать, что $U^{\dagger}U$ является единичным оператором.

В теории Фурье-преобразования имеет место равенство (**теорема Парсеваля**):

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_1^*(x)\psi_2(x)dx = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi_1^*(k)\psi_2(k)dk \tag{2.31}$$

Матричное представление

$\psi(x)$ можно представить в виде (столбец бесконечного числа комплексных чисел):

$$\psi(x) = \sum C_n f_n(x) \tag{2.32}$$

где в качестве базиса можно выбрать классические ортогональные полиномы Эрмита:

$$f_n(x) = N_n H_n\left(\frac{x}{x_0}\right)e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}} \tag{2.33}$$

Такой базис, в котором волновая функция представляет собой столбец комплексных чисел $\begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ C_3 \\ . \\ . \\ . \end{pmatrix}$ называется **матричным представлением**.

Если в качестве базиса выбрать собственные функции оператора энергии (гамильтониана):

$$H\,|\psi_n\rangle = E_N\,|\psi_n\rangle \tag{2.34}$$

Замечание. В случае базиса (1.34) получаем одновременно и матричное, и энергетическое представление (так как это собственные вектора гамильтониана гармонического осциллятора).

Теория измерений

Рассмотрим опыт Штерна-Герлаха: в печке нагревается серебряная проволока, формируется пучок, влетающий в неоднородное магнитное поле. На магнитный момент в неоднородном магнитном поле действует сила. В результате были получены два пятна, соответствующие двум проекциям спина.

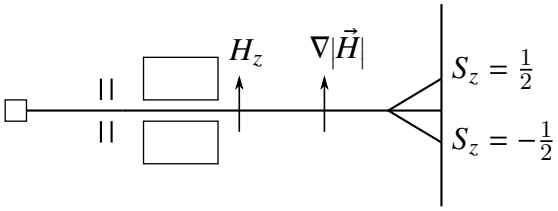


Рис. 2.3: Опыт Штерна-Герлаха

При измерении получаем собственные значения. Их всего два, поэтому можно ввести оператор спина следующим образом:

$$\hat{S}_z = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{pmatrix} \tag{2.35}$$

Модифицируем опыт. Пропустим верхний пучок через ещё один прибор Штерна-Герлаха. В результате получим одно пятно. Отсюда следует, что два пятна, полученные

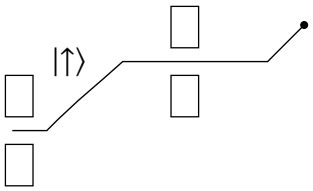


Рис. 2.4: Модифицированный опыт Штерна-Герлаха

в первоначальном опыте, это не два случая, а свойство состояния, которое вылетает из печки. Таким образом, мы приготовили состояние, в котором спин направлен вверх $|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$. Аналогично, в случае нижнего пучка мы бы получили $|\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$.

Если второй прибор Штерна-Герлаха (в модифицированном опыте) перевернуть, верхнее пятно станет нижним.

Теперь рассмотрим случай, в котором второй прибор повернут на девяносто градусов. Пусть спины всех частиц пучка направлены по оси x. Они влетают в прибор с полем, ориентированным по оси z. Тогда снова получим два пятна.

Рассмотрим случай, в котором спины частиц направлены вдоль оси n, которая составляет угол θ с осью z (Рис. 2.5).

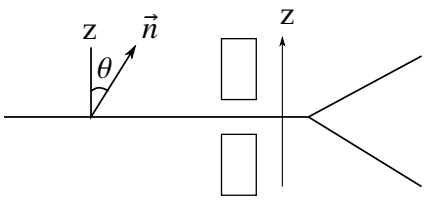


Рис. 2.5: Поворот

Тогда в случае $\theta = 0$ попадаем только в верхнее пятно, при $\theta = \pi$ - в нижнее пятно, при $\theta = \frac{\pi}{2}$ равновероятное попадание:

$$\theta = 0 \Rightarrow \begin{cases} P_{\text{в}} = 1 \\ P_{\text{н}} = 0 \end{cases} ; \theta = \pi \Rightarrow \begin{cases} P_{\text{в}} = 0 \\ P_{\text{н}} = 1 \end{cases} ; \theta = \frac{\pi}{2} \Rightarrow \begin{cases} P_{\text{в}} = \frac{1}{2} \\ P_{\text{н}} = \frac{1}{2} \end{cases}$$

Где $P_{\text{в}}$ - вероятность попадания в верхнее пятно, а $P_{\text{н}}$ - в нижнее.
Все три случая может описать формула:

$$P_{\text{в}} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} cos\theta \tag{2.36}$$

При этом

$$P_{\text{н}} = 1 - P_{\text{в}} \tag{2.37}$$

В самом общем случае можно записать (частично поляризованное состояние)

$$P_{\text{в}} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \xi cos\theta \tag{2.38}$$

где ξ - степень поляризации: $0 \leqslant \xi \leqslant 1$. При этом $\xi = 0$ - абсолютно неполяризованное состояние, $\xi = 1$ - абсолютно поляризованное состояние.

Рассмотрим следующую ситуацию. Для одной частицы было приготовлено какое-то состояние и измерена одна из возможных величин $- S_z = +1/2$. В этом случае нельзя сделать никаких утверждений о состоянии квантовой системы.
Рассмотрим другую ситуацию. Приготовим одинаковым образом состояния десяти тысяч частиц и измерим S_z. Тогда получим, что результат $+1/2$ получится с некоторой вероятностью $P_{\text{в}}$, а $-1/2$ – с вероятностью $P_{\text{н}} = 1 - P_{\text{в}}$. Однако и в этом случае мы никак не зафиксировали состояние квантово-механической системы в данной серии измерений. Единственный способ зафиксировать состояние квантово-механической системы – узнать результаты измерений всех наблюдаемых в этой системе.
В случае описанной выше задачи это означает, что прибор Штерна-Герлаха нужно сориентировать его произвольным образом вдоль оси n' и для каждой ориентации набрать достаточную статистику и сделать это для всевозможных ориентаций оси $\vec{n}'$.

Рассмотрим формулу вероятности (1.37):

$$\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\xi\vec{n}\vec{n}' \tag{2.39}$$

Формально нужно перебрать все ориентации прибора $\vec{n}'$. Однако, в силу линейности можно ограничиться всего тремя измерениями:

$$\vec{n}'=\begin{cases}e_x\\e_y\\e_z\end{cases}$$

Под результатами измерений подразумевают возможные ответы. Однако, опят показывает, что построение теории на основе спектра наблюдаемых и соответствующих вероятностей неудобно. Поэтому обычно используют средние значения всех наблюдаемых. Таким образом, состояние квантово-механической системы фиксировано тогда и только тогда, когда известно среднее значение любой наблюдаемой данной системы.

Замечание. Знание среднего любой наблюдаемой эквивалентно вероятности получения того или иного собственного значения любой наблюдаемой. Покажем это.

Пусть базис собственных векторов наблюдаемой:

$$A=\begin{pmatrix}a_1 & & & 0\\ & a_2 & & \\ & & a_3 & \\ 0 & & & \ddots\end{pmatrix} \tag{2.40}$$

Тогда среднее значение имеет вид

$$\langle A\rangle=\sum_n a_n p_n \tag{2.41}$$

Пусть мы хотим определить p_2 – вероятность того, что при измерении мы получим a_2. Составим эрмитов оператор:

$$A'=\begin{pmatrix}0 & & & 0\\ & 1 & & \\ & & 0 & \\ 0 & & & \ddots\end{pmatrix} \tag{2.42}$$

Его среднее будет равняться искомомуp_2. Таким образом, измеряя физическую величину A', определяем отдельную вероятность p_2 (аналогично можно поступить и для других

вероятностей). Значит, знание спектра и вероятностей означает знание всех средних и наблюдаемых. Обратно - знание всех средних всех наблюдаемых эквивалентно знанию людой из вероятностей p_n.

Аксиомы фон Неймана:

1. Линейность:
$$\langle a\bar{A} + b\bar{B}\rangle = a\,\langle \bar{A}\rangle + b\,\langle \bar{B}\rangle \tag{2.43}$$
2.
$$\langle 1\rangle = 1 \tag{2.44}$$
3. Среднее значение наследует свойства физической величины. Если спектр неотрицателен, то среднее значение неотрицательно; если спектр вещественный (чисто мнимый), то среднее значение вещественно (чисто мнимое):
$$a_n \geqslant 0 \qquad \langle A\rangle \geqslant 0 \tag{2.45}$$
$$a_n \in Re \qquad \langle A\rangle \in Re \tag{2.46}$$
$$a_n \in Im \qquad \langle A\rangle \in Im \tag{2.47}$$

Определим конструкцию, которая описывает состояние системы. Пусть есть некоторая физическая величина A. Преобразуем её: домножим слева и справа на единичный оператор и распишем единичные операторы через суммы:

$$\hat{A} = 1\cdot\hat{A}\cdot 1 = \sum_n |n\rangle\langle n|\,\hat{A}\sum_m |m\rangle\langle m| = \sum_{nm} |n\rangle\langle m|\cdot A_{nm} \tag{2.48}$$

Найдём среднее:

$$\langle\hat{A}\rangle = \left\langle \sum_{nm} |n\,\langle m|A_{nm}\rangle \right\rangle = \sum_{nm} A_{nm}\big\langle\, |n\rangle\langle m|\,\big\rangle \tag{2.49}$$

Заметим, что A_{nm} определяет физическую величину (она зависит только от физической величины и выбранного базиса). Состояние квантовой-механической системы определяется $\big\langle\, |n\rangle\langle m|\,\big\rangle$. Данная конструкция называется **матрицей плотности** и обозначается:

$$\rho_{nm} = \big\langle\, |n\rangle\langle m|\,\big\rangle$$

Лекция 3. Чистые и смешанные состояния.

Свойства следа

На прошлой лекции было введено понятие матрицы плотности. Она позволяет найти среднее значение любой физической величины:

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_{nm} A_{nm}\rho_{nm} \sum_{n} \langle n| \hat{A}\hat{\rho} |n\rangle = Tr(\hat{A}\hat{\rho}) \tag{3.1}$$

Свойства следа.

1. $Tr\left(a\hat{A} + b\hat{B}\right) = a \cdot Tr\hat{A} + b \cdot Tr\hat{B}$
2. $Tr\left(\hat{B}\hat{C}\hat{D}\hat{A}\right) = Tr\left(\hat{A}\hat{B}\hat{C}\hat{D}\right) = Tr\left(\hat{D}\hat{A}\hat{B}\hat{C}\right)$
3. $Tr\left(\hat{A}'\right) = Tr\left(\hat{U}^{\dagger}\hat{A}\hat{U}\right) = Tr\left(\hat{A}\hat{U}\hat{U}^{\dagger}\right) = Tr\hat{A}$
4. $Tr\hat{A} = \sum_n a_n$

Свойства матрицы плотности

1. Условие нормировки для матрицы плотности:

$$Tr(\rho) = 1 \tag{3.2}$$

$$Tr(\rho \cdot 1) = \langle 1 \rangle = 1 \tag{3.3}$$

2. Матрица плотности эрмитова:

$$\rho^{\dagger} = \rho \tag{3.4}$$

Докажем данное утверждение. Запишем определение эрмитовости (где ρ^*_{nm} – матричный элемент эрмитово сопряжённой матрицы):

$$\rho^*_{nm} = \rho_{mn} \tag{3.5}$$

Достаточно доказать, что для диагональных элементов выполняется $\rho^*_{nn} = \rho_{nn}$, а для недиагональных -

$$\rho_{11} \in Re \tag{3.6}$$

$$\rho_{12} = \rho^*_{21} \tag{3.7}$$

Чтобы доказать утверждение (2.6), выберем эрмитов оператор вида:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & & & & & 0 \\ & 0 & & & & \\ & & 0 & & & \\ & & & 0 & & \\ 0 & & & & & \ddots \end{pmatrix} \tag{3.8}$$

Тогда для среднего справедливы утверждения:$\langle A \rangle \geqslant 0$ и $\langle A \rangle \in Re$ (см. аксиомы фон Неймана).

Вычислим:

$$Tr(A \cdot \rho) = \rho_{11} = \langle A \rangle \tag{3.9}$$

Отсюда получаем, что $\rho \in Re$.

Для доказательства утверждения (2.7) введём две матрицы (в них отличны от нуля только два элемента):

$$A_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & & & & 0 \\ 1 & 0 & & & & \\ & & 0 & & & \\ & & & 0 & & \\ & & & & 0 & \\ 0 & & & & & 0 \end{pmatrix} \tag{3.10}$$

$$A_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i & & & & 0 \\ i & 0 & & & & \\ & & 0 & & & \\ & & & 0 & & \\ 0 & & & & & 0 \end{pmatrix} \tag{3.11}$$

Можно показать, что обе эти матрицы будут эрмитовыми. Поэтому средние значения A_1 и A_2 вещественны. Посчитаем средние значения:

$$x = \langle A_1 \rangle = 1 \cdot \rho_{12} + 1 \cdot \rho_{21} = TrA_1\rho \tag{3.12}$$

$$y = \langle A_2 \rangle = i \cdot \rho_{12} - i \cdot \rho_{21} = TrA_2\rho \tag{3.13}$$

Отсюда получим:

$$\rho_{12} = \frac{x - iy}{2} \tag{3.14}$$

$$\rho_{21} = \frac{x + iy}{2} = \rho_{12}^* \tag{3.15}$$

Таким образом, второе свойство матрицы плотности доказано.

3. Собственные значения матрицы плотности вещественны и неотрицательны.

Перейдём в базис собственных векторов:

$$\rho \left|r_k\right\rangle = p_k \left|r_k\right\rangle \tag{3.16}$$

В этом базисе матрица плотности имеет вид:

$$p = \begin{pmatrix} p_1 & & & 0 \\ & p_2 & & \\ & & p_3 & \\ 0 & & & \ddots \end{pmatrix} \tag{3.17}$$

Диагональный матричный элемент неотрицателен: $p_1 \geqslant 0$, ... , $p_k \geqslant 0$...
При этом, так как

$$Tr\rho = 1 = \sum_k p_k \tag{3.18}$$

должно выполняться условие $p_k \leqslant 1$. Таким образом, собственные значения матрицы плотности лежат в диапазоне от 0 до 1:

$$\begin{cases} p_k \geqslant 0 \\ p_k \leqslant 1 \end{cases}$$

Пусть есть некоторые матрица плотности и оператор $\hat{A}$. Посчитаем среднее значение физической величины A:

$$\sum_k \left\langle\alpha_k\right| \rho A \left|\alpha_k\right\rangle = Tr(\rho A) = \langle A\rangle = \sum_k \left\langle\alpha_k\right| \rho \left|\alpha_k\right\rangle \cdot a_k \tag{3.19}$$

где α_k - базис собственных векторов наблюдаемой A. (Последнее равенство следует из того, что $A \left|\alpha_k\right\rangle = a_k \left|\alpha_k\right\rangle$).
Следовательно, $\left\langle\alpha_k\right| \rho \left|\alpha_k\right\rangle = P_{a_k}$ - вероятность получить a_k. Тогда условие нормировки принимает вид:

$$Tr\rho = \sum_k \left\langle\alpha_k\right| \rho \left|\alpha_k\right\rangle = 1 \tag{3.20}$$

Таким образом, физический смысл собственных значений матрицы плотности –

$$A \left|\alpha_k\right\rangle = a_k \left|\alpha_k\right\rangle \tag{3.21}$$

$$\rho \left|\alpha_k\right\rangle = p_k \left|\alpha_k\right\rangle \tag{3.22}$$

Получаем, что матрицы ρ и A имеют общий набор базисных собственных векторов и в

этом базисе матрица плотности вероятности имеет вид:

$$\rho = \begin{pmatrix} p_1 & & 0 \\ & p_2 & \\ 0 & & \ddots \end{pmatrix} \tag{3.23}$$

и p_k есть вероятность получения a_k.

Неполяризованное состояние

Выше было показано, что в опыте Штерна-Герлаха вероятность попадания частицы в верхнее пятно имеет вид:

$$P_{\text{в}} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\xi\bar{n}\bar{n}' \tag{3.24}$$

где $\vec{n}'$ - направление, вдоль которого направлено поле в приборе Штерна-Грелаха. Мы можем измерить проекцию спина на ось n': $S_{n'}$. Вектор $\xi\bar{n}$ исчерпывающим образом задаёт состояние квантово-механической системы. В случае максимальной вероятности попадания в верхнее пятно вектор $\vec{n}'$ совпадает с $\vec{n}$ и вероятности принимают вид:

$$P_{\text{в}} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\xi \tag{3.25}$$

$$P_{\text{н}} = \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\xi \tag{3.26}$$

При этом вероятность равна 1 только в случае $\xi = 1$. Тогда все частицы попадут в верхнее пятно, в нижнее пятно не попадёт ни одна частица. Данное состояние называется **абсолютно поляризованным** или **чистым** состоянием.
В противном случае $\xi = 0$ - абсолютно неполяризованное состояние. В этом случае матрица плотности имеет вид:

$$\rho = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{3.27}$$

Тогда вероятность попадания в верхнее пятно:

$$P_{\text{в}} = \langle\psi_{\text{в}}|\,\rho\,|\psi_{\text{в}}\rangle = 1/2 \tag{3.28}$$

где $\psi_{\text{в}}$ – любой базисный вектор.
В абсолютно неполяризованном состоянии результат измерения проекции любого спина даёт вероятность 1/2 для попадания как в верхнее, так и в нижнее пятно.

В случае трёх степеней свободы абсолютно неполяризованное состояние можно

описать следующим образом:

$$\rho = \frac{1}{3}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{3.29}$$

Пусть измеряется наблюдаемая вида:

$$A = \begin{pmatrix} a_1 & & 0 \\ & a_2 & \\ 0 & & a_3 \end{pmatrix} \tag{3.30}$$

Тогда

$$P_{\alpha_1} = \langle \alpha_1 | \rho | \alpha_1 \rangle = \frac{1}{3} \tag{3.31}$$

Аналогичные результаты получим и для P_{α_2} и P_{α_3}. то есть получаем одинаковые вероятности измерения величин $a_1,\ a_2,\ a_3$.

Поляризованное состояние

Рассмотрим абсолютно поляризованное состояние.

Теорема.Пусть есть некоторая наблюдаемая A с чисто дискретным невырожденным спектром (ЧДНС). И пусть разброс в результатах измерений отсутствует: $DA = 0$. Тогда матрица плотности является проектором и наоборот, то есть:

$$\rho^2 = \rho \tag{3.32}$$

Состояние, в котором величина с чисто дискретным невырожденным спектром имеет нулевую дисперсию, называется **чистым состоянием**.

Дисперсия определяется как разброс вокруг среднего значения:

$$\left\langle \left(A - \langle A \rangle \right)^2 \right\rangle = DA = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \tag{3.33}$$

Доказательство. Докажем обратное утверждение: убедимся, что есть наблюдаемая с чисто дискретным невырожденным спектром, которая принимает определённое значение (то есть дисперсия равна нулю) в случае, если $\rho^2 = \rho$.
Если $\rho^2 = \rho$, то матрица проекционна. Будем работать в базисе собственных векторов:

$$\rho | r_k \rangle = p_k | r_k \rangle \tag{3.34}$$

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

При этом известно, что собственные значения p_k равны или 0, или 1. Причём на диагонали стоит только одна единица, так как $Tr\rho = 1$. Базисные вектора всегда можно перенумеровать таким образом, чтобы единица стояла на первом месте. Значит, всегда найдётся базис собственных векторов, в котором матрица плотности имеет вид:

$$\rho = \begin{pmatrix} 1 & & & 0 \\ & 0 & & \\ & & 0 & \\ 0 & & & \ddots \end{pmatrix} \tag{3.35}$$

Нужно доказать, что если матрица имеет вид (2.35), то существует наблюдаемая с ЧДНС, которая принимает определённые значения. Пример такой наблюдаемой -

$$A = \begin{pmatrix} 1 & & & & 0 \\ & 2 & & & \\ & & 3 & & \\ & & & 4 & \\ 0 & & & & 5 \end{pmatrix} \tag{3.36}$$

Замечание. Если спектр одномерного гармонического осциллятора поделить на $\hbar\omega$ и вычесть $\frac{1}{2}$, то получим в точности (2.36).

Можно показать, что

$$\left.\begin{array}{c} \langle A \rangle = TrA\rho = 1 \\ \langle A^2 \rangle = TrA^2\rho = 1 \end{array}\right\} \Rightarrow DA = 0$$

Таким образом, проекционная матрица плотности удовлетворяет определению чистого состояния.

Докажем второе утверждение теоремы. Пусть есть некоторая наблюдаемая с ЧВНС с нулевой дисперсией: $DA = 0$. Обозначим: $\langle A \rangle \equiv a$.

Посчитаем дисперсию:

$$DA = Tr\left(\hat{\rho}(\hat{A} - a)^2\right) = \sum_k \langle r_k | \rho (A - a)^2 | r_k \rangle = \sum_k p_k \cdot \langle r_k | (A - a) \cdot (A - a) | r_k \rangle \tag{3.37}$$

Здесь было учтено, что ρ - эрмитова, поэтому $\langle r_k | \rho = \langle r_k | p_k$.

Обозначим $(A - a) | r_k \rangle = | \chi_k \rangle$. Тогда $\langle r_k | (A - a) = \langle \chi_k |$ и формула (2.37) принимает вид

$$DA = \sum_k p_k \cdot \langle \chi_k | \chi_k \rangle = 0 \tag{3.38}$$

По условию дисперсия равна нулю. Из аксиомы скалярного произведения следует, что $\langle \chi_k | \chi_k \rangle \geqslant 0$. Собственное значение матрицы плотности $p_k \geqslant 0$. Сумма неотриуательных

чисел равна нулю тогда и только тогда, когда они все равны нулю:

$$p_k \cdot \langle \chi_k | \chi_k \rangle = 0 \quad \forall k \tag{3.39}$$

Сумма p_k отлична от нуля, значит существует отличное от нуля p:

$$p_{k_0} \neq 0 \quad \Rightarrow \quad \langle \chi_{k_0} | \chi_{k_0} \rangle = 0 \tag{3.40}$$

В этом случае получаем, что $|\chi_{k_0}\rangle = 0$ (из аксиомы скалярного произведения). То есть

$$(A - a)\,|r_{k_0}\rangle = 0 \tag{3.41}$$

откуда получаем

$$A\,|r_{k_0}\rangle = a\,|r_{k_0}\rangle \tag{3.42}$$

Для любого другого k получаем:

$$A\,|r_{k\neq k_0}\rangle \neq a\,|r_k\rangle \tag{3.43}$$

так как спектр невырожденный (у разных собственных векторов не может быть одно и то же собственное значение).
Следовательно,

$$|\chi_{k\neq k_0}\rangle \neq 0 \tag{3.44}$$

и

$$\langle \chi_{k\neq k_0} | \chi_{k\neq k_0} \rangle \neq 0 \tag{3.45}$$

Отсюда и из (2.39) следует, что

$$p_{k\neq k_0} = 0 \tag{3.46}$$

Сумма p_k должна равняться 1, значит $p_{k_0} = 1$. Тогда матрица плотности имеет вид:

$$\rho = \begin{pmatrix} 0 & & & & & & & 0 \\ & 0 & & & & & & \\ & & 0 & & & & & \\ & & & \ddots & & & & \\ & & & & 0 & & & \\ & & & & & 1 & & \\ 0 & & & & & & \ddots & \end{pmatrix} = |r_{k_0}\rangle \langle r_{k_0}| \tag{3.47}$$

где единица стоит на месте с номером k_0.
Матрица (2.47) называется **проекционной матрицей плотности**. Она может быть записана как проектор на одномерное подпространство.

Отметим, что r_{k_0} оказывается собственным вектором оператора A с собственным значением a:

$$A\left|r_{k_0}\right\rangle = a\left|r_{k_0}\right\rangle \tag{3.48}$$

Таким образом, чистые состояния можно описывать с помощью вектора гильбертова пространства (а не с помощью матрицы). Если какая-то наблюдаемая имеет имеет собственный вектор r_{k_0} (с соответствующим собственным значением a), то в этом (чистом) состоянии при измерении наблюдаемой A мы с вероятностью 1 получим значение a.

Обозначим $r_{k_0} = \psi$. Значит, чистое состояние имеет место тогда и только тогда, когда матрица ρ - проектор на некоторое одномерное подпространство.

$$\rho = \left|\psi\right\rangle\left\langle\psi\right| \tag{3.49}$$

В этом случае состояние системы описывается волновой функцией ψ.
В случае чистого состояния можно записать:

$$Tr\rho = 1 = \sum_n \left\langle n\right|\rho\left|n\right\rangle = \sum_n \left\langle n|\psi\right\rangle\left\langle\psi|n\right\rangle = \sum_n \left|\psi_n\right|^2 \tag{3.50}$$

так как $\langle n|\psi\rangle = \psi_n$, $\langle\psi|n\rangle = \psi_n^*$.
Переставив скалярные произведения в последнем равенстве (2.50), получим:

$$Tr\rho = \sum_n \left\langle\psi|n\right\rangle\left\langle n|\psi\right\rangle = \left\langle\psi\right|\left(\sum_n \left|n\right\rangle\left\langle n\right|\right)\left|\psi\right\rangle = \left\langle\psi|\psi\right\rangle = 1 \tag{3.51}$$

Выражение $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ является условием нормировки волновой функции в общем случае.
Вычислим среднее:

$$\left\langle A\right\rangle = TrA\rho = \sum_n \left\langle n\right|A\left|\psi\right\rangle\left\langle\psi|n\right\rangle = \sum_n \left\langle\psi|n\right\rangle\left\langle n\right|A\left|\psi\right\rangle = \left\langle\psi\right|A\left|\psi\right\rangle = \left\langle A\right\rangle \tag{3.52}$$

Пусть есть некоторая наблюдаемая A:

$$A\left|\alpha_n\right\rangle = a_n\left|\alpha_n\right\rangle \tag{3.53}$$

Будем измерять её в состоянии с матрицей плотности ρ. Тогда вероятнсть получить одно из собственных значений есть диагональный матричный элемент матрицы плотности, взятый в базисе собственных функций оператора A:

$$P_{\alpha_n} = \left\langle\alpha_n\right|\rho\left|\alpha_n\right\rangle = \left\langle\alpha_n|\psi\right\rangle\left\langle\psi|\alpha_n\right\rangle = \left|\left\langle\alpha_n|\psi\right\rangle\right|^2 = P_{a_n} \tag{3.54}$$

КОНСПЕКТ ПОДГОТОВЛЕН СТУДЕНТАМИ, НЕ ПРОХОДИЛ
ПРОФ РЕДАКТУРУ И МОЖЕТ СОДЕРЖАТЬ ОШИБКИ
СЛЕДИТЕ ЗА ОБНОВЛЕНИЯМИ НА VK.COM/TEACHINMSU

Принцип суперпозиции

Принцип суперпозиции: линейная комбинация двух чистых состояний ψ и χ

$$\alpha|\psi\rangle + \beta|\chi\rangle \tag{3.55}$$

также является чистым состоянием, где α и β - некоторые комплексные числа, подобранные таким образом, что для вектора гильбертова пространства (2.55) выполняется условие нормировки. (ψ и χ не обязательно ортогональны.)

Данная формулировка является тривиальной, так как отражает показанный выше факт того, что любой вектор гильбертова пространства является каким-то чистым состоянием (найдётся физическая величина, которая в этом состоянии принимает определённое значение). Гильбертово пространство является линейным, поэтому линейная комбинация векторов также входит в гильбертово пространство и является чистым состоянием.

Существует другая формулировка принципа суперпозиции: любой вектор гильбертова пространства раскладывается по базису собственных векторов эрмитова оператора $\hat{A}$ (A - физическая величина)

$$|\psi\rangle = \sum_n C_n |\alpha_n\rangle \tag{3.56}$$

При этом вероятность получить при измерении значение a_n равно

$$P_{a_n} = \left|C_n\right|^2 = \left|\langle\alpha_n|\psi\rangle\right|^2 \tag{3.57}$$

Пример. Рассмотрим опыт Штерна-Герлаха, причём будем считать, что спин вылетевших частиц направлен вдоль ось x и его волновая функция имеет вид:

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\downarrow\rangle \tag{3.58}$$

Заметим, что здесь речь идёт о чистом (а не о смешанном) состоянии, так как (2.58) - вектор гильбертова пространства. Смешанное состояние будет только в том случае, когда для описания состояния требуется матрица плотности (вектора для описания уже недостаточно), например такая:

$$\rho = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix}$$

Данная матрица соответствует абсолютно неполяризованному состоянию.

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

Замечание. Состояние, в котором спин ориентирован по оси y -

$$|\chi\rangle = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ i/\sqrt{2} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\downarrow\rangle$$

Состояние, в котором спин направлен вдоль оси, которая лежит в плоскости Oxy и составляет угол φ с осью x имеет вид:

$$\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ e^{i\varphi}/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

Вернемся к опыту Штерна-Герлаха (Рис. 3.1). После пролёта через прибор Штерна-Герлаха частица полетела в одном из двух направлений. Если в каждом направлении поставить детектор, то с вероятностью 1/2 мы будем получать щелчок для обоих детекторов. Если же не ставить детекторы, а свести два пучка в один, то на выходе мы должны получить пучок со спином, ориентированным по оси x.

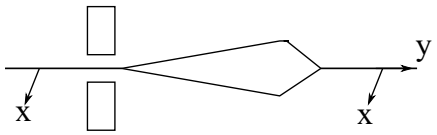


Рис. 3.1: Иллюстрация к примеру

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

Лекция 4. Вероятностная интерпретация

На прошлой лекции был введён принцип суперпозиции. Он позволяет разложить волновую функцию спина, который направлен по оси x по собственным функциям оператора S_z:

$$|x+\rangle = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{4.1}$$

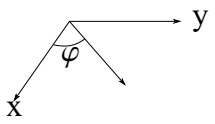


Рис. 4.1: Спин в плоскости Oxy

Состояние, в котором спин лежит в плоскости Oxy и составляет угол φ с осью x (Рис. 4.1), можно описать следующим образом:

$$|\chi\rangle = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ e^{i\varphi}/\sqrt{2} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} |\uparrow\rangle + \frac{e^{i\varphi}}{\sqrt{2}} |\downarrow\rangle \tag{4.2}$$

В качестве примера рассмотрим прибор Штерна-Герлаха, в который влетает пучок частиц, спины которых ориентированы по оси x. Несколько неаккуратная интерпретация данного опыта состоит в следующем. После прохождени прибора Штерна-Герлаха пучок разбивается на два, каждый из которых можно условно описать половинкой волновой функции (Рис. 4.2). Если два пучка снова свести вместе, то вновь получим состояние со

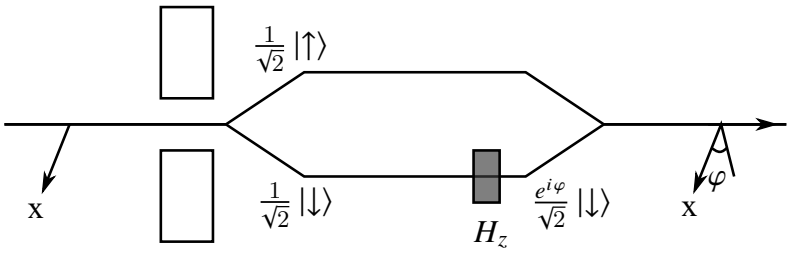


Рис. 4.2: Модифицированный опыт Штерна-Герлаха

спином, ориентированным по оси x. Однако, если нижний пучок поместить в магнитное поле, для его волновой функции появится дополнительная фаза φ, вследствие чего для конечного пучка (после объединения верхнего и нижнего пучков) спин повернётся на угол φ.

Отметим, что в данном эксперименте не производятся измерения. Чтобы измерить s_z, нужно знать, о каком пучке идёт речь. В случае верхнего пучка $s_z = \frac{1}{2}$, в случае нижнего - $s_z = -\frac{1}{2}$, причём из волновой функции вытекает, что вероятности попадания в каждый пучок равны 1/2.

Чтобы произвести измерение, можно поставить детекторы на пути каждого из пучков. Однако можно произвести измерения и без детекторов. Для этого достаточно

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

установить источники яркого света на пути каждого пучка (Рис. 4.3). Заряды рассеивают электромагнитную волну, вследствие чего наблюдается искра. Искра будет появляться в верхнем и нижнем пучке с вероятностью 1/2. Таким образом, мы создали условия, позволяющие увидеть, где конкретно пролетела частица. Пусть искра мелькнула в точке

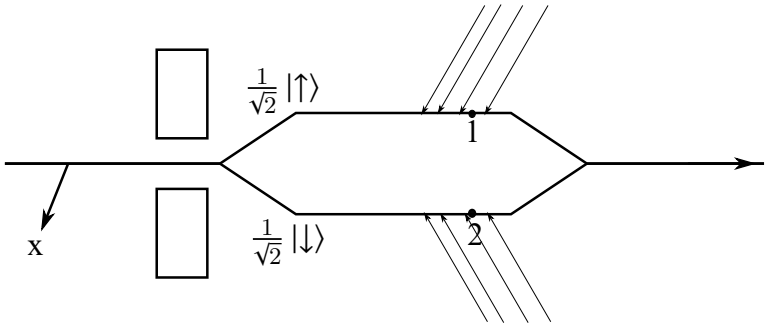


Рис. 4.3: Измерения в опыте Штерна-Герлаха

1 на рис. 4.3. Значит, для данного конкретного электрона результат измерения $s_z = +\frac{1}{2}$. Значит, для данного конкретного электрона состояние описывается волновой функцией спин вверх. До прохождения прибора был спин, ориентированный по оси x, в результате получился спин, ориентированный по оси z.

Замечание. По определению, спин, ориентированный по оси z - это такое состояние, в котором при каждом измерении s_z мы будем получать $s_z = +\frac{1}{2}$ (в данном случае). Для определения состояния недостаточно одного измерения. В контексте данной задачи это означает, что нужно провести измерения для всех электронов, у которых наблюдалась искра в точке 1 и проверить, что для них результат измерения $s_z = +\frac{1}{2}$.

Таким образом, в случае регистрации частиц в точке 1 речь идёт о частицах с чистым состоянием с спинов вверх. При регистрации в точке 2 получим чистые состояния со спином вниз.

Обозначим волновую функцию исходного состояния $|x+\rangle$ (см. (3.1)). Тогда исходная матрица плотности

$$\rho = |x+\rangle \langle x+| = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 \end{pmatrix} \tag{4.3}$$

Однако, после измерения получим

$$\rho = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix} \tag{4.4}$$

Таким образом, конечное состояние (после слияния двух пучков) будет абсолютно неполяризованным – результат измерения не несёт информации о первоначальном направлении спина.

Изменим способ регистрации частиц: установим слабый источник света, который позволяет регистрировать частицы только в половине случаев. Учтём, что полное отсутствие света соответствует проекционной матрице плотности (3.3), яркий свет (позволяющий достоверно измерить s_z) соответствует абсолютно неполяризованной матрице плотности (3.4). Тогда для тусклого света получим матрицу плотности, соответствующую частично поляризованному состоянию по оси x:

$$\rho = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/4 \\ 1/4 & 1/2 \end{pmatrix} \tag{4.5}$$

В этом случае вероятность обнаружить частицу с $s_z = +\frac{1}{2}$ равна $p = \frac{3}{4}$, а с $s_z = -\frac{1}{2}$ – $p = \frac{1}{4}$.

Таким образом, измерение всегда соответствует изменению матрицы плотности (если изначально состояние было чисто, то проекционная матрица плотности превращается в матрицу плотности, соответствующую смешанному состоянию).

Копенгагенская интерпретация: прибор действует на исходное состояние, в котором спин был направлен по оси x, он измеряет величину s_z и за счёт измерения s_z (путём воздействия на систему) полностью теряется информация о изначальном направлении спина. Такой подход хорошо описывает рассматриваемую задачу, однако в других случаях он оказывается непригоден (например, для составных систем при косвенных измерениях).

Рассмотрим так называемый эксперимент с отложенным выбором. Для описания рассматриваемого опыта среди прочего выдвигались следующие предположения: электрон каким-то образом заранее узнаёт, есть ли на пути источники света, или нет. В случае, если установлены источники света, то электрон выбирает один из двух путей, если источника нет - электрон раздваивается и дальше движется одновременно по двум путям. Это предположение было опровергнуто в результате проведения эксперимента с отложенным выбором. Он заключался в следующем: пути для частиц были сделаны достаточно длинными. При этом мы решаем, светить на пути (то есть измерять s_z) или объединять их в один (то есть измерять s_x) уже после того, как электрон пролетел развилку.

Редукция волновой функции

В соответствии с выше сказанным, в случае совершенного измерения исходное состояние преобразуется следующим образом:

$$\begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 \end{pmatrix} \tag{4.6}$$

Если же измерение не совершенное:

$$\begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2\xi \\ 1/2\xi & 1/2 \end{pmatrix} \tag{4.7}$$

где ξ - качество измерения и, соответственно, степень поляризации s_x.

Редукция - это отбор. Например, мы может отобрать все частицы, у которых искра (см. Рис. 4.3) была в точке 1. При этом это не будет изменением состояния всей системы в результате измерения (как в случае (3.6)). Речь идёт об отборе ровно половины частиц - приготовление нового чистого состояния из половины частиц. Редукция происходит в результате измерения и отбора.

Замечание. Редукция может происходить и в результате косвенного отбора.

Совместимые наблюдаемые

Совместимые наблюдаемые - это наблюдаемые, для которых соответствующие операторы коммутируют между собой:

$$\Big[A, B\Big] = 0 \tag{4.8}$$

Утверждение. Если наблюдаемые коммутируют, то у них существует общий базис собственных функций:

$$A\,|\psi_n\rangle = a_n\,|\psi_n\rangle \tag{4.9}$$

$$B\,|\psi_n\rangle = b_n\,|\psi_n\rangle \tag{4.10}$$

и в этих чистых состояниях они принимают определённые значения.
План доказательства: если у А ЧДНС, то в базисе собственных векторов α_n матрица будет

диагональной (в случае невырожденного спектра):

$$B = \begin{pmatrix} b_1 & & 0 \\ & b_2 & \\ 0 & & \ddots \end{pmatrix} \tag{4.11}$$

Пусть теперь $a_1 = a_2$. Тогда диагональность выполнится для всех элементов матрицы B, кроме одного:

$$B = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & & & 0 \\ b_{21} & b_{22} & & & \\ & & b_3 & & \\ & & & b_4 & \\ 0 & & & & \ddots \end{pmatrix} \tag{4.12}$$

При этом, если $a_1 = a_2$, то собственным вектором матрицы A с собственным значением a_1 будет линейная комбинация

$$c_1 |\alpha_1\rangle + c_2 |\alpha_2\rangle \tag{4.13}$$

В этом двумерном пространстве (3.13), каждый вектор которого является собственным вектором оператора A с собственным значением a_1 нужно найти собственные вектора и собственные значения матрицы $\begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix}$. Для полученных собственных векторов матрица B станет диагональной.
Аналогично для случаев совпадений нескольких собственных значений.

Замечание. В литературе распространено следующее неверное утверждение: совместимые наблюдаемые всегда принимают определённое значение.

Пример. Пусть даны две диагональные матрицы:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \quad B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{4.14}$$

Их коммутатор равен нулю.
Обсудим измерение величины A в первом базисном векторе (то есть в состоянии $|1\rangle$). В результате получим 1, причём $DA = 0$. В случае измерения B в состоянии $|1\rangle$ тоже получим 1 при $DB = 0$.

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

Теперь рассмотрим состояние вида:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|2\rangle \tag{4.15}$$

в результате измерения A и B в таком состоянии получим:

$$1 \leftrightarrow A,\ DA = 0$$

$$\left.\begin{matrix}1\\2\end{matrix}\right] \leftrightarrow B,\ \ DB \neq 0$$

причём B принимает одно из возможных значений с вероятностью 1/2.
В случае состояния

$$\frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}|3\rangle \ \Rightarrow\ DA \neq 0,\ DB = 0 \tag{4.16}$$

В случае состояния

$$\frac{1}{\sqrt{2}}|2\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|3\rangle \ \Rightarrow\ DA \neq 0,\ DB \neq 0 \tag{4.17}$$

Допустим, наблюдаемые несовместимы:

$$\left[A, B\right] \neq 0 \tag{4.18}$$

Распространено следующее неправильное утверждение: в этом случае наблюдаемые не могут одновременно принимать определённое значение.
Пример.

$$A = \begin{pmatrix}7 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix}\ \ B = \begin{pmatrix}13 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1\\ 0 & 1 & 0\end{pmatrix} \tag{4.19}$$

Коммутатор A и B не равен нулю. Измерим обе величины в чистом состоянии $|1\rangle$. При этом получим:

$$A \rightarrow\ 7\ \ DA = 0$$

$$B \rightarrow\ 12\ \ DB = 0$$

так как единица является собственным вектором для обеих величин.

Ещё один пример:

$$\left[l_x, l_y\right] = i l_z \tag{4.20}$$

Измерим l_x в s состоянии (то есть $l = 0,\ m = 0$). В результате получим $l_x \rightarrow 0$ и $l_y \rightarrow 0$.

Полный набор наблюдаемых

Пример. Атом водорода (бесспиновый) описывается с помощью трёх квантовых чисел: $n,\ l,\ m$. Энергия зависит только от главного квантового числа:

$$E_n \sim -\frac{1}{n^2} \tag{4.21}$$

При этом волновая функция нумеруется всеми тремя квантовыми числами: $\psi_{nlm}(\bar{x})$. Однако, чистое состояние должно нумероваться только один номером - номером собственной функции оператора с ЧДНС, которая фиксирует это чистое состояние. Для атома водорода можно придумать наблюдаемую с ЧДНС, которая позволит заменить три числа на одно. Однако это бессмысленно, так как каждое квантовое число имеет определённый физический смысл:

$$n \leftrightarrow \hat{H} \leftrightarrow E_n$$

$$l \leftrightarrow \hat{l}^2 \leftrightarrow l(l+1)$$

$$m \leftrightarrow \hat{l}_z \leftrightarrow m$$

При этом спектр каждого из этих операторов сильно вырожден. Ни одна из этих наблюдаемых не попадает под определение величины с ЧДНС. Поэтому появляется новый способ фиксации чистого состояния с помощью нескольких наблюдаемых (даже если они с вырожденным спектром).

Пусть есть некоторый набор наблюдаемых - совокупность совместимых наблюдаемых $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \ldots$ (их попарные коммутаторы равны нулю). Тогда у них существует базис общих собственных векторов:

$$A\,|\psi_n\rangle = a_n\psi_n \tag{4.22}$$

$$B\,|\psi_n\rangle = b_n\psi_n \tag{4.23}$$

$$C\,|\psi_n\rangle = c_n\psi_n\ldots\ldots\ldots\ldots \tag{4.24}$$

Данный набор называется **полным**, если при каждом n набору $(a_n, b_n, c_n\ldots..)$ соответствует одна волновая функция $|\psi_n\rangle$:

$$(a_n, b_n, c_n\ldots..) \leftrightarrow \exists!\,|\psi_n\rangle$$

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

Пример. Следующие матрицы имеют невырожденный спектр:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \quad B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{4.25}$$

Однако они составляют полный набор наблюдаемых. Паре собственных значений (1,1) соответствует базисный вектор $|1\rangle$. Аналогично:

$$(1,1) \leftrightarrow |1\rangle$$

$$(1,2) \leftrightarrow |2\rangle$$

$$(2,1) \leftrightarrow |3\rangle$$

Таким образом, пара собственных значений a_n, b_n позволяет однозначным образом фиксировать соответствующую волновую функцию.

Соотношение неопределенности

Пусть даны две наблюдаемые A и B, а их коммутатор равен:

$$\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = i \cdot \hat{C} \tag{4.26}$$

Эрмитово сопряжем соотношение (3.26):

$$\left(AB - BA\right)^{\dagger} = \left(i\hat{C}\right)^{\dagger} = -i\hat{C}^{\dagger} \tag{4.27}$$

Раскроем скобки в левой части:

$$B^{\dagger}A^{\dagger} - A^{\dagger}B^{\dagger} = BA - AB = -\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = -iC^{\dagger} \tag{4.28}$$

Сравнив (3.26) и (3.28), получим:

$$C^{\dagger} = C \tag{4.29}$$

Значит, оператор C - тоже некоторая наблюдаемая.

Теорема. Возьмём любое смешанное состояние (ρ - матрица плотности). Тогда, если выполняется (3.26),

$$\boxed{DA \cdot DB \geqslant \frac{\langle C \rangle^2}{4}} \tag{4.30}$$

Для средне-квадратичных отклонений данная теорема имеет вид:

$$\delta A \delta B \geqslant \frac{|\langle C \rangle|}{2} \tag{4.31}$$

Доказательство: состояние фиксировано, поэтому есть $\langle A \rangle$ и $\langle B \rangle$. Введём следующие эрмитовы операторы:

$$\tilde{A} = A - \langle A \rangle \tag{4.32}$$

$$\tilde{B} = B - \langle B \rangle \tag{4.33}$$

Тогда

$$\langle \tilde{A}^2 \rangle = DA \tag{4.34}$$

$$\langle \tilde{B}^2 \rangle = DB. \tag{4.35}$$

Определим вспомогательный эрмитов оператор:

$$F = \tilde{A} + i\lambda \tilde{B} \tag{4.36}$$

где λ - произвольное вещественное число.
Тогда

$$F^\dagger = \tilde{A} - i\lambda \tilde{B} \tag{4.37}$$

Определим оператор:

$$G = F^\dagger F \tag{4.38}$$

G уже является наблюдаемой, так как

$$G^\dagger = \left(F^\dagger F\right)^\dagger = F^\dagger \left(F^\dagger\right)^\dagger = F^\dagger F = G \tag{4.39}$$

Более того, G - наблюдаемая с неотрицательным спектром. Докажем это. Пусть

$$G\,|\gamma_n\rangle = g_n\,|\gamma_n\rangle \tag{4.40}$$

Умножим соотношение (3.40) на $\langle \gamma_n|$ и распишем матричный элемент:

$$\langle \gamma_n|\, G\,|\gamma_n\rangle = g_n = \langle \gamma_n|\, F^\dagger F\,|\gamma_n\rangle = \langle \chi|\chi\rangle \geqslant 0 \tag{4.41}$$

где обозначено: $\langle \gamma_n|\, F^\dagger = \langle \chi|$ $\left(\text{тогда } F\,|\gamma_n\rangle = |\chi\rangle\right)$. Последнее неравенство в (3.41) получено из аксиомы скалярного произведения.
Следовательно, собственные значения: $g_n \geqslant 0$. Отсюда G - наблюдаемая с неотрицательным спектром.

Спектр неотрицателен, поэтому для среднего выполняется соотношение (см. аксиомы

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

фон Неймана):

$$\langle G \rangle \geqslant 0 \tag{4.42}$$

Раскроем выражение (3.43):

$$\langle \left(\tilde{A} - i\lambda \tilde{B} \right) \left(\tilde{A} + i\lambda \tilde{B} \right) \rangle \tag{4.43}$$

Раскроем скобки:

$$\langle \tilde{A}^2 + \lambda^2 \tilde{B}^2 + i\lambda \left(\tilde{A}\tilde{B} - \tilde{B}\tilde{A} \right) \rangle \geqslant 0 \tag{4.44}$$

Легко проверить, что

$$\left[\tilde{A}, \tilde{B} \right] = \left[A, B \right] = iC \tag{4.45}$$

Окончательно получаем:

$$\langle \tilde{A}^2 + \lambda^2 \tilde{B}^2 - \lambda C \rangle \geqslant 0 \tag{4.46}$$

Преобразуем выражение с учётом (3.34)-(3.35):

$$DA + \lambda^2 DB - \lambda \langle C \rangle \geqslant 0 \tag{4.47}$$

Это выражение должно выполняться для всех вещественных λ. Поэтому у данного квадратного уравнения или нет корней, или только один корень. Запишем условие на дискриминант квадратного уравнения:

$$\langle C \rangle^2 - 4DADB \leqslant 0 \tag{4.48}$$

Отсюда получаем:

$$\boxed{DA \cdot DB \geqslant \frac{\langle C \rangle^2}{4}} \tag{4.49}$$

Частный случай: $\left[\hat{x}, \hat{p} \right] = i\hbar$ Тогда соотношение неопределённости принимает вид:

$$DxDp \geqslant \frac{\hbar^2}{4} \tag{4.50}$$

или:

$$\delta x \delta p \geqslant \frac{\hbar}{2} \tag{4.51}$$

– соотношение неопределённости Гейзенберга.

Замечание: соотношение неопределённости Бора:

$$\Delta E \Delta t \geqslant \hbar \tag{4.52}$$

не имеет отношения к вышесказанным выкладкам (так как время - числовой параметр, а не оператор).

Замечание: соотношения неопределённости, введённые выше, не имеют отношения к точности измерения. Есть измерения, в которых дисперсия совпадает с точностью измерения (это частные случаи). Однако в данном случае речь идёт о бесконечно точных измерениях и разбросе, связанном с индетерминизмом.

Лекция 5. Смешанные состояния. Матрица плотности.

Рассмотрим наблюдаемую вида (в базисе собственных функций):

$$A = \begin{pmatrix} a_1 & & 0 \\ & a_2 & \\ 0 & & a_3 \end{pmatrix} \tag{5.1}$$

Возьмём волновую функцию:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle + \frac{1}{2}|2\rangle + \frac{1}{2}|3\rangle \tag{5.2}$$

Тогда результат измерения будет равен a_1 с вероятностью 1/2, a_2 и a_3 - с вероятностью 1/4.
Матрица плотности состояния до измерения равна:

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2\sqrt{2}} & \frac{1}{2\sqrt{2}} \\ \frac{1}{2\sqrt{2}} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{2\sqrt{2}} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \end{pmatrix} \tag{5.3}$$

Заметим, что на диагонали матрицы плотности стоят указанные выше вероятности.
Проведём идеальное измерение. В результате получим матрицу

$$\rho = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 1/4 & 0 \\ 0 & 0 & 1/4 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}|1\rangle\langle 1| + \frac{1}{4}|2\rangle\langle 2| + \frac{1}{4}|3\rangle\langle 3| \tag{5.4}$$

Замечание. Неважно, смотрели ли мы на самом деле на показания прибора, который реализует измерение. Главное, что было создано условие для измерения.

Замечание. Обычно матрицу плотности вводят как проекторы на чистое состояние, умноженные на соответствующие веса и имеют смысл вероятности соответствующих чистых состояний.

Величина A не имеет определённого значения. Поэтому её дисперсия не равна нулю:

$$A \to \begin{cases} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{cases} \quad \Rightarrow \quad DA \neq 0$$

Пример. В качестве иллюстрации соотношения неопределённости приведём

волновой пакет:

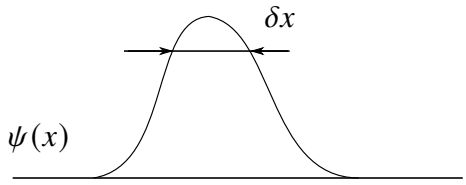


Рис. 5.1: Волновой пакет

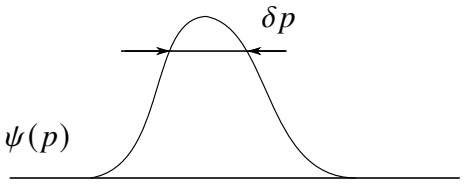


Рис. 5.2: Волновой пакет

Отметим, что классический волновой пакет, соответствующий световому импульсу и волновой пакет, соответствующий электрону - это разные объекты. В случае электрона речь идёт о вероятности нахождения электрона в пространстве. Электрон остаётся точечной частице, однако Рис. 5.1 и 5.2 указывают на то, что координата и импульс электрона не имеют определённого значения.

Таким образом формулировка соотношения неопределенности, подразумевающая, что координату и импульс нельзя одновременно измерить точно, некорректна. Правильное утверждение - координата и импульс не имеют определённого значения.

Теория измерений для составных систем

Рассмотрим два спина. Один спин может быть как в состоянии вверх, так и в состоянии вниз, то есть имеем два базисных вектора:

$$|\uparrow\rangle\,,\ |\downarrow\rangle \tag{5.5}$$

В случае двух спинов обозначим:

$$|\uparrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2 \equiv |\uparrow\uparrow\rangle \tag{5.6}$$

Таким образом, для двух спинов имеем четыре варианта:

$$|\uparrow\uparrow\rangle\,,\ |\uparrow\downarrow\rangle\,,\ |\downarrow\uparrow\rangle\,,\ |\downarrow\downarrow\rangle$$

Таким образом, если есть две подсистемы, одна из которых находится в N-мерном гильбертовом пространстве с базисом $|U_n\rangle_1$, а вторая подсистема связана с базисом $|V_m\rangle_2$ в M-мерном пространстве. Тогда прямое произведение пространств есть линейная оболочка (линейная комбинация всех базисных векторов), натянутая на базис вида $|U_nV_m\rangle$ с размерностью $N \cdot M$.

Разложение волновой функции по базисным векторам содержит двумерный индекс:

$$|\psi\rangle = \sum_{nm} C_{nm} |U_n V_m\rangle \tag{5.7}$$

Матричные элементы операторов будут иметь вид:

$$\langle U_{n'} V_{m'}| A |U_n V_m\rangle = A_{(n'm')(nm)} \tag{5.8}$$

Определим физическую величину, относящуюся к первой подсистеме, следующим образом. Соответствующие матричные элементы по определению соответствуют нетривиальному эрмитову оператору, относящемуся к первым индексам и единичному оператору, относящемуся ко вторым индексам. Тогда наблюдаемая, относящаяся к первой подсистеме, имеет вид:

$$A^{(1)}_{(n'm')(nm)} \equiv A^{(1)}_{n'n}\delta_{m'm} \tag{5.9}$$

Аналогично для второй подсистемы:

$$A^{(2)}_{(n'm')(nm)} = A^{(2)}_{m'm}\delta_{n'n} \tag{5.10}$$

Пример. Спин вверх и спин вниз соответственно:

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{5.11}$$

$$|\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{5.12}$$

$$s_z = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\sigma_3 \tag{5.13}$$

Рассмотрим:

$$S^{(1)}_z = \frac{1}{2}\sigma_3 \;\; S^{(2)}_z = \frac{1}{2}\sigma_3 \tag{5.14}$$

При этом

$$S^{(1)}_z \neq S^{(2)}_z \tag{5.15}$$

Покажем это на примере. Подействуем $s^{(1)}_z$ на вектор: $s^{(1)}_z |\uparrow\downarrow\rangle$. Единичная матрица

применяется к столбцу $\downarrow$, а матрица σ_3 - к столбцу $\uparrow$. В результате получаем:

$$s_z^{(1)} |\uparrow\downarrow\rangle = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_2 = \frac{1}{2}|\uparrow\downarrow\rangle \tag{5.16}$$

При этом для $s_z^{(2)}$ применяется только ко второму спину:

$$s_z^{(2)} |\uparrow\downarrow\rangle = -\frac{1}{2}|\uparrow\downarrow\rangle \tag{5.17}$$

Точно такой же условной является запись сложения орбитальных моментов:

$$\vec{L} = \vec{l}^{(1)} + \vec{l}^{(2)}$$

так как операторы L, $\vec{l}^{(1)}$ и $\vec{l}^{(2)}$ вообще говоря действуют в пространствах разных размерностей.

Рассмотрим произвольное состояние составной системы с матрицей плотности ρ. Найдём среднее значение оператора, относящегося к первой подсистеме (в данном состоянии):

$$\langle A^{(1)}\rangle = TrA^{(1)}\rho = \sum_{n'm'nm} A^{(1)}_{(n'm')(nm)}\rho_{(nm)(n'm')} \tag{5.18}$$

Воспользуемся определением оператора подсистемы:

$$A^{(1)}_{(n'm')(nm)} = A^{(1)}_{n'n}\cdot\delta_{m'm} \tag{5.19}$$

Таким образом, в (4.19) исчезает сумма по m':

$$\langle A^{(1)}\rangle = \sum_{nn'} A^{(1)}_{n'n}\sum_m \rho_{(nm)(n'm')} \tag{5.20}$$

Заметим, что $\sum_m \rho_{(nm)(n'm')} = \rho^{(1)}_{nn'}$. Зачастую данное выражение обозначают следующим образом:

$$\rho^{(1)} = Tr_2\rho \tag{5.21}$$

что подразумевает, что Tr берётся только по индексам, относящимся ко второй подсистеме.
Таким образом, получаем:

$$\langle A^{(1)}\rangle = \sum_{nn'} A^{(1)}_{nn'}\rho^{(1)}_{nn'} = Tr_1A^{(1)}\rho^{(1)} \tag{5.22}$$

При этом получаем, что матрица $\rho^{(1)}$ есть матрица плотности первой подсистемы при данном состоянии всей составной системы ρ.

Аналогично матрица плотности второй подсистемы:

$$\rho^{(2)} = Tr_1 \rho \tag{5.23}$$

Заметим, что разнообразие таблиц умножения двух подсистем велико и как првило, не содержит никакой определённости. Из чистого состояния ρ можно с равным успехом получить как чистое, так и смешанное состояние в подсистеме. Наоборот: из двух смешанных состояний можно получить чистое.

Пример. Рассмотрим четырёхмерное пространство с базисными векторами:

$$|11\rangle,\ |12\rangle,\ |21\rangle,\ |22\rangle$$

В случае спинов 1 соответствует спину вверх, а 2 - спину вниз.
Возьмём матрицу плотности вида (абсолютно неполяризованное состояние):

$$\rho = \begin{pmatrix} 1/4 & & & 0 \\ & 1/4 & & \\ & & 1/4 & \\ 0 & & & 1/4 \end{pmatrix} \tag{5.24}$$

Посчитаем матрицы плотности для каждой из подсистем:

$$\rho_{11}^{(1)} = \rho_{(11)(11)} + \rho_{(12)(12)} = 1/2 \tag{5.25}$$

$$\rho_{12}^{(1)} = \rho_{(11)(21)} + \rho_{(12)(22)} = 0 \tag{5.26}$$

$$\rho_{22}^{(1)} = 1/2 \tag{5.27}$$

Таким образом, для матриц плотности подсистем получаем:

$$\rho = \frac{1}{4} \ \Rightarrow \begin{cases} \rho^{(1)} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \\ \rho^{(2)} = \frac{1}{2} \end{cases}$$

Таким образом, из смешанного состояния мы получили два смешанных состояния обеих подсистем, причём оба состояния являются абсолютно неполяризованными.

Пример. Рассмотрим смешанное состояние вида:

$$\rho = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{5.28}$$

Отсюда видим, что вероятность для первой системы быть в состоянии $|1\rangle$ равна 1 (так как в матрице (4.2) всего два ненулевых элемента, один из которых равен вероятности для первой подсистемы быть в состоянии $|11\rangle$, а второй - вероятности быть в состоянии $|12\rangle$. При этом других состояний нет.) Можно показать, что:

$$\rho^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{5.29}$$

При этом матрица второй подсистемы соответствует абсолютно неполяризованному состоянию:

$$\rho^{(2)} = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix} \tag{5.30}$$

То есть речь идёт о ситуации, в которой смешанное состояние может соответствовать чистому и смешанному состояниям подсистем соответственно. Если бы в матрице плотности (4.28) элементы 1/2 стояли на первой и третьей позициях на диагонали, то первая подсистема была бы в смешанном состоянии, а вторая - в чистом.

Пример. Рассмотрим матрицу плотности чистого состояния (проектор):

$$\rho = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{5.31}$$

Для подсистем получаем:

$$\rho^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \rho^{(2)} \tag{5.32}$$

Таким образом, чистое состояние $|11\rangle$ распадается на произведение волновых функций. Первая и вторая подсистемы находятся в первом состоянии:

$$|\psi^{(1)}\rangle = |1\rangle_1$$

$$|\psi^{(2)}\rangle = |1\rangle_2$$

Таким образом, чистое состояние составной системы соответствует чистому состоянию обеих подсистем.

Пример. Возьмём чистое состояние:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|12\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|21\rangle \tag{5.33}$$

Матрица плотности проекционная (она проектор на $|\psi\rangle$):

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| \tag{5.34}$$

Можно показать, что матрица будет иметь вид:

$$\rho = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{5.35}$$

Для подсистем получаются абсолютно неполяризованные состояния:

$$\rho^{(1)} = \frac{1}{2} \tag{5.36}$$

$$\rho^{(2)} = \frac{1}{2} \tag{5.37}$$

Таким образом, состояние составной системы не собирается их отдельных состояний подсистем. Одной и той же паре $\rho^{(1)}$ и $\rho^{(2)}$ может соответствовать бесконечно много матриц плотности составной системы.

Состояния, для которых состояние составной системы чистое, а для всех подсистем состояние смешанные, называется **запутанным**. То есть волновая функция в данном случае не распадается на произведение волновых функций каждой из подсистем по отдельности.

Обозначим за с - смешанное состояние, ч - чистое состояние. Тогда описанные примеры можно объединить в виде:

$$\text{чч} \longrightarrow \text{ч} \tag{5.38}$$

$$\text{ч}c \longrightarrow c$$

$$c \longrightarrow \left\{ \text{ч}c \right.$$

$$c \to \begin{cases} cc \\ чc \\ cч \end{cases}$$

$$ч \to \begin{cases} чч \\ cc \end{cases}$$

Докажем первое утверждение (4.28).
Чистое состояние для первой подсистемы $A^{(1)}$ подразумевает, что существует некоторая величина с ЧДНС, имеющая определённое значение. Обозначим эту величину a_1. Для второй системы $A^{(2)}$ тоже существует определённое значение b_1.

Отметим, что операторы $A^{(1)}$ и $A^{(2)}$ являются независимыми. Значит, они коммутируют. Тогда $A^{(1)}$ и $A^{(2)}$ - совместимые. Если у них невырожденный спектр, то и у пар (a_i, b_j) тоже невырожденный спектр. Таким образом, мы получили полный набор наблюдаемых в составной системе и a_1, b_1 - это некоторые чистые состояния, так как паре $a_1,\ b_1$ соответствует единственная волновая функция.

Парадоксы квантовой теории

1. **Парадокс Эйнштейна - Подольского - Розена**

Рассмотрим систему из двух спинов, находящуюся в синглетном состоянии (полный спин системы равен нулю):

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |\uparrow\downarrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |\downarrow\uparrow\rangle \tag{5.39}$$

Определим оператор проекции спина на ось $\vec{n}$:

$$s_n^{(1)} = \vec{s}^{(1)} \cdot \vec{n} \tag{5.40}$$

Аналогично для второго спина:

$$s_n^{(2)} = \vec{s}^{(2)} \cdot \vec{n} \tag{5.41}$$

В этом случае имею место два эквивалентных утверждения:

$$\left(s_n^{(1)} + s_n^{(2)}\right) |\psi\rangle = 0\,|\psi\rangle \tag{5.42}$$

$$s_n^{(1)} \cdot s_n^{(2)} |\psi\rangle = -\frac{1}{4} |\psi\rangle \tag{5.43}$$

Результат измерения каждой из величин $s_n^{(1)}$ и $s_n^{(2)}$ равен $\pm\frac{1}{2}$, поэтому действие суммы операторов равно нулю $\Big((4/42)\Big)$.

Теперь рассмотрим составную систему (в состоянии $|\psi\rangle$) из первого и второго спина. Заставим частицы разлететься в противоположные стороны. Тогда, если мы измеряем любую проекцию спина на любую ось одной из улетевших частиц, мы автоматически узнаем значение для проекции спина второй частицы. Например, если $s_n^{(1)} = +\frac{1}{2}$, то $s_n^{(2)} = -\frac{1}{2}$. Следовательно, если нам нужно построить чистое состояние из вторых частиц, мы можем отобрать ту их половину, которая соответствует результату $s_n^{(1)} = +\frac{1}{2}$ (или $-\frac{1}{2}$) для первой частицы. Например, если необходимо, чтобы у второй частицы было чистое состояние, смотрящее против оси n, то мы производим отбор вторых частиц только когда у первых частиц $s_n^{(1)} = +\frac{1}{2}$. Если же у первых частиц $s_n^{(1)} = -\frac{1}{2}$, то мы отбрасываем соответствующую вторую частицу. Селекция в данном случае осуществляется с помощью косвенных измерений.

Парадокс можно увидеть в следующем. Если одновременно измерять $s_z^{(1)}$ и $s_x^{(2)}$ для первой и второй частиц соответственно, то при неправильном понимании соотношения неопределённости, мы получаем его нарушение. Напимер, при измерении мы получили $s_x^{(2)} = -1/2$ и $s_z^{(1)} = -1/2$. Но тогда получаем, что $s_z^{(2)} = +1/2$. Получаем нарушение соотношения неопределённости.

Однако никакого парадокса на самом деле нет, так как каждый из спинов находится в абсолютно неполяризованном состоянии:

$$\rho^{(1)} = \frac{1}{2} \tag{5.44}$$

$$\rho^{(2)} = \frac{1}{2} \tag{5.45}$$

Тогда среднее значение любой компоненты спина на любую ось равно нулю. Следовательно, дисперсия в данном случае максимальна и равна 1/4 для обеих частиц. При этом ни $s_z^{(1)}$, ни $s_x^{(2)}$ не имеет определённого значения и соотношение неопределённости не нарушается.

В оригинальной работе Эйнштейна интересовал так называемый локальный реализм. С точки зрения Эйнштейна, когда частицы разлетелись уже очень далеко, вся составная система может быть собрана из своих составных частей. Однако это не так. Есть абсолютно неполяризованные состояния первой и второй подсистем, которые полностью описывают результаты измерения проекций спина любую из осей для каждой подсистемы. Но при этом ни матриц подсистем (4.44)-(4.45), ни их объединения недостаточно для предсказания корреляций между значениями спинов двух частиц. Данные корреляции описывает волновая функция ψ.

Описанная особенность связана с квантовой теорией систем. Рассмотрим следующую

классическую систему. Пусть дан ящик с красной и зелёной лампочками на нём. Каждая лампочка вспыхивает с вероятностью 1/2, от ящика разлетаются световые импульсы. В данном случае уже присутствует локальный реализм. Пока свет не долетит до наблюдателя, он не знает, какая лампочка загорелась, однако внутри светового импульса есть определённая переменная, которая определяет свет лампочки. То есть цвет имеет определённое значение, даже если оно нам пока неизвестно.

В квантовой системе, например, в описанной ранее, локальный реализм отсутствует. Значение проекции спина не имеет определённого значения.

Лекция 6. Динамическая система квантовой механики.

Матрицы Паули

Пусть есть три спина в состоянии:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot |\downarrow\downarrow\downarrow\rangle \tag{6.1}$$

Рассмотрим наблюдаемые:

$$\sigma_x = 2s_x = \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{6.2}$$

$$\sigma_y = 2s_y = \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \tag{6.3}$$

Так как

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

получаем:

$$\sigma_y |\uparrow\rangle = i |\downarrow\rangle \quad \sigma_y |\downarrow\rangle = -i |\uparrow\rangle \tag{6.4}$$

$$\sigma_x |\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle \quad \sigma_x |\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle \tag{6.5}$$

Рассмотрим наблюдаемую:

$$A_0 = \sigma_x^{(1)} \cdot \sigma_x^{(2)} \cdot \sigma_x^{(3)} \tag{6.6}$$

Тогда

$$A_0 |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot A_1 |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot A_1 |\downarrow\downarrow\downarrow\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} |\downarrow\downarrow\downarrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle = -1 \cdot |\psi\rangle \tag{6.7}$$

Таким образом, σ могут принимать значения либо $(1, 1, 1)$, либо $(-1, -1, 1)$.

Рассмотрим

$$A_1 = \sigma_y^{(1)} \sigma_y^{(2)} \sigma_x^{(3)} \tag{6.8}$$

Тогда

$$A_1 |\psi\rangle = -1 |\psi\rangle \tag{6.9}$$

В данном случае величины, входящие в (5.8), реализуется или как $(-1, -1, -1)$ или как

$(-1, 1, 1)$.

Аналогично можно определить:

$$A_2 = \sigma_y^{(1)} \sigma_x^{(2)} \sigma_y^{(3)} \tag{6.10}$$

Отметим, что A_2 не совместима ни с A_0, ни с A_1. Значение данной величины:

$$A_2 |\psi\rangle = -1 |\psi\rangle \tag{6.11}$$

Определим также:

$$A_3 = \sigma_x^{(1)} \sigma_y^{(2)} \sigma_y^{(3)} \tag{6.12}$$

$$A_3 |\psi\rangle = -1 |\psi\rangle \tag{6.13}$$

Сделаем неверное предположение, что все задействованные физические величины имеют определённые значения. Обозначим их следующим образом.
$r_x^{(1)}$ - определённое значение $\sigma_x^{(1)}$. Аналогично определяем $r_x^{(2)}$, $r_x^{(3)}$, $r_y^{(1)}$, $r_y^{(2)}$, $r_y^{(3)}$. Величины A_0,A_1, A_2, A_3 составлены из шести указанных физических величин, причём:

$$r_x^{(1)} \cdot r_x^{(2)} \cdot r_x^{(3)} = A_0 = 1 \tag{6.14}$$

$$r_y^{(1)} \cdot r_y^{(2)} \cdot r_x^{(3)} = A_1 = -1 \tag{6.15}$$

$$r_y^{(1)} \cdot r_x^{(2)} \cdot r_y^{(3)} = A_2 = -1 \tag{6.16}$$

$$r_x^{(1)} \cdot r_y^{(2)} \cdot r_y^{(3)} = A_3 = -1 \tag{6.17}$$

Перемножим сроки (5.12)-(5.15). В правой части получим -1. Отметим, что в левой части каждый множитель повторяется. Произведение ${r_x^{(i)}}^2 = {r_y^{(i)}}^2 = 1 \quad \forall i = (1, 2, 3)$. Таким образом, получили $1 = -1$. Противоречие. Значит, исходное предположение действительно было неверным.

Таким образом, мы привели доказательство индетерминизма, что не существует физической величины до того, как мы её измерили.

Данный факт можно доказать другими способами: с помощью неравенства Белла или доказательство Коэна-Шпекера.

Идея доказательства Коэна-Шпекера. Пусть дан единичный спин $\vec{s}$. Тогда квадрат спина

$$S^2 = 1(1 + 1) = 2 \tag{6.18}$$

а его проекция на любую ось

$$S_n \begin{cases} 1 \\ 0 \\ -1 \end{cases}$$

Квадрат проекции:

$$S_n^2 \begin{cases} 0 \\ 1 \end{cases} \tag{6.19}$$

Заметим, что утверждение (5.17) выполняется для любого направления оси n. Предположим, что S_n^2 имеет определённое (но нам неизвестное) значение. Пусть значению 0 соответствует чёрный цвет, а значению 1 - белый. Тогда, рассматривая направления $\vec{n}$ как радиус сферы, можем ставить в соответствие значению квадрата проекции (каждому вектору $\vec{n}$ соответствует одна точка на сфере). Выберем какую-нибудь систему координат с осями x,y,z. Тогда квадрат спина равен (с учётом (5.18)):

$$S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 = 2 \tag{6.20}$$

Данное выражение выполняется, если $S_x,\ S_y,\ S_z$ принимают значения из множества $(1, 1, 0)$. Однако, можно показать, что нельзя раскрасить сферу в чёрный и белый цвет, так, чтобы удовлетворялось (5.20).

Квантовая телепортация

Рассмотрим две частицы в синглетном состоянии:

$$\left.\frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}\right|_{12} \tag{6.21}$$

На большом расстоянии от первых двух частиц расположена третья частица с волновой функцией:

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = a\,|\uparrow\rangle_3 + b\,|\downarrow\rangle_3 \tag{6.22}$$

Состояние этой составной системы из трёх частиц имеет вид:

$$|\psi\rangle = \frac{a}{\sqrt{2}}\,|\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + \frac{b}{\sqrt{2}}\,|\uparrow\downarrow\downarrow\rangle - \frac{a}{\sqrt{2}}\,|\downarrow\uparrow\uparrow\rangle - \frac{b}{\sqrt{2}}\,|\downarrow\uparrow\downarrow\rangle \tag{6.23}$$

Далее вторую частицу отправляют к третьей:

Причём будем рассматривать случай телепортации, реализованной в четверти случаев.

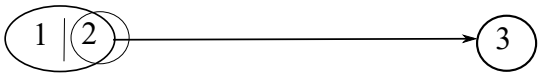


Рис. 6.1: Иллюстрация к объяснению квантовой телепортации

Рис. 6.2: Иллюстрация к объяснению квантовой телепортации

Рассмотрим только те случаи, когда вторая и третья частица находятся в синглетном состоянии. Тогда второе и третье слагаемые в волновой функции (5.22) выпадают из рассмотрения. Распишем оставшиеся слагаемые волновой функции:

$$\frac{a}{\sqrt{2}}|\uparrow\downarrow\uparrow\rangle = \frac{a}{2}|\uparrow\rangle_1\left[\frac{|\uparrow\downarrow\rangle+|\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}-\frac{|\uparrow\downarrow\rangle-|\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}\right]_{23} \tag{6.24}$$

Заметим, что первое слагаемое в (5.24) имеет суммарный спин, равный единице. Поэтому он выпадает из рассмотрения.
Преобразуем слагаемое:

$$\frac{b}{\sqrt{2}}|\downarrow\uparrow\downarrow\rangle = \frac{b}{2}|\downarrow\rangle_1\left[\frac{|\uparrow\downarrow\rangle+|\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}+\frac{|\uparrow\downarrow\rangle-|\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}\right]_{23} \tag{6.25}$$

Аналогично для (5.25) первое слагаемое мы не рассматриваем в силу условия задачи.
Таким образом, интересующая нас часть волновой функции имеет вид:

$$\frac{a}{\sqrt{2}}|\uparrow\downarrow\uparrow\rangle - \frac{b}{\sqrt{2}}|\downarrow\uparrow\downarrow\rangle = -\frac{1}{2}\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}\left[\frac{|\uparrow\downarrow\rangle-|\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}\right]_{23} \tag{6.26}$$

Заметим, что в данной задаче отбирается ровно четверть случаев (коэффициент перед волновой функцией равен 1/2, то есть вероятность события, описываемое данной волновой функцией, равна 1/4).

Часть (5.26) с индексом 23 соответствует синглету для второй и третьей частицы, а волновая функция первой частицы равна ψ, которая была у третьей частицы (которая оставалась неподвижной). В этом смысле говорят, что происходит мгновенная телепортация состояния.

Динамика

Существует два эквивалентных подхода к описанию динамики в квантовой механике - матричная механика Гейзенберга и нестационарное уравнение Шреденигера.

Комбинационный принцип Ритца: частоты можно нумеровать двумя целыми числа и выполняется соотношение:

$$\omega_{kn} + \omega_{nm} = \omega_{km} \tag{6.27}$$

Отсюда следует вывод, что каждая из частот - это разность некоторых величин, которые нумеруются одним индексом. Поэтому (5.27) можно переписать в виде:

$$\frac{E_k - E_n}{\hbar} + \frac{E_n - E_m}{\hbar} = \frac{E_k - E_n}{\hbar} \tag{6.28}$$

Было обнаружено, что различные частоты соответствуют линиям разной яркости: $\omega_{kn} \leftrightarrow I_{kn}$. Гейзенберг предположил, что справедлива классическая электродинамика (то есть что интенсивность связана с ускорением). Таким образом, согласно предположению, должна быть связь с амплитудой:

$$\omega_{kn} \leftrightarrow I_{kn} \leftrightarrow x_{kn}$$

Таким образом, если верна классическая электродинамика, то координата является не числом, а матрицей, матричные элементы x_{kn} которой осциллируют с частотой ω_{kn}.

Матричные элементы координаты эволюционируют следующим образом:

$$x_{kn} \cdot e^{i\omega_{kn}t} \tag{6.29}$$

При этом $\omega_{kn} = \frac{E_k - E_n}{\hbar}$. Подставим данное выражение в (5.29) и вынесем экспоненту с положительным аргументов налево, а с отрицательным - направо:

$$\begin{pmatrix} e^{iE_1t} & & 0 \\ & e^{iE_2t} & \\ 0 & & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots \\ x_{21} & x_{22} & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-iE_1t} & & 0 \\ & e^{-iE_2t} & \\ 0 & & \ddots \end{pmatrix} \tag{6.30}$$

При такой эволюции матрицы координаты мы можем использовать классические электродинамические результаты.

Выпишем гамильтониан:

$$H = \begin{pmatrix} E_1 & & 0 \\ & E_2 & \\ 0 & & \ddots \end{pmatrix} \tag{6.31}$$

Учитывая правила взятия функций от диагональных матриц, получаем:

$$\hat{x}_\Gamma(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \hat{x}_\Gamma(0) e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \tag{6.32}$$

Продифференцируем по времени полученное выражение:

$$\frac{d}{dt}\hat{x}_{\Gamma}(t) = \frac{i}{\hbar}He^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{x}_{\Gamma}(0)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} + e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{x}_{\Gamma}(0)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\cdot\left(-\frac{i}{\hbar}H\right) \tag{6.33}$$

Заметим, что в обоих слагаемых присутствует выражение для координаты (5.32). Тогда выражение (5.33) можно записать в виде:

$$\frac{d}{dt}\hat{x}_{\Gamma}(t) = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}, \hat{x}_{\Gamma}(t)\right] \tag{6.34}$$

данное выражение аналогично скобкам Пуассона в классической теоретической механике. Поэтому можно записать:

$$\frac{d}{dt}\hat{p}_{\Gamma}(t) = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}, \hat{p}_{\Gamma}(t)\right] \tag{6.35}$$

Аналогичное выражение можно записать для любой функции, а не только для канонических переменных, поэтому:

$$\boxed{\frac{d\hat{A}_{\Gamma}(t)}{dt} = \frac{\partial\hat{A}_{\Gamma}(t)}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}, \hat{A}_{\Gamma}(t)\right]} \tag{6.36}$$

Частная производная в выражении (5.36) указывает на явную зависимость функции от времени. Если построить функцию от канонических переменных, она будет эволюционировать по двум причинам - координата и импульс эволюционируют в соответствии с (5.34)-(5.35) и в рассматриваемую величину может быть искусственно введено время.

Уравнение (5.36) и есть **уравнение Гейзенберга**. Оно описывает динамику квантово-механической системы. Заметим, что указанные выше выкладки не являются выводом данного уравнения.

Замечание. Уравнение Гейзенберга (5.36) верно и для неконсервативных систем. Вообще говоря, в гамильтониан можно ввести зависимость от времени. В этом случае используется гамильтониан гейзенбергского представления (следует учитывать, что гамильтониан в представлениях Шрёдингера и Гейзенберга имеет разный вид):

$$\boxed{\frac{d\hat{A}_{\Gamma}(t)}{dt} = \frac{\partial\hat{A}_{\Gamma}(t)}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}_{\Gamma}(t), \hat{A}_{\Gamma}(t)\right]} \tag{6.37}$$

Уравнение Гейзенберга используется в случаях линейных систем, для которых легко решается соответствующее классическое уравнение движения. Для сильно нелинейных систем, однако, используют уравнение Шрёдингера.

Замечание. Матрица плотности в представлении Гейзенберга не эволюционирует:

$$\rho_{\text{г}}(t) = \rho_{\text{г}}(0) \tag{6.38}$$

В частном случае чистого состояния волновая функция в представлении Гейзенберга тоже не эволюционирует:

$$\text{чс} \Rightarrow \ |\psi_{\text{г}}(t)\rangle = |\psi_{\text{г}}(0)\rangle \tag{6.39}$$

Это значит, что можно посчитать среднее для любой наблюдаемой в некотором состоянии.

Замечание. Как правило, в большинстве задач используют представление Шрёдингера, то есть исследуют эволюцию волновых функций, а не динамических величин. Это связано с тем, что как правило работаю с чистыми состояниями; при этом эволюцию столбца вычислить проще, чем эволюцию матрицы.

Интегралы движения и симметрия

Если в уравнении Гейзенберга правая часть обращается в ноль, то соответствующая величина является **интегралом движения.**

Вообще говоря, могут существовать интегралы движения, которые явным образом зависят от времени. Однако в квантовой механике основной практический смысл имеют интегралы движения, которые не зависят от времени явно. Поэтому в дальнейшем мы будем рассматривать интегралы движения как величины, которые коммутируют с гамильтонианом:

$$\left[H, A\right] = 0 \tag{6.40}$$

(здесь можно писать H вместо $H_{\text{г}}$, так как здесь уже нет зависимости от времени)
Если данная величина A не зависит явно от времени, то она и не эволюционирует:

$$\hat{A}_{\text{г}}(t) = \hat{A}_{\text{г}}(0) \tag{6.41}$$

Аналогично классической механике, интеграл движения позволяет решать динамические уравнения. Однако чаще интеграл движения используют для других целей. Если есть интеграл движения, то он коммутирует с гамильтонианом (5.40). Значит, он совместим с гамильтонианом. Отсюда следует, что этот интеграл движения можно использовать вместе с гамильтонианом в качестве полного набора наблюдаемых.

Пример. Орбитальный момент для любого сферически-симметричного потенциала коммутирует с гамильтонианом:

$$\left[l_i, H\right] = 0 \tag{6.42}$$

Поэтому полный набор наблюдаемых в центрально-симметричном потенциале: H, l^2, l_z.

Согласно теоретической механике, сохранение импульса следует из трансляционной инвариантности. Сохранение момента следует из изотропности пространства. Сохранение энергии следует из инвариантности трансляций по времени. Аналогично в квантовой механике каждый интеграл движения соответствует некоторой непрерывной симметрии. Например, момент является интегралом движения в случае сферически-симметричного потенциала, так как он инвариантен относительно вращений.

Замечание. Вообще говоря, симметрия может параметризоваться несколькими параметрами, однако в дальнейшем мы будем выделять только один параметр.

Рассмотрим унитарный оператор, который непрерывно зависит от числового параметра α: $U(\alpha)$:

$$U^{\dagger}U = 1 \tag{6.43}$$

При этом будем считать, что $U(\alpha)$ бесконечно дифференцируема и выполняется условие:

$$U(0) = 1 \tag{6.44}$$

Такой оператор будет называться **симметрией**, если при унитарном преобразовании гамильтониан остаётся инвариантным:

$$U^{\dagger}(\alpha)HU(\alpha) = H \tag{6.45}$$

Теорема. Каждой непрерывной симметрии соответствует интеграл движения и наоборот.

Замечание. В данной теореме отсутствует утверждение о единственности. Из одного и того же интеграла движения можно построить много непрерывных симметрий и обратно.

Доказательство. Докажем обратное утверждение. Пусть интеграл движения A - наблюдаемая, которая коммутирует с гамильтонианом:

$$\left[H, A\right] = 0 \tag{6.46}$$

Запишем $U(\alpha)$ в виде:

$$U(\alpha) = e^{i\alpha A} \tag{6.47}$$

Этот оператор является унитарным:

$$U^{\dagger}(\alpha) = e^{-i\alpha A} \tag{6.48}$$

При этом $U(\alpha)$ является непрерывной симметрией (выполняются условия бесконечной дифференцируемости и (5.44)). Также выполняется:

$$U^{\dagger}(\alpha)HU(\alpha) = e^{-i\alpha A}He^{i\alpha A} \tag{6.49}$$

Так как по условию оператор A коммутирует с гамильтонианом. Значит, и любая его степень коммутирует с гамильтонианом. В свою очередь это означает, что любая функция от A коммутирует с гамильтонианом. Отсюда получаем, что экспоненту $e^{-i\alpha A}$ можно переставить с гамильтонианом. Тогда получаем:

$$U^{\dagger}(\alpha)HU(\alpha) = He^{-i\alpha A}e^{i\alpha A} = H \tag{6.50}$$

Что и требовалось доказать.

Лекция 7. Представление Гейзенберга.

Уравнение Гейзенберга

Запишем уравнение Гейзенберга:

$$\frac{d\hat{A}_{\Gamma}(t)}{dt} = \frac{\partial \hat{A}_{\Gamma}(t)}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}, \hat{A}_{\Gamma}(t)\right] \tag{7.1}$$

Интеграл движения - величина, коммутирующая с гамильтонианом:

$$\left[H, A\right] = 0 \tag{7.2}$$

При этом интеграл движения вместе с гамильтонианом образуют полный набор наблюдаемых.

На прошлой лекции была сформулирована следующая теорема.
Теорема. Каждой непрерывной симметрии соответствует интеграл движения и наоборот.
Было показано, что выражение

$$U(\alpha) = e^{i\alpha\hat{A}} \tag{7.3}$$

удовлетворяет всем определениям непрерывной симметрии. При этом можно изменить данное выражение с сохранением свойств непрерывной симметрии. Например, так:

$$U(\alpha) = e^{i\alpha\hat{A}+i\alpha^7\hat{A}^7} \tag{7.4}$$

Этот оператор удовлетворяет условию унитарности:

$$U^{\dagger}U = 1 \tag{7.5}$$

условию в нуле:

$$U(0) = 1 \tag{7.6}$$

и оставляет гамильтониан унитарным:

$$U^{\dagger}HU = e^{i\alpha A+i\alpha^7 A^7} \cdot H \cdot e^{-i\alpha A-i\alpha^7 A^7} = H \tag{7.7}$$

Данный пример подчёркивает тот факт, что указанная выше теорема не постулирует единственность.

Докажем вторую часть теоремы. Пусть есть непрерывная симметрия, удовлетворяющая условиям:

$$U^{\dagger}U = 1 \tag{7.8}$$

$$U^{\dagger}HU = H \tag{7.9}$$

Разложим $U(\alpha)$ по степеням α:

$$U(\alpha) = U(0) + U'(0) \cdot \alpha^1 + ... \tag{7.10}$$

При этом $U(0) = 1$; обозначим $U'(0) = iB$, так как производная оператора есть некоторый оператор. Подставим полученное выражение в условие унитарности (6.7). Для этого вычислим эрмитово сопряжение:

$$U^{\dagger}(\alpha) = 1 - iB^{\dagger} \cdot \alpha^1 + ... \tag{7.11}$$

После после подстановки получаем:

$$\left(1 - i\alpha B^{\dagger} + ...\right)\left(1 + i\alpha B + ...\right) = 1 - i\alpha B^{\dagger} + i\alpha B + ... = 1 \tag{7.12}$$

Данное выражение должно равняться 1. Два степенных ряда равны тогда и только тогда, когда совпадают их коэффициенты при всех степенях. Сопоставляя коэффициенты перед степенями α, получаем, что равенство (6.12) возможно, если

$$B - B^{\dagger} = 0 \quad \Rightarrow \quad B = B^{\dagger} \tag{7.13}$$

Таким образом, B - некоторая наблюдаемая физическая величина.

Теперь подставим разложение в условие (6.9):

$$\left(1 - i\alpha B^{\dagger} + ...\right)\hat{H}\left(1 + i\alpha B + ...\right) = H - i\alpha BH + i\alpha BH + ... = H \tag{7.14}$$

Условие выполняется в случае, если совпадают коэффициенты справа и слева от последнего знака равенства. Таким образом, должно выполняться условие:

$$\left[H, B\right] = 0 \tag{7.15}$$

Таким образом, наблюдаемая B коммутирует с гамильтонианом и является интегралом движения. Что и требовалось доказать.

Пример.

$$e^{\frac{i}{\hbar}\hat{p}x_0} \tag{7.16}$$

- унитарный оператор, реализующий трансляции в координатном пространстве.
Если система трансляционно инвариантно, то $\hat{p}$ - интеграл движения (импульс сохраняется).

$$e^{\frac{i}{\hbar}\vec{n}\vec{l}\varphi} \tag{7.17}$$

- унитарный оператор, реализующий вращение вокруг оси $\vec{n}$ на угол φ, $\vec{l}$ - три компоненты момента.

Если система обладает аксиальной симметрией при вращении вокруг оси $\vec{n}$, сохраняется величина $\vec{n}\vec{l}$ - проекция момента на ось $\vec{n}$. Если система обладает сферической симметрией, то $\vec{n}$ - любое и тогда сохраняются все три компоненты момента.

При рассмотрении двух частиц с моментами $\vec{l}_1$ и $\vec{l}_2$ соответственно вводится оператор

$$e^{\frac{i}{\hbar}\vec{n}\vec{L}\varphi} \tag{7.18}$$

где

$$\vec{L} = \vec{l}_1 + \vec{l}_2 \tag{7.19}$$

вводится для описания поворота вокруг оси $\vec{n}$ системы из двух частиц как целого. Изотропность пространства появляется в случае рассмотрения системы как целого, поэтому в данном случае интегралом движения будет полный момент системы (6.19).

Рассмотрим кулоновский потенциал:

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r} \tag{7.20}$$

Потенциал является сферически-симметричным, поэтому орбитальный момент $\vec{l}$ - интеграл движения. Ещё один интеграл движения - вектор Лапласа - Рунге - Ленца:

$$\vec{A} = \frac{1}{2m}\left[\vec{p}\times\vec{l}\right] - \frac{1}{2m}\left[\vec{l}\times\vec{p}\right] + e^2\frac{\vec{r}}{r} \tag{7.21}$$

При этом выражение вида

$$e^{i\vec{n}\vec{A}\xi} \tag{7.22}$$

будет непрерывной симметрией для кулоновского потенциала атома водорода.

Посмотрим, как симметрия влияет на задачу на собственные вектора и собственные значения оператора гамильтона. Пусть

$$H\,|\psi_n\rangle = E_n\,|\psi_n\rangle \tag{7.23}$$

Применим непрерывную симметрию к собственному вектору гамильтониана:

$$e^{i\alpha A}\,|\psi_n\rangle \tag{7.24}$$

Так как $e^{i\alpha A}He^{-i\alpha A}\,|\psi_n\rangle = H$, то выполняется:

$$e^{i\alpha A}He^{-i\alpha A}\,|\psi_n\rangle = E_n\,|\psi_n\rangle \tag{7.25}$$

Умножим обе части равенства на $e^{-i\alpha A}$:

$$H\Big[e^{-i\alpha}A\,|\psi_n\rangle\Big] = E_n\Big[e^{-i\alpha}A\,|\psi_n\rangle\Big] \tag{7.26}$$

В итоге получили собственный вектор $e^{-i\alpha}A\,|\psi_n\rangle$ с тем же самым собственным значением E_n. В случае, если уровень энергии E_n невырожден, то получаем $|\psi_n\rangle$, домноженный на некоторую фазу. Если же уровень энергии вырожден (одному уровню энергии соответствует несколько разных $|\psi_n\rangle$), то получим линейную комбинацию этих $|\psi_n\rangle$.

Таким образом, полученное унитарное преобразование позволяет получить все остальные решения стационарного уравнения Шрёдингера (которое является задачей на СВ и СЗ гамильтониана) из какого-то одного.

Пример. Рассмотрим атом водорода. Возьмём $n = 2$, $l = 1$, $m = 1$. Соответствующая волновая функция $|\psi_{211}\rangle$. Осуществим преобразование: $e^{il_x\varphi}\,|\psi_{211}\rangle$.
Так как $e^{il_x\varphi}$ - непрерывная симметрия, в правой части должна получиться линейная комбинация состояний с той же самой энергией. При этом должно выполняться $n = 2$,
$l = \begin{cases}0\\1,\end{cases}$ $m = \begin{cases}0\\\pm 1.\end{cases}$
Учтём, что $e^{il_x\varphi}$ является симметрией не только для гамильтониана, но и для оператора l^2. Значит, можно исключить $l = 0$.

Таким образом, получаем:

$$e^{il_x\varphi}\,|\psi_{211}\rangle = a\,|\psi_{211}\rangle + b\,|\psi_{210}\rangle + c\,|\psi_{21-1}\rangle \tag{7.27}$$

Рассмотрим состояние $n = 2,\ l = 0,\ , m = 0$. Осуществим преобразование:

$$e^{iA_x\xi}\,|\psi_{200}\rangle \tag{7.28}$$

Тогда $n = 0$; при этом l уже не сохраняется, $\Rightarrow\ l = 0,\ l = 1$ и соответствующие им m.

Теорема о вырожденном спектре

Теорема. Пусть дано два интеграла движения

$$\Big[H, A\Big] = 0 \tag{7.29}$$

$$\left[H, B\right] = 0 \tag{7.30}$$

Пусть они не коммутируют:

$$\left[A, B\right] \neq 0 \tag{7.31}$$

Тогда спектр H вырожден.

В любом центрально-симметричном потенциале интегралами движения являются компоненты орбитального момента $\vec{l}$. Они не коммутируют между собой:

$$\left[l_i, l_j\right] \neq 0 \tag{7.32}$$

Можно соорудить полный набор наблюдаемых H, l^2, l_z. Тогда оставшиеся интегралы движения l_x, l_y являются способом получения других волновых функций.
В частном случае кулоновского потенциала также появляется интеграл движения - вектор Лапласа - Рунге - Ленца. Это объясняет случайное вырождение в кулоновском потенциале.

Теорема. Для операторов, не зависящих явно от времени, уравнение Гейзенберга сохраняет коммутационные соотношения между операторами.
Например, если

$$\left[A(0), B(0)\right] = iC(0) \tag{7.33}$$

то

$$\left[A(t), B(t)\right] = iC(t) \tag{7.34}$$

Формальное решение уравнения Гейзенберга. Оператор эволюции.

Пусть оператор не зависит от времени явно:

$$\frac{\partial}{\partial t}A = 0 \tag{7.35}$$

Пусть система консервативна:

$$H_{\text{г}}(t) = H \tag{7.36}$$

Тогда формальное решение уравнение Гейзенберга:

$$A_{\text{г}}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}Ht}A_{\text{г}}(0)e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} \tag{7.37}$$

Обобщим запись (6.37) на неконсервативные системы. Полное описание динамики в представлении Гейзенберга предполагает решение уравнения Гейзенберга для всех возможных операторов. Однако можно свести эволюцию всех операторов к некоторому

уравнению на один оператор.

Будем искать решение уравнения Гейзенберга в виде:

$$U(t)A_{\text{г}}(0)U^{\dagger}(t) \tag{7.38}$$

Заметим, что $e^{\frac{i}{\hbar}Ht}$ является унитарным оператором, когда H - эрмитов. Поэтому от оператора U тоже следует ожидать унитарности.

Пусть система неконсервативна: гамильтониан в представлении Гейзенберга зависит от времени$H_{\text{г}}(t)$. Наша задача - найти оператор $A_{\text{г}}(t)$.

Рассмотрим интервал $[t, 0]$, разбитый на N частей (Рис. 7.1). Длина каждого отрезка равна ε:

$$\varepsilon = t/N$$

Введём $t_n = \epsilon \cdot n$.

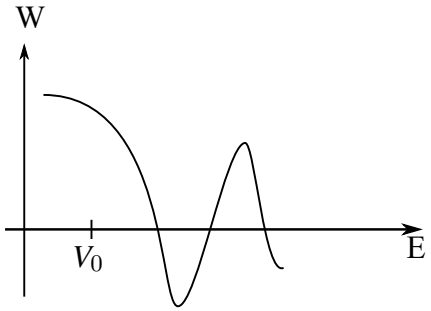


Рис. 7.1: Иллюстрация к доказательству

В дальнейшем $N \to \infty$ и $\varepsilon \to 0$, поэтому на интервале $[t_0, t_1]$ можно считать гамильтониан постоянным, а систему - консервативной. Тогда на указанном интервале

$$H_{\text{г}}(t) \approx H_{\text{г}}(t_0) \tag{7.39}$$

Отсюда получаем, что

$$A_{\text{г}}(t_1) = e^{\frac{i}{\hbar}H(t_0)\cdot\varepsilon}A_{\text{г}}(t_0)e^{-\frac{i}{\hbar}H(t_0)\varepsilon} \tag{7.40}$$

Аналогично получаем

$$A_{\text{г}}(t_2) = e^{\frac{i}{\hbar}H(t_1)} \cdot A_{\text{г}}(t_1) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}H(t_1)\cdot\varepsilon} \tag{7.41}$$

Таким образом, через N шагов получаем:

$$A_{\text{г}}(t) = A_{\text{г}}(t_N) = e^{\frac{i}{\hbar}H(t_{N-1})\varepsilon}e^{\frac{i}{\hbar}H(t_{N-2})\varepsilon}.....e^{\frac{i}{\hbar}H(t_0)\varepsilon} \cdot A_{\text{г}}(0) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}H(t_0)\varepsilon}.....e^{-\frac{i}{\hbar}H(t_{N-1})\varepsilon} \tag{7.42}$$

В пределе $N \to \infty$ и $\epsilon \to 0$ можно обозначить выражение

$$e^{-\frac{i}{\hbar}H(t_0)\varepsilon}.....e^{-\frac{i}{\hbar}H(t_{N-1})\varepsilon} = U^{\dagger}(t) \tag{7.43}$$

Тогда

$$e^{\frac{i}{\hbar}H(t_{N-1})\varepsilon}e^{\frac{i}{\hbar}H(t_{N-2})\varepsilon}.....e^{\frac{i}{\hbar}H(t_0)\varepsilon} = U(t) \tag{7.44}$$

И в итоге получаем:

$$A_{\text{г}}(t) = U(t)A_{\text{г}}(0)U^{\dagger}(t) \tag{7.45}$$

где (6.44) - одно из выражений для оператора эволюции.

В качестве иллюстрации приведённого рассуждения нарисуем график зависимости гамильтониана от времени.

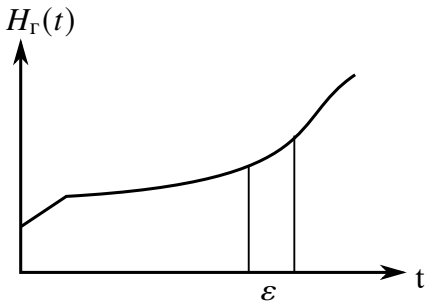


Рис. 7.2: График зависимости гамильтониана от времени

На указанном интервале ε можно считать гамильтониан постоянным лишь с некоторой точностью. Причём чем меньше ε, тем больше точность.

Замечание. Ясно, что

$$e^{\frac{i}{\hbar}H(t_{N-1})\varepsilon}....e^{\frac{i}{\hbar}H(t_0)\varepsilon} \neq e^{\frac{i}{\hbar}\int_0^t H(t)dt} \tag{7.46}$$

Равенство могло бы быть, если бы экспонента суммы равнялась бы произведению экспонент. Однако, если операторы не коммутируют, то

$$e^{A+B} \neq e^{A} \cdot e^{B} \tag{7.47}$$

Как правило, в разные моменты времени гамильтониан сам с собой не коммутирует.

Выпишем уравнение для оператора эволюции:

$$\frac{d}{dt}U(t) = \frac{U(t+\varepsilon) - U(t)}{\varepsilon} \tag{7.48}$$

Вынесем за скобки (вправо) все общие множители:

$$\frac{d}{dt}U(t) = \frac{e^{\frac{i}{\hbar}H(t_N)\varepsilon} - 1}{\varepsilon} \cdot e^{\frac{i}{\hbar}H(t_{N-1})\varepsilon} e^{\frac{i}{\hbar}H(t_{N-2})\varepsilon} \ldots\ldots e^{\frac{i}{\hbar}H(t_0)\varepsilon} = \frac{i}{\hbar}H(t_N) \cdot U(t) \tag{7.49}$$

Так как

$$e^{\frac{i}{\hbar}H(t_{N-1})\varepsilon} e^{\frac{i}{\hbar}H(t_{N-2})\varepsilon} \ldots\ldots e^{\frac{i}{\hbar}H(t_0)\varepsilon} = U(t)$$

и

$$\frac{e^{\frac{i}{\hbar}H(t_N)\varepsilon} - 1}{\varepsilon} \underset{\varepsilon\to 0}{\longrightarrow} \frac{i}{\hbar}H(t_N)$$

$$\begin{cases} \frac{dU}{dt} = \frac{i}{\hbar}H_{\text{г}}(t) \cdot U(t) \\ U(0) = 1 \end{cases} \tag{7.50}$$

Замечание. Мы могли определить оператор эволюции с помощью дифференциального уравнения с начальным условием (6.50) и произвести обратные рассуждения.

Для оператора $U^\dagger$ уравнение получается после эрмитова сопряжения:

$$\frac{dU^\dagger}{dt} = -\frac{i}{\hbar}U^\dagger(t) \cdot H_{\text{г}}(t) \tag{7.51}$$

Таким образом, решение уравнения Гейзенберга для оператора, не зависящего от уравнения явно:

$$A_{\text{г}}(t) = U(t)A_{\text{г}}(0)U^\dagger(t) \tag{7.52}$$

если удаётся решить дифференциальное уравнение (6.50) для одного оператора. То есть, найдя $U(t)$, можно описать динамику любой наблюдаемой величины.

Если эволюция системы происходит от момента времени t_1 до t_2, то оператор эволюции можно определить как $U(t_2, t_1)$. Тогда

$$U(t) \equiv U(t, 0) \tag{7.53}$$

Свойства оператора эволюции.

$$U(t_1, t_1) = 1 \tag{7.54}$$

Транзитивность:

$$U(t_3,t_2)U(t_2,t_1)=U(t_3,t_1) \tag{7.55}$$

Унитарность:

$$U^{\dagger}(t_2,t_1)U(t_2,t_1)=1 \tag{7.56}$$

$$U(t_1,t_2)=U^{-1}(t_2,t_1)=U^{\dagger}(t_2,t_1) \tag{7.57}$$

Замечание. Для неконсервативной системы оператор эволюции зачастую нельзя найти точно. Если же система консервативна:

$$U(t)=e^{\frac{i}{\hbar}Ht} \tag{7.58}$$

Однако для большинства гамильтонианов вычислить данную экспоненту нельзя. Экспонента может быть вычислена, только если можно найти спектр (СЗ и СВ гамильтониана). Таким образом, решение стационарного уравнения Шрёдингера означает полное описание динамики.

Пусть система консервативна. Тогда:

$$A_{\text{г}}(t)=e^{\frac{i}{\hbar}Ht}A_{\text{г}}(0)e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} \tag{7.59}$$

Воспользуемся формулой Бейкера-Хаусдорфа

$$e^{A}Be^{-A}=B+\frac{1}{1!}\Big[A,B\Big]+\frac{1}{2!}\Big[A,[A,B]\Big]+..... \tag{7.60}$$

Тогда (6.59) преобразуется в:

$$A_{\text{г}}(t)=A_{\text{г}}(0)+\frac{\left(\frac{i}{\hbar}t\right)^1}{1!}\Big[H,A_{\text{г}}(0)\Big]+\frac{\left(\frac{i}{\hbar}t\right)^2}{2!}\Big[H,[H,A_{\text{г}}(0)]\Big]+ \\ +\frac{\left(\frac{i}{\hbar}t\right)^3}{3!}\Big[H,\Big[H,[H,A_{\text{г}}(0)]\Big]\Big]+..... \tag{7.61}$$

Аналогичная формула для эволюции физической величины A существует в теоретической механике (коммутаторы заменяются на скобки Пуассона).

Опишем другой способ записи оператора эволюции. Необходимо решить дифференциальное уравнение:

$$\frac{d}{dt}U=\frac{i}{\hbar}H_{\text{г}}U \tag{7.62}$$

При условии:

$$U(0) = 1 \tag{7.63}$$

Проинтегрируем обе части равенства (6.62):

$$U(t) - U(0) = \int_0^t \frac{i}{\hbar} H_{\text{г}}(t_1) dt_1 \tag{7.64}$$

Таким образом, получили интегральное уравнение, которое можно решить рекурсивно:

$$U(t) = 1 + \frac{i}{\hbar} \int_0^t H_{\text{г}}(t_1) U(t_1) dt_1 =$$

$$= 1 + \frac{i}{\hbar} \int_0^t H_{\text{г}}(t_1) dt_1 + \frac{i}{\hbar} \int_0^t H_{\text{г}}(t_1) \int_0^t \frac{i}{\hbar} H_{\text{г}}(t_2) U(t_2) dt_1 dt_2 \tag{7.65}$$

где t_2, t_3 и т.д. - переменные интегрирования.
Подставляя далее исходное выражение для $U(t)$ под интегралы, получим бесконечный ряд с многократными интегралами:

$$U(t) = 1 + \frac{i}{\hbar} \int_0^t H_{\text{г}}(t_1) U(t_1) dt_1 =$$

$$= 1 + \frac{i}{\hbar} \int_0^t H_{\text{г}}(t_1) dt_1 + \frac{i}{\hbar} \int_0^t H_{\text{г}}(t_1) \int_0^t \frac{i}{\hbar} H_{\text{г}}(t_2) \cdot 1 \cdot dt_1 dt_2 +$$

$$+ \frac{i}{\hbar} \int_0^t H_{\text{г}}(t_1) \frac{i}{\hbar} \int_0^t H_{\text{г}}(t_2) \int_0^t H_{\text{г}}(t_3) dt_1 dt_2 dt_3 + \ldots. \tag{7.66}$$

Преобразуем полученное выражение. Определим операцию хронологического упорядочения (обозначим Т) следующим образом:

$$T H_{\text{г}}(t_1) H_{\text{г}}(t_2) = \begin{cases} H_{\text{г}}(t_1) H_{\text{г}}(t_2), & t_1 > t_2 \\ H_{\text{г}}(t_2) H_{\text{г}}(t_1), & t_2 > t_1 \end{cases}$$

То есть, в результате хронологического упорядочения из двух гамильтонианов, входящих в произведение, левее стоит тот, у которого время больше. Если определить операцию Т для трёх гамильтонианов, то получим аналогичное соотношение из 3!=6 строк. Запишем это в виде:

$$T H_{\text{г}}(t_1) H_{\text{г}}(t_2) H_{\text{г}}(t_3) = H_{\text{г}}(t_a) H_{\text{г}}(t_b) H_{\text{г}}(t_c), \quad t_a > t_b > t_c \tag{7.67}$$

Лекция 8. Представление Шрёдингера.

Решение уравнения Гейзенберга

Запишем решение уравнения Гейзенберга в виде

$$A_{\text{г}}(t) = U(t)A_{\text{г}}(0)U^{\dagger}(t) \tag{8.1}$$

Уравнение для оператора эволюции:

$$\begin{cases} \int \frac{dU}{dt} = \frac{i}{\hbar}H_{\text{г}}(t)U(t) \\ U(0) = 1 \end{cases} \tag{8.2}$$

и уравнение для $U^{\dagger}$:

$$\frac{d}{dt}U^{\dagger}(t) = -\frac{i}{\hbar}U^{\dagger}H_{\text{г}}(t) \tag{8.3}$$

На прошлой лекции было показан способ записи оператора эволюции в виде ряда по повторным интегралам:

$$U(t) = 1 + \frac{i}{\hbar}\int\limits_0^t H_{\text{г}}(t_1)dt_1 + \frac{i}{\hbar}\int\limits_0^t H_{\text{г}}(t_1)\int\limits_0^t \frac{i}{\hbar}H_{\text{г}}(t_2)dt_2 + ... \tag{8.4}$$

Была определена операция хронологического упорядочения:

$$TH_{\text{г}}(t_1)H_{\text{г}}(t_2) = H(t_a)H(t_b) \;\; t_a > t_b \tag{8.5}$$

после действия которой операторы в произведении переставляются слева направо в порядке возрастания времени.

Применим операцию временного упорядочения к квадрату однократного интеграла:

$$T\left(\frac{i}{\hbar}\int\limits_0^t H(t)dt\right)^2 = T\frac{i}{\hbar}\int\limits_0^t dt_1\frac{i}{\hbar}\int\limits_0^t dt_2 H(t_1)H(t_2) \tag{8.6}$$

Интегралы не зависят друг от друга, поэтому область интегрирования можно представить в виде рис. 8.1.

В нижней, заштрихованной области на рис. 8.1 всегда $t_1 > t_2$. Поэтому интеграл по этой области не преобразуется после операции T. Обратно, в интеграле по не заштрихованной области операция T приведёт к перемене мест $H(t_1)$ и $H(t_2)$:

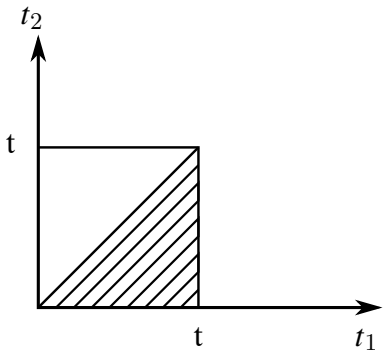


Рис. 8.1: Поворот

$$T\Big(\frac{i}{\hbar}\int\limits_0^t H(t)dt\Big)^2 = \frac{i}{\hbar}\int\limits_0^t dt_1 H(t_1)\frac{i}{\hbar}\int\limits_0^{t_1} H(t_2)dt_2 + \frac{i}{\hbar}\int\limits_0^t dt_2 H(t_2)\frac{i}{\hbar}\int\limits_0^{t_2} H(t_1)dt_1 =$$

$$= 2!\frac{i}{\hbar}\int\limits_0^t dt H(t_1)\frac{i}{\hbar}\int\limits_0^{t_1} H(t_2)dt_2 \quad (8.7)$$

С точностью до множителя мы получили третье по счёту слагаемое в ряде для оператора эволюции (7.4).

Аналогично

$$T\Big(\frac{i}{\hbar}\int\limits_0^t H(t)dt\Big)^3 = 3!\frac{i}{\hbar}\int\limits_0^t dt_1 H(t_1)\int\limits_0^{t_1} dt_2 H(t_2)\cdot\frac{i}{\hbar}\int\limits_0^{t_2} dt_3 H(t_3) \quad (8.8)$$

- четвёртое слагаемое ряда.

Запишем выражение для оператора эволюции в виде:

$$U(t) = T\Big[1 + \frac{1}{1!}\Big(\frac{i}{\hbar}\int\limits_0^t dt H_{\text{г}}(t)\Big)^1 + \frac{1}{2!}\Big(\frac{i}{\hbar}\int\limits_0^t H_{\text{г}}(t)dt\Big)^2 + \frac{1}{3!}\Big(\frac{i}{\hbar}\int\limits_0^t H_{\text{г}}(t)dt\Big)^3 + ...\Big] =$$

$$= T\exp\Big(\frac{i}{\hbar}\int\limits_0^t H_{\text{г}}(t)dt\Big) \quad (8.9)$$

Отметим, что

$$e^{\frac{i}{\hbar}H_{\text{г}}(t_1)\varepsilon} \neq e^{\frac{i}{\hbar}H_{\text{г}}(t_0)\varepsilon + \frac{i}{\hbar}H_{\text{г}}(t_0)\varepsilon} \quad (8.10)$$

Но при этом

$$e^{\frac{i}{\hbar}H_{\text{г}}(t_2)\varepsilon}e^{\frac{i}{\hbar}H_{\text{г}}(t_0)\varepsilon} = Te^{\frac{i}{\hbar}H_{\text{г}}(t_1)\varepsilon+\frac{i}{\hbar}H_{\text{г}}(t_0)\varepsilon} \tag{8.11}$$

Данное свойство операции T является одним из способов построения теории возмущений в теории переходов.

Представление Шрёдингера

Унитарное преобразование предполагает смену базиса, в котором мы работаем. Построим унитарное преобразование для любого оператора:

$$\tilde{A} \equiv V^{\dagger}AV \tag{8.12}$$

и перейдём к новому вектору гильбертова пространства:

$$|\tilde{\psi}\rangle = V^{\dagger}|\psi\rangle \tag{8.13}$$

Возьмём в качестве унитарного оператора V оператор эволюции:

$$V \equiv U(t) \tag{8.14}$$

Тогда для любого оператора

$$A_{\text{ш}}(t) = U^{\dagger}(t)A_{\text{г}}(t)U(t) \tag{8.15}$$

для гамильтониана:

$$H_{\text{ш}}(t) = U^{\dagger}(t)H_{\text{г}}(t)U(t) \tag{8.16}$$

для матрицы плотности:

$$\rho_{\text{ш}}(t) = U^{\dagger}(t)\rho_{\text{г}}(t)U(t) \tag{8.17}$$

В случае чистого состояния:

$$|\psi_{\text{ш}}(t)\rangle = U^{\dagger}(t)|\psi_{\text{г}}(t)\rangle \tag{8.18}$$

Указанные выражения составляют переход от представления Гейзенберга к представлению Шрёдингера. Причём при унитарном преобразовании физика процесса никак не меняется - в этом смысле представления эквивалентны.
Если оператор не зависит от времени явно:

$$\frac{\partial A}{\partial t} = 0 \tag{8.19}$$

то

$$A_{\text{ш}}(t) = U^{\dagger}(t)\Big[U(t)A_{\text{г}}(0)U^{\dagger}(t)\Big]\cdot U(t) = A_{\text{г}}(0) = A_{\text{ш}}(0) \tag{8.20}$$

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

где в квадратных скобках записано решение уравнения Гейзенберга через оператор эволюции.

Таким образом, в представлении Шрёдингера операторы не зависят от времени.

Отметим в момент времени $t = 0$ $U(0) = 1$ представления Гейзенберга и Шрёдингера совпадают.

Динамика операторов остановлена, поэтому в данном случае будут эволюционировать состояния:

$$\rho_{\text{ш}}(t) = U^{\dagger}(t)\rho_{\text{г}}(t)U(t) \tag{8.21}$$

В представлении Гейзенберга матрица плотности не эволюционирует: $\rho_{\text{г}}(t) = \rho_{\text{г}}(0)$.
Выведем уравнение эволюции для матрицы плотности:

$$\frac{d}{dt}\rho_{\text{ш}}(t) = U^{\dagger}(t)\Big(-\frac{i}{\hbar}H_{\text{г}}(t)\Big)\cdot U(t)U^{\dagger}(t)\cdot\rho_{\text{г}}(0)U(t) + U^{\dagger}(t)\rho_{\text{г}}(0)U(t)\Big(U^{\dagger}(t)\frac{i}{\hbar}H_{\text{г}}(t)U(t)\Big) = \\ = -\frac{i}{\hbar}H_{\text{ш}}(t)\rho_{\text{ш}}(t) + \frac{i}{\hbar}\rho_{\text{ш}}(t)H_{\text{ш}}(t) \tag{8.22}$$

где в первое слагаемое для удобства подставлен единичный оператор $U(t)U^{\dagger}(t)$. Далее получаем, что $U^{\dagger}(t)\Big(-\frac{i}{\hbar}H_{\text{г}}(t)\Big)\cdot U(t) = H_{\text{ш}}(t)$, $U^{\dagger}(t)\cdot\rho_{\text{г}}(0)U(t) = \rho_{\text{ш}}(t)$. Аналогично для второго слагаемого. Отсюда и следует окончательный ответ.

Таким образом, уравнение для эволюции состояния

$$\boxed{i\hbar\frac{d}{dt}\rho_{\text{ш}}(t) = \Big[H_{\text{ш}}(t), \rho_{\text{ш}}(t)\Big]} \tag{8.23}$$

Аналогично в частном случае чистого состояния выводится нестационарное уравнение Шрёдингера:

$$\boxed{i\hbar\frac{d}{dt}\,|\psi_{\text{ш}}(t)\rangle = H_{\text{ш}}(t)\,|\psi_{\text{ш}}(t)\rangle} \tag{8.24}$$

Нестационарное уравнение Шрёдингера проще для решения, так как оно решается для столбца, а не для матрицы.

Рассмотрим частный случай консервативной системы:

$$H_{\text{г}}(t) = H \tag{8.25}$$

Тогда

$$U(t) = e^{\frac{i}{\hbar}Ht} \tag{8.26}$$

Соответственно, гамильтониан в представлении Шрёдингера:

$$H_{\text{ш}}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} H e^{\frac{i}{\hbar}Ht} = H = H_{\text{г}}(t) \tag{8.27}$$

Гамильтониан коммутирует сам с собой, следовательно, $e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$ тоже коммутирует с H. Тогда экспоненты в (7.27) можно переставить, вследствие чего и получился ответ.

Таким образом, для консервативных систем гамильтониан не зависит от времени и совпадает для обоих представлений.

В рассмотренном случае консервативной системы описание динамики в любом представлении эквивалентно умению вычислять экспоненту (7.26). Однако зачастую прямое вычисление данной экспоненты невозможно. Вычисление возможно в случае использования спектрального разложения. Запишем задачу на собственные функции и собственные значения гамильтониана:

$$H\,|\psi_n\rangle = E_n\,|\psi\rangle \tag{8.28}$$

Состояния, полученные в результате решения данной задачи позволяют полностью описывать динамику системы в любом из представлений.

Пусть стационарное уравнение Шрёдингера решено. Тогда

$$e^{\frac{i}{\hbar}Ht} = \sum_n e^{\frac{i}{\hbar}E_n t}\,|\psi_n\rangle\,\langle\psi_n| \tag{8.29}$$

Запишем решение нестационарного уравнения Шрёдингера через разложение по базису собственных функций:

$$|\psi_{\text{ш}}(0)\rangle = \sum_n C_n\,|\psi_n\rangle \tag{8.30}$$

где

$$C_n = \langle\psi_n|\psi_{\text{ш}}(0)\rangle \tag{8.31}$$

Учтём, что

$$e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} = \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\,|\psi\rangle\,\langle\psi| \tag{8.32}$$

Тогда волновая функция в любой момент времени:

$$|\psi_{\text{ш}}(t)\rangle = U^{\dagger}(t)\,|\psi_{\text{ш}}(0)\rangle = \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\,|\psi_n\rangle\,\langle\psi_n|\psi_{\text{ш}}(0)\rangle = \sum_n C_n \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\,|\psi_n\rangle \tag{8.33}$$

Замечание. Пусть

$$C_{n_0} = 1, \quad C_{n \neq n_0} = 0 \tag{8.34}$$

то есть

$$|\psi_{\text{ш}}(0)\rangle = |\psi_{n_0}\rangle \tag{8.35}$$

Тогда в сумме будет только одно слагаемое:

$$|\psi_{\text{ш}}(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_{n_0}t}\,|\psi_{\text{ш}}(0)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_{n_0}t}\,|\psi_{n_0}\rangle \tag{8.36}$$

Заметим, что фаза $e^{-\frac{i}{\hbar}}$ не имеет физического смысла - она не меняет состояние $|\psi_{n_0}\rangle$. Однако, её нельзя выкидывать из решения нестационарного уравнения Шрёдингера.

Пример. Атом водорода имеет решение стационарного уравнения Шрёдингера вида $|\psi_{nlm}\rangle$. Ему соответствует энергия, которая зависит только от главного квантового числа: E_n. Строго говоря,для атома водорода существует одно стационарное состояние - 100.

Однако, если в качестве гамильтониана системы взять

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r}$$

то все состояния $|\psi_{nlm}\rangle$ будут стационарными по определению. Однако в случае реальных ситуаций необходимо к гамильтониану добавить гамильтониан электромагнитного взаимодействия. Из-за этой добавки любой из возбуждённых состояний в атоме водорода оказывается нестационарным.

Таким образом, понятие стационарности зависит от того, какой гамильтониан мы рассматриваем в конкретной задаче.

Одномерное движение материальной точки

Операторами координаты и импульса называются операторы, удовлетворяющие следующему коммутационному соотношению:

$$\left[\hat{x}, \hat{p}\right] = i\hbar \tag{8.37}$$

Материальная точка (в одномерном случае) - это система, у которой спектр оператора координаты - вся вещественная ось и спектр оператора координаты невырожден.

Невырожденность спектра оператора координаты требуется для того, чтобы у определяемой материальной точки не было дополнительных степеней свободы.

Заметим, что запись

$$\hat{x}\,|x\rangle = x\,|x\rangle \tag{8.38}$$

строго говоря не имеет математического смысла, так как $|x\rangle$ не является вектором гильбертова пространства. Физический смысл имеет утверждение, что существует функционал, определённый на гильбертовом пространстве, который и даёт координатное представление $\psi(x)$:

$$\langle x|\psi\rangle = \psi(x) \tag{8.39}$$

Причём x - обобщённый собственный вектор, если выполняется:

$$\langle x|\,\hat{x}\,|\psi\rangle = x\psi(x) \tag{8.40}$$

В дальнейшем мы будем писать выражения вида (7.38), подразумевая (7.40).

Действие оператора координаты выражается в виде:

$$\hat{x}\psi(x) = x\psi(x) \tag{8.41}$$

причём математически подразумеваются выражения (7.39) и (7.40).

Пусть в некотором абстрактном гильбертовом пространстве введён базис. Тогда каждому вектору гильбертова пространства будет соответствовать столбец:

$$|\psi\rangle \longleftrightarrow \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ C_3 \\ . \\ . \\ . \end{pmatrix} \tag{8.42}$$

Данный столбец тоже образует гильбертово пространство, которое определяется выбранным базисом. Аналогично для описанной выше ситуации. Есть некоторое абстрактное гильбертово пространство $|\psi\rangle$. Мы выбираем базис из обобщённых собственных векторов оператора координаты $|x\rangle$. Для них определено скалярное произведение $\langle x|\psi\rangle = \psi(x)$. Оно, по аналогии со столбцами, образует гильбертово пространство.

Работа в базисе обобщённых собственных векторов оператора координаты называется **координатным представлением.**

Коммутационного соотношения оказывается достаточно, чтобы выяснить, как

оператор импульса действует в координатном представлении. Покажем это. Сдвиг оператора координаты можно записать в виде

$$e^{\frac{i}{\hbar}\hat{p}a}\hat{x}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{p}a} = \hat{x} + a \tag{8.43}$$

Умножим это соотношение на $e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{p}a}$ слева:

$$\hat{x}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{p}a} = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{p}a}\hat{x} + ae^{-\frac{i}{\hbar}\hat{p}a} \tag{8.44}$$

Тогда

$$\left[\hat{x}, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{p}a}\right] = a \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{p}a} \tag{8.45}$$

Утверждение. Если есть два оператора B и Δ, которые коммутируют следующим образом:

$$\left[\hat{B}, \hat{\Delta}\right] = d \cdot \hat{\Delta} \tag{8.46}$$

то физический смысл оператора Δ - оператор, сдвигающий собственные значения оператора B. Покажем это. Пусть

$$B\,|\beta\rangle = b\,|\beta\rangle \tag{8.47}$$

Построим

$$|\tilde{\beta}\rangle = \Delta\,|\beta\rangle \tag{8.48}$$

Применим B к $|\tilde{\beta}\rangle$:

$$B\,|\tilde{\beta}\rangle = B\Delta\,|\beta\rangle = \left(\Delta B + d\Delta\right)|\beta\rangle = \Delta B\,|\beta\rangle + d\Delta\,|\beta\rangle = \Delta b\,|\beta\rangle + d\Delta\,|\beta\rangle = (b+d)\,|\tilde{\beta}\rangle = B\,|\tilde{\beta}\rangle \tag{8.49}$$

То есть оператор Δ сдвигает собственные значения оператора B вверх на d для любого собственного вектора оператора B.

Замечание. Если оператор Δ - унитарный, то собственный вектор $|\tilde{\beta}\rangle$ останется нормированным на 1. В противном случае $|\tilde{\beta}\rangle$ не будет нормированным.

В нашем случае:

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{p}a}\,|x\rangle = e^{i\xi}\,|x+a\rangle \tag{8.50}$$

где $e^{i\xi}$ - произвольный фазовый множитель.

Далее постулируется **фазовое соглашение**: отрегулируем фазу вектора $|x+a\rangle$ так, чтобы $\xi = 0$. Если изначально $\xi \neq 0$, то можно переопределить вектор $|x+a\rangle$, чтобы выполнилось указанное условие $\xi = 0$ (это возможно, так как любой из базисных векторов может быть домножен на произвольный фазовый множитель без последующего изменения базиса).

КОНСПЕКТ ПОДГОТОВЛЕН СТУДЕНТАМИ, НЕ ПРОХОДИЛ
ПРОФ РЕДАКТУРУ И МОЖЕТ СОДЕРЖАТЬ ОШИБКИ
СЛЕДИТЕ ЗА ОБНОВЛЕНИЯМИ НА VK.COM/TEACHINMSU

Осуществим эрмитово сопряжение формулы (7.50) и домножим её на $|\psi\rangle$:

$$\langle x|\, e^{\frac{i}{\hbar}\hat{p}a}\, |\psi\rangle = \langle x+a|\psi\rangle = \psi(x+a) \tag{8.51}$$

Таким образом, работая в координатном представлении, получаем соотношение:

$$e^{\frac{i}{\hbar}\hat{p}a}\psi(x) = \psi(x+a) \tag{8.52}$$

Устремим $a \to 0$ и разложим обе части уравнения в ряд по степеням a, оставляя только линейные слагаемые:

$$\psi(x) + \frac{i}{\hbar}\hat{p}a\psi(x) = \psi(x) + \frac{a^1}{1!}\psi'(x) \tag{8.53}$$

Отсюда получаем:

$$\boxed{\hat{p}\psi(x) = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\psi(x)} \tag{8.54}$$

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

Лекция 9. Непрерывный спектр.

Математическое отступление о непрерывном спектре

Запишем волновую функцию в координатном представлении

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle \tag{9.1}$$

Отметим, что соотношение

$$\hat{x}\,|x\rangle = x\,|x\rangle \tag{9.2}$$

имеет строгий математический смысл только в случае записи:

$$\langle x|\,\hat{x}\,|\psi\rangle = x\,\langle x|\psi\rangle \tag{9.3}$$

Пусть оператор x действует на некоторую произвольную волновую функцию $|\psi\rangle$:

$$|\chi\rangle = \hat{x}\,|\psi\rangle \tag{9.4}$$

Тогда при переходе в координатное представление:

$$\chi(x) = x\psi(x) = \hat{x}\psi(x) \tag{9.5}$$

Если же

$$|\xi\rangle = \hat{p}\,|\psi\rangle \tag{9.6}$$

то

$$\xi(x) = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\psi(x) = \hat{p}\psi(x) \tag{9.7}$$

Где операторы координаты и импульса определяются через коммутаторы:

$$\left[\hat{x}, \hat{p}\right] = i\hbar \tag{9.8}$$

Сделаем математическое отступление касаемо непрерывного спектра. Возьмём функции, определённые на кольце $[0, L]$ и удовлетворяющие периодическому граничному условию:

$$\psi(x) = \psi(x + L) \tag{9.9}$$

Определим оператор волнового числа:

$$\hat{k} = \frac{1}{i}\frac{d}{dx} \tag{9.10}$$

Из-за условия периодичности спектр будет дискретным, собственные вектора имеют вид:

$$\psi_n(x) = \frac{e^{ik_n x}}{\sqrt{L}} \tag{9.11}$$

а k_n обеспечивают условие периодичности:

$$k_n = \frac{2\pi n}{L} = k \tag{9.12}$$

Изменим условие нормировки:

$$\psi_k(x) = \sqrt{\frac{L}{2\pi}}\psi_n(x) = \frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}} \tag{9.13}$$

где k изменяется непрерывно, n - дискретный индекс.
В результате получаем функцию, нормированную на дельта-функцию:

$$\int \psi^*_{k'}(x)\psi_k(x)dx = \delta(k' - k) \tag{9.14}$$

В таком случае

$$\int_0^L \frac{e^{-ikx}}{\sqrt{2\pi}} \cdot \frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}} dx = \delta(0) = \frac{L}{2\pi} \tag{9.15}$$

Отсюда получаем квадрат дельта-функции:

$$\delta^2(k' - k) = \delta(0)\delta(k - k') = \frac{L}{2\pi}\delta(k - k') \tag{9.16}$$

$\psi_n(x)$ образуют базис, поэтому любую $\psi(x)$ можно разложить по этому базису:

$$\psi(x) = \sum_n C_n\psi_n(x) \tag{9.17}$$

причём квадрат коэффициентов C_n равен вероятностям того, что измерение наблюдаемой, соответствующей оператору волнового числа даст в точности $k_n = \frac{2\pi n}{L}$. Однако, при достаточно большом L величина $|C_n|^2$ не имеет физического смысла, так как в этом случае уже нельзя отличить k_n от k_{n+1} или k_{n+2}. Физический смысл в данном случае будет у величины, позволяющей определить вероятность k_n в некотором диапазоне:

$$P_{[n_1,n_2]} = \sum_{n=n_1}^{n_2} |C_n|^2 = \int_{k_1}^{k_2} dk \frac{L}{2\pi}|C_n|^2 = \int_{k_1}^{k_2} dk|C_k|^2 \tag{9.18}$$

где C_n - коэффициент разложения по дискретному спектру. $|C_k|^2$ есть плотность

вероятности иметь значение k.

Аналогичное рассуждение можно привести для любой другой величины, для которой можно реализовать переход от дискретного спектра к непрерывному.

Реализуем разложение единицы по базису и перейдём от дискретного спектра к непрерывному:

$$1 = \sum_n |\psi_n\rangle \langle\psi_n| = \int dk \left(\sqrt{\frac{L}{2\pi}}\right)^2 |\psi_n\rangle \langle\psi_n| = \int dk\, |\psi_k\rangle \langle\psi_k| \tag{9.19}$$

Таким образом, при переходе от дискретного спектра к непрерывному сумма заменятся на интеграл и изменяются нормировка соответствующих базисных векторов и их размерность.

Запишем

$$\langle\psi_k|\psi_{k'}\rangle = \delta(k - k') \tag{9.20}$$

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x - x') \tag{9.21}$$

где произведение двух обобщённых векторов $\langle x|x'\rangle$ можно определить следующим образом:

$$\sum_n \langle x|\psi_n\rangle \langle\psi_n|x'\rangle = \sum_n \psi_n(x)\psi_n^*(x') = \delta(x - x') \tag{9.22}$$

так как соотношения $\langle x|\psi_n\rangle = \psi_n(x)$ и $\langle\psi_n|x'\rangle = \psi_n^*(x')$ уже определены.
Последнее равенство в (8.22) выполняется вследствие условия полноты базиса.

Аналогичное соотношение:

$$\langle\psi_n|\psi_m\rangle = \delta_{nm} = \int dx \langle\psi_n|x\rangle \langle x|\psi_m\rangle = \int dx \psi_n^*(x)\psi_m(x) = \delta_{nm} \tag{9.23}$$

справедливо для любых базисных векторов. Поэтому

$$1 = \int dx\, |x\rangle \langle x| \tag{9.24}$$

Аналогично для собственных функций волнового числа:

$$1 = \int dk\, |\psi_k\rangle \langle\psi_k| \tag{9.25}$$

Таким образом, меняя нормировку дискретного спектра, можно получить непрерывный спектр.

Оператор со смешанным спектром

Пусть дана некоторая наблюдаемая $\hat{A}$ с любым спектром. Пусть у неё есть дискретный:

$$A\,|\alpha_n\rangle = a_n\,|\alpha_n\rangle \tag{9.26}$$

и непрерывный спектр:

$$A\,|\alpha_n\rangle = a\,|\alpha_n\rangle \tag{9.27}$$

Рассмотрим произведение собственных векторов. Для дискретных уровней получаем символ Кронекера:

$$\langle\alpha_n|\alpha_m\rangle = \delta_{nm} \tag{9.28}$$

В случае дискретного на непрерывный:

$$\langle\alpha_n|\alpha_a\rangle = 0 \tag{9.29}$$

Для непрерывного спектра:

$$\langle\alpha_a|\alpha_{a'}\rangle = \delta(a - a') \tag{9.30}$$

Разложение единицы в таком случае примет вид:

$$1 = \sum_{\text{д.с.}} |\alpha_n\rangle\,\langle\alpha_n| + \int\limits_{\text{н.с.}} da\,|\alpha_a\rangle\,\langle\alpha_a| \tag{9.31}$$

где $\sum_{\text{д.с.}}$ - суммирование по дискретному спектру, $\int\limits_{\text{н.с.}}$ - интегрирование по непрерывному спектру.

Тогда разложение произвольного вектора гильбертова пространства:

$$|\psi\rangle = \sum_{\text{д.с.}} C_n\,|\alpha_n\rangle + \int\limits_{\text{н.с.}} da C(a)\,|\alpha_a\rangle \tag{9.32}$$

Тогда вероятность при измерении наблюдаемой A получить a_n равно $|C_n|^2$, а вероятность получить значение в интервале равна

$$P_{\left[a_1,a_2\right]} = \int\limits_{a_1}^{a_2} da\left|C(a)\right|^2 \tag{9.33}$$

При этом

$$C_n = \langle\alpha_n|\psi\rangle\,,\quad C(a) = \langle\alpha_a|\psi\rangle \tag{9.34}$$

Спектральное разложение эрмитова оператора:

$$\hat{A} = \sum_{\text{д.с.}} a_n \left|\alpha_n\right\rangle \left\langle\alpha_n\right| + \int\limits_{\text{н.с.}} da\; a \left|\alpha_a\right\rangle \left\langle\alpha_a\right| \tag{9.35}$$

Определим функцию от оператора:

$$f(\hat{A}) = \sum_{\text{д.с.}} f(a_n) \left|\alpha_n\right\rangle \left\langle\alpha_n\right| + \int\limits_{\text{н.с.}} da f(a) \left|\alpha_a\right\rangle \left\langle\alpha_a\right| \tag{9.36}$$

Перейдём к координатному представлению. Тогда в рассматриваемом случае

$$\left|\alpha_a\right\rangle \leftrightarrow \left|x\right\rangle$$

$$C(a) \leftrightarrow \psi(x)$$

и $|C(a)|^2$ - плотность вероятности иметь координату x.

Рассмотрим смешанное состояние с матрицей плотности ρ. Вероятность того, что при измерении мы получим a_n, принадлежащую дискретному спектру:

$$P_{a_n} = \left\langle\alpha_n\right| \rho \left|\alpha_n\right\rangle \tag{9.37}$$

Тогда вероятность того, что координата частицы находится в интервале $[x_1, x_2]$:

$$P_{[x_1,x_2]} = \int\limits_{x_1}^{x_2} dx \left\langle x\right| \rho \left|x\right\rangle \tag{9.38}$$

Таким образом, в координатном представлении диагональный элемент матрицы плотности есть плотность вероятности найти частицу в точке x.

Импульсное представление

Коммутационное соотношение

$$\left[\hat{x}, \hat{p}\right] = i\hbar \tag{9.39}$$

запишем в виде

$$\left[\hat{p}, \hat{x}\right] = -i\hbar \tag{9.40}$$

Поэтому для построения импульсного представления достаточно перейти в базис собственных векторов оператора импульса:

$$\hat{p}\,|p\rangle = p\,|p\rangle \tag{9.41}$$

Аналогично координатному представлению

$$\psi(p) = \langle p|\psi\rangle \tag{9.42}$$

$$1 = \int dp\,|p\rangle\,\langle p| \tag{9.43}$$

Тогда

$$\hat{p}\psi(p) = p\psi(p) \tag{9.44}$$

Унитарный оператор трансляции координаты $e^{\frac{i}{\hbar}\hat{p}a}$ заменяем на $e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{x}b}$ - унитарный оператор трансляции в импульсном пространстве.

Аналогично выкладкам предыдущей лекции можно получить:

$$\hat{x}\psi(p) = -\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dp}\psi(p) \tag{9.45}$$

Итак, имеем некоторое абстрактное гильбертово пространство векторов $|\psi\rangle$. Мы можем воспользоваться базисом обобщённых векторов оператора координаты $|x\rangle$ (при этом они не принадлежат гильбертову пространству). В этом базисе мы получаем координатное представление $\psi(x)$. Аналогично, воспользовавшись базисом обобщённых собственных векторов оператора импульса, получаем импульсное представление $\psi(p)$. Оба случая представляют собой разложение одной и той же волновой функции по разным базисам. Следовательно, должен быть переход между координатным и импульсным представлением, которым является преобразование Фурье. Причём преобразование Фурье реализуется унитарным оператором. Докажем, что переход между представлениями осуществляется с помощью преобразования Фурье.

Чтобы найти коэффициенты разложения $\langle U_n|\psi\rangle$ по какому-то базису, полученному с помощью некоторого унитарного преобразования $|U_n\rangle = U\,|n\rangle$, нужно подставить в $\langle U_n|\psi\rangle$ единичный оператор:

$$\sum_m \langle U_n|m\rangle\,\langle m|\psi\rangle = \sum_m U^{\dagger}_{nm}\cdot\psi_m \tag{9.46}$$

В нашем случае формула будет аналогичная, только вместо суммы - интеграл:

$$\langle x|\psi\rangle = \psi(x) = \int dp\, \langle x|p\rangle \langle p|\psi\rangle = \int dp\, \langle x|p\rangle \psi(p) \tag{9.47}$$

Обозначим скалярное произведение следующим образом:

$$\langle x|p\rangle = U_p(x) \tag{9.48}$$

С одной стороны, получаем:

$$\langle x|\, \hat{p}\, |p\rangle = \langle x|\, p\, |p\rangle = pU_p(x) \tag{9.49}$$

С другой стороны, матричный элемент можно представить в виде:

$$\langle x|\, \hat{p}\, |p\rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\langle x|p\rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}U_p(x) \tag{9.50}$$

Таким образом, мы получили дифференциальное уравнение для плоской волны. Отсюда:

$$U_p(x) = N \cdot e^{\frac{i}{\hbar}px} \tag{9.51}$$

где N - нормировочный множитель. Чтобы найти его, посчитаем:

$$\begin{aligned}\delta(p-p') = \langle p|p'\rangle = \int dx\, \langle p|x\rangle \langle x|p'\rangle = \int dx U_p^*(x)U_{p'}(x) = \\ = \int dx N_p^* e^{-\frac{i}{\hbar}px} N_{p'} e^{\frac{i}{\hbar}p'x} = 2\pi\hbar\delta(p-p')N_p^*N_p = \delta(p-p')\end{aligned} \tag{9.52}$$

Отсюда получаем:

$$N_p = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \cdot 1 \tag{9.53}$$

Окончательно получаем:

$$U_p(x) = \frac{e^{\frac{i}{\hbar}px}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \tag{9.54}$$

Соответственно,

$$\psi(x) = \int dp \frac{e^{\frac{i}{\hbar}px}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\psi(p) \tag{9.55}$$

Обратно:

$$\psi(p) = \int dx \frac{e^{-\frac{i}{\hbar}px}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\psi(x) \tag{9.56}$$

Отметим связь между знаком для коммутатора и знаком показателя экспоненты в

преобразовании:

$$\left[x, p\right] = +i\hbar \quad \longleftrightarrow \quad U_p(x) = \frac{e^{+\frac{i}{\hbar}px}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \tag{9.57}$$

Аналогично координатному представлению $\left|\psi(p)\right|^2$ есть плотность вероятности иметь значение импульса p. В случае смешанного состояния диагональный элемент матрицы плотности $\langle p|\,\hat{\rho}\,|p\rangle$ - плотность вероятности иметь в этом смешанном состоянии импульс p.

Общие свойства одномерного стационарного уравнения Шрёдингера

В общем случае стационарное уравнение Шрёдингера:

$$H\,|\psi\rangle = E\,|\psi\rangle \tag{9.58}$$

- задача на собственные вектора и собственные значения гамильтониана.

Рассмотрим гамильтониан:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) \tag{9.59}$$

Если мы работаем в координатном представлении, то в случае некоторого оператора $\hat{A}$ необходимо построить матрицу: $A(x', x) = \langle x'|\,\hat{A}\,|x\rangle$. При этом большинство операторов в координатном представлении - это функция двух аргументов. Поэтому при действии этим оператором на волновую функцию:

$$|\chi\rangle = A\,|\psi\rangle \tag{9.60}$$

получаем

$$\chi(x) = \int dx' A(x', x)\psi(x') \tag{9.61}$$

Заметим, что несмотря на это, в гамильтониане (8.59) V зависит только от одного аргумента. Это связано с тем, что оператор имеет только диагональные матричные элементы. Данное свойство называется **локальностью**; оно подтверждается экспериментально и, вообще говоря, не следует из квантовой механики. Потенциал действует на волновую функцию только в той точке x, где мы её берём:

$$V(x, x') = V(x)\delta(x - x') \tag{9.62}$$

Тогда

$$\hat{V}(x)\psi(x) = V(x)\psi(x) \tag{9.63}$$

В общем случае потенциал должен был бы выглядеть как (8.62).

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

Рассмотрим свободное движение частицы: $V(x) = 0$. Тогда гамильтониан: $H = \frac{p^2}{2m}$. Тогда:

$$\frac{p^2}{2m}\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = E\psi(x) \tag{9.64}$$

Решение данного дифференциального уравнения равно:

$$\psi(x) = \left.\begin{matrix} N \cdot e^{ikx} \\ N' \cdot e^{-ikx} \end{matrix}\right\} E = \frac{\hbar^2}{2m}k^2 \tag{9.65}$$

или

$$\psi(x) = \left.\begin{matrix} N \cdot e^{\varkappa x} \\ N' \cdot e^{-\varkappa x} \end{matrix}\right\} E = -\frac{\hbar^2}{2m}\varkappa^2 \tag{9.66}$$

Однако для второй пары решений (8.66) не выполняется условие нормировки. Запишем условие нормировки для функций(8.65):

$$\int \psi_k^* \psi_{k'} dx = N_k^* N_{k'} \cdot \delta(k - k') = \delta(E - E') = \delta\left(\frac{\hbar^2}{2m}k^2 - \frac{\hbar^2}{2m}k'^2\right) = \frac{2m}{\hbar^2}\frac{1}{|2k|}\Big(\delta(k - k') + \delta(k + k')\Big) \tag{9.67}$$

так как

$$\delta\Big(f(x)\Big) = \frac{1}{\Big|f'(x_0)\Big|}\delta(x - x_0) \tag{9.68}$$

при условии $f(x_0) = 0$.

Пусть потенциал имеет вид:
где 2^x обозначает двукратное вырождение, 1^x - однократное вырождение, $\varnothing$ - отсутствие

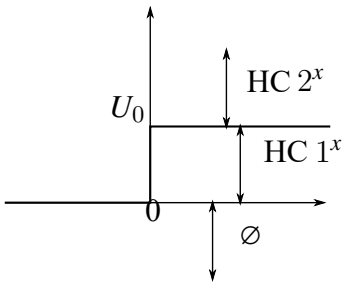


Рис. 9.1: Потенциал

спектра.

Единственный собственный вектор гамильтониана, принадлежащий непрерывному

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

спектру, имеет вид:

$$\begin{aligned} Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad x < 0 \\ Ce^{-\varkappa x}, \quad x > 0 \end{aligned} \tag{9.69}$$

При этом энергия соответственно равна

$$\begin{aligned} E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \\ E - U_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \varkappa^2 \end{aligned} \tag{9.70}$$

Волновая функция имеет следующий вид. При $x > 0$ - убывающая экспонента, при $x < 0$ - осцилляции (Рис. 9.2).

Как найти вероятность нахождения частицы в классически запрещённой области

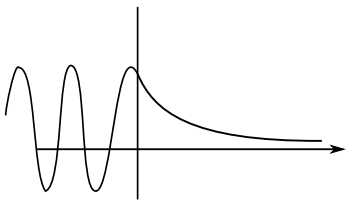


Рис. 9.2: Зависимость решения от координаты

(энергия частицы меньше потенциала) в рассматриваемом случае? Отметим, что ответ

$$P_{x>0} = \int_0^\infty \left|\psi_E(x)\right|^2 dx \tag{9.71}$$

не имеет физического смысла, так как для записи выражений типа

$$P_{[x_1,x_2]} = \int_{x_1}^{x_2} \left|\psi_E(x)\right|^2 dx \tag{9.72}$$

нужно использовать волновые функции в строгом смысле, то есть векторы гильбертова пространства, удовлетворяющие условию нормировки:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left|\psi_E(x)\right|^2 dx = 1 \tag{9.73}$$

Однако тогда эта волновая функция должна принадлежать дискретному спектру.

КОНСПЕКТ ПОДГОТОВЛЕН СТУДЕНТАМИ, НЕ ПРОХОДИЛ
ПРОФ РЕДАКТУРУ И МОЖЕТ СОДЕРЖАТЬ ОШИБКИ
СЛЕДИТЕ ЗА ОБНОВЛЕНИЯМИ НА VK.COM/TEACHINMSU

Поэтому формула (8.71) не имеет смысла. Например, найдём интеграл:

$$P_{[-10^6,0]} = \int\limits_{-10^6}^{0} \left|\psi_E(x)\right|^2 dx \tag{9.74}$$

Тогда интеграл станет больше единицы, что противоречит определению вероятности.

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

Лекция 10. Дискретный спектр.

Решение уравнения Шрёдингера. Сшивание функций.

Рассмотрим решения, принадлежащие дискретному спектру:

$$H|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle \tag{10.1}$$

Здесь $|\psi_n\rangle$ - волновые функции, являющиеся векторами гильбертова пространства с условием нормировки:

$$\langle\psi_n|\psi_m\rangle = \delta_{nm} \tag{10.2}$$

В случае непрерывного спектра речь идёт об обобщённых собственных векторах:

$$H|\psi_E\rangle = E|\psi_n\rangle\, H \tag{10.3}$$

с условием нормировки на дельта-функцию:

$$\langle\psi_{E'}|\psi_E\rangle = \delta(E - E') \tag{10.4}$$

решение стационарного уравнения Шрёдингера (9.3) тоже называют волновой функцией, однако в данном случае это не обосновано, так как данное решение не является вектором гильбертова пространства, то есть не может быть волновой функцией в строгом смысле.

Точно так же e^{ikx} не является волновой функцией в строгом смысла. Это обобщённый вектор, который используется в качестве базисного при разложении настоящих волновых функций.

Так, разложение $|\psi\rangle$ по базису собственных векторов гамильтониана имеет вид:

$$|\psi\rangle = \sum_{\text{д.с.}} C_n|\psi_n\rangle + \int_{\text{н.с.}} dEC(E)|\psi_E\rangle \tag{10.5}$$

При этом $|C_n|^2$ есть вероятность нахождения в $|\psi_n\rangle$, а $|C(E)|^2$ есть плотность вероятности иметь энергию E.

Рассмотрим потенциал, представленный на рис. 10.1. Здесь V_- - асимптотика потенциала при $x \to -\infty$, V_+ - асимптотика при $x \to +\infty$, V_0 - глобальный минимум потенциала. Отметим, что два локальных максимума и локальный минимум указанного потенциала не важны роли с точки зрения спектра.

Если мы находимся выше асимптотики на $+\infty$, то речь идёт о двукратно вырожденном

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

непрерывном спектре. В интервале между V_- и V_+ - однократно вырожденный непрерывный спектр, между глобальным минимумом и V_- - однократно вырожденный дискретный спектр. Ниже глобального минимума потенциала спектр отсутствует. Данные утверждения вытекают из асимптотики волновых функций на бесконечностях.

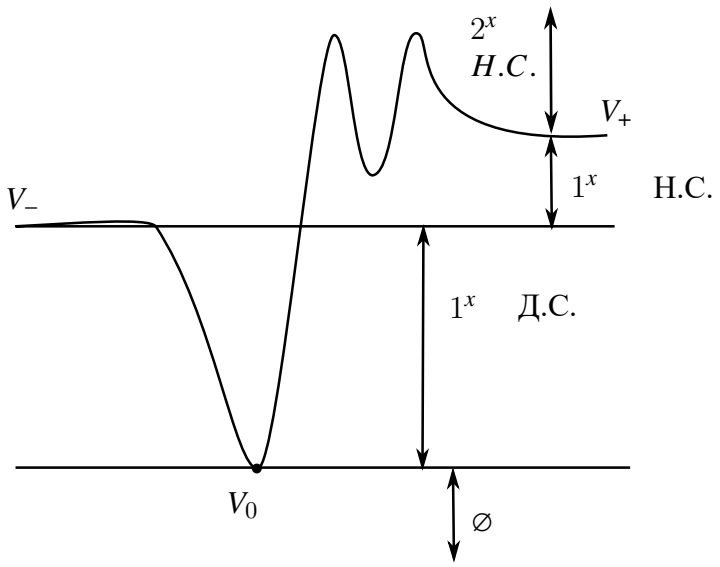


Рис. 10.1: Потенциал

Рассмотрим асимптотику на $-\infty$. Стационарное уравнение Шрёдингера в общем виде

$$\psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}\Big(E - V(x)\Big)\psi(x) = 0 \tag{10.6}$$

при $x \to -\infty$ $V = V_-$. Рассмотрим следующие случаи:

$$E > V_- : \qquad k_- = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_-)} \tag{10.7}$$

и получаем уравнение колебаний, решение которого можно записать в виде:

$$\psi(x \to -\infty) = A_- e^{ik_- x} + B_- e^{-ik_- x} \tag{10.8}$$

Замечание. В данном случае используется комплексный вид решения (а не линейную комбинацию синуса и косинуса), так как у комплексного решения в виде плоской волны есть физический смысл - это состояние с определённым потоком вероятности.

Аналогично:

$$E < V_- : \qquad \varkappa_- = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_- - E)} \tag{10.9}$$

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

тогда

$$\psi(x \to -\infty) = A_- e^{\varkappa_- x} + B_- e^{-\varkappa_- x} \tag{10.10}$$

В случае $x \to +\infty$ формулы аналогичны (с учётом замены $''-''$ на $''+''$).

Пусть $E > \begin{cases} V_- \\ V_+ \end{cases}$

В этом случае мы получим в качестве решения осциллирующие экспоненты слева и справа, а значит - непрерывный спектр. В этом случае имеем два линейно независимых решения ψ_1 и ψ_2:

$$\psi_1(x \to -\infty) = A_- e^{ik_- x} \tag{10.11}$$

$$\psi_2(x \to -\infty) = B_- e^{-ik_- x} \tag{10.12}$$

Таким образом, имеем два линейно независимых решения с одной и той же энергией, то есть спектр двукратно вырожден.

Рассмотрим случай $V_- < E < V_+$. Тогда имеем асимптотику:

$$\psi(x \to +\infty) = A_+ e^{\varkappa_+ x} + B_+ e^{-\varkappa_+ x} \tag{10.13}$$

Заметим, что из двух решений (из двух слагаемых в (9.13)) в данном случае подходит только вторая, так как первое слагаемое - возрастающая экспонента, которая не нормируется на дельта-функцию. Таким образом, получаем однократно вырожденный спектр. Покажем это.

Пусть есть два решения: ψ_1, соответствующее энергии E_1, и $\psi_2 \leftrightarrow E_2$. Их вронскиан:

$$W(\psi_1, \psi_2) = \psi_1' \psi_2 - \psi_1 \psi_2' \tag{10.14}$$

Производная вронскиана имеет вид:

$$\frac{d}{dx} W(\psi_1, \psi_2) = -\frac{2m}{\hbar^2}(E_1 - V)\psi_1\psi_2 - \left(-\frac{2m}{\hbar^2}(E_2 - V)\psi_2\right) \cdot \psi_1 = \frac{2m}{\hbar^2}(E_2 - E_1)\psi_1 \cdot \psi_2 \tag{10.15}$$

Если же энергии двух решений совпадают, то производная вронскиана равна нулю. Тогда вронскиан есть константа.

Условие линейной зависимости двух решений дифференциального уравнения второго порядка - равенство вронскиана нулю:

$$\psi_1' \psi_2 - \psi_1 \psi_2' = 0 \tag{10.16}$$

Тогда решения оказываются линейно зависимыми:

$$\frac{\psi_1'}{\psi_1} = \frac{\psi_2'}{\psi_2} \tag{10.17}$$

Таким образом, если справа решение - убывающая экспонента, то оно линейно зависимо с любой другой убывающей экспонентой, то есть вронскиан равен нулю. Однако вронскиан есть константа, поэтому он оказывается равным нулю и слева. Значит, и слева получаем только одно линейно независимое решение.

Пусть $E < \begin{cases} V_- \\ V_+ \end{cases}$ Тогда при $x \to +\infty$ получаем асимптотику для $\psi(x)$:

$$A_+ e^{\varkappa_+ x} + B_+ e^{-\varkappa_+ x} \tag{10.18}$$

в которой по тем же причинам вычёркиваем первое слагаемое. Тогда дискретный спектр, если он есть, однократно вырожден.

В случае $x \to -\infty$ получаем:

$$A_+ e^{\varkappa_- x} + B_+ e^{-\varkappa_- x} \tag{10.19}$$

Здесь необходимо избавиться от второго слагаемого, так как оно является бесконечно возрастающим. Таким образом, условие на дискретный уровень в данном случае есть:

$$B_-(E) = 0 \tag{10.20}$$

Приведём обратные рассуждения. Построим волновую функцию $\tilde{\psi}(x)$ с правильной асимтотикой слева при произвольной энергии:

$$\tilde{A}_- e^{\varkappa_- x} \tag{10.21}$$

Тогда асимптотика справа будет содержать оба слагаемых:

$$\tilde{A}_+ e^{\varkappa_+ x} + \tilde{B}_+ e^{-\varkappa_+ x} \tag{10.22}$$

Тогда альтернативное уравнение на энергию имеет вид:

$$\tilde{A}_+(E) = 0 \tag{10.23}$$

Заметим, что уравнения (9.20) и (9.23) эквивалентны. Покажем это. Выпишем вронскиан

решений $\psi(x)$ и $\tilde{\psi}(x)$ и вычислим его при $x \to -\infty$:

$$W\left(\psi(x), \tilde{\psi}(x)\right) = const = \left(\psi'\tilde{\psi} - \psi\tilde{\psi}'\right)\Big|_{x\to-\infty} =$$
$$= \left(A_- e^{\varkappa_- x} - B_- e^{-\varkappa_- x}\right)\varkappa_-\tilde{A}_- e^{\varkappa_- x} - \left(A_- e^{\varkappa_- x} + B_- e^{-\varkappa_- x}\right)\varkappa_-\tilde{A}_- e^{\varkappa_- x} = -2\varkappa_- B_-\tilde{A}_- = 0 \quad (10.24)$$

Здесь было учтено, что энергия для указанных функций одинакова, поэтому вронскиан должен равняться константе.

Чтобы получить дискретный уровень, нужно, чтобы ψ и $\tilde{\psi}$ были одной и той же функцией (или линейно зависимыми функциями). Отсюда и получаем условие равенства нулю вронскиана (последнее равенство в (9.24)) как условие дискретного уровня.

При этом $\tilde{A}_{\neq}0$ по построению. Отсюда получаем, что условие на дискретный уровень есть $B_-(E) = 0$.

Так как вронскиан константа, его можно вычислить в любой точке. Вычислим его при $x \to +\infty$.

$$W(\psi, \tilde{\psi})\Big|_{x\to+\infty} = W\left(B_+ e^{-\varkappa_+ x}, \tilde{A}_+ e^{\varkappa_+ x} + \tilde{B}_+ e^{-\varkappa_+ x}\right) = -2\varkappa_+ B_+\tilde{A}_+ = 0 \quad (10.25)$$

Аналогично получаем условие на уровень: $\tilde{A}_+ = 0$. Таким образом, условия (9.20) и (9.23) эквивалентны. В общем случае условие наличия дискретного уровня можно записать в виде:

$$W(\psi, \tilde{\psi}) = 0 \quad (10.26)$$

При численном поиске дискретных уровней зачастую используют метод стрельбы. Для этого берут некоторое произвольное значение энергии и решают стационарное уравнение Шрёдингера, двигаясь из эффективной отрицательной бесконечности слева направо (см. рис. 10.2).

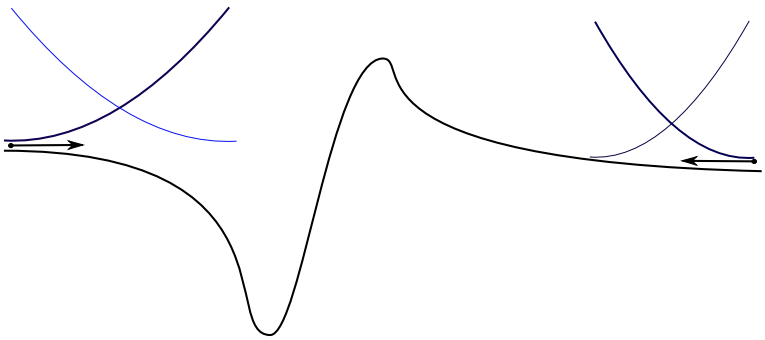


Рис. 10.2: Иллюстрация к методу стрельбы

Можно подумать, что в качестве начального условия необходимо брать правильную асимптотику вида $\tilde{A}_- e^{\varkappa_- x}$ и уже отсюда находить ψ и ψ'. Однако оказывается, что получаемое в таком случае решение экспоненциально растёт (синяя линия), что не соответствует действительности. При этом неправильное решение $e^{-\varkappa_- x}$ при движении слева направо экспоненциально убывает (тонкая синяя линия). Таким образом, в качестве начальных условий можно брать произвольные функции. По этой причине метод стрельбы должен производится слева направо, в противном случае правильное, убывающее на $-\infty$ решение, при движении справа налево становится экспоненциально неустойчивым.

В случае положительной бесконечности правильная асимптотика решения имеет вид $B_+ e^{-\varkappa_+ x}$. Однако правильное решение будет экспоненциально расти при движении справа налево. Аналогично предыдущему случаю неправильно решение будет экспоненциально убывать (при движении справа налево), поэтому начальные условия могут быть любыми. Далее, два решения встречаются (например, в точке минимума потенциала) и мы вычисляем их вронскиан. Для произвольной энергии вронскиан не будет равен нулю, однако можно построить график зависимости вронскиана от энергии (рис. 10.3). Зачастую после V_0 функция $W(E)$ начинает пересекать ось абсцисс. Нули данной функции будут соответствовать основному состоянию, первому возбуждённому состоянию и т.д. Таким образом, формула (9.26) позволяет находить дискретные уровни в любом наперёд заданном потенциале.

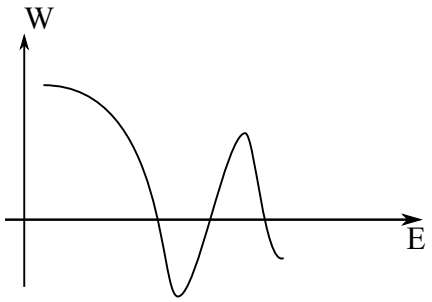


Рис. 10.3: Зависимость вронскиана от энергии

Покажем, что ниже глобального минимума потенциала V_0 нет уровней энергии (рис. 11.3).

1 способ доказательства:

$$\psi'' = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\psi \tag{10.27}$$

Если энергия лежит ниже глобального минимума, то $(E - V) < 0$. Следовательно, $-\frac{2m}{\hbar^2}(E - V) > 0$.

Учтём, что асимптотика дискретного уровня на отрицательной бесконечности - растущая экспонента, а на положительной бесконечности - убывающая экспонента.

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

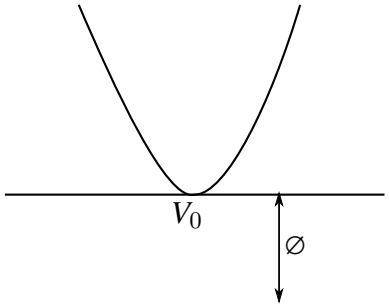


Рис. 10.4: Отсутствие уровней энергии

Множитель перед ψ в (9.27) положителен, поэтому в случае отрицательной бесконечности производная ψ' будет возрастать. В случае же положительной бесконечности при движении слева направо будет возрастать $|\psi'|$. При этом коэффициент перед ψ в (9.27) не меняет знак, поэтому функции никогда не сошьются, поэтому вронскиан $W \neq 0$ всегда.

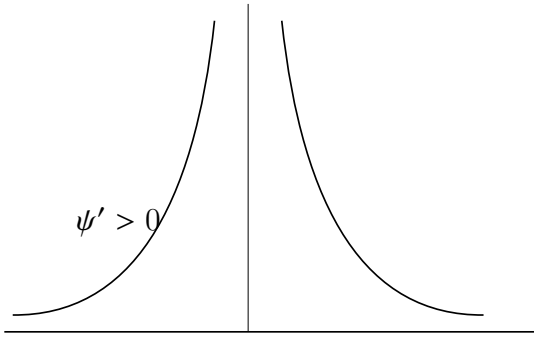


Рис. 10.5: Иллюстрация к доказательству

2 способ доказательства У стационарного уравнения Шрёдингера всегда существует два линейно независимых вещественных решения, поэтому мы можем работать только с вещественными решениями (а не с комплексными). Запишем уравнение Шрёдингера:

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\psi = 0 \tag{10.28}$$

и домножим его на ψ:

$$\psi\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\psi^2 = 0 \tag{10.29}$$

Проинтегрируем получившееся соотношение:

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} \left[\psi\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\psi^2\right] = 0 \tag{10.30}$$

Пусть есть дискретный уровень, для которого $E < V_0$. Тогда $(E - V) < 0$ и интеграл от

второго слагаемого $\frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\psi^2 < 0$.

Проинтегрируем первое слагаемое (9.30) по частям:

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} \psi\psi'' dx = \psi\psi'\Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int\limits_{-\infty}^{+\infty} (\psi')^2 dx \tag{10.31}$$

ψ - квадратично интегрируема я функция, поэтому $\psi\psi'\Big|_{-\infty}^{+\infty} = 0$. При этом второе слагаемое $\left(-\int\limits_{-\infty}^{+\infty} (\psi')^2 dx\right) < 0$.

Таким образом, сумма двух строго отрицательных величин в (9.30) должна равняться нулю. Пришли к противоречию.

Пусть дискретные уровни нумеруются с нуля, то есть E_0 и ψ_0 - основное состояние, E_1, ψ_1 - первое возбуждённое и т.д.

Осцилляционная теорема. У основного состояния ноль корней, у первого состояния - один корень, у второго - два корня и т.д. При этом корни простые и интерполируют друг друга.

Идея доказательства. Вронскиан двух решений с разной энергией имеет вид:

$$\frac{d}{dx}(\psi_1, \psi_2) = \frac{2m}{\hbar^2}(E_2 - E_1)\psi_1\psi_2 \tag{10.32}$$

Возьмём корни функции с меньшей энергией и предположим, что на данном интервале psi_2 не меняет знак. Тогда, проинтегрировав соотношение (9.23), придём к противоречию (правая и левая части уравнения будут иметь разные знаки).

Осцилляционная теорема используется при численном нахождении дискретных уровней. Она позволяет сравнить полученное число корней с теоретическим.

Утверждение. В частном случае чётного потенциала:

$$V(-x) = V(x) \tag{10.33}$$

решения стационарного уравнения Шрёдингера или чётные, или нечётные.

Доказательство.
Можно убедиться, что если $\psi(x)$ - решение, то и $\psi(-x)$ - решение стационарного

уравнения. При этом, так как дискретные уровни невырождены, $\psi(-x)$ линейно зависим с $\psi(x)$:

$$\psi(-x) = c\psi(x) \tag{10.34}$$

Применяя это соотношение два раза:

$$\psi\Big(-(-x)\Big) = \psi(x) = c^2\psi(x) \tag{10.35}$$

тогда получим

$$c^2 = 1 \quad \Rightarrow \quad c = \pm 1 \tag{10.36}$$

откуда следует, что все уровни делятся на чётные и нечётные.

Из осцилляционной теоремы следует, что у основного состояния нуль корней. При этом у нечётной функции должен быть хотя бы один нуль. Поэтому основному состоянию соответствует чётная волновая функция. У первого возбуждённого состояния только один корень, поэтому ему соответствует нечётная функция. В случае второго возбуждённого состояния имеем чётную функцию, корни которой лежат симметрично относительно нуля. Далее аналогично.

Замечание. Можно показать, что для некоторых потенциалов (например для $\frac{\sin x}{x}$), которые обращаются на бесконечности в нуль, могут существовать дискретные уровни энергии (то есть существуют квадратично интегрируемые функции, являющиеся решением стационарного уравнения Шрёдингера). Таким образом, внутри непрерывного спектра может быть дискретный уровень с положительной энергией.

Построим кусочно-постоянный чётный потенциал и чётную волновую функцию (Рис. 11.3). При построении волновой функции будем считать, что на каждом отрезке $[x_i, x_{i+1}]$ будет четверть волны. Выпишем условия сшивания в точках x_n и добьёмся того, чтобы амплитуда синусов и косинусов убывала как $A_n \sim \frac{1}{n}$ и $U_n \sim \frac{1}{n}$. Таким образом из условий сшивания можно получить конкретную функцию.

Нестационарное уравнение Шрёдингера. Уравнение непрерывности.

Рассмотрим нестационарное уравнение Шрёдингера:

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle \tag{10.37}$$

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

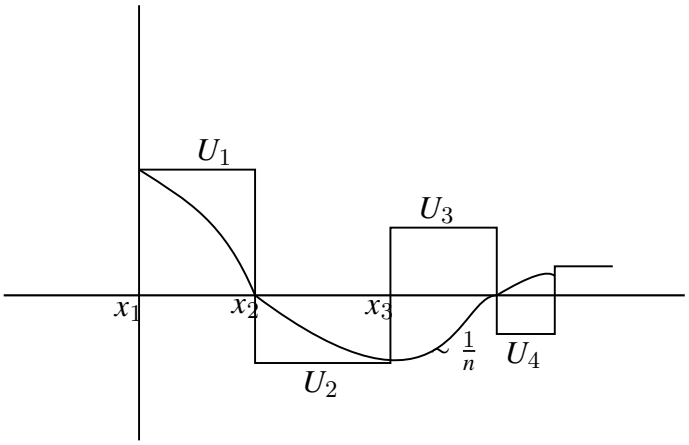


Рис. 10.6: Иллюстрация к примеру

Рассмотрим материальную точку, движущуюся в одномерном пространтсве. Перейдём в координатное представление и определим:

$$\psi(t,x) = \langle x|\psi(t)\rangle \tag{10.38}$$

Учитывая вид гамильтониана материальной точки, получим:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(t,x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(t,x) + V(x)\psi(t,x) \tag{10.39}$$

Запишем стационарное уравнение Шрёдингера. Пусть мы нашли дискретный и непрерывный спектры:

$$H\,|\psi_n\rangle = E_n\,|\psi_n\rangle \tag{10.40}$$

$$H\,|\psi_E\rangle = E\,|\psi_E\rangle \tag{10.41}$$

Тогда начальное условие для волновой функции необходимо разложить по базису (9.40)-(9.41):

$$\psi(0,x) = \sum_{\text{д.с.}} C_n\psi_n(x) + \int\limits_{\text{н.с.}} dEC(E)\psi_E(x) \tag{10.42}$$

Тогда решение нестационарного уравнения Шрёдингера:

$$\psi(t,x) = \sum_{\text{д.с.}} C_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\psi_n(x) + \int\limits_{\text{н.с.}} dEC(E)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\psi_E(x) \tag{10.43}$$

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

Лекция 11. Нестационарное уравнение Шрёдингера.

Нестационарное уравнение Шрёдингера. Уравнение непрерывности.

Запишем нестационарное уравнение Шрёдингера.

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(t,x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(t,x) + V(x)\psi(t,x) \tag{11.1}$$

Замечание. Если система неконсервативна, то в потенциале V может быть зависимость от времени.

При решении данного уравнения зачатую используют возможность разложения по базису. Таким образом, если можно решить стационарное уравнение Шрёдингера, то и (10.1) можно решить.

Произведём комплексное сопряжение уравнения (10.1):

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^*(t,x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi^*(t,x) + V^*(x)\psi^*(t,x) \tag{11.2}$$

Умножим уравнение (10.1) на ψ^*, а (10.2) - на ψ и вычтем из первого уравнения второе:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\psi^*\psi'' - \psi\psi^{*\prime\prime}\right) + (V - V^*)|\psi|^2 \tag{11.3}$$

Поделим (10.3) на $i\hbar$:

$$\frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2 = -\frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\psi'' - \psi\psi^{*\prime\prime}\right) + \frac{(V - V^*)}{i\hbar}|\psi|^2 \tag{11.4}$$

Заметим, что величина $\frac{(V-V^*)}{i\hbar}$ является вещественной.
Введём величины:

$$\rho(t,x) = \left|\psi(t,x)\right|^2 \tag{11.5}$$

- плотность вероятности найти частицу в данный момент времени t в точке x,

$$j(t,x) = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*(t,x)\psi'(t,x) - \psi^{*\prime}(t,x)\psi(t,x)\right) = \frac{\hbar}{2mi}W(\psi,\psi^*) \tag{11.6}$$

- поток вероятности.
Теперь выражение (10.4) можно переписать в виде:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(t,x) = -\frac{\partial}{\partial x}j(t,x) + \frac{V - V^*}{i\hbar}\rho(t,x) \tag{11.7}$$

Полученное уравнение есть уравнение непрерывности. Проинтегрируем (10.7) по

произвольному интервалу от x_1 до x_2:

$$\frac{\partial}{\partial t}P_{[x_1,x_2]} = -j(t,x_2) + j(t,x_1) + \int_{x_1}^{x_2} \frac{V(x) - V^*(x)}{i\hbar}\rho(t,x)dx \tag{11.8}$$

где $P_{[x_1,x_2]}$ - вероятность нахождения на интервале $[x_1,x_2]$. Последнее слагаемое появляется в случае существования мнимой части потенциала на данном отрезке. Выбор знаков для потоков вероятности в (10.8) можно описать с помощью рис. 11.1.

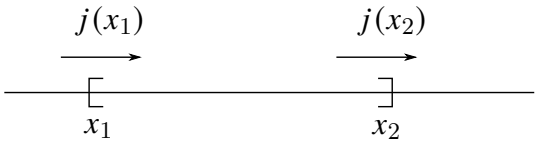


Рис. 11.1: Поток вероятности

Заметим, что эрмитовость гамильтониана (в данном случае - вещественность потенциала) и закон сохранения вероятности жестко связаны. Вероятность сохраняется только в том случае, когда гамильтониан эрмитов.
Вообще говоря, последнее слагаемое в (10.8) не имеет физического смысла. Однако оно используется в качестве модели поглощения или излучения частиц. Например, при рассмотрении неупругого рассеяния электронов на ядрах ядро изображают как потенциал с некоторой мнимой добавкой. С точки зрения фундаментальной теории данный способ является неправильным, однако он может дать правильный результат.

В дальнейшем мы будем рассматривать случаи, когда последнее слагаемое отсутствует:

$$\frac{\partial}{\partial t}P_{[x_1,x_2]} = -j(t,x_2) + j(t,x_1) \tag{11.9}$$

Если гамильтониан эрмитов, то эволюция унитарна и действует закон сохранения вероятности: изменение вероятности на отрезке это разница между потоками вероятности.
Пусть в качестве начального условия дано решение стационарного уравнения Шрёдингера, которое может принадлежать как непрерывному, так и дискретному спектру:

$$\psi(0,x) = \psi(x) \tag{11.10}$$

В этом случае

$$\psi(t,x) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\psi(x) \tag{11.11}$$

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

и для ρ пропадает зависимость от времени:

$$\rho(t,x) = \left|\psi(t,x)\right|^2 = \left|\psi(x)\right|^2 \tag{11.12}$$

В этом случае в левой части уравнения непрерывности стоит ноль:

$$0 = -j(x_2) + j(x_1) \tag{11.13}$$

Таким образом, получили очевидный ответ: для решений стационарного уравнения Шрёдингера не должно быть изменений во времени, поток вероятности равен константе. В противном случае была бы эволюция. С другой стороны, поток вероятности - это вронскиан ψ и ψ^*. При этом ψ и ψ^* - два решения стационарного уравнения Шрёдингера с одной и той же энергией. Тогда вронскиан равен константе, что соответствует (10.13).

Рассеяние

Рассмотрим случай одномерного рассеяния, результатом которого является либо прохождение сквозь барьер, либо отражение от него. Нахождение непрерывного спектра в стационарном уравнении Шрёдингера.

Рассмотрим потенциал, представленный на рис 11.2.

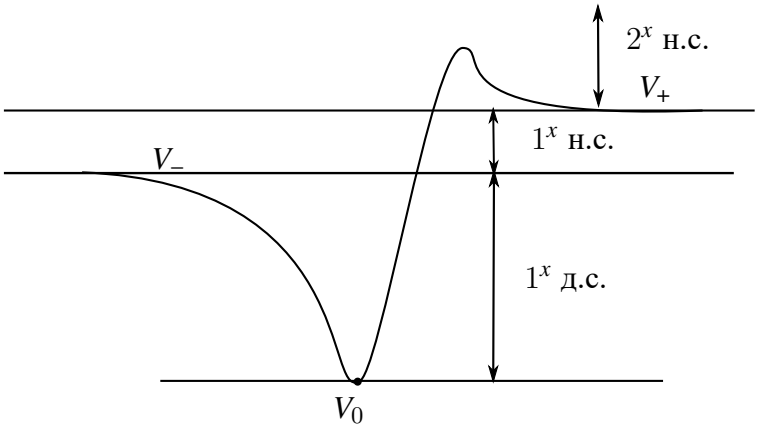


Рис. 11.2: Потенциал

Финитное движение (то есть связанные состояния) соответствует дискретному спектру. Случай инфинитного движения - задача о полном отражении от потенциального барьера - соответствует однократно вырожденному непрерывному спектру. Инфинитное движение частицы в обе стороны соответствует двукратно вырожденному непрерывному спектру.

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

Для решения задачи на прохождение и отражение частицы от потенциального барьера, нужно, чтобы у решения стационарного уравнения Шрёдингера была следующая асимптотика. При $x \to -\infty$ волновая функция должна иметь вид:

$$1 \cdot e^{ik_- x} + Ae^{-ik_- x} \tag{11.14}$$

а при $x \to +\infty$ волновая функция должна иметь вид:

$$Be^{ik_+ x} \tag{11.15}$$

Переобозначим:

$$k_+ \equiv q, \quad k \equiv k \tag{11.16}$$

При этом коэффициент отражения и коэффициент прохождения соответственно равны

$$R = |A|^2 \tag{11.17}$$

$$T = \frac{q}{k}|B|^2 \tag{11.18}$$

Отметим, что если волновая функция имеет вид:

$$\psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \tag{11.19}$$

то плотность вероятности $\rho(t,x)$ будет содержать интерференционный член:

$$\rho(t,x) = \rho(x) = |A|^2 + |B|^2 + AB^* e^{2ikx} + A^* Be^{-2ikx} \tag{11.20}$$

однако между потоками вероятности, бегущими вправо и влево, не будет интерференции, так как

$$\begin{aligned} j(x) &= \frac{\hbar}{2mi} W\left(Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, A^* e^{-ikx} + B^* e^{ikx}\right) = \\ &= \frac{\hbar}{2mi}|A|^2 \cdot 2ik - \frac{\hbar}{2mi}|B|^2 \cdot 2ik = \frac{\hbar k}{m}|A|^2 - \frac{\hbar k}{m}|B|^2 \end{aligned} \tag{11.21}$$

Здесь $|A|^2$ - плотность вероятности в каждой точке для волны, бегущей вправо, $\frac{\hbar k}{m}$ - скорость распространения волны вероятности. Аналогично для волны, бегущей влево.

Вычислим поток вероятности на отрицательной и положительной бесконечности:

$$j(x \to -\infty) = \frac{\hbar k}{m} \cdot 1 - \frac{\hbar k}{m}|A|^2 = j_0 - j_R \tag{11.22}$$

$$j(x \to +\infty) = \frac{\hbar q}{m}|B|^2 = j_T \tag{11.23}$$

Где j_0 - поток вероятности в налетающей волне, j_R - поток вероятности в отражённой волне, j_T - поток вероятности в прошедшей волне.

Тогда коэффициент отражения

$$R = \frac{j_R}{j_0} = |A|^2 \tag{11.24}$$

А коэффициент прохождения:

$$T = \frac{j_T}{j_0} = \frac{q}{k}|B|^2 \tag{11.25}$$

Учтём, что

$$j_0 = j_R + j_T \tag{11.26}$$

Тогда получим закон сохранения вероятности:

$$1 = R + T \tag{11.27}$$

Покажем, что R - вероятность отразиться от барьера, а T - вероятность пройти через барьер.

Теорема. Коэффициент отражения слева направо совпадает с коэффициентом прохождения справа налево. Аналогично для коэффициента прохождения.

$$R_{\rightarrow} \equiv R_{\leftarrow} \tag{11.28}$$

Доказательство. Волновая функция ψ, описывающая рассеяние слева направо, имеет асимптотики

$$x \to -\infty \quad \Rightarrow \quad e^{ikx} + Ae^{-ikx} \tag{11.29}$$

$$x \to +\infty \quad \Rightarrow \quad Be^{iqx} \tag{11.30}$$

Тогда комплексное сопряжение решения даёт линейно независимое решение ψ^* с асимптотиками:

$$x \to -\infty \quad \Rightarrow \quad e^{-ikx} + A^*e^{ikx} \tag{11.31}$$

$$x \to +\infty \quad \Rightarrow \quad B^*e^{-iqx} \tag{11.32}$$

Из этих двух решений можно собрать волновую функцию с правильными асимптотиками, которая описывает рассеяние справа налево. Учтём, что при рассеянии справа налево не должно быть волны, приходящей из $-\infty$. Разделим $\frac{\psi^*(x)}{A^*}$ и получим функцию с

асимптотиками:

$$x \to -\infty \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{A^*}e^{-ikx} + e^{ikx} \tag{11.33}$$

$$x \to +\infty \quad \Rightarrow \quad \frac{B^*}{A^*}e^{-iqx} \tag{11.34}$$

Если вычесть из ψ функцию с асимптотиками (10.33)-(10.34), получим функцию, для которой выполняется условие отсутствия налетающей слева волны.

Учтём теперь, что амплитуда волны, набегающей справа, должна равняться 1. Для этого умножим функцию с асимптотиками (10.33)-(10.34) на $\frac{A^*}{B^*}$. Тогда получим асимптотики

$$x \to -\infty \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{B^*}e^{-ikx} + \frac{A^*}{B^*}e^{ikx} \tag{11.35}$$

$$x \to +\infty \quad \Rightarrow \quad 1e^{-iqx} \tag{11.36}$$

Домножим $\psi(x)$ на $\frac{A^*}{B^*}$ и получим функцию с асимптотиками:

$$x \to -\infty \quad \Rightarrow \quad \frac{A^*}{B^*}e^{ikx} + \frac{A^*A}{B^*}e^{-ikx} \tag{11.37}$$

$$x \to +\infty \quad \Rightarrow \quad \frac{A^*}{B^*}Be^{-iqx} \tag{11.38}$$

Теперь рассмотрим функцию

$$\chi = \frac{\psi^*}{B^*} - \frac{A^*}{B^*}\psi \tag{11.39}$$

Для неё получим асимптотики:

$$x \to +\infty \quad \Rightarrow \quad e^{-iqx} - \frac{A^*B}{B^*}e^{iqx} \tag{11.40}$$

$$x \to -\infty \quad \Rightarrow \quad \left(\frac{1}{B^*} - \frac{AA^*}{B^*}\right)e^{-ikx} \tag{11.41}$$

Тогда коэффициент отражения справа налево:

$$R_{\leftarrow} = \left| -\frac{A^*B}{B^*}\right|^2 = \left|A\right|^2 = R_{\rightarrow} \tag{11.42}$$

Таким образом, для любого потенциала коэффициенты прохождения (и отражения) равны при движении справа налево и движении слева направо.

Движение волновых пакетов

В случае инфинитного движения дискретный спектр отсутствует. Тогда общее решение нестационарного уравнения Шрёдингера имеет вид:

$$\psi(t,x) = \int\limits_{\text{н.с.}} dEC(E)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\psi_E(x) \tag{11.43}$$

Заметим, что непрерывный спектр двукратно вырожден, поэтому вообще говоря в (10.43) должна быть записана линейная комбинация двух линейно независимых решений.

Будем рассматривать случай рассеяния только слева направо. Будем вычислять интегралы по k, а не по E. Тогда в (10.43) dE заменим на dk, и вместо энергии подставим

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}k^2 \tag{11.44}$$

Рассмотрим потенциал, затухающий на бесконечности:

$$V_+ = V_- = 0 \tag{11.45}$$

Подберём $C(k)$ таким образом, чтобы $C(k) \neq 0$ только в окрестности некоторого k_0. Ширина волнового пакета в пространстве волновых векторов будет равна Δk. Тогда характерный размер волнового пакета: $\Delta x = \frac{1}{\Delta k}$.

В дальнейшем примем некоторые приближения.

1. Будем считать, что $t \to \pm\infty$ (временная бесконечность) при выполнении условия

$$\frac{\hbar k_0}{m}|t| \gg a \tag{11.46}$$

2. Коэффициенты прохождения и отражения являются функциями волнового числа. Потребуем, чтобы выполнялось:

$$A(k_0 \pm 5\Delta k) \equiv A(k_0) \tag{11.47}$$

$$B(k_0 \pm 5\Delta k) \equiv B(k_0) \tag{11.48}$$

   Данное условие исключает резонанс в окрестности k_0.

3. Предположим, что

$$\frac{\hbar\Delta k}{m}|t| \ll \Delta x = \frac{1}{\Delta k} \tag{11.49}$$

   Здесь величина $\frac{\hbar\Delta k}{m}|t|$ равна тому, на сколько увеличится ширина волнового пакета

за бесконечное время. Таким образом, физическая бесконечность имеет некоторое ограничение сверху:

$$\frac{\hbar\Delta k^2}{m}|t| \ll 1 \tag{11.50}$$

Запишем выражение для гауссова пакета (качественно результат не зависит от профиля пакета, поэтому используют гауссов пакет, который относительно легко интегрировать):

$$C(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}\Delta k}} \cdot exp\left(-\frac{(k-k_0)}{2\Delta k^2}\right) \tag{11.51}$$

Тогда

$$\psi(t,x) = \int dx \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}\Delta k}} \cdot \exp\left(-\frac{(k-k_0)^2}{2\Delta k^2}\right) \cdot \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{\hbar^2}{2m}k^2 t\right) \cdot \psi_E(x) \tag{11.52}$$

В области, где потенциал отличен от нуля, явное выражение для $\psi_E(x)$ неизвестно. Однако, нам известны асимптотики $\psi_E(x)$ при $x \to \pm\infty$. Рассмотрим случай $x \to +\infty$:

$$\psi(t,x)\Big|_{x\to+\infty} = \int dx \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}\Delta k}} \cdot \exp\left(-\frac{(k-k_0)^2}{2\Delta k^2}\right) \cdot \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{\hbar^2}{2m}k^2 t\right) \cdot B(k) \cdot e^{ikx} =$$

Учтём, что подынтегральное выражение отлично от нуля только в маленькой окрестности k_0. Значит, можно заменить $B(k)$ на $B(k_0)$. Далее сделаем замены $k \to k + k_0$:

$$= \int dk \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\frac{B(k_0)}{\sqrt{\sqrt{\pi}\Delta k}} \cdot \exp\left[-\frac{k^2}{2\Delta k^2} + ikx + ik_0 x - i\frac{\hbar}{2m}k^2 t - i\frac{\hbar}{m}kk_0 \cdot t - i\frac{\hbar}{2m}k_0^2 t\right] = \tag{11.53}$$

Учтём, что $\frac{k^2}{2\Delta k^2} \sim 1$, а $i\frac{\hbar}{2m}k^2 t \ll 1$. Тогда получим:

$$= \int dk \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\frac{B(k_0)}{\sqrt{\sqrt{\pi}\Delta k}} \exp\left[-\frac{k^2}{2\Delta k^2} + ik\left(x - \frac{\hbar k_0}{m}t\right) + ik_0\left(x - \frac{\hbar k_0}{m}t\right)\right] \tag{11.54}$$

Учтём, что

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}k^2 \tag{11.55}$$

тогда

$$\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m} \tag{11.56}$$

Тогда фазовая скорость равна:

$$v_\phi = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m} \tag{11.57}$$

а групповая скорость:

$$v_{\text{гр}} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m} \tag{11.58}$$

В (10.54) мы получили табличный интеграл вида:

$$\int dx e^{-ax^2+bx+c} = \frac{\sqrt{\pi}}{a} e^{\frac{b^2}{4a}+c} \tag{11.59}$$

Обозначим:

$$a = \frac{1}{2\Delta k^2} \tag{11.60}$$

$$b = i\left(x - \frac{\hbar k_0}{m}t\right) \tag{11.61}$$

$$c = ik_0\left(x - \frac{\hbar k_0}{2m}t\right) \tag{11.62}$$

Соответственно, получаем:

$$\psi(t,x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{B(k_0)}{\sqrt{\sqrt{\pi}\Delta k}} \sqrt{\frac{\pi}{\frac{1}{2\Delta k^2}}} \cdot \exp\left[-\frac{\left(x - \frac{\hbar k_0}{m}t\right)^2}{4\frac{1}{2\Delta k^2}} + ik_0\left(x - \frac{\hbar k_0}{2m}t\right)\right] =$$

$$= \frac{B(k_0)}{\sqrt{\sqrt{\pi}\Delta x}} \cdot \exp\left[-\frac{\left(x - \frac{\hbar k_0}{m}t\right)^2}{2\Delta x^2} + ik_0\left(x - \frac{\hbar k_0}{2m}t\right)\right] \tag{11.63}$$

- гауссов пакет с центром в точке $\frac{\hbar k_0}{m}t$ с некоторыми фазовыми добавками и коэффициентом $B(k_0)$. Квадрат модуля данной функции будет иметь вид, представленный на рис. 11.3.

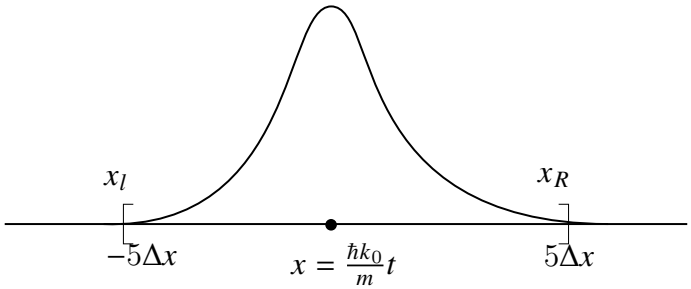


Рис. 11.3: $|\psi(x)|^2$

Тогда

$$\int_{x_l}^{x_r} \left|\psi(t,x)\right|^2 dx = \left|B(k_0)\right|^2 \tag{11.64}$$

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

КОНСПЕКТ ПОДГОТОВЛЕН СТУДЕНТАМИ, НЕ ПРОХОДИЛ
ПРОФ РЕДАКТУРУ И МОЖЕТ СОДЕРЖАТЬ ОШИБКИ
СЛЕДИТЕ ЗА ОБНОВЛЕНИЯМИ НА VK.COM/TEACHINMSU

Отметим, что указанный пакет существует только при $t \to +\infty$, то есть после рассеяния.

Таким образом, мы показали, что вероятность встретить частицу справа от потенциала при $t \to +\infty$ равна $\left|B(k_0)\right|^2$, что в нашем случае и есть коэффициент прохождения сквозь барьер.

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

Лекция 12. Нестационарное уравнение Шрёдингера.

Решение нестационарного уравнения Шрёдингера.

Запишем решение нестационарного уравнения Шрёдингера в виде линейной комбинации по волновым функциям, являющимися решениями стационарного уравнения Шрёдингера

$$\psi(t,x) = \int dk C(k)\psi_k(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \tag{12.1}$$

На прошлой лекции были приняты некоторые предположения, учитывая которые, можно получить асимптотику

$$\psi(t,x)\Big|_{x\to+\infty} = \frac{B(k_0)}{\sqrt{\sqrt{\pi}\Delta x}} \cdot \exp\left(-\frac{\left(x-\frac{\hbar k_0}{m}t\right)^2}{2\Delta x^2} + ik_0\left(x-\frac{\hbar k_0}{2m}t\right)\right) \tag{12.2}$$

Таким образом, получили гауссов пакет, групповая скорость которого равна $v_{\text{гр}} = \frac{\hbar k_0}{m}$, а фазовая скорость - $v_{\text{ф}} = \frac{\hbar k_0}{2m}$. Отметим, что полученный пакет будет виден только в случае $t \to +\infty$. При этом интеграл от квадрата модуля равен $\int\limits_{x_l}^{x_r} \left|\psi(t,x)\right|^2 dx = \left|B(k_0)\right|^2$.

Описанное выше можно изобразить следующим образом (рис. 12.1). В окрестности потенциала (в области с характерным размером a) вид зависимости неизвестен, так как он связан с видом конкретного потенциала. На положительной бесконечности имеем гауссов пакет, который движется вправо со скоростью $v_{\text{гр}} = \frac{\hbar k_0}{m}$.

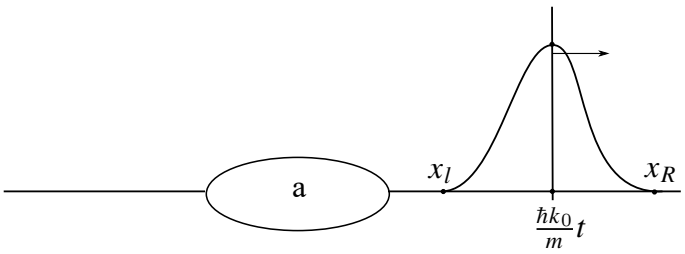


Рис. 12.1: Асимптотика при $x \to +\infty$

При этом вероятность для частицы оказаться на интервале $[x_l, x_r]$ равен коэффициенту прохождения:

$$P_{[x_l,x_r]} = |B(k_0)|^2 = T \tag{12.3}$$

Отметим, что в полученном соотношении (11.3) отсутствует коэффициент $\frac{q}{k}$, так как ранее было сделано предположение, что асимптотики потенциала на бесконечностях:

$$V_- = V_+ = 0 \tag{12.4}$$

Тогда

$$k_+ = k_- = k = q \tag{12.5}$$

Исследуем асимптотику на отрицательной бесконечности:

$$\psi(t,x)\Big|_{x\to-\infty} = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}\Delta x}}\cdot\exp\left(-\frac{\left(x-\frac{\hbar k_0}{m}t\right)^2}{2\Delta x^2}+ik_0\left(x-\frac{\hbar k_0}{2m}t\right)\right)+$$
$$+\frac{A(k_0)}{\sqrt{\sqrt{\pi}\Delta x}}\cdot\exp\left(-\frac{\left(-x-\frac{\hbar k_0}{m}t\right)^2}{2\Delta x^2}+ik_0\left(-x-\frac{\hbar k_0}{2m}t\right)\right) \tag{12.6}$$

Отметим, что полученный пакет (в первом слагаемом) будет виден в случае $t \to -\infty$. Второе же слагаемое имеет место только при $t \to +\infty$. Таким образом, при $t \to -\infty$ имеем один гауссов пакет, который движется вправо. При этом вероятность нахождения частицы в области локализации этого пакета равна 1. Этот случай соответствует налетающей частице (верхняя часть рис. 12.2)

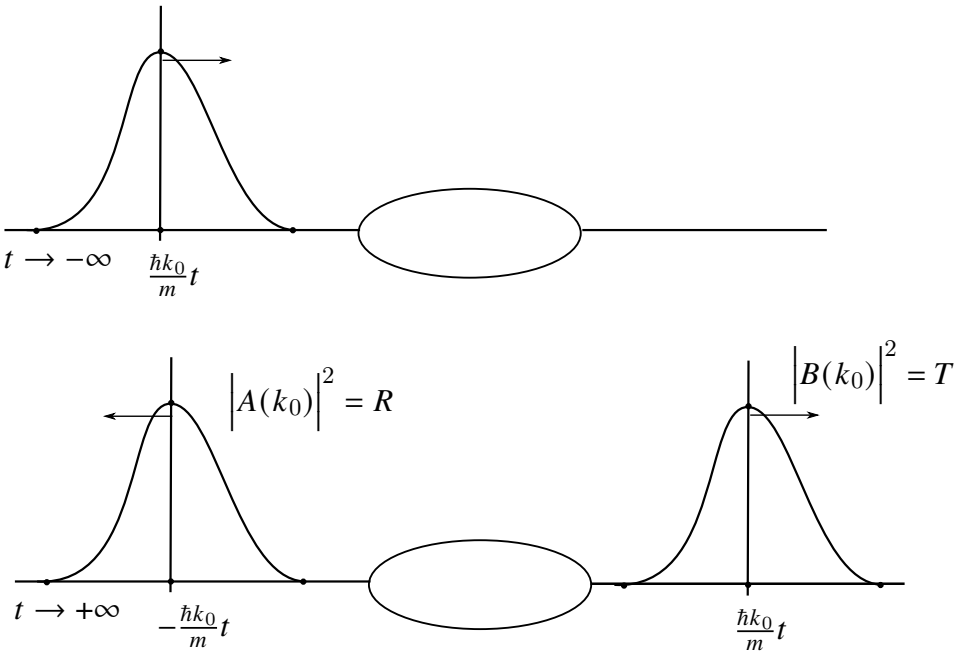


Рис. 12.2: Асимптотика при $x \to -\infty$

При $t \to +\infty$ имеем отражённый пакет, движущийся влево. Вероятность нахождения частицы в области этого пакета равна $\left|A(k_0)\right|^2 = R$. В правой же части изображения (нижняя часть рис. 12.2) находится прошедший пакет, движущийся вправо. Вероятность нахождения в этой области равна $\left|B(k_0)\right|^2 = T$. Отметим, что так как $R + T = 1$, то вероятность нахождения частицы между указанными пакетами равна нулю - частица или

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

прошла, или отразилась.

Рассмотрим следующую ситуацию. Пусть частица налетает на некоторый потенциал. На пути её движения с двух сторон установлены детекторы (Рис. 12.3). При этом должен сработать один из двух детекторов. Однако ранее мы описали ситуацию с помощью двух волновых пакетов - прошедшего и отражённого. Почему же щелчок будет только один? Дело в том, что волновая функция является лишь инструментом в вычислении вероятностей. Точно также когда монета падает решкой вверх, не имеет смысла говорить о том, куда пропала вероятность 1/2 упасть вверх орлом.

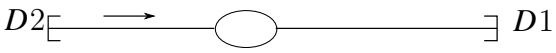


Рис. 12.3: Иллюстрация к примеру

Классический предел квантовой теории

Зачастую о классическом пределе говорят в случае выполнения условия $S \gg \hbar$ или в случае $n \gg 1$ (где n - номера уровней). Однако возможны и другие ситуации.

Пример. Пусть дан гармонический осциллятор:

$$V(x) = \frac{kx^2}{2} \tag{12.7}$$

$$E = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \tag{12.8}$$

Можно показать, что в этом случае условия $S \gg \hbar$ и $n \gg 1$ эквивалентны. Рассмотрим состояния данной системы. Случай ψ_0 представлен на рис. 12.4. Здесь δx - неопределённость в координате. Тогда $\delta x = \sqrt{Dx}$, где $Dx = \frac{x_0^2}{2}$, $x_0^2 = \frac{\hbar}{\sqrt{km}}$.

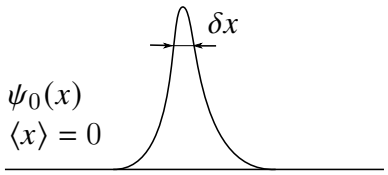


Рис. 12.4: Координатное представление

В импульсном представлении (рис. 12.5) имеем $\delta p = \sqrt{Dp}$, где $Dp = \frac{p_0^2}{2}$, $p_0^2 = \hbar\sqrt{km}$. Отметим, что

$$x_0 \cdot p_0 = \hbar \tag{12.9}$$

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

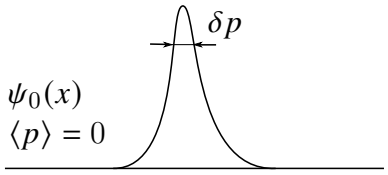


Рис. 12.5: Импульсное представление

Тогда соотношение неопределённости достигает минимума:

$$Dx \cdot Dp = \frac{\hbar^2}{4} \tag{12.10}$$

Таким образом, основное состояние гармонического осциллятора есть классическое состояние, так как частица покоится в начале координат и неопределённость в координате и импульсе имеет планковский масштаб. Если прибор не может определить смещение координаты и импульса порядка x_0 и p_0 соответственно, то относительно приборов частица будет покоится, а неопределённостями можно пренебречь в рамках поставленной задачи.

Если взять уровень энергии $n \gg 0$, то

$$\langle x \rangle = 0 \quad Dx = x_0^2\left(n + \frac{1}{2}\right) \tag{12.11}$$

$$\langle p \rangle = 0 \quad Dp = p_0^2\left(n + \frac{1}{2}\right) \tag{12.12}$$

Так как n здесь достаточно велико, неопределённость оказывается достаточно большой, чтобы зафиксировать её приборами.

Рассмотрим когерентное состояние в гармоническом осцилляторе:

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{\alpha\alpha^*}{2}} e^{\alpha a^\dagger} |0\rangle \tag{12.13}$$

Данное состояние по сути является трансляцией основного состояния гармонического осциллятора в пространстве координат и импульсов, поэтому позволяет описывать частицу, которая находится не в начале координат и имеет ненулевой импульс. При трансляции дисперсия не меняется, поэтому дисперсии

$$Dx = \frac{x_0^2}{2} \quad Dp = \frac{p_0^2}{2} \tag{12.14}$$

При этом

$$\langle x \rangle \sim x_0 \cdot Re\alpha \tag{12.15}$$

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

$$\langle p \rangle \sim p_0 \cdot Im\alpha \tag{12.16}$$

Таким образом, в данном случае α - модель классического состояния материальной точки.

Отметим, что (11.13) является собственным вектором для оператора:

$$A = \frac{(p - \langle p \rangle)^2}{2m} + k\frac{(x - \langle x \rangle)^2}{2} \tag{12.17}$$

Рассмотрим движение электрона в лучевой трубке. Его можно описать классическими приближениями. Тогда среднее значение координаты точно известно, неопределённости координаты и импульса так малы, что их нельзя зафиксировать.

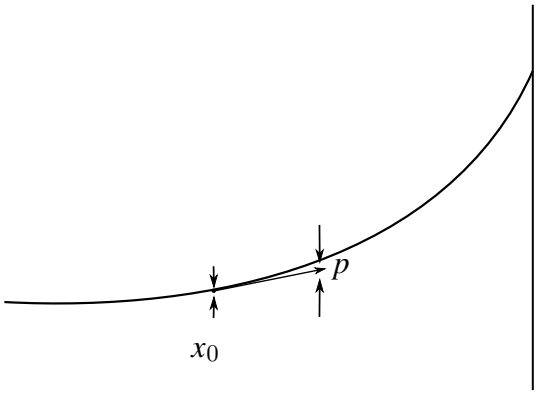


Рис. 12.6: Движение электрона в лучевой трубке

Тогда про матрицу плотности можно сказать следующее. Плотность вероятности обнаружить частицу в точке x равна диагональному элементу матрицы плотности по обобщённым собственным векторам оператора координаты: $\langle x|\,\rho\,|x\rangle$. Тогда можно утверждать, что $\langle x|\,\rho\,|x\rangle$ имеет максимум в точке x_0, а неопределённость имеет такой масштаб малости, что ею можно пренебречь (рис. 12.7).

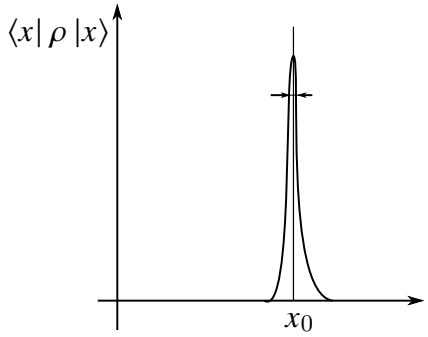


Рис. 12.7: Плотность вероятности $\langle x|\,\rho\,|x\rangle$

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

Для плотности вероятности иметь импульс p получаем такую же зависимость (рис. 12.8) - резкий пик в окрестности среднего значения импульса и малая неопределённость импульса, которой можно пренебречь в данной задаче.

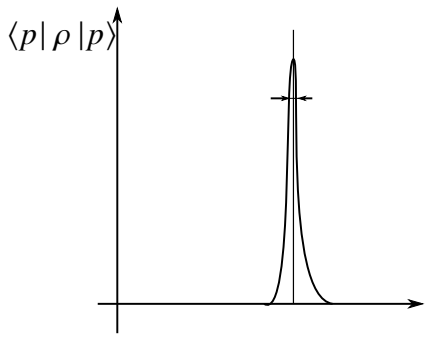


Рис. 12.8: Плотность вероятности $\langle p|\,\rho\,|p\rangle$

Если указанные выше условия выполняются, то можно утверждать, что частица находится в состоянии, которое соответствует классическому пределу квантовой механики.

Чтобы построить $\langle p|\,\rho\,|p\rangle$ перейдём от координатного к импульсному представлению:

$$\langle p|\,\rho\,|p'\rangle = \langle p|\,1\cdot\rho\cdot 1\,|p'\rangle = \int dx' \int dx\,\langle p|x\rangle\,\langle x|\,\rho\,|x'\rangle\,\langle x'|p'\rangle =$$

$$= \left[\,\langle x'|p'\rangle = U_{p'}(x'),\ U_p^*(x) = \langle p|x\rangle\,\right] = \iint dx'dx\frac{e^{-\frac{i}{\hbar}px}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\rho(x,x')\cdot\frac{e^{\frac{i}{\hbar}p'x'}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \qquad (12.18)$$

Таким образом, для получения матрицы плотности в импульсном представлении нужно совершить двойное преобразование Фурье (по аргументам x и x').

Тогда можно утверждать, что смешанное состояние (которое описывает классический предел) описывается матрицей плотности ρ, для которой при любых средних значениях импульса и координаты соответствующие неопределённости пренебрежимо малы.

Выясним, как эволюционирует классическое состояние системы. Рассмотрим динамику $\langle x\rangle$ и $\langle p\rangle$, ожидая, что Dx и Dp остаются маленькими по ходу динамики. Рассмотрим описанное выше рассеяние волновых пакетов. Этап движения, представленный на верхней части рис. 12.9, может быть сделан классическим, если подобрать подходящую ширину пакета (например, $\sim\sqrt{\hbar}$).

После рассеяния (нижняя часть рис. 12.9) классического предела уже не может быть, так как неопределённость в координате будет увеличиваться со временем.

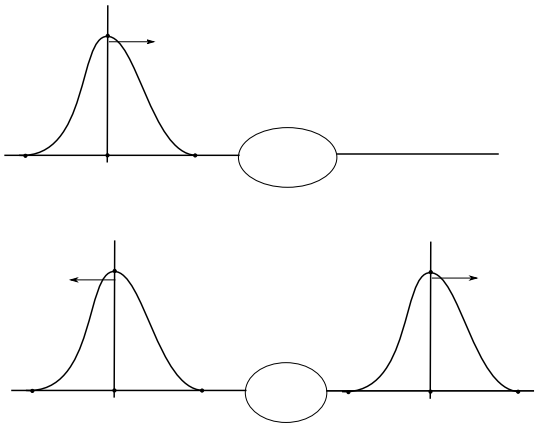


Рис. 12.9: Рассеяние волнового пакета

Рассеяние может оказаться классическим, если барьер достаточно большой, чтобы можно было пренебречь туннелированием направо и считать, что пакет целиком отразится от потенциала. Возможен и обратный случай - энергия частиц гораздо выше величины барьера, так что можно пренебречь надбарьерным отражением. Тогда можно говорить только о прошедшем пакете (снова возможен классический предел).

Рассмотрим следующий вопрос. Каким уравнениям движения подчиняются $\langle x \rangle$ и $\langle p \rangle$, которые мы рассматриваем как классические координату и импульс классической материальной точки? В качестве ответа получаем **теорему Эренфеста**.

Запишем уравнения Гейзенберга для координаты и импульса:

$$\dot{x} = \frac{i}{\hbar} [H, x] \tag{12.19}$$

$$\dot{p} = \frac{i}{\hbar} [H, p] \tag{12.20}$$

где гамильтониан имеет вид:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) \tag{12.21}$$

При этом

$$\langle x \rangle = Tr(\rho \cdot x) \tag{12.22}$$

$$\langle p \rangle = Tr(\rho \cdot p) \tag{12.23}$$

Тогда можно получить:

$$\dot{x} = \frac{i}{\hbar} \left[\frac{p^2}{2m} + V(x), x \right] = \frac{i}{\hbar} \cdot \frac{1}{2m} [-2i\hbar p] = \frac{p}{m} \tag{12.24}$$

Возьмём среднее от левой и правой части (11.24) и учтём, что операция среднего является линейной:

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \frac{\langle p\rangle}{m} \tag{12.25}$$

При этом мы рассматриваем $\langle x\rangle$ и $\langle p\rangle$ как классические координату и импульс $x_{\text{кл}}$ и $p_{\text{кл}}$:

$$\frac{d}{dt}x_{\text{кл}} = \frac{p_{\text{кл}}}{m} \tag{12.26}$$

Таким образом, получили соотношение классической механики одномерного движения материальной точки.

В случае импульса аналогично получаем:

$$\dot{p} = \frac{i}{\hbar}\left[\frac{p^2}{2m} + V(x), p\right] = \frac{i}{\hbar}\cdot V'(x)\cdot i\hbar = -V'(x) = f(x) \tag{12.27}$$

где $f(x)$ - сила.
После усреднения получим:

$$\frac{d}{dt}p_{\text{кл}} = \langle f(x)\rangle \tag{12.28}$$

Хотели получить:

$$\frac{d}{dt}p_{\text{кл}} = f(\langle x\rangle) \tag{12.29}$$

Осуществим разложение в ряд $\langle f(x)\rangle$ вокруг $\langle x\rangle$:

$$\langle f(x)\rangle = \left\langle f\left(\langle x\rangle + \left(x - \langle x\rangle\right)\right)\right\rangle = \left\langle f(\langle x\rangle) + f'(\langle x\rangle)(x - \langle x\rangle) + \frac{f''(\langle x\rangle)}{2!}(x - \langle x\rangle)^2 + \ldots\right\rangle =$$
$$= f(\langle x\rangle) + 0 + \frac{f''(\langle x\rangle)}{2!}Dx + \ldots \tag{12.30}$$

Таким образом, движение будет классическим тогда и только тогда, когда дисперсия Dx пренебрежимо мала. Тогда получаем

$$\frac{d}{dx}p_{\text{кл}} \cong f(x_{\text{кл}}) \tag{12.31}$$

Периодический потенциал

Пусть потенциал является периодической функцией с периодом a:

$$V(x + a) = V(x) \tag{12.32}$$

Рассмотрим решение стационарного уравнения в этом случае. Есть два линейно независимых решения $U_1(x)$, $U_2(x)$. Любое другое решение представимо как линейная

комбинация данных решений. Потенциал периодичен, а кинетическая энергия не изменяется при смещениях. Поэтому весь гамильтониан инвариантен относительно смещений на a. Следовательно, результат трансляции функции U_1 тоже будет решением стационарного уравнения Шрёдингера с той же самой энергией. При этом результат трансляции есть линейная комбинация решений:

$$U_1(x+a) = AU_1(x) + BU_2(x) \tag{12.33}$$

Аналогично:

$$U_2(x+a) = CU_1(x) + DU_2(x) \tag{12.34}$$

Таким образом, возникла матрица трансляций.

Отметим, что вронскиан двух решений стационарного уравнения Шрёдингера с одной и той же энергией равен константе. Так как он не зависит от координаты, его можно вычислить в любой точке. Вычислим вронскиан в точке $x + a$ и подставим матрицу трансляций:

$$W(U_1,U_2)\Big|_x = const = W\left(U_1(x+a), U_2(x+a)\right) = W\left(AU_1(x)+BU_2(x), CU_1(x)+DU_2(x)\right) = \\ = A\cdot D\cdot W(U_1,U_2) + B\cdot C\cdot W(U_2,U_1) = (AD-BC)\,W(U_1,U_2) = W(U_1,U_2) \tag{12.35}$$

При вычислении было учтено, что вронскиан симметричен: $W(U_2,U_1) = -W(U_1,U_2)$.

U_1 и U_2 - линейно независимые решения, поэтому их вронскиан отличен от нуля, поэтому окончательно выражение можно поделить на $W(U_1,U_2)$. Получаем:

$$det\begin{pmatrix} A & C \\ B & D \end{pmatrix} = 1 \tag{12.36}$$

Отсюда следует, что собственные значения данной матрицы удовлетворяют условию:

$$\lambda_1\cdot\lambda_2 = 1 \tag{12.37}$$

Соответственно:

$$\lambda_1 + \lambda_2 = A + D \tag{12.38}$$

Найдём собственные вектора, соответствующие собственным значениям λ_1 и λ_2:

$$\begin{pmatrix} A & C \\ B & D \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{pmatrix} = \lambda_1\begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{pmatrix} \tag{12.39}$$

$$\begin{pmatrix} A & C \\ B & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \end{pmatrix} = \lambda_2 \begin{pmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \end{pmatrix} \tag{12.40}$$

Пусть данные вектора найдены. Ищем новые решения в виде линейной комбинации U_1 и U_2 с коэффициентами, соответствующими собственному вектору $\begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{pmatrix}$:

$$V_1 = \xi_1 U_1(x) + \xi_2 U_2(x) \tag{12.41}$$

При этом

$$V_1(x+a) = \lambda_1 V_1(x) \tag{12.42}$$

Докажем это. Произведём трансляцию для U_1 и U_2 и сгруппируем слагаемые:

$$V_1(x+a) = \xi_1 \left(AU_1 + BU_2\right) + \xi_2 \left(CU_1 + DU_2\right) = U_1 \left(A\xi_1 + C\xi_2\right) + U_2 \left(B\xi_1 + D\xi_2\right) = \\ = \lambda_1 U_1 \left(\xi_1 U_1 + \xi_2 U_2\right) = \lambda_1 V_1 \tag{12.43}$$

Здесь было учтено, что $A\xi_1 + C\xi_2 = \lambda_1 \xi_1$ и $B\xi_1 + D\xi_2 = \lambda_1 \xi_2$.

Таким образом, операция трансляции эквивалентна умножению на собственное значение.

Если построить

$$V_2 = \eta_1 U_1 + \eta_2 U_2 \tag{12.44}$$

то аналогично получим:

$$V_2(x+a) = \lambda_2 \cdot V_2(x) \tag{12.45}$$

Лекция 13. Одномерное движение.

Периодический потенциал

На прошлой лекции было разобрано, как из двух линейно независимых решений $U_1(x)$ и $U_2(x)$ построить решения, которые обладают определённым законом трансляции при смещении x на период потенциала a, построили два решения:

$$V_1(x+a) = \lambda_1 V_1(x) \tag{13.1}$$

$$V_2(x+a) = \lambda_2 V_2(x) \tag{13.2}$$

Далее ответим на вопрос чему равны λ_1 и λ_2 - собственные значения матрицы:

$$\begin{pmatrix} A & C \\ B & D \end{pmatrix}$$

Её определитель равен единицце, тогда:

$$1 = \lambda_1 \lambda_2 \tag{13.3}$$

А также след этой матрицы:

$$A + D = \lambda_1 + \lambda_2 \tag{13.4}$$

Выпишем характеристическо уравнение:

$$\begin{pmatrix} A-\lambda & C \\ B & D-\lambda \end{pmatrix} = \lambda^2 - \lambda(A+D) + AD - BC = 0 \tag{13.5}$$

Обозначив $A + D = 2F$, тогда F - это функция энергии, причем $A + D$ - вещественно. Вещественно, потому что это след, а он не меняется при вращениях. Теперь найдём эти λ:

$$\lambda = F \pm \sqrt{F^2 - 1} \tag{13.6}$$

Видно, что:

$$\lambda_1 + \lambda_2 = 2F = A + D \tag{13.7}$$

Кроме того:

$$\lambda_1 \cdot \lambda_2 = 1 \tag{13.8}$$

Далее имеем два случая:

1. Получается, что λ - вещественные:

$$|F| \geqslant 1 \quad \lambda_1, \lambda_2 \in Re \tag{13.9}$$

В двух случаях (для λ_1 и λ_2 - разные цвета на картинке) решения стационарного уравнения Шрёдингера будут выглядеть как нарисовано на картинке 13.1. Эти

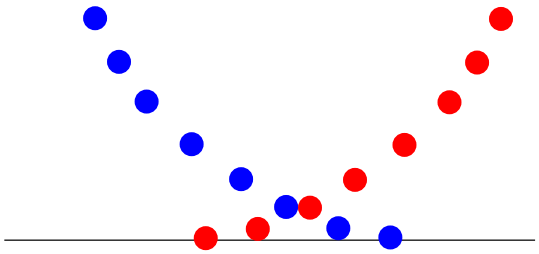


Рис. 13.1: Решения стационарного уравнения Шрёдингера для различных λ. Решения не принадлежат ни дискретному, ни непрерывному спектру.

решения не принадлежат ни дискретному, ни непрерывному спектру, потому что интеграл от квадрата модуля соответствующей функции будет бесконечность, которая никак не даст δ функцию от $E - E'$. Эти функции соответствуют запрещённой зоне, но не лишены физического смысла. Если периодический потенциал ограничить с той или иной стороны, например слева, то решение будет экспоненциально убывающим, например может быть дискретным спектром. Можно и с обеих сторон ограничить. То есть, физический смысл есть только если область ограниченна. Иначе - это запрещённая зона (то есть энергия E находится в запрещённой зоне).

2. Получается, что λ - комплексные:

$$|F| \leqslant 1 \quad \lambda_{1,2} = F \pm i\xi \tag{13.10}$$

Их модуль будет равен единице:

$$|\lambda_{12}| = 1 \tag{13.11}$$

В этом случае комплексно сопряжены:

$$\lambda_1 = \lambda_2^* \tag{13.12}$$

И тогда можно параметризовать их в виде:

$$\lambda_1 = e^{\frac{i}{\hbar}qa} \tag{13.13}$$

$$\lambda_2 = e^{-\frac{i}{\hbar}qa} \tag{13.14}$$

Здесь q - квазиимпульс. Если взять обобщенный собственный вектор настоящего импульса ($e^{\frac{i}{\hbar}px}$), то при трансляции на любую величину, он переходит в себя и

умножается на фазовый множитель:

$$e^{\frac{i}{\hbar}px} \longrightarrow_{x\to x_0} e^{\frac{i}{\hbar}px} \cdot e^{\frac{i}{\hbar}px_0} \tag{13.15}$$

Здесь решения можно сдвинуть на целое число a:

$$V_1(x) \longrightarrow_{x\to an} V_1(x) \cdot e^{\frac{i}{\hbar}qan} \tag{13.16}$$

То есть, квазиимпульс работает только при трансляциях на величину, кратную периоду потенциала a. Энергия в данном случае принадлежит разрешённой зоне:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}k^2 \tag{13.17}$$

Проиллюстрируем разрешённую и запрещённую зоны на картинке 13.2. Как правило, ширина запрещённых зон убывает при увеличении k. Кроме того,

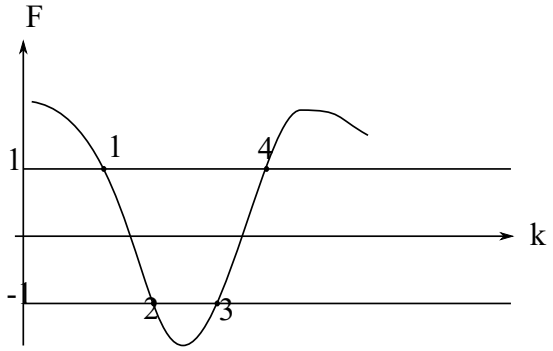


Рис. 13.2: Разрешённая и запрещённая зона ограничены прямыми на уровнях F= 1 и -1. Разрешённая зона находится между прямыми.

нарисуем зависимость энергии от квазиимпульса (рис. 14.2). Квазиимпульс периодичен, на картинке ограничимся одним периодом. Чтобы нарисовать

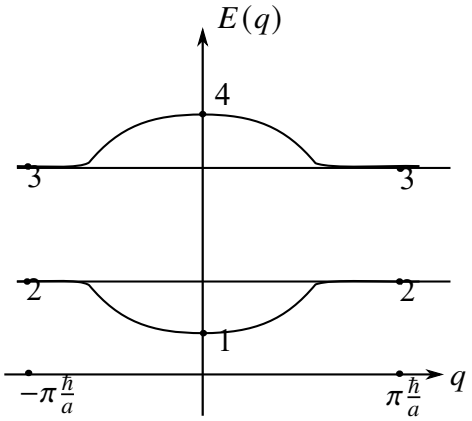


Рис. 13.3: Поворот

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

зависимость, посмотрим, что будет в терминах q при $F = 1$ - начало разрешённой зоны - точка 1 на картинке 13.2. Запишем:

$$2F = \lambda_1 + \lambda_2 = e^{\frac{i}{\hbar}qa} + e^{-\frac{i}{\hbar}qa} = 2cos\frac{qa}{\hbar} \tag{13.18}$$

Тогда, при $F = 1$ получаем, что $q = 0$. Соответствующую точку и номером один можно поставить на второй график (рис. 14.2). Далее, вокруг этой точки горизонтальные касательные (будет доказано ниже), всё кончится в точках $\pm\pi\frac{\hbar}{a}$. Можем отметить точку под номером 2. Далее от точки 2 до 3 идёт запрещённая зона. Третья точка начинается там, где кончилась вторая (а не в нуле!), рисуем аналогично симметрично. В итоге соответствующие точки отмечены одними цифрами на двух графиках.

Докажем, что касательные в начале и в конце разрешённой зоны (то есть в точках 1 и 2 на графике рис. 14.2). Так как:

$$F = cos\frac{qa}{\hbar} \tag{13.19}$$

Тогда, продифференцируем и получим нуль на границе зоны (так как на границе $cos\frac{qa}{\hbar} = \pm 1$, а значит $sin\frac{qa}{\hbar} = 0$):

$$\frac{dF}{dE}\frac{dE}{dq} = -\frac{q}{\hbar}sin\frac{qa}{\hbar} = 0 \tag{13.20}$$

Решение V_1, соответствующее разрешённой зоне:

$$V_1(x + a) = e^{\frac{i}{\hbar}qa}V_1(x) \tag{13.21}$$

Принадлежит явно не дискретному спектру, так как интеграл будет равен бесконечности. Покажем, что спектр непрерывный. Имеем функцию $q(E)$ и $E(q)$. То, что хотим получить пропорционально:

$$\delta(E - E') \sim \delta(q - q') \tag{13.22}$$

Убедимся, что $\delta(q - q')$ получить можно. Пусть есть два решения соответствующие двум энергиям и двум квазиимпульсам - $V_E(x)$ и $V_{E'}(x)$:

$$V_E = e^{-\frac{i}{\hbar}q'na}$$

$$V_{E'} = e^{\frac{i}{\hbar}q'na} \tag{13.23}$$

Посчитаем интеграл (по сути интегрировать в пределах бесконечностей не

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

обязательно):

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} V_E(x)\cdot V_{E'}(x)dx = \sum_{n=-\infty}^{+\infty}\int\limits_{na}^{n+a} dx V_E^*(x)V_{E'}(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar}na(q'-q)}\cdot\int\limits_0^1 V_E^*(x)V_{E'}(x)dx \tag{13.24}$$

Вспомним, что, если ы последнем равенстве последний интеграл положить интеграл равным C:

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{inz} = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} 2\pi\delta(z+2\pi m) = C\cdot\sum_{n=-\infty}^{+\infty} 2\pi\delta\left(2\pi m+\frac{q}{\hbar}(q'-q)\right) \tag{13.25}$$

Так как имеем сумму по m от $2\pi m$, тогда все эти слагаемые будут равны нулю, значит можем вычеркнуть их и само суммирование тоже. Тогда получаем:

$$C\cdot 2\pi\delta\left(\frac{q}{\hbar}(q'-q)\right)\sim\delta(q'-q)\sim\delta(E'-E) \tag{13.26}$$

Эту пропорциональность и требовалось доказать. Решение будет принадлежать непрерывному спектру.

Вариационный принцип Ритца и вариационный метод Ритца

Вариационный принцип Ритца - это точное утверждение, в то время, как вариационный метод Ритца - приближенный метод решения стационарного уравнения Шрёдингера, который опирается на вариационный принцип Ритца.

Построим функционал (среднее значение энергии):

$$\Phi\left[|\psi\rangle\right] = \langle\psi|H|\psi\rangle \tag{13.27}$$

Где H - гамильтониан системы, $|\psi\rangle$ - какой-то вектор гильбертова пространства.

Теорема: Экстремум функционала Φ при условии нормированности волновой функции:

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1 \tag{13.28}$$

даст решение стационарного уравнения Шрёдингера.

Доказательство: Для того, чтобы найти условный экстремум функционала нужно определить новый функционал:

$$\tilde{\Phi}\left[|\psi\rangle\right] = \langle\psi|H|\psi\rangle - \lambda\left(\langle\psi|\psi\rangle - 1\right) \tag{13.29}$$

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

И ищут его безусловный экстремум по λ и по ψ. Итак:

$$\frac{\delta\tilde{\Phi}}{\delta\lambda} = \langle\psi|\psi\rangle - 1 = 0 \tag{13.30}$$

Для второго экстремума имеем вектор:

$$|\psi\rangle \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ . \\ . \\ . \end{pmatrix} \tag{13.31}$$

Так как переменные независимые, получаем:

$$\frac{\delta}{\delta C_n^*} C_m^* = \delta_{nm} \tag{13.32}$$

$$\frac{\delta}{\delta C_n^*} C_m = 0 \tag{13.33}$$

Тогда, чтобы вычислить нужный нам экстремум, запишем:

$$\frac{\delta}{\delta\langle\psi|} \begin{pmatrix} \frac{\delta}{\delta C_1^*} \\ \frac{\delta}{\delta C_2^*} \\ . \\ . \\ . \end{pmatrix} \tag{13.34}$$

Итого получаем:

$$\frac{\delta\tilde{\Phi}}{\delta\langle\psi|} = H|\psi\rangle - \lambda|\psi\rangle = 0 \tag{13.35}$$

Видим, что это ни что иное, как стационарное уравнение Шрёдингера, кроме того, оказалось, что λ - есть энергия.

Замечание: В таком виде формулировка не очень удачная. С таким же успехом можно взять другой функционал:

$$\Phi_2 = \frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \tag{13.36}$$

Про него делается такое же утверждение, что он является решением стационарного уравнения Шрёдингера, только уже без каких-то дополнительных условий. Вычислим вариацию данного функционала:

$$\frac{\delta\Phi_2}{\delta\langle\psi|} = 0 = \frac{1}{\langle\psi|\psi\rangle}\left[H|\psi\rangle - \frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}\cdot|\psi\rangle\right] \tag{13.37}$$

Переформулировка с дифференциального уравнения на вариационный метод хороша с точки зрения численного счёта. Гамильтониан одномерного движения материальной точки:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) \tag{13.38}$$

Если решать с помощью вариационного метода, то вместо второй производной будет первая. Запишем соответственно числитель (так как ищем дискретные уровни энергии, то вычислять по частям интеграл можно):

$$\langle\psi|\, H\, |\psi\rangle = \int dx\psi^*(x)\cdot\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\psi(x) = \int dx\left[\frac{\hbar^2}{2m}\psi^{*\prime}(x)\psi'(x) + V(x)\,|\psi(x)|^2\right] \tag{13.39}$$

Далее можно делать с этим функционалом различные методы, чтобы найти экстремум.

Замечание про вариационный принцип Ритца: Когда ищется экстремум такого функционала - $\frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$, то неизбежно сваливание в минимум. Этот минимум будет соответствовать основному состоянию E_0 ($|\psi_0\rangle$). Тогда, если интересует какое-то возбуждённое состояние, вариационный принцип надо немного изменить. Сначала ищется E_0 и $|\psi_0\rangle$, а потом экстремум такого функционала:

$$\frac{\langle\psi|\, H\, |\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} + C_0\frac{\left|\langle\psi_0|\psi\rangle\right|^2}{\langle\psi|\psi\rangle} \tag{13.40}$$

Тут C_0 не может быть слишком маленькой константой. Тогда неизбежно с $|\psi_0\rangle$ минимум перейдёт на первое возбуждённое состояние. Аналогично для второго возбуждённого:

$$\frac{\langle\psi|\, H\, |\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} + C_0\frac{\left|\langle\psi_0|\psi\rangle\right|^2}{\langle\psi|\psi\rangle} + \frac{C_1\left|\langle\psi_0|\,|\psi\rangle\right|^2}{\langle\psi|\psi\rangle} \tag{13.41}$$

Теперь рассмотрим метод Ритца. Откуда-то (с потолка) берётся гипотетический вид волновой функции - $|\psi(a,b,c,...)\rangle$, который параметризуется неким набором констант $a, b, c, ...$ Далее считается среднее значение энергии и ищется минимум (здесь $\langle\psi|\, H\, |\psi\rangle$ уже функция, а не функционал):

$$E(a,b,c...) = \frac{\langle\psi|\, H\, |\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \tag{13.42}$$

Таким образом получим некое приближённое значение энергии $E(a_0,b_0,c_0...)$. Соответственно $\langle\psi(a_0,b_0,c_0...)|$ - приближённое значение волновой функции. Обычно параметров не очень много. Необходимо помнить, что, если ошибка волновой функции составляет ε, то ошибка по энергии будет ε^2. Поэтому оценка получается чрезвычайно точной. Отметим, что речь может идти не только об одномерном гильбертовом пространстве.

Приближение Венцера-Краммерса-Бриюллена (ВКБ)

Идея довольно проста. Из курса дифференциальных уравнений известно, что любое линейное уравнение второго порядка сводится к уравнению Риккати. Мы решаем стационарное уравнение Шрёдингера:

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\psi = 0 \tag{13.43}$$

Обозначим:

$$\frac{2m}{\hbar^2}(E - V) = k^2(x) \tag{13.44}$$

Тогда превратим стационарное уравнение Шрёдингера в уравнение Риккати заменой:

$$\psi = e^{if(x)} \tag{13.45}$$

Тогда порядок уравнения понизится на единицу, но оно перестанет быть линейным. Тогда:

$$\psi' = if' \cdot \psi \tag{13.46}$$

$$\psi'' = if''\psi + (if')^2 \cdot \psi \tag{13.47}$$

Подставляем в уравнение:

$$\left[if'' - (f')^2 + k^2(x)\right]\psi = 0 \tag{13.48}$$

Так как ψ - экспонента, то она не будет обращаться в нуль. И, сделав замену:

$$f' = g(x) \tag{13.49}$$

Получаем уравнение Риккати:

$$ig' - g^2 + k^2 = 0 \tag{13.50}$$

Допустим, что задача такова, что:

$$\left|g'\right| \ll g^2 \tag{13.51}$$

Тогда получаем не дифференциальное, а алгебраическое уравнение на g:

$$g^2 = k^2 \tag{13.52}$$

Итого:

$$g = \pm k \tag{13.53}$$

Это и есть квазиклассическое приближение. Приближение оно, потому что мы сделали допущение $\left|g'\right| \ll g^2$.

Лекция 14. Нестационарное уравнение Шрёдингера.

Приближение Венцера-Краммерса-Бриюллена (ВКБ)

Будем искать решение стационарного уравнения Шрёдингера в виде:

$$\psi = e^{if(x)} \tag{14.1}$$

Тогда для функции $f(x)$ получим уравнение Рикатти:

$$if'' - (f')^2 + k^2(x) = 0 \tag{14.2}$$

где $k(x)$ - переменное волновое число:

$$k(x) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\Big(E - V(x)\Big)} \tag{14.3}$$

Обозначим:

$$f' = g \tag{14.4}$$

Тогда получим уравнение:

$$ig' - g^2 + k^2 = 0 \tag{14.5}$$

Предположим, что

$$|g'| \ll g^2 \tag{14.6}$$

Если данное условие выполняется, то в уравнении (13.5) можно пренебречь первым слагаемым и тем самым получить алгебраическое уравнение:

$$g = \pm k \tag{14.7}$$

Тогда условие (13.6) преобразуется в условие:

$$|k'| \ll k^2 \tag{14.8}$$

Это условие также можно записать в виде:

$$|k'| \cdot \frac{1}{k} \sim |k'| \cdot \lambda \ll k \tag{14.9}$$

то есть на расстояниях порядка волны де Бройля k должно мало изменяться.

Так как $\lambda \sim \frac{1}{k}$, условие (13.9) также можно записать в виде:

$$\left|\frac{d\lambda}{dx}\right| \ll 1 \tag{14.10}$$

Если бы потенциал был бы константой, решением была бы плоская волна e^{ikx}. Если же потенциал меняется достаточно плавно, то можно выделить области, в которых k приблизительно постоянно. Тогда на этих областях волновая функция $e^{ik(x_i)(x-x_i)}$.

Найдём следующее приближение. Пусть нулевое приближение

$$g_0 = k(x) \tag{14.11}$$

Тогда

$$f' = k(x) \;\Rightarrow\; f = \int k(x) \tag{14.12}$$

Будем искать приближение в виде:

$$f = f_0 + f_1 + \ldots \tag{14.13}$$

$$g = g_0 + g_1 + \ldots \tag{14.14}$$

Подставим (13.13) в уравнение:

$$if_0'' + if_1'' - (f_0')^2 - 2f_0'f_1' - (f_1')^2 + k^2 = 0 \tag{14.15}$$

Так как мы работаем в с первым порядком малости, можно пренебречь слагаемыми $(f_1')^2$, if_1''. При этом $(f_0')^2 = k^2$. Поэтому получаем уравнение в первом приближении:

$$if_0'' = 2f_0'f_1' \tag{14.16}$$

f_0' известно, поэтому для f_1' получаем:

$$f_1' = \frac{i}{2}\frac{f_0''}{f_0'} \tag{14.17}$$

Интегрируя это соотношение, получаем:

$$f_1 = \frac{i}{2}\ln f_0' = \frac{i}{2}\ln k \tag{14.18}$$

Окончательно получаем (с точностью до нулевого и первого порядков) решение

уравнения Шрёдингера:

$$\psi(x) = e^{if_0(x)+if_1(x)} = e^{i\int k(x)dx + i\frac{i}{2}\ln k(x)} = \frac{1}{\sqrt{k(x)}} e^{i\int k(x)dx} \tag{14.19}$$

Замечание. Ранее были получено уравнение непрерывности и был доказан закон сохранения вероятности. Для плоской волны Ae^{ikx} поток вероятности равен $\frac{\hbar k}{m} \cdot |A|^2$. При этом для любого решения стационарного уравнения Шрёдингера поток вероятности равен константе:

$$j(x) = const \tag{14.20}$$

Для плоской волны поток вероятности, очевидно, равен константе. Для квазиклассической плоской волны имеем:

$$j \sim \frac{\hbar k(x)}{m} \cdot |A(x)|^2 = const \tag{14.21}$$

При этом (так как речь идёт о решении стационарного уравнения Шрёдингера), поток вероятности должен быть константой (последнее равенство в (13.21)). Тогда получаем:

$$A(x) \sim \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \tag{14.22}$$

то есть, можно было не производить выкладки уравнения (13.19), так как нам известен коэффициент (13.22) перед экспонентой.

Таким образом, в квазиклассическом приближении общее решение стационарного уравнения Шрёдингера (в разрешённой зоне):

$$\psi(x) = \frac{A}{\sqrt{k(x)}} e^{+i\int k(x)dx} + \frac{B}{\sqrt{k(x)}} e^{-i\int k(x)dx}, \quad |k'| \ll k^2 \tag{14.23}$$

Для запрещённой зоны введём:

$$\varkappa(x) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\Big(V(x) - E\Big)} \tag{14.24}$$

при условии

$$|\varkappa'| \ll \varkappa^2 \tag{14.25}$$

Аналогично случаю разрешённой зоны можно получить:

$$\psi(x) = \frac{A}{\sqrt{\varkappa(x)}} e^{+\int \varkappa(x)dx} + \frac{B}{\sqrt{\varkappa(x)}} e^{-\int \varkappa(x)dx} \tag{14.26}$$

В реальных задачах всегда присутствуют точки поворота, например на рис. 14.2 точка поворота - x_0 - точка, в которой энергия совпадает с V(x). На рис. разрешённая зона

выделена штриховкой.

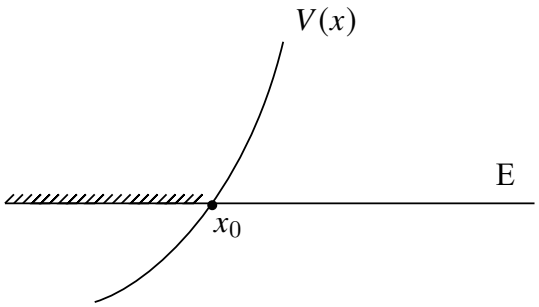


Рис. 14.1: Точка поворота

Однако, в этом случае в окрестности точки поворота нельзя применять квазиклассическое приближение, так как в этом случае $k(x_0) \equiv 0 = \varkappa(x_0)$ и условие применимости приближения не выполняется. Таким образом, нам нужно сшить две квазиклассические функции, которые определены справа и слева от точки поворота.

Замечание. В третьем томе Ландау Лифшица при рассмотрении обхода точек поворота была допущена ошибка. Там рассматривалось аналитическое продолжение с запрещённой области в разрешённую, по комплексной плоскости, что является ошибкой.

Иллюстрация. Рассмотрим функцию $\frac{1}{\operatorname{ch} x}$. Она имеет максимум в нуле. На $+\infty$ функция имеет асимптотику $2e^{-x}$, на $-\infty$ - асимптотику $2e^{x}$. Учтём, что $\operatorname{ch} ix = \cos x$. Тогда получим, что в качестве особых точек выступает череда полюсов на мнимой оси (в комплексной плоскости). Можно показать, что для любого луча справа или слева от мнимой оси выполняются указанные асимптотики функции. Однако непосредственно на мнимой оси это условие уже нарушается. Аналогичная ситуация получается и в случае квазиклассического приближения. Изобразим комплексную плоскость (рис. 14.2), на которой разной штриховкой обозначим квазиклассические приближения (вся плоскость разделится на три сектора размером $\frac{2\pi}{3}$, в каждом из которых будет свой вид квазиклассического приближения).

Рассмотрим частный случай линейного потенциала и нулевой энергии: $E = 0$:

$$V(x) = F \cdot x \tag{14.27}$$

Выберем такие единицы измерения, что

$$\frac{2m}{\hbar^2} F \equiv 1 \tag{14.28}$$

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

КОНСПЕКТ ПОДГОТОВЛЕН СТУДЕНТАМИ, НЕ ПРОХОДИЛ
ПРОФ РЕДАКТУРУ И МОЖЕТ СОДЕРЖАТЬ ОШИБКИ
СЛЕДИТЕ ЗА ОБНОВЛЕНИЯМИ НА VK.COM/TEACHINMSU

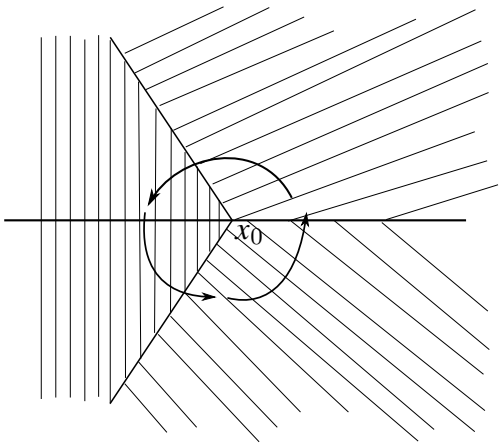


Рис. 14.2: Иллюстрация к замечанию

Тогда уравнение Шрёдингера примет вид:

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}(0 - Fx)\psi = 0 \tag{14.29}$$

Следовательно,

$$\psi'' - x\psi = 0 \tag{14.30}$$

В разрешённой области:

$$x < 0 \quad k(x) = \sqrt{|x|} \tag{14.31}$$

В запрещённой области:

$$x > 0 \quad \varkappa(x) = \sqrt{x} \tag{14.32}$$

Тогда

$$\int_0^x \varkappa(x)dx = \frac{2}{3}x^{3/2} \tag{14.33}$$

$$\int_x^0 k(x)dx = \frac{2}{3}|x|^{3/2} \tag{14.34}$$

Таким образом, в запрещённой области имеем два линейно независимых решения:

$$\frac{1}{x^{1/4}}e^{\pm\frac{2}{3}x^{3/2}} \tag{14.35}$$

В разрешённой области:

$$\frac{1}{|x|^{1/4}}e^{\pm\frac{2}{3}i|x|^{3/2}} \tag{14.36}$$

При этом не существует способа попасть из запрещённой в разрешённую область аналитическим продолжением. Отметим, что уравнение (13.30) - уравнение Эйри. Для

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

него можно построить

$$\psi = C_1 \cdot A(x) + C_2 B(x) \tag{14.37}$$

где A - функция Эйри первого рода, которая экспоненциально убывает в запрещённой области, B - функция Эйри второго рода, которая экспоненциально растёт в запрещённой области. Для указанных функций известны асимптотики:

$$A(x)\Big|_{x\to+\infty} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}\frac{1}{x^{1/4}}e^{-\frac{2}{3}x^{3/2}} \tag{14.38}$$

$$B(x)\Big|_{x\to+\infty} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{x^{1/4}}e^{+\frac{2}{3}x^{3/2}} \tag{14.39}$$

$$A(x)\Big|_{x\to-\infty} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{|x|^{1/4}}\sin\left(\frac{2}{3}|x|^{3/2}+\frac{\pi}{4}\right) \tag{14.40}$$

$$B(x)\Big|_{x\to-\infty} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{|x|^{1/4}}\cos\left(\frac{2}{3}|x|^{3/2}+\frac{\pi}{4}\right) \tag{14.41}$$

Таким образом, в данном частном случае функции сшиваются (убывающая экспонента с синусом, растущая - с косинусом). В общем случае необходимо считать, что все потенциалы в окрестности точки поворота в некотором смысле линейны. Например, пусть есть некоторый потенциал и точка поворота $x = 0$ (если это не так, можно сдвинуть начало координат). Потенциал можно разложить в ряд Тейлора в окрестности нуля:

$$V(x) = V(0) + V'(0)\cdot x + \frac{V''(0)}{2}x^2 + \ldots \tag{14.42}$$

Рассмотрим, при каких x можно пренебречь третьим слагаемым в (13.42):

$$V'(0)\cdot x \gg V''(0)\cdot x^2 \tag{14.43}$$

Отсюда получаем:

$$x \ll \frac{V'(0)}{V''(0)} \equiv b \tag{14.44}$$

То есть b - интервал, на котором допустимо линейное приближение, причём b - величина классических порядков. Таким образом, на интервале $[-b, b]$ возможно линейное приближение потенциала. Рассмотрим, где внутри этого интервала можно применять квазиклассическое приближение. Вычислим величину a, в пределах которой (то есть внутри интервала $[-a, a]$) ещё нельзя применять квазиклассическое приближение. В окрестности нуля можно записать:

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - V(0) - V'(0)x\right)\psi = 0 \tag{14.45}$$

Причём $E = V(0)$, так как 0 - точка поворота. Обозначим:

$$\frac{2m}{\hbar^2}V'(0) \equiv \frac{1}{a^3} \tag{14.46}$$

Тогда

$$\psi'' - \frac{x}{a^3}\psi = 0 \tag{14.47}$$

$$k = \sqrt{\frac{x}{a^3}} \tag{14.48}$$

Причём должно выполняться условие применимости:

$$|k'| \ll k^2 \tag{14.49}$$

Тогда

$$\frac{1}{\sqrt{x}}\frac{1}{a^{3/2}} \ll \frac{x}{a^3} \tag{14.50}$$

Преобразуем:

$$x^{3/2} \gg a^{3/2} \tag{14.51}$$

Тогда получаем условие применимости в виде:

$$\boxed{x \gg a} \tag{14.52}$$

Из (13.46) получаем размер окрестности точки поворота:

$$a = \left(\frac{\hbar^2}{2mV'(0)}\right)^{1/3} \tag{14.53}$$

То есть, a - величина планковского масштаба, a b - классическая величина. Значит, интервал $[-a, a]$ вложен в интервал $[-b, b]$ и область применимости приближения можно условно изобразить следующим образом (рис. 14.3).

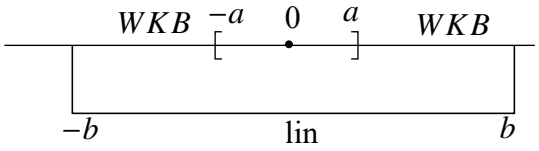


Рис. 14.3: Область применимости WKB

где lin - обозначение области применимости линейного приближения для потенциала.

Нам известно, как сшиваются квазиклассические функции для линейного потенциала. Тогда, обобщая полученный результат на случай точки поворота x_0 можем записать

$$\frac{1}{2\sqrt{\varkappa(x)}} e^{-\int_{x_0}^{x} \varkappa(x)dx} \longleftrightarrow \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \sin\left[\int_{x}^{x_0} k(x)dx + \frac{\pi}{4}\right] \tag{14.54}$$

$$\frac{1}{\sqrt{\varkappa(x)}} e^{+\int_{x_0}^{x} \varkappa(x)dx} \longleftrightarrow \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \cos\left[\int_{x}^{x_0} k(x)dx + \frac{\pi}{4}\right] \tag{14.55}$$

Правила квантования Бора-Зоммерфельда

Пусть дан некоторый гладкий потенциал (рис. 14.4). Необходимо найти уровни энергии в данном гладком потенциале.

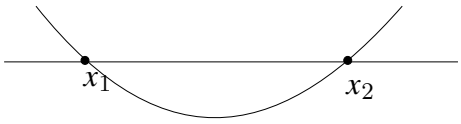


Рис. 14.4: Потенциал

Возьмём произвольную энергию, и построим квазиклассические волновые функции, обладающие правильными асимптотиками на бесконечности. Тогда в запрещённой области от правой точки поворота должно быть

$$\psi_2 = \frac{1}{2\sqrt{\varkappa}} e^{-\int_{x_2}^{x} \varkappa(x)dx} \tag{14.56}$$

Слева от точки поворота x_1 получаем:

$$\psi_1 = \frac{1}{2\sqrt{\varkappa}} e^{-\int_{x}^{x_1} \varkappa(x)dx} \tag{14.57}$$

Таким образом, в разрешённой области ψ_2 будет иметь вид:

$$\frac{1}{\sqrt{k(x)}} \sin\left(\int_{x}^{x_2} k(x)dx + \frac{\pi}{4}\right) \tag{14.58}$$

Аналогично для ψ_1:

$$\frac{1}{\sqrt{k(x)}} \sin\left(\int_{x_1}^{x} k(x)dx + \frac{\pi}{4}\right) \tag{14.59}$$

Таким образом, условие существования уровня энергии - линейная зависимость ψ_1 и ψ_2. Посчитаем вронскиан ψ_1 и ψ_2 в области пересечения функций и приравняем его нулю.

Обозначим:

$$\int\limits_{x}^{x_2} k(x)dx + \frac{\pi}{4} = \varphi_2, \quad \int\limits_{x_1}^{x} k(x)dx + \frac{\pi}{4} = \varphi_1 \tag{14.60}$$

Тогда

$$\varphi_1'(x) = k(x) \tag{14.61}$$

$$\varphi_2'(x) = -k(x) \tag{14.62}$$

Отсюда получаем:

$$\begin{aligned} 0 = W(\psi_1, \psi_2) = \psi_1'\psi_2 - \psi_1\psi_2' = -\frac{1}{2}\frac{k'}{k^{3/2}}\sin\varphi_1\frac{1}{\sqrt{k}}\sin\varphi_2 + \frac{1}{\sqrt{k}}k(x)\cos\varphi_1\frac{1}{\sqrt{k}}\sin\varphi_2 + \\ +\frac{1}{2}\frac{k'}{k^{3/2}}\sin\varphi_2\frac{1}{\sqrt{k}}\sin\varphi_1 - \frac{1}{\sqrt{k}}(-k)\cos\varphi_2\frac{1}{\sqrt{k}}\sin\varphi_1 = \\ = \sin(\varphi_1 + \varphi_2) = \sin\left(\int\limits_{x_1}^{x_2} k(x)dx + \frac{\pi}{2}\right) = 0 \end{aligned} \tag{14.63}$$

Условие (13.63) выполнено в точке $\pi(n+1)$. Следовательно должно выполняться (при условиях применимости квазиклассического приближения)

$$\boxed{\int\limits_{x_1}^{x_2} k(x)dx = \pi\left(n + \frac{1}{2}\right)} \tag{14.64}$$

Условие применимости имеет вид:

$$|k'| \ll k^2 \tag{14.65}$$

Проиллюстрируем поведение функции $k(x)$ (рис. 14.5):

$$k(x) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))} \tag{14.66}$$

В точках поворота волновое число обращается в нуль. При этом производная функции (16.66) в точке поворота есть бесконечность. Поэтому вблизи точек поворота на графике должны быть вертикальные прямые. k_0 - некоторое максимальное значение, которое достигается в точке минимума потенциала. Используем этот максимум в оценке (13.65). Для этого оценим k':

$$k' \sim \frac{k_0}{x_2 - x_1} \tag{14.67}$$

Тогда:

$$\frac{k_0}{x_2 - x_1} \ll k_0^2 \tag{14.68}$$

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

КОНСПЕКТ ПОДГОТОВЛЕН СТУДЕНТАМИ, НЕ ПРОХОДИЛ
ПРОФ РЕДАКТУРУ И МОЖЕТ СОДЕРЖАТЬ ОШИБКИ
СЛЕДИТЕ ЗА ОБНОВЛЕНИЯМИ НА VK.COM/TEACHINMSU

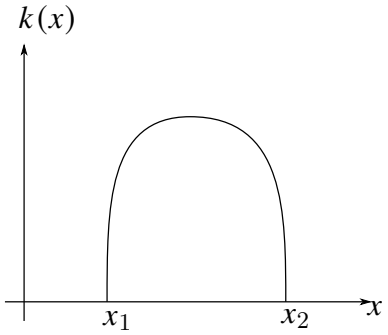


Рис. 14.5: Зависимость волнового числа от координаты

Следовательно,

$$k_0(x_2 - x_1) \gg 1 \tag{14.69}$$

Данное выражение можно переписать в виде (с учётом правила квантования Бора-Зоммерфельда):

$$\frac{\pi}{2} + \pi n = \int_{x_1}^{x_2} k(x)dx \gg 1 \tag{14.70}$$

Причём правилом квантования Бора-Зоммерфельда можно пользоваться только в случае:

$$n \gg 1 \tag{14.71}$$

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

Лекция 15. Потенциальный барьер и потенциальная яма.

Правила квантования Бора-Зоммерфельда

Рассмотрим потенциал $V(x)$ (рис. 15.1).
Правила квантования имеют вид:

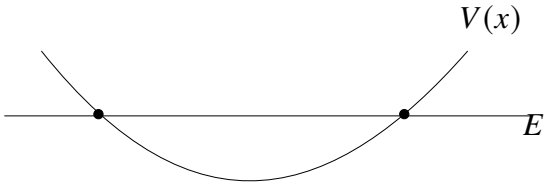


Рис. 15.1: Поворот

$$\int_{x_1}^{x_2} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\left(E - V(x)\right)}dx = \pi\left(n + \frac{1}{2}\right) \tag{15.1}$$

При этом условие применимости квазиклассического приближения имеет вид:

$$|k'(x)| \ll k^2(x) \tag{15.2}$$

где $k(x) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\Big(E - V(x)\Big)}$.
В случае рассматриваемой задачи это означает, что $n \gg 1$.

С точки зрения квантовой механики описанного способа достаточно для решения задач. С точки зрения статфизики полученное соотношение (14.1) нужно умножить на постоянную Планка:

$$\int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m\Big(E - V(x)\Big)}dx = \pi\hbar\left(n + \frac{1}{2}\right) \tag{15.3}$$

И учтём, что $\sqrt{2m\Big(E - V(x)\Big)}$ есть импульс классической материальной точки в точке x. Изобразим фазовую плоскость и траекторию на ней (рис. 15.2).

В случае движения слева направо имеем положительный импульс. При движении справа налево - отрицательный импульс. В случае вычисления интеграла (14.3) площадь, по которой вычисляется интеграл ограничена верхней кривой на верхней полуплоскости на рис. 15.2. Для вычисления интеграла по замкнутому контуру добавим нижнюю область,

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

равную верхней по площади:

$$\oint p(x)dx = 2\pi\hbar\left(n + \frac{1}{2}\right) \tag{15.4}$$

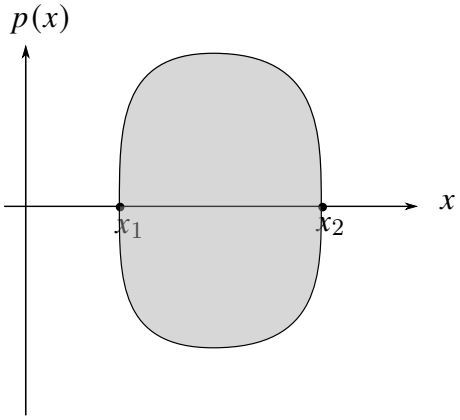


Рис. 15.2: Фазовая плоскость

Таким образом, фазовый объём равен (14.4). Тогда, если траектория, обозначенная на рис. 15.2, соответствует n-му уровню энергии, то при переходе к n+1 уровню энергии (рис. 15.3), то добавочная площадь будет иметь фазовый объем, равный $2\pi\hbar$. Следовательно, на каждое квантово-механическое состояние (в случае одномерного движения) приходится фазовый объём $2\pi\hbar$. В случае трёхмерного движения - $(2\pi\hbar)^3$.

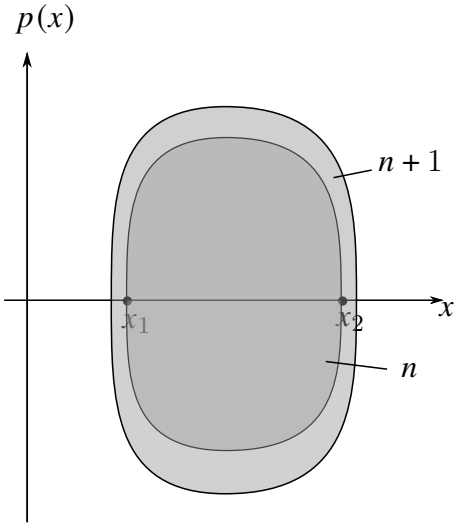


Рис. 15.3: Фазовая плоскость

Замечание. Правилами квантования Бора-Зоммерфельда можно пользоваться тогда и только тогда, когда применимо квазиклассическое приближение. Если же

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

дан потенциал, у которого есть скачки, до и после которых потенциал удовлетворяет условиям применимости квазиклассического приближения, то этим приближением можно пользоваться, сшивая две квазиклассические функции в скачках потенциала.

Нормировочный коэффициент для квазиклассической волновой функции

Запишем условие нормировки:

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2\, dx = 1 \tag{15.5}$$

Уровни, для которых применимо правило квантования Бор-Зоммерфельда, высоколежащие. Поэтому частица в основном живёт в разрешённой зоне. Поэтому в интеграле (14.5) вклад от экспоненциально убывающих частей функции в запрещённой зоне достаточно мал, чтобы им пренебречь. Тогда получаем:

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2\, dx = 1 = \int\limits_{x_1}^{x_2} |\psi(x)|^2\, dx = \int\limits_{x_1}^{x_2} |N|^2 \left(\frac{1}{\sqrt{k(x)}}\right)^2 \left[\sin\left(\int\limits_{x_1}^{x_2} k(x)dx + \frac{\pi}{4}\right)\right]^2 =$$

$$= |N|^2 \frac{1}{2} \int\limits_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{k(x)} = |N|^2 \frac{1}{2} \int\limits_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\Big(E - V(x)\Big)}} = |N|^2 \frac{\hbar}{2} \int\limits_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{2m\,(E - V(x))} =$$

$$= |N|^2 \frac{\hbar}{2} \int\limits_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{mv(x)} = |N|^2 \frac{\hbar}{2m} \frac{T}{2} = 1 \tag{15.6}$$

При вычислении мы предположили, что от $\left[\sin\left(\int\limits_{x_1}^{x_2} k(x)dx + \frac{\pi}{4}\right)\right]^2$ можно взять среднее, так как $n \gg 1$, вследствие чего у указанного синуса очень много нулей.

Отсюда получаем:

$$N = \sqrt{\frac{4m}{\hbar T}} \tag{15.7}$$

где T - классический период колебаний при энергии E в потенциале V(x).

Изобразим зависимость плотности вероятности нахождения частицы в точке x от x (рис. 15.4). Здесь x_1 и x_2 - точки поворота.

В запрещённых областях имеем экспоненциально убывающие выражения. Между

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

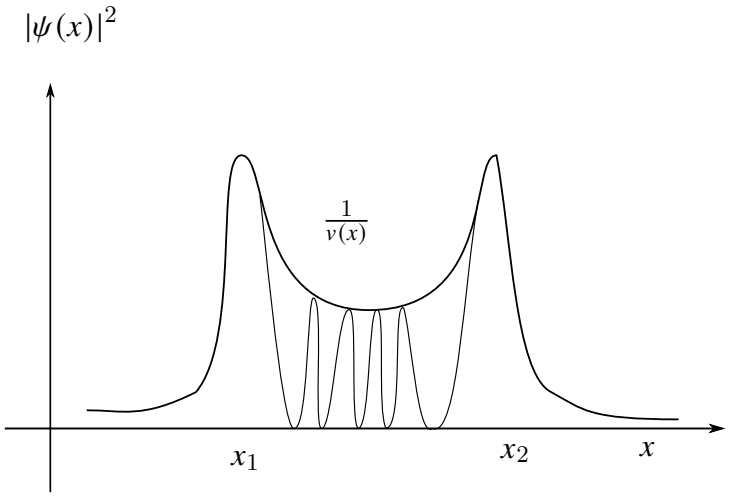


Рис. 15.4: Зависимость плотности вероятности от координаты

точками поворота имеем осциллирующую кривую, огибающая которой - $\frac{1}{v(x)}$. Вблизи точки поворота наблюдается резкий максимум. Отметим, что классическая частица (пролетающая со скоростью v) в среднем проводит в точке x время, пропорциональное $\frac{1}{v(x)}$, чем и объясняется наличие данной огибающей. В окрестности точки поворота частица стоит - поэтому время её нахождения в этой точке резко увеличивается.

Прохождение сквозь барьер

Рассмотрим потенциал, который убывает на бесконечностях:

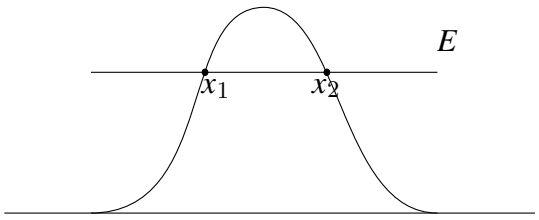


Рис. 15.5: Потенциал

Теперь x_1 и x_2 ограничивают запрещённую зону.

Пусть мы решили (с помощью квазиклассического приближения) задачу о коэффициенте прохождения через указанный потенциальный барьер и получили $T = 0.1$. Тогда полученный ответ означает, что квазиклассическое приближение применяется в ситуации, когда его применять на самом деле нельзя. Ранее была получена оценка:

$$\int_{x_1}^{x_2} k(x)dx \gg 1 \tag{15.8}$$

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

В нашем же случае эта оценка имеет вид:

$$\int_{x_1}^{x_2} \varkappa(x)dx \gg 1 \tag{15.9}$$

Коэффициент прохождения равен:

$$T = \exp\left[-2\int_{x_1}^{x_2} \varkappa(x)dx\right] \tag{15.10}$$

Тогда в силу (14.9) должно быть выполнено $T \lll 1$.

Выведем формулу (14.10). Для решения стационарного уравнения Шрёдингера имеем асимптотики:

$$x \to -\infty \;\Rightarrow\; e^{ikx} + Ae^{-ikx} \tag{15.11}$$

$$x \to +\infty \;\Rightarrow\; Be^{ikx} \tag{15.12}$$

Тогда коэффициент прохождения

$$T = |B|^2 \tag{15.13}$$

При этом мы рассматриваем случай, когда на бесконечности потенциал равен нулю, поэтому справа и слева от потенциала энергия равна $E = \frac{\hbar^2}{2m}k^2$.

Уравнение Шрёдингера - линейное. Домножим его на некоторый коэффициент и получим для соответствующих асимптотик выражения

$$x \to +\infty \;\Rightarrow\; \frac{1}{\sqrt{k}}e^{ikx+i\xi} \tag{15.14}$$

где ξ - некоторая произвольная фаза

$$x \to -\infty \;\Rightarrow\; \frac{C}{\sqrt{k}}e^{ikx+i\varphi} + \frac{D}{\sqrt{k}}e^{-ikx+i\lambda} \tag{15.15}$$

Тогда коэффициент прохождения равен

$$T = \frac{1}{|c|^2} \tag{15.16}$$

Построим соответствующую квазиклассическую волновую функцию. Справа от точки

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

поворота получим выражение, которое обозначим следующим образом:

$$\int_{x_2}^{x} dx\ k(x) + \frac{\pi}{4} \equiv \varphi_2(x) \tag{15.17}$$

Слева от левой точки поворота:

$$\int_{x}^{x_1} dx\ k(x) + \frac{\pi}{4} \equiv \varphi_1(x) \tag{15.18}$$

Возьмём производную:

$$\varphi_2'(x) = k(x)\Big|_{x\to\infty} = k \tag{15.19}$$

Тогда асимптотика $\varphi_2(x)$

$$\varphi_2(x)\Big|_{x\to+\infty} = k\cdot x + \alpha \tag{15.20}$$

где α - некоторая константа.

Асимптотика $\varphi_1(x)$ имеет вид:

$$\varphi_1(x)\Big|_{x\to-\infty} = -k\cdot x + \beta \tag{15.21}$$

Запишем квазиклассическую волновую функцию. Для области $x > x_2$ запишем линейную комбинацию двух решений, соответствующих двум квазиклассическим волновым функциям (то есть выражение, которое является решением стационарного уравнения Шрёдингера в области $x > x_2$ в квазиклассическом приближении):

$$\frac{1}{\sqrt{k(x)}}\cos\left[\int_{x_2}^{x} k(x)dx + \frac{\pi}{4}\right] + \frac{i}{\sqrt{k(x)}}\sin\left[\int_{x_2}^{x} k(x)dx + \frac{\pi}{4}\right] = \frac{1}{\sqrt{k(x)}}e^{i\varphi_2(x)}\Big|_{x\to\infty} = \frac{1}{\sqrt{k}}e^{ikx+i\alpha} \tag{15.22}$$

Рассмотрим данную волновую функцию в запрещённой области $x_1 < x < x_2$:

$$\frac{1}{\sqrt{\varkappa(x)}}e^{+\int_{x}^{x_2}\varkappa(x)dx} + \frac{i}{2\sqrt{\varkappa(x)}}e^{-\int_{x}^{x_2}\varkappa(x)dx} = \frac{1}{\sqrt{\varkappa(x)}}\cdot e^{\int_{x_1}^{x_2}\varkappa(x)dx}\cdot e^{-\int_{x_1}^{x}\varkappa(x)dx} = \frac{2\mu}{2\sqrt{\varkappa(x)}}e^{-\int_{x_1}^{x}\varkappa(x)dx} \tag{15.23}$$

Здесь второе слагаемое не учитывается вследствие его малости. Было введено обозначение $e^{\int_{x_1}^{x_2}\varkappa(x)dx} = \mu$.

Сшиваем полученную убывающую экспоненту с синусом в левой разрешённой зоне.

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

В области $x < x_1$ получаем волновую функцию

$$\frac{2\mu}{\sqrt{k(x)}} \sin\left(\int_x^{x_1} k(x)dx + \frac{\pi}{4}\right) = \frac{2\mu}{\sqrt{k(x)}} \frac{1}{2i}\left(e^{i\varphi_1(x)} - e^{-i\varphi_1(x)}\right) \tag{15.24}$$

Так как $\int_x^{x_1} k(x)dx + \frac{\pi}{4} = \varphi_1(x)$.

При $x \to -\infty$ выражение (14.24) имеет асимптотику:

$$\frac{1}{\sqrt{k}}\mu\frac{1}{i}e^{-ikx+i\beta} - \frac{1}{\sqrt{k}}\mu\frac{1}{i}e^{ikx-i\beta} \tag{15.25}$$

Таким образом, коэффициент прохождения равен:

$$T = \frac{1}{\left|-\mu\frac{1}{i}e^{-i\beta}\right|^2} = \mu^{-2} \tag{15.26}$$

Тогда получаем:

$$\boxed{T = e^{-2\int_{x_1}^{x_2} \varkappa(x)dx}} \tag{15.27}$$

Причём квазиклассическое приближение применяется только в случае $T \ll 1$.

Расщепление уровней в двойной яме

Пусть дана некоторая потенциальная яма, $E - 0$ - основное состояние в этой яме. Нарисуем профиль соответствующей волновой функции. (нижняя часть рис. 15.6). Учтём, что

$$\psi'' = -\frac{2m}{\hbar^2}\Big(E - V(x)\Big)\psi \tag{15.28}$$

В случае основного состояния корней нет, значит, ψ всюду одного знака. Тогда знак второй производной определяется тем, в запрещённой или разрешённой зоне мы находимся. В точках поворота имеем точку перегиба. Если в качестве энергии взять энергию основного состояния E_0, получим функцию, профиль которой изображён чёрной линией.

Дадим некоторое отрицательное приращение $E_0 - \delta E$. Тогда получаем функцию, которая на бесконечности экспоненциально растёт (синяя линия). В случае энергии $E_0 + \delta E$ получим функцию, которая имеет точку пересечения с точкой абсцисс, после чего функция экспоненциально растёт (по абсолютной величине) (красная линия на рис.). В этих двух случаях дискретные уровни отсутствуют.

КОНСПЕКТ ПОДГОТОВЛЕН СТУДЕНТАМИ, НЕ ПРОХОДИЛ
ПРОФ РЕДАКТУРУ И МОЖЕТ СОДЕРЖАТЬ ОШИБКИ
СЛЕДИТЕ ЗА ОБНОВЛЕНИЯМИ НА VK.COM/TEACHINMSU

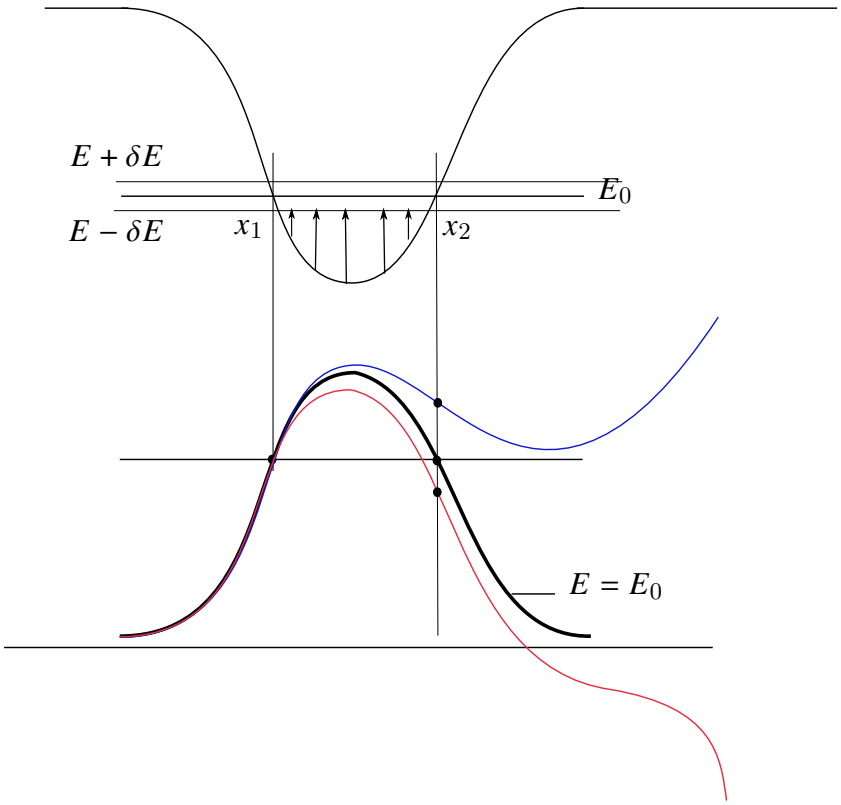


Рис. 15.6: Профили волновой функции

Рассмотрим потенциал с двумя одинаковыми ямами (рис. 15.7). Согласно осцилляторной теореме, основное состояние в такой яме - состояние без корней.

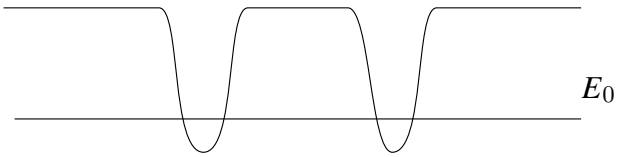


Рис. 15.7: Двойная яма

Соответствующий профиль волновой функции должен иметь вид, представленный на рис. 15.8.

Основное состояние должно быть чётной волновой функцией (в начале координат должна быть нулевая производная). Следовательно, $\tilde{\psi}_0$ должно соответствовать энергии $\tilde{E}_0 = E_0 - \delta E$. Чем дальше друг от друга ямы в потенциале, тем меньше δE, то есть тем больше полученный результат похож на уровень энергии в одиночной яме, рассмотренный выше.

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

КОНСПЕКТ ПОДГОТОВЛЕН СТУДЕНТАМИ, НЕ ПРОХОДИЛ
ПРОФ РЕДАКТУРУ И МОЖЕТ СОДЕРЖАТЬ ОШИБКИ
СЛЕДИТЕ ЗА ОБНОВЛЕНИЯМИ НА VK.COM/TEACHINMSU

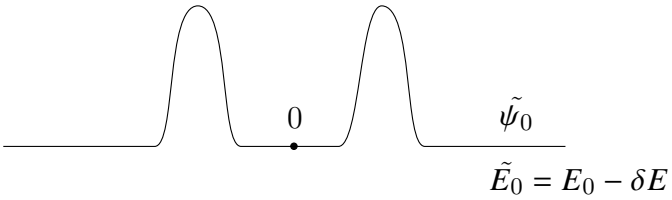


Рис. 15.8: Профиль волновой функции

Первый возбуждённый уровень в данном случае - нечётная волновая функция с одним корнем. Тогда её можно представить в виде рис. 15.9.

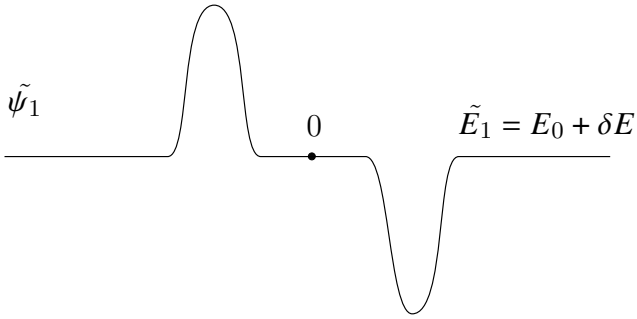


Рис. 15.9: Первый возбуждённый уровень в двойной яме

Можно показать, что если в яме несколько уровней, то для уровней энергии получаем расщепления, представленные на рис. 15.10.

Если E_0 - основное состояние в одиночной яме, $\tilde{E}_0$ - соновное состояние в двойной яме,

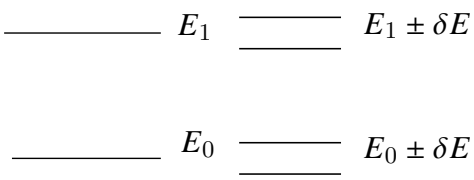


Рис. 15.10: Уровни энергии в одиночной яме

$\tilde{E}_1$ - первое возбуждённое состояние в двойной яме, то отношения между указанными энергиями можно изобразить в виде (рис. 15.11):

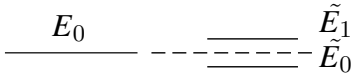


Рис. 15.11: Отношение между уровнями

Изучим область применения квазиклассических приближений в случае двойной ямы. Чтобы применять квазиклассическое приближение, необходимо отступить достаточно

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

далеко вверх от минимума и достаточно далеко вниз от максимума потенциала (рис. 16.7). Найдём расщепление для указанных средних уровней. Пусть есть квазиклассическая

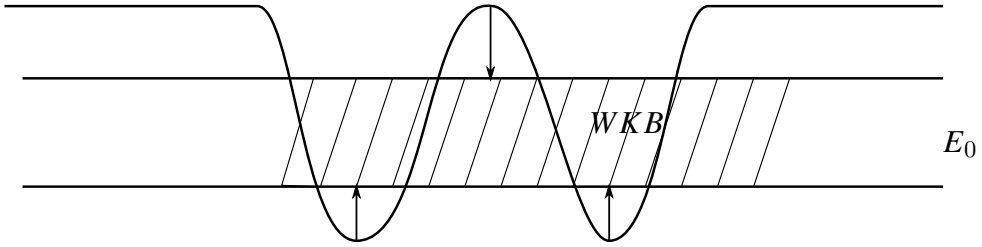


Рис. 15.12: Область применимости WKB в двойной яме

волновая функция в одиночной яме $\psi_0(x)$. Тогда для основного состояния в двойной яме $\tilde{\psi}_0(x)$ можно получить $\frac{1}{\sqrt{2}}\psi_0(x)$ в каждой из ям. Для $\tilde{\psi}_1(x)$ в одной из ям должно быть $-\frac{1}{\sqrt{2}}\psi_0(x)$.

Ранее было показано, что производная вронскиана двух решений стационарного уравнения Шрёдингера с разными энергиями имеет вид:

$$\frac{d}{dx}W\left(\tilde{\psi}_0(x),\psi_0(x)\right) = -\frac{2m}{\hbar^2}\left(\tilde{E}_0 - E_0\right)\tilde{\psi}_0(x)\psi_0(x) \tag{15.29}$$

Проинтегрируем (14.29):

$$\int_0^{+\infty}\left(-\frac{2m}{\hbar^2}\right)\left(\tilde{E}_0 - E_0\right)\tilde{\psi}_0(x)\psi_0(x)dx = \left(-\frac{2m}{\hbar^2}\right)\left(\tilde{E}_0 - E_0\right)\cdot\frac{1}{\sqrt{2}} =$$

$$= \left(\tilde{\psi}'_0(x)\psi_0(x) - \tilde{\psi}_0(x)\psi'_0(x)\right)\Big|_0^{\infty} = +\tilde{\psi}_0(0)\psi'_0(0) \tag{15.30}$$

Начало координат в рассматриваемой задаче является запрещённой областью, поэтому

$$\psi_0 = \frac{1}{\sqrt{\varkappa(x)}}e^{-\int_x^{x_1}\varkappa(x)dx}\cdot N \sim \varphi_0(x) \tag{15.31}$$

$$\tilde{\psi}_0(x) \sim \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_0(x) \tag{15.32}$$

Отсюда получаем:

$$\psi'_0(x) \sim \varkappa(x)\psi_0(x) \tag{15.33}$$

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

Лекция 16. Теория моментов.

Расщепление уровней в двойной яме

На прошлой лекции было показано, что в случае одиночной ямы есть хотя бы один уровень с энергией $\tilde{E}_0$ и соответствующей волновой функцией $\tilde{\psi}_0$ (на рис. 16.1 волновая функция изображена тонкой линией).

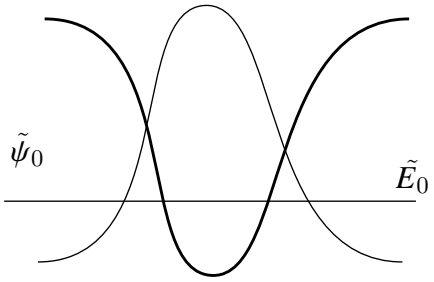


Рис. 16.1: Потенциальная яма

Замечание. Здесь и далее лектор поменял обозначения - энергии и функции с тильдой относятся к случаю одиночной ямы, без тильды - к одиночной яме.

Если расположить две такие ямы рядом друг с другом (Рис. 16.2), волновая функция основного состояния будет состоять из функций $\tilde{\psi}_0$ (см. нижнюю часть рис. 16.2). При этом энергия E_0, соответствующая ψ_0, немного меньше $\tilde{E}_0$.

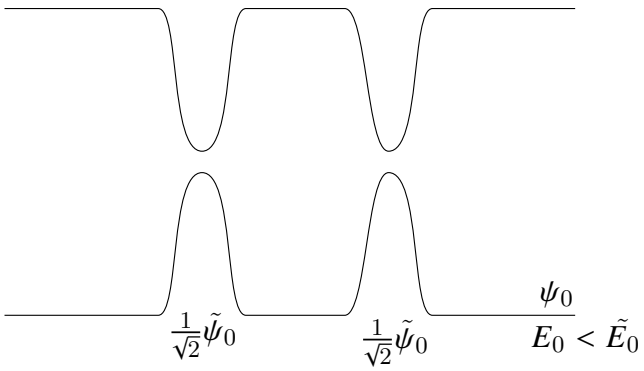


Рис. 16.2: Двойная яма

В случае первого возбуждённого состояния (Рис. 16.3) $E_1 > \tilde{E}_0$.

При этом для чётной волновой функции ψ_0 выполняется:

$$\psi_0'(0) = 0 \tag{16.1}$$

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

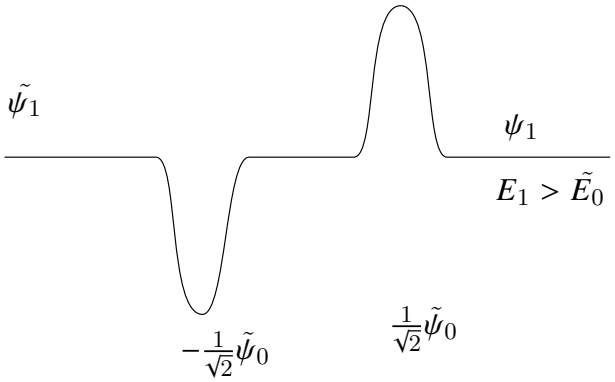


Рис. 16.3: Первое возбуждённое состояние

а для нечётной волновой функции ψ_1:

$$\psi_1(0) = 0 \tag{16.2}$$

Ранее было получено тождество для вронскиана двух решений стационарного уравнения Шрёдингера с разными энергиями:

$$\frac{d}{dx}W\left(\psi_0, \tilde{\psi}_0\right) = -\frac{2m}{\hbar^2}\left(E_0 - \tilde{E}_0\right) \cdot \psi_0\tilde{\psi}_0 \tag{16.3}$$

После взятия интеграла вида $\int\limits_0^\infty dx$ от данного выражения для левой части получили:

$$-\frac{2m}{\hbar^2}\left(E_0, \tilde{E}_0\right)\frac{1}{\sqrt{2}}$$

Для правой части получили выражение

$$\psi_0'\tilde{\psi}_0 - \psi_0\tilde{\psi}_0'\Big|_0^\infty$$

После всех подстановок окончательно получили:

$$\psi_0(0)\tilde{\psi}_0'(0) = -\frac{2m}{\hbar^2}\left(E_0 - \tilde{E}_0\right)\frac{1}{\sqrt{2}} = \frac{2}{\sqrt{2}}\tilde{\psi}_0(0)\tilde{\psi}_0'(0) \tag{16.4}$$

Последнее равенство в (15.2) имеет место, так как в нуле $\psi_0(0) = \frac{2}{\sqrt{2}}\tilde{\psi}_0(0)$ (Рис. 16.4) (из-за того, что эта точка является общей для обеих ям).

Покажем, что разница между уровнями $\tilde{E}_0$, E_1 и E_0 (Рис. 16.5) равна нулю.

Посчитаем:

$$\frac{d}{dx}W\left(\psi_1, \tilde{\psi}_0\right) = -\frac{2m}{\hbar^2}\left(E_1 - \tilde{E}_0\right) \cdot \psi_1\tilde{\psi}_0 \tag{16.5}$$

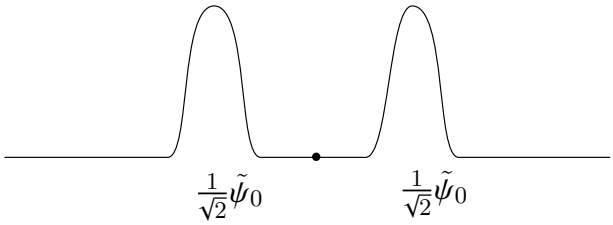


Рис. 16.4: Волновая функция ψ_0

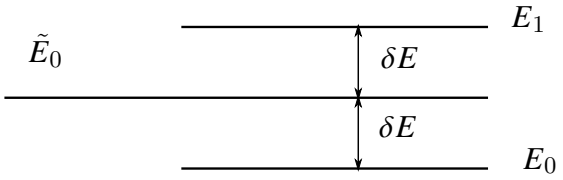


Рис. 16.5: Сдвиг между уровнями

Аналогично сделанному ранее, интегрируем обе части уравнения от 0 до ∞. Для левой части уравнения получим $\psi_1'\tilde{\psi}_0 - \psi_1\tilde{\psi}_0'\Big|_0^\infty$. Подстановка на $+\infty$ равна нулю, так как функции квадратично интегрируемы, поэтому на бесконечности они равны нулю. Учтём также, что $\psi_1(0)$, поэтому второе слагаемое при нижней подстановке равно нулю. В результате получаем:

$$-\psi_1'(0)\tilde{\psi}_0(0) = -\frac{2}{\sqrt{2}}\tilde{\psi}_0'(0)\tilde{\psi}_0(0) = -\frac{2m}{\hbar^2}\left(E_1 - \tilde{E}_0\right)\frac{1}{\sqrt{2}} \tag{16.6}$$

Таким образом, разница в энергиях одинакова (разница только в знаке):

$$E_1 - \tilde{E}_0 = -\left(E_0 - \tilde{E}_0\right) \tag{16.7}$$

То есть нижний уровень расщепляется симметричным образом.

Вернёмся к квазиклассическому приближению. $\tilde{\psi}_0$ в запрещённой области - это квазиклассическая волновая функция, причём:

$$\tilde{\psi}_0(0) = N \cdot \frac{1}{2\sqrt{\varkappa}} e^{-\int_0^{x_1} \varkappa(x)dx} \tag{16.8}$$

Рассмотрим только одну точку поворота (x_1 на рис. 16.6). При дифференцировании (15.8) нужно пренебречь дифференцированием $\frac{1}{\sqrt{\varkappa}}$ в силу условия применимости квазиклассического приближения.

Тогда

$$\tilde{\psi}_0'(0) = N\frac{\varkappa}{2\sqrt{\varkappa}} e^{-\int_0^{x_1} \varkappa(x)dx} \tag{16.9}$$

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

КОНСПЕКТ ПОДГОТОВЛЕН СТУДЕНТАМИ, НЕ ПРОХОДИЛ
ПРОФ РЕДАКТУРУ И МОЖЕТ СОДЕРЖАТЬ ОШИБКИ
СЛЕДИТЕ ЗА ОБНОВЛЕНИЯМИ НА VK.COM/TEACHINMSU

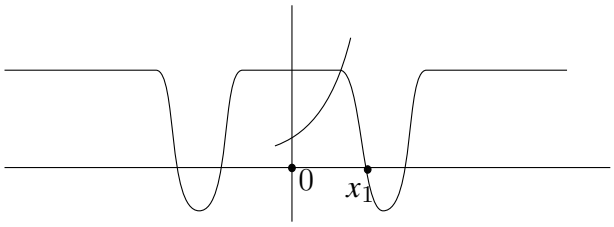


Рис. 16.6: Потенциал

После подстановки в (15.6) получаем:

$$N^2 \cdot \frac{\varkappa}{4\varkappa} e^{-\int_{-x_1}^{x_1} \varkappa(x)dx} \cdot \frac{2}{\sqrt{2}} = -\frac{2m}{\hbar}\left(E_0 - \tilde{E}_0\right) \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \tag{16.10}$$

При этом

$$N^2 = \frac{4m}{\hbar \cdot T} \tag{16.11}$$

где T - период колебаний при данной энергии.
После упрощения получаем:

$$-e^{-\int_{-x_1}^{x_1} \varkappa(x)dx} \cdot \frac{\hbar}{T} = \left(E_0 - \tilde{E}_0\right) = -\left(E_1 - \tilde{E}_0\right) \tag{16.12}$$

Замечание. Все результаты были получены с помощью квазиклассического приближения, поэтому существует диапазон адекватности этих результатов - достаточно высоко над основным состоянием и достаточно глубоко под барьером между ямами (см. рис. 16.7).

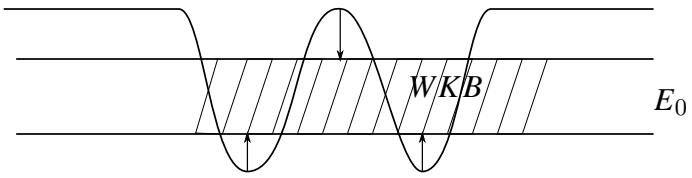


Рис. 16.7: Область применимости WKB в двойной яме

Замечание. Расстояние между основным и первым возбуждённым уровнями в двойной яме $E_1 - E_0$ есть скорость туннелирования из левой ямы в правую. Покажем это. На рис. 16.8 представлены волновые функции основного и первого возбуждённого состояний в двойной яме.

Из указанных волновых функций можно построить функцию для частицы в левой яме (которая соответствует состоянию с неопределённой энергией):

$$|\psi_l\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\psi_0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|\psi_1\rangle \tag{16.13}$$

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

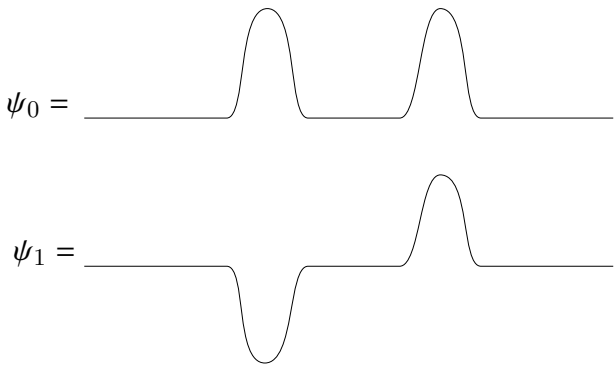


Рис. 16.8: Волновые функции основного и первого возбуждённого состояний

Аналогично для правой ямы:

$$|\psi_r\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\psi_0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\psi_1\rangle \tag{16.14}$$

Пусть в начальный момент времени частица находится в правой яме:

$$|\psi(t=0)\rangle = |\psi_r\rangle \tag{16.15}$$

Тогда получаем:

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-\frac{i}{\hbar}E_0 t}|\psi_0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t}|\psi_1\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_0 t}\left(\frac{1}{\sqrt{2}}|\psi_0\rangle + e^{\frac{i}{\hbar}(E_0-E_1)t}|\psi_1\rangle \cdot \frac{1}{\sqrt{2}}\right) \tag{16.16}$$

Таким образом, базисные вектора не эволюционируют, а вся волновая функция эволюционирует, причём если

$$e^{\frac{i}{\hbar}(E_0-E_1)t} = e^{-i\pi} = -1 \tag{16.17}$$

получим состояние psi_l, то есть волновая функция перешла из правой ямы в левую. Таким образом, мы получили связь между разницей энергий и временем туннелирования через потенциальный барьер:

$$\frac{1}{\hbar}(E_0 - E_1)\,T = -\pi \tag{16.18}$$

где T - время туннелирования.

Теория моментов

Определение. Момент определяется через коммутационное соотношение:

$$\left[l_i, l_j\right] = i\varepsilon_{ijk}l_k \tag{16.19}$$

Замечание. Далее будут встречаться обозначения вида

$$l_1 \equiv l_x \quad l_2 \equiv l_y \quad l_3 \equiv l_z$$

Тогда (15.19) можно переписать в виде:

$$\left.\begin{array}{l} [l_x, l_y] = il_z \\ [l_y, l_z] = il_x \\ [l_z, l_x] = il_y \end{array}\right\} \tag{16.20}$$

Пример. Орбитальный момент имеет вид (здесь квадратные скобки обозначают векторное произведение)

$$\vec{l} = \frac{1}{\hbar}[\vec{x} \times \vec{p}] \tag{16.21}$$

Ещё один пример момента - спин:

$$\vec{s} = \frac{1}{2}\vec{\sigma} \tag{16.22}$$

Полный момент:

$$\vec{j} = \vec{l} + \vec{s} \tag{16.23}$$

Для двух независимых моментов

$$\left[l_i^{(1)}, l_j^{(2)}\right] = 0 \tag{16.24}$$

можно построить их сумму:

$$\vec{L} = \vec{l}^{(1)} + \vec{l}^{(2)} \tag{16.25}$$

Построим полный набор наблюдаемых для момента. Для этого возьмём l_z и квадрат момента:

$$\vec{l}^2 = l_x^2 + l_y^2 + l_z^2 \tag{16.26}$$

Отметим, что квадрат момента коммутирует с l_z. Найдём собственные функции:

$$\vec{l}^2 |lm\rangle = l(l+1) |lm\rangle \tag{16.27}$$

Здесь $l(l+1)$ - пока что только обозначение собственного значения. Далее будем считать, что $l \geqslant 0$.

Аналогично:

$$l_z |lm\rangle = m |lm\rangle \tag{16.28}$$

где m - обозначение собственного значения.

Отметим, что так как

$$\vec{l}^2 = l_x^2 + l_y^2 + l_z^2 \tag{16.29}$$

при фиксированном $\vec{l}^2$ l_z (соответственно и m) есть величина ограниченная.

Замечание. Спектр $|lm\rangle$ может быть вырожденным. Например, в случае системы из трёх спинов получаем полный спин системы:

$$\vec{S} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2 + \vec{s}_3 \tag{16.30}$$

Два спина можно сложить таким образом, что в результате будет нулевой спин:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} |\uparrow\downarrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |\downarrow\uparrow\rangle \tag{16.31}$$

Тогда возможно состояние со спином 1/2:

$$\left|S = \frac{1}{2}, S_z = \frac{1}{2}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\uparrow\rangle - |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle) \tag{16.32}$$

Также возможно состояние со спином 1/2

$$\left|S = \frac{1}{2}\, S_z = \frac{1}{2}\right\rangle' = \frac{1}{\sqrt{6}} (|\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle - |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle) \tag{16.33}$$

При этом волновые функции (15.33) и (15.32) разные при одинаковых квантовых числах.

Ранее было показано, что для некоторой наблюдаемой A и оператора D, удовлетворяющих коммутационному соотношению:

$$[A, D] = \Delta D \tag{16.34}$$

оператор D оказывается сдвиговым для наблюдаемой A.

Рассмотрим собственный вектор наблюдаемой:

$$A |\alpha\rangle = a |\alpha\rangle \tag{16.35}$$

Построим

$$|\xi\rangle \equiv D |\alpha\rangle \tag{16.36}$$

Тогда оператор D сдвигает a на δ:

$$A |\xi\rangle = (a + \Delta) |\xi\rangle \tag{16.37}$$

Причём вообще говоря вектор ξ не обязан быть нормирован на 1:

$$\langle\xi|\xi\rangle = \left|N\right|^2 \neq 1 \tag{16.38}$$

Произведём операцию эрмитова сопряжения для (15.34):

$$(AD - DA)^\dagger = D^\dagger A^\dagger - AD^\dagger = -\left[A, D^\dagger\right] = \Delta \cdot D^\dagger \tag{16.39}$$

так как A - наблюдаемая, здесь $A^\dagger = A$.

Отсюда получаем, что $-\delta$ - тоже сдвиговый оператор (сдвигает в противоположную сторону). Построим сдвиговый оператор вида:

$$D = c_1 l_1 + c_2 l_2 \tag{16.40}$$

Подберем c_1 и c_2 так, чтобы D был сдвиговым оператором для наблюдаемой

$$A \equiv l_z \tag{16.41}$$

В результате можно получить:

$$l_\pm = l_1 \pm i l_z \equiv l_x \pm i l_y \tag{16.42}$$

где $l_- \equiv (l_+)^\dagger$.
Заметим, что

$$[l_3, l_\pm] = (\pm 1) \cdot l_\pm \tag{16.43}$$

$$\left[l^2, l_\pm\right] = 0 \tag{16.44}$$

Значит, оператор $l_\pm$ не может поменять значение l, но при этом может поменять значение l_3.

Построим операторы: $D^\dagger D$ и $DD^\dagger$, то есть $l_+ l_-$ и $l_- l_+$ соответственно. Отметим, что действие любой из этих пар операторов не изменит $|lm\rangle$, соответственно, вектор $|lm\rangle$ должен быть собственным вектором указанных операторов. Отметим также, что операторы $l_+ l_-$ и $l_- l_+$ являются эрмитовыми, а их спектр является неотрицательным, так как

$$\langle\psi| D^\dagger D |\psi\rangle = \langle\xi|\xi\rangle \geqslant 0 \tag{16.45}$$

где $\langle\psi| D^\dagger = \langle\xi|$ и $D|\psi\rangle = |\xi\rangle$.

Найдём явный вид указанных операторов.

$$l_+ l_- = \left(l_x + i l_y\right)\left(l_x - i l_y\right) = l_x^2 + l_y^2 + l_z^2 - l_z^2 - i\left(l_x l_y - l_y l_x\right) = l^2 - l_z^2 + l_z \tag{16.46}$$

Аналогично

$$l_- l_+ = l^2 - l_z^2 - l_z \tag{16.47}$$

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

Введём обозначения:

$$l_+ |lm\rangle = A_m |l\ m+1\rangle \tag{16.48}$$

$$l_- |lm\rangle = B_m |l\ m-1\rangle \tag{16.49}$$

Отсюда можно получить:

$$\langle l\ m+1|\, l_+ |lm\rangle = A_m \tag{16.50}$$

$$\langle l\ m-1|\, l_- |lm\rangle = B_m \tag{16.51}$$

Произведём операцию эрмитова сопряжения для (15.49):

$$\langle lm|\, l_+ |l\ m-1\rangle = B_m^* \tag{16.52}$$

В полученном выражении заменим m на m+1 и, сравнивая с (15.50), получаем:

$$\langle l\ m+1|\, l_+ |lm\rangle = B_{m+1}^* = A_m \tag{16.53}$$

Если

$$|\xi\rangle = l_+ |l_m\rangle = A_m |l\ m+1\rangle \tag{16.54}$$

то получаем

$$\langle \xi|\xi\rangle = \langle lm|\, l_- l_+ |lm\rangle = |A_m|^2 \tag{16.55}$$

Здесь $l_- l_+ = \hat{l}^2 - \hat{l}_z^2 - \hat{l}_z$, поэтому

$$l(l+1) - m^2 - m = (l-m)(l+m+1) \tag{16.56}$$

и (15.55) можно переписать в виде:

$$|A_m|^2 = (l-m)(l+m+1) \tag{16.57}$$

Тогда

$$|B_m|^2 = (l-m+1)(l+m+1-1) \tag{16.58}$$

Введём

$$|\eta\rangle = l_- |lm\rangle \tag{16.59}$$

тогда аналогично можно получить:

$$\langle \eta|\eta\rangle = |B_m|^2 = (l+m)(l-m+1) \tag{16.60}$$

Таким образом, мы получили модули A и B. Однако, фазу в данном случае получить нельзя. Так, если подействовать на $|lm\rangle$ оператором l_+, получим $|l\ m+1\rangle$ с модулем, определённым выше. При этом любой вектор в гильбертовом пространстве определён с точностью до произвольного фазового множителя. Поэтому целесообразно выбрать

фазовый множитель, равный единице. Однако следует учитывать, что $B^*_{m+1} = A_m$. Поэтому, если мы приняли, что при действии оператора l_+ получаем вектор с единичным фазовым множителем:

$$l_+ |lm\rangle = \sqrt{(l-m)(l+m+1)} \cdot 1 \, |l \; m+1\rangle \tag{16.61}$$

то в случае действия оператора l_- фазовый множитель должен быть 1^*:

$$l_- |lm\rangle = \sqrt{(l+m)(l-m+1)} \cdot 1^* \, |l \; m-1\rangle \tag{16.62}$$

Отметим также, что последовательное действие операторов l_-l_+ (или l_+l_-) не выводит нас из изначального набора векторов. Так, если подействовать оператором l_-l_+ на $|l \; m-1\rangle$, получим $|lm\rangle$ (при этом мы не можем получить вектор $|lm\rangle'$). Аналогично при действии l_-l_+ на $|l \; m-1\rangle'$ нельзя перейти к вектору $|lm\rangle$.

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

Лекция 17. Орбитальный момент.

Теория моментов

На прошлой лекции было выведены матричные элементы всех моментов, было выведено следующее соотношение:

$$\hat{\vec{l}}^2 = l(l+1)\,|lm\rangle \tag{17.1}$$

Соответственно для l_z:

$$l_z\,|lm\rangle = m\,|lm\rangle \tag{17.2}$$

Далее в прошлой лекции также сумели выяснить следующие соотношение (знак “+” - это соглашение, таким образом согласуются фазы базисных векторов по обе стороны равенства):

$$l_+\,|lm\rangle = +\sqrt{(l-m)(l+m+1)}\,|lm+1\rangle \tag{17.3}$$

$$l_-\,|lm\rangle = \sqrt{(l-m)(l+m+1)}\,|lm-1\rangle \tag{17.4}$$

Зная l_+ и l_- легко получить l_x и l_y, действующие на l_m. Теперь знаем как действуют все три компоненты момента на собственные функции момента. Осталось выяснить какие значения принимают l и m. Знаем, что это вещественные числа, кроме того, $l \geq 0$, а также, при фиксированном l, m - ограниченно. Последнее связано с тем, что m - это собственное значение l_z, который входит в l^2. Фиксируем l и говорим, что есть некое m_{max}. Очевидно, можем записать:

$$l_+\,|lm_{max}\rangle = 0 \tag{17.5}$$

Нуль в правой части получается в двух случаях: $m_{max} = l$ или $m_{max} = -l-1$. Так как такой оператор $l_+l_-\,|lm_{max}\rangle$ должен быть неотрицательным, то второго значения m_{max} не будет. Неотрицательный он, потому что спектр такой конструкции - $(l_-)^\dagger l_-$ - неотрицательная величина (было доказано ранее).

Определение: старший вектор - $|lm = l\rangle$.

Применяя же оператор l_- последовательно много раз к старшему вектору, дойдём до какого-то m_{min}. Меньше этого минимального быть не может по аналогичным причинам, как и для максимального m_{max}.

$$l_-\,|lm_{min}\rangle = 0 \tag{17.6}$$

Каждое применение оператора вычитало единичку из l, тогда, аналогично максимальному:

$$m_{min} = -l = l - k \tag{17.7}$$

Тогда:

$$2l = k \;\; l = \frac{k}{2} \tag{17.8}$$

Тут k - некоторое целое число. Допустимые значения l целые или полуцелые: $l = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, ...$ При фиксированном l, m меняется в пределах:

$$-l \leqslant m \leqslant l \tag{17.9}$$

Примеры:

1. Оператор спина (σ - матрица Паули):

$$\vec{S} = \frac{1}{2}\vec{\sigma} \tag{17.10}$$

Знаем, что:

$$\vec{S}^2 = \frac{1}{4}\left(\sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \sigma_3^2\right) = \frac{3}{4} = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2} + 1\right) \tag{17.11}$$

Таким образом, здесь выше $l = \frac{1}{2}$. Соответственно, появляются спин вверх и спин вниз:

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \tag{17.12}$$

Спин обладает следующим свойством:

$$S_z |\uparrow\rangle = +\frac{1}{2} |\uparrow\rangle \tag{17.13}$$

А также:

$$S_z |\downarrow\rangle = -\frac{1}{2} |\downarrow\rangle \tag{17.14}$$

Таким образом получаем два состояния:

$$|\uparrow\rangle = |l = \frac{1}{2} m = \frac{1}{2}\rangle \tag{17.15}$$

$$|\downarrow\rangle = |l = \frac{1}{2} m = -\frac{1}{2}\rangle \tag{17.16}$$

Очевидно, других собственных векторов нет, так как присутствуют ограничения на m, описанные выше.

2. Орбитальный момент (обычный):

$$\vec{l} = \frac{1}{\hbar}\left[\vec{x} \times \vec{p}\right] \tag{17.17}$$

Также легко вывести (используя коэффициенты Ламе), что:

$$l_z = \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial \varphi} \tag{17.18}$$

А также:

$$l^2 = -\Delta_{\theta\varphi} \tag{17.19}$$

Использую теорию ММФ, получим, что lm - являются обыкновенными сферическими гармониками:

$$|lm\rangle \equiv Y_{lm}(\theta, \varphi) \tag{17.20}$$

Замечание: часто сферические гармоники определяют без нормировки в математике. В квантовой теории сферические гармоники - это нормированные на единицу функции, удовлетворяющие фазовым соглашениям:

$$Y_{lm}(\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sqrt{\frac{2l+1}{2}} \cdot \sqrt{\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} \cdot P_l^{(m)}(\cos\theta) \cdot e^{im\varphi} \begin{cases} (-1)^m, & m \geqslant 0 \\ 1, & m \leqslant 0 \end{cases} \cdot \left[i^l\right]$$

В последнем выражении то, что в фигурных скобках идёт фазовый множитель, который обеспечивает выполнение фазового соглашения. Множитель $[i^l]$ в данном курсе не используется, поэтому опционален. Таким образом, теперь можем записать:

$$l_+ Y_{lm}(\theta\varphi) = +\sqrt{(l-m)(l+m+1)}\, Y_{lm+1}(\theta\varphi) \tag{17.21}$$

3. Чтобы вернуться в сходное положение нужно повернуться на 720, а не на 360 градусов во круг своей оси, что, на первый взгляд, не очевидно. Например для электронов такое наблюдается. Возьмём любую частицу со спином $\frac{1}{2}$ и, следовательно, с моментом $\frac{1}{2}$:

$$|l = \frac{1}{2}\ m = \frac{1}{2}\rangle = |\uparrow\rangle \tag{17.22}$$

Отметим, что унитарный оператор, реализующий поворот на угол φ вокруг оси n: $e^{i\vec{n}\vec{l}\varphi}$ Для вертикальной оси: $e^{il_z\varphi}$

Теперь применим данный оператор поворота:

$$e^{il_z\varphi}\,|l = \frac{1}{2}\ m = \frac{1}{2}\rangle = e^{i\frac{1}{2}\varphi}\,|l = \frac{1}{2}\ m = \frac{1}{2}\rangle \tag{17.23}$$

Теперь становится очевидно, что 360 градусов недостаточно для поворота в исходное состояние, а 720 как раз столько, сколько надо:

$$\varphi = 2\pi \quad -1 \cdot |l = \frac{1}{2}\ m = \frac{1}{2}\rangle \tag{17.24}$$

$$\varphi = 4\pi \quad + 1 \cdot |l = \frac{1}{2}\, m = \frac{1}{2}\rangle \tag{17.25}$$

Убедиться в этом можно проведя мысленный эксперимент. Летит пучок частиц со спином $\frac{1}{2}$, ориентированных по горизонтальной оси, волновая функция будет:

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \tag{17.26}$$

Затем пучок пролетает через устройство Штерна-Герлаха. Пучок разделится на два пучка, в одном спин будет направлен вверх, другой вниз и частица будет в одном или другом пучке с вероятностью $\frac{1}{2}$. Волновые функции пучков будут равны соответственно:

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \tag{17.27}$$

В одном из пучком можно повернуть спин на 360 градусов с помощью магнитного поля, но тогда волновая функция пучка преобразуется в такую же с минусом:

$$\begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \end{pmatrix} \tag{17.28}$$

Тогда, если после такого преобразования одного пучка, объединить их вновь, то итоговая волновая функция окажется равной:

$$\begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \tag{17.29}$$

Что соответствует спину, смотрящему против оси X, хотя изначально он был ориентирован по оси X. При повороте на 720 градусов, итоговая волновая функция была бы идентична начальной.

Сложение моментов

Постановка задачи: пусть есть два момента: $\vec{l}^{(1)}$ и независимый (любая компонента первого момента коммутирует с любой компонентой второго момента) $\vec{l}^{(2)}$. Собственные функции соответственно будут: $|l_1 m_1\rangle$ и $|l_2 m_2\rangle$. Для первых собственных функций будет $(2l_1 + 1)$ разных векторов, для вторых - $(2l_2 + 1)$. Это будет типичная составная система.

Тогда естественным образом образуется базис:

$$|l_1 m_1\rangle\, |l_2 m_2\rangle \equiv |l_1 l_2 m_1 m_2\rangle = |m_1 m_2\rangle \tag{17.30}$$

Легко проверить, что векторная сумма:

$$\vec{L} = \vec{l}^{(1)} + \vec{l}^{(2)} \tag{17.31}$$

удовлетворяет определению момента. То есть, можно интересоваться векторами $|LM\rangle$, они тоже образуют базис и выражаются через исходный базис:

$$|LM\rangle = \sum_{m_1 m_2} C^{Ll_1l_2}_{Mm_1m_2} \cdot |l_1 m_1\rangle\,|l_2 m_2\rangle \tag{17.32}$$

Коэффициенты $C^{Ll_1l_2}_{Mm_1m_2}$ называются **к**оэффициентами Клебша-Гордана, и они как раз и решают задачу переход к базису суммарного момента L. Казалось бы, что суммирование идёт по всем индексам m, но на самом деле это не совсем так. Запишем:

$$L_z = l_z^{(1)} + l_z^{(2)} \tag{17.33}$$

Поэтому:

$$L_z\,|l_1 m_1\rangle\,|l_2 m_2\rangle = l_z^{(1)}\,|l_1 m_1\rangle\,|l_2 m_2\rangle + l_z^{(2)}\,|l_1 m_1\rangle\,|l_2 m_2\rangle = (m_1 + m_2)\,|l_1 m_1\rangle\,|l_2 m_2\rangle \tag{17.34}$$

Таким образом, получается, что собственное значение L_z:

$$M = m_1 + m_2 \tag{17.35}$$

Таким образом, можем записать снова:

$$|LM\rangle = \sum_{M=m_1+m_2} C^{Ll_1l_2}_{Mm_1m_2}\,|l_1 m_1\rangle\,|l_2 m_2\rangle \tag{17.36}$$

Можно также записать и обратное выражение (учтя, что, так как матрица C унитарная, то в обратном преобразовании нужно эрмитово сопрячь её):

$$|l_1 m_1\rangle\,|l_2 m_2\rangle = \sum_L {}^{*}C^{Ll_1l_2}_{Mm_1m_2}\,|LM\rangle \tag{17.37}$$

Необходимо не забыть учесть, что M в выражении выше фиксировано и равно сумме m_1 и m_2. Отметим, что о фазах можно договориться таким образом, что матрица C будет ортогональной, сопрягать её следовательно будет не надо.

Вычисление коэффициентов Клебша-Гордана

Коэффициенты Клебша-Гордана могут вычисляться по общей формуле, но это не так просто, занимает много времени. Есть ещё и таблица этих коэффициентов.

- **Способ 1**: Просто записать строчку, которая является определением коэффициентов Клебша-Горданаю и требуем выполнение равенства:

$$\vec{L}^2 |LM\rangle = L(L+1) |Lm\rangle \tag{17.38}$$

Такой способ эффективен в довольно тривиальных случаях, таких как: $l_1 = l$

$$l_2 = \begin{cases} 1/2 \\ 1 \\ 3/2 \\ 2 \end{cases}$$

Разумеется, при применении L^2 к правой части, необходимо учесть:

$$\vec{L}^2 = \left(\vec{l}^{(1)} + \vec{l}^{(2)}\right)^2 = \left(\vec{l}^{(1)}\right)^2 + \left(\vec{l}^{(2)}\right)^2 + 2\vec{l}^{(1)}\vec{l}^{(2)} \tag{17.39}$$

В итоге мы получим цепочку линейных тождеств, связывающую коэффициенты Клебша-Гордана друг с другом и не нужно будет решать систему линейных уравнений (первый коэффициент находится из условий нормировки).

- **Способ 2**: Ранее выяснили, что:

$$l_+ |l, l = m\rangle = 0 \tag{17.40}$$

А также:

$$l_z |l, m = l\rangle = l |l, m = l\rangle \tag{17.41}$$

Эти равенства можно перевернуть в обратную сторону:

$$\left.\begin{array}{c} l_+ |\psi\rangle = 0 \\ l_z |\psi\rangle = l |\psi\rangle \end{array}\right\} \Rightarrow |\psi\rangle = |l, l\rangle$$

Учитываем дополнительные требования:

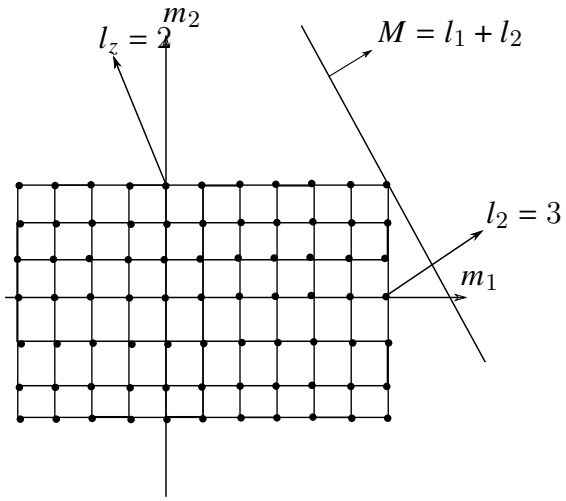
$$L_+ |LL\rangle = 0 \tag{17.42}$$

$$L_z |LL\rangle = L |LL\rangle \tag{17.43}$$

Таким образом можно найти старший вектор. Далее, применяя L_-, находятся все остальные:

$$|L, L\rangle \underset{L_-}{\to} |L, L-1\rangle \underset{L_-}{\to} |L, L-2\rangle \ldots\ldots |L, -L\rangle \tag{17.44}$$

- **Способ 3**: Канонический способ получить допустимые значения L - это нарисовать картинку 17.1. Эта картинка изображает все вектора исходного базиса в виде точек на плоскости. Как не трудно видеть, можно нарисовать l_1 и l_2. Далее будем рисовать наклонные линии - прямые с фиксированным $M = m_1 + m_2$. Вывод - нашли старший



ы

Рис. 17.1: Вектора исходного базиса в виде точек на плоскости m_1 - m_2. Наклонные линии - прямые с фиксированным $M = m_1 + m_2$.

вектор, проведя максимальное M. Можем записать теперь:

$$|L = l_1 + l_2, M = l_1 + l_2\rangle = 1\,|l_1 l_1\rangle\,|l_2 l_2\rangle \tag{17.45}$$

Тогда единица будет первым найденным коэффициентом Клебша-Гордана. И это будет единственный коэффициент, который удобно искать данным способом. По сути мы нашли семейство векторов. Применив L_-, получим:

$$\sqrt{(L+L)(L-L+1)}\,|L = l_1 + l_2, M = l_1 + l_2 - 1\rangle = (l_-^{(1)} + l_-^{(2)})\,|l_1 l_1\rangle\,|l_2 l_2\rangle =$$
$$= \sqrt{(l_1+l_1)(l_1-l_1+1)}\,|l_1 l_1 - 1\rangle\,|l_2 l_2\rangle + \sqrt{(l_2+l_2)(l_1-l_1+1)}\,|l_1 l_1\rangle\,|l_2 l_2 - 1\rangle \tag{17.46}$$

Таким образом, попали на вторую прямую, отсчитывая от правого верхнего угла, на картинке 17.1. С нормировкой всё хорошо, потому что:

$$|L = l_1 + l_2, M = l_1 + l_2 - 1\rangle = \sqrt{\frac{l_1}{l_1 + l_2}}\,|l_1 l_1 - 1\rangle\,|l_2 l_2\rangle + \sqrt{\frac{l_2}{l_1 + l_2}}\,|l_1 l_1\rangle\,|l_2 l_2 - 1\rangle \tag{17.47}$$

И так далее можно получить остальные коэффициенты. Существует также ортогональная комбинация к выше написанному вектору, которая является старшим вектором в том, что осталось, и можем тогда справедливо записать:

$M = l_1 + l_2 - 1$, а $L = M$. Итого строим ортогональную комбинацию:

$$|L = l_1 + l_2 - 1, M = l_1 + l_2 - 1\rangle = \sqrt{\frac{l_2}{l_1 + l_2}}\,|l_1 l_1 - 1\rangle\,|l_2 l_2\rangle - \sqrt{\frac{l_1}{l_1 + l_2}}\,|l_1 l_1\rangle\,|l_2 l_2 - 1\rangle \tag{17.48}$$

В итоге получили ещё два коэффициента. Однако, далее, при спуске, для меньших L придётся искать ортогональную комбинацию к большому количеству векторов, что очень тяжело вычислительно. Вся процедура закончится, когда перестанут появляться новые вектора L. То есть, в середине будет $L_{min} = l_1 - l_2$, а на краю, как написано выше, $L_{max} = l_1 + l_2$, иллюстрация представлена на рисунке 17.2.

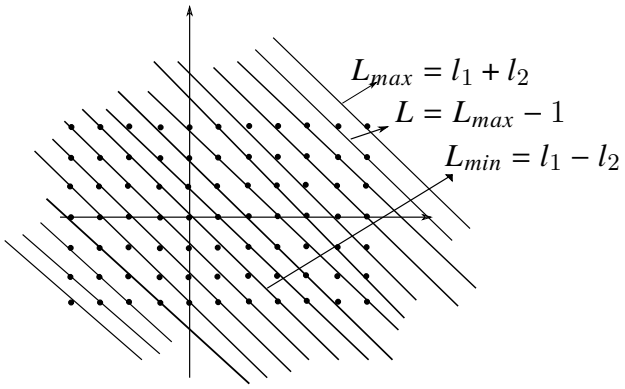


Рис. 17.2: Поиск базисных векторов от максимального до минимального.

Пример сложения моментов

Воспользуемся способом 2. Возьмём для примера два момента: $l_1 = 1$ и $l_2 = 1$. Тогда L - их сумма, - может иметь значения:

$$L = \left.\begin{matrix} 2 \\ 1 \\ 0 \end{matrix}\right\}$$

Для примера выясним при каких коэффициентах Клебша-Гордана $L = 0$. Понятно, что тогда $M = 0$:

$$m_1 + m_2 = M = 0 \tag{17.49}$$

Итого получаем вектор:

$$|L = 0 M = 0\rangle = \alpha\,|11\rangle\,|1 - 1\rangle + \beta\,|10\rangle\,|10\rangle + \gamma\,|1 - 1\rangle\,|11\rangle \tag{17.50}$$

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

И нужно найти всего три коэффициента Клебша-Гордана: α, β, γ. По-прежнему, несомненно выполнено:

$$L_z \left|L = 0 M = 0\right\rangle = 0 \cdot \left|L = 0 M = 0\right\rangle \tag{17.51}$$

Осталось удовлетворить второму условию, что:

$$L_+ \left|L = 0 M = 0\right\rangle = 0 \tag{17.52}$$

Распишем всё:

$$\begin{aligned} L_+ \left|L = 0 M = 0\right\rangle = 0 = \alpha l_+^{(1)} \left|11\right\rangle \left|1-1\right\rangle + \alpha l_+^{(2)} \left|11\right\rangle \left|1-1\right\rangle + \\ + \beta l_+^{(1)} \left|10\right\rangle \left|10\right\rangle + \beta l_+^{(2)} \left|10\right\rangle \left|10\right\rangle + \\ + \gamma l_+^{(1)} \left|1-1\right\rangle \left|11\right\rangle + \gamma l_+^{(2)} \left|1-1\right\rangle \left|11\right\rangle = \\ = \alpha \cdot \sqrt{(1-(-1))\,(1+(-1)+1)} \left|11\right\rangle \left|10\right\rangle + \\ + \beta \sqrt{(1-0)(1+0+1)} \left|11\right\rangle \left|10\right\rangle + \beta\sqrt{2} \left|10\right\rangle \left|11\right\rangle + \\ + \gamma\sqrt{2} \left|10\right\rangle \left|11\right\rangle = 0 \end{aligned} \tag{17.53}$$

Итого получаем два равенства:

$$\alpha\sqrt{2} + \beta\sqrt{2} = 0 \tag{17.54}$$

$$\beta\sqrt{2} + \gamma\sqrt{2} = 0 \tag{17.55}$$

И искомые коэффициенты будут равны:

$$\boxed{\alpha = \gamma = -\beta = \frac{1}{\sqrt{3}}} \tag{17.56}$$

Классификация операторов

Определение: Оператор $\hat{A}$ называется скалярным (или скаляром), если он коммутирует со всеми тремя компонентами момента:

$$\left[l_i, \hat{A}\right] = 0 \tag{17.57}$$

Необходимо учитывать, что это определение относительное. В некоторой степени абсолютным оно будет только тогда, когда l_i будет полным моментом системы. А так возникают парадоксальные ситуации. Например, относительно орбитального момента l_i такая величина, как $\hat{\vec{x}}^2$ - скаляр. Аналогично $\hat{\vec{p}}^2$ - тоже скаляр, что вроде логично. Однако, в данном случае S_z является скаляром, даже не смотря на то, что она является одним из компонентов вектора.

Лекция 18. Скалярный оператор, оператора поворота.

Скалярный оператор

Ранее определили скалярный оператор A, как оператор, коммутирующий со всеми тремя компонентами момента (относительное определение):

$$[l_i, A] = 0 \tag{18.1}$$

Аналогично определим векторный оператор B (вектор) соотношением:

$$[l_i, B_i] = i\varepsilon_{i,k} B_k \tag{18.2}$$

Из таких векторов можно сооружать другие векторные и скалярные операторы. Пусть есть два векторных оператора D и F, и можно построить их скалярное произведение:

$$\vec{D} \cdot \vec{F} = D_i F_i = D_1 F_1 + D_2 F_2 + D_3 F_3 \tag{18.3}$$

Можно убедиться, что эта величина коммутирует с любой компонентой момента. Также можно построить вектор G - векторное произведение:

$$\vec{G} \equiv \left[\vec{D}\vec{F}\right] \tag{18.4}$$

Отметим, что G - это псевдовектор, потому что при инверсии координат он не меняет свой знак.

Аналогично определим тензор второго ранга c_{jk} через коммутатор:

$$\left[l_i, c_{jk}\right] = i\varepsilon_{ijn} C_{nk} + i\varepsilon_{ikn} C_{jn} \tag{18.5}$$

Конечно, можно определить тензоры и более высокого ранга, но в данном курсе это будет не надо. Величина $G_j F_k$ явно двухиндексная величина - тензор второго ранга, подставляя его в коммутатор легко понять как будет коммутировать произвольный тензор второго ранга. Теперь убедимся, что оператор $e^{i\vec{n}\vec{l}\varphi}$ реализует унитарное преобразование (так как $U^\dagger = U^{-1}$) - поворот. Проще всего это сделать со скаляром. Скаляр A не преобразуется при поворотах, покажем это:

$$e^{i\vec{n}\vec{l}\varphi} A e^{-i\vec{n}\vec{l}\varphi} = A \tag{18.6}$$

Теперь перейдём к вектору B, действуем последовательно по компонентам:

$$e^{il_z\varphi} B_x e^{-il_z\varphi} = B_x \cos\varphi hi - B_y \sin\varphi \tag{18.7}$$

$$e^{il_z\varphi} B_y e^{-il_z\varphi} = B_y \cos\varphi + B_x \sin\varphi \tag{18.8}$$

Для компоненты z ничего не произойдёт.

$$e^{il_z\varphi}B_z = B_x\cos\varphi - B_y\sin\varphi = B_z \tag{18.9}$$

Получается, что оператор производит поворот вокруг оси z на угол φ и поворачивает любой оператор, который является векторным относительно данного момента. Далее нужно доказать, что вышесказанное верно и в общем случае - для поворота вокруг оси n. Существует два доказательства.

1. Первое доказательство заключается в том, чтобы рассмотреть поворот на очень маленький угол $\delta\varphi$: $e^{i\vec{n}\vec{l}\delta\varphi}$. В этом случае легко показать, что вектор B действительно повернётся на такой угол, но произведение двух экспонент не является экспонентой с суммой их показателей в показателе. Однако $e^{A\delta\varphi}\cdot e^{A\delta\varphi} = e^{2A\delta\varphi}$, потому что оператор A коммутирует сам с собой. Таким образом можно умножать маленький поворот $\delta\varphi$ много раз на себя и получить произвольный конечный угол φ.

2. Второе доказательство вычислительное. Можно доказать формулу (далеко не так просто это сделать):

$$e^{i\vec{n}\vec{l}\varphi}\vec{B}e^{-i\vec{n}\vec{l}\varphi} = \vec{n}\left(\vec{n}\vec{B}\right) + \left(\vec{B} - \vec{n}\left(\vec{n}\vec{B}\right)\right)\cos\varphi + \left[\vec{n}\times\vec{B}\right]\sin\varphi \tag{18.10}$$

   Первое слагаемое имеет смысл проекции оператора B на ось $\vec{n}$. Геометрический смысл второго слагаемого - проекция оператора B на плоскость, перпендикулярную оси $\vec{n}$, значит эта проекция будет множиться на косинус. Третье слагаемое - это третье направление, ортогональное двум предыдущим слагаемым.

Матричные элементы скалярного оператора

Существует множество способов доказать то, как выглядят матричные элементы скалярного оператора. Ниже будет приведён один из них. По определению скалярного оператора:

$$[l_3, A] = 0\cdot A \tag{18.11}$$

Справа умножили на A, потому что это не запрещено. Аналогично для квадрата:

$$\left[l^2, A\right] = 0\cdot A \tag{18.12}$$

Если операторы выглядят таким образом, как выше, то оператор A сдвигает собственные значения оператора l_3. Покажем на сколько сдвигает. Имеем собственные функции момента:

$$l_3\,|lm\rangle = m\,|lm\rangle \tag{18.13}$$

Введём:

$$|\psi\rangle = A\,|lm\rangle \tag{18.14}$$

Покажем как оператор l_3 действует на $|\psi\rangle$:

$$l_3\,|\psi\rangle = l_3 A\,|lm\rangle = [l_3, A]\,|lm\rangle + [Al_3]\,|lm\rangle = m\,|\psi\rangle \tag{18.15}$$

Действие состоит из двух слагаемых. Коммутатор в первом слагаемом - это $\Delta\,|\psi\rangle$, причём $\Delta = 0$. Коммутатор во втором слагаемом - это $m\,|\psi\rangle$. Таким образом квантовое число l тоже не меняется, а также:

$$|\psi\rangle = a_{lm}\,|lm\rangle \tag{18.16}$$

Здесь коэффициент a_{lm} соответствует условию нормировки. Дело в том, что у наблюдемой A имеется размерность, тогда коэффициент имеет ту же размерность.

Итак, оказалось, что:

$$A\,|lm\rangle = a_{lm}\,|lm\rangle \tag{18.17}$$

Оказывается, что коэффициент a_{lm} не зависит от m. Это можно понять, например применив оператор l_+:

$$l_+ A\,|lm\rangle = Al_+\,|lm\rangle = A\sqrt{(l-m)(l+m+1)}\,|lm+1\rangle =$$

$$= \sqrt{(l-m)(l+m+1)}a_{lm+1}\,|lm+1\rangle = a_{lm}\sqrt{(l-m)(l+m+1)}\,|lm+1\rangle \tag{18.18}$$

Последний член равенства ($a_{lm}\sqrt{(l-m)(l+m+1)}\,|lm+1\rangle$) - это то, что будет, если применить вышеупомянутый оператор к правой части. Теперь понятно, что нет зависимости от m:

$$a_{lm} = a_{lm+1} = \ldots\ldots = a_l \tag{18.19}$$

Итого, чтобы определить скалярный оператор, достаточно для каждого l определить одно число, которое называется **приведённым матричным элементом.** Если знаем приведённый матричный элемент для каждого l, то знаем вообще все матричные элементы скалярного оператора. Домножим вышеупомянутое равенство на $\langle l'm'|$:

$$\langle l'm'|\,A\,|lm\rangle = a_l\,\langle l'm'|lm\rangle = a_l\delta_{l'l}\delta_{m'm} \tag{18.20}$$

Иллюстрация: Возьмём орбитальный момент, относительного него оператор координаты является векторным, а квадрат координаты - скаляром. Состояние $\langle lm|$ - это сферические гармоники, как было отмечено выше:

$$|lm\rangle \longrightarrow Y_{lm}(\theta, \varphi) \tag{18.21}$$

Тогда квадрат:

$$\vec{x}^2 = \vec{r}^2 = r^2 \cdot \sqrt{4\pi}Y_{00}(\theta, \varphi) \tag{18.22}$$

Тогда, когда скалярный оператор A равный здесь $\vec{x}^2$ применяем к $\langle lm|$:

$$A\,|lm\rangle \longrightarrow Y_{00}(\theta,\varphi)Y_{lm}(\theta,\varphi) \tag{18.23}$$

Эффективно это означает, что складывается нулевой момент и момент l.

Матричные элементы векторного оператора

Для начала угадаем ответ в общем виде, а потом его докажем. Итак, возьмём то же самое координатное представление и тот же самый орбитальный момент. Возьмём например третью компоненту координаты x_3. В координатном представлении это сферическая гармоника:

$$x_3 = r\cos\theta \sim Y_{10}(\theta,\varphi) \tag{18.24}$$

Тогда, когда будем применять третью компоненту вектора к функции $|lm\rangle$, получим:

$$B_3\,|lm\rangle \longrightarrow Y_{10}(\theta,\varphi)\cdot Y_{lm}(\theta,\varphi) \tag{18.25}$$

Тем самым, происходит сложение момента l с моментом единица. Тогда, при сложении получатся моменты $l+1, l, l-1$. отсюда берутся правила отбора.

Теперь докажем данное утверждение. Начнём с компоненты B_3:

$$[l_3, B_3] = 0 \tag{18.26}$$

Эта формула соответствует $l_3\,|10\rangle = 0\,|10\rangle$, так как B_3 - это точный аналог состояния $\langle 10|$. Для начала определим новые операторы:

$$B_\pm \equiv B_1 \pm iB_2 \tag{18.27}$$

В том же самом координатном представлении:

$$x_+ = r\,(\sin\theta\cos\varphi + i\sin\theta\sin\varphi) = r\sin\theta e^{i\varphi} \sim -Y_{11}(\theta,\varphi) \tag{18.28}$$

Знак минус фигурирует в соответствии с фазовым соглашением. Совершенно аналогично получается:

$$x_- = r\sin\theta e^{-i\varphi} \sim +Y_{1-1}(\theta,\varphi) \tag{18.29}$$

Знак плюс тут тоже в соответствии с фазовым соглашением. Теперь можем вычислить второй коммутатор с B_3:

$$[l_+, B_3] = \sqrt{2}\left(-\frac{1}{\sqrt{2}}B_+\right) \tag{18.30}$$

Последнее равенство записано в таком виде, чтобы совпадали все коэффициенты,

прослеживалась аналогия с соотношением:

$$l_+ |10\rangle = \sqrt{2} |11\rangle \tag{18.31}$$

Тогда соответствующие коэффициенты будут равны между собой. Последнее соотношение для B_3:

$$[l_-, B_3] = \sqrt{2} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} B_- \right) \tag{18.32}$$

Нетрудно догадаться, что, аналогично:

$$l_- |10\rangle = \sqrt{2} |1 - 1\rangle \tag{18.33}$$

Соответствующие коэффициенты также будут равны между собой.

Далее, можно сразу записать, что:

$$\left[l_+, \frac{-1}{\sqrt{2}} B_+ \right] = 0 \tag{18.34}$$

Это верно, потому что:

$$l_+ |11\rangle = 0 \tag{18.35}$$

Все эти равенства несложно проверить, но доказательство остаётся на самостоятельную работу. Аналогично, так как:

$$l_3 |11\rangle = 1 \cdot |11\rangle \tag{18.36}$$

То можем опять записать:

$$\left[l_3, \frac{-1}{\sqrt{2}} B_+ \right] = 1 \cdot \frac{-1}{\sqrt{2}} B_+ \tag{18.37}$$

Записываем ещё одну часть часть:

$$\left[l_-, \frac{-1}{\sqrt{2}} B_+ \right] = \sqrt{2} B_3 \tag{18.38}$$

Это соотношение аналогично справедливо, так как:

$$l_- |11\rangle = \sqrt{2} |10\rangle \tag{18.39}$$

Далее, выписываем сразу только оставшиеся три коммутатора. Так как эти две величины аналогичны:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} B_- \leftrightarrow |1 - 1\rangle \tag{18.40}$$

Тогда сразу вытекает, что один коммутатор равен нулю:

$$\left[l_+, \frac{1}{\sqrt{2}}B_-\right] = 0 \tag{18.41}$$

А остальные соответственно:

$$\left[l_3, \frac{1}{\sqrt{2}}B_-\right] = (-1)\left(\frac{1}{\sqrt{2}}B_-\right) \tag{18.42}$$

И

$$\left[l_+, \frac{1}{\sqrt{2}}B_-\right] = \sqrt{2}B_3 \tag{18.43}$$

Все девять коммутаторов написаны исходя из определения векторного оператора.

Когда вычислялись коэффициенты Клебша-Гордана, что, если выполняются два равенства:

$$l_3 |\psi\rangle = k |\psi\rangle \tag{18.44}$$

$$l_+ |\psi\rangle = 0 \tag{18.45}$$

Тогда немедленно вытекает, что, с точностью до нормировочного коэффициента:

$$|\psi\rangle \sim |ll\rangle \tag{18.46}$$

То есть $|\psi\rangle$ будет старшим вектором (вектор, у которого m совпадает с l, то есть достигает максимально возможного значения). Из данного утверждения вытекает один коэффициент Клебша-Гордана, который не требует выкладок:

$$1 \cdot |l_1 = 1 m_1 = 1\rangle |l_2 = l m_2 = l\rangle = |L = l + 1, M = l + 1\rangle \tag{18.47}$$

$L = l + 1$, потому что и там и там m некуда увеличивать. Единица - это тривиальный коэффициент Клебша-Гордана.

Теперь выпишем аналог последнего соотношения (в отличие от предыдущего, $|\psi\rangle$ не нормировано на единицу и размерно с размерностью B):

$$1 \cdot \left(-\frac{1}{\sqrt{2}}B_+\right) |ll\rangle = |\psi\rangle \tag{18.48}$$

Убедимся, что $|\psi\rangle$ будет являться старшим вектором. Запишем (учтя, что l_+ с B_+ коммутируют, а $l_+ \langle ll| = 0$):

$$l_+ |\psi\rangle = l_+ \left(-\frac{1}{\sqrt{2}}B_+\right) |ll\rangle = \left(-\frac{1}{\sqrt{2}}B_+\right) l_+ |ll\rangle = 0 \tag{18.49}$$

Получили нуль. Запишем вторую половину данной выкладки:

$$l_3 |\psi\rangle = \left[l_3, -\frac{1}{\sqrt{2}}B_+\right] |ll\rangle + \left(-\frac{1}{\sqrt{2}}B_+\right) l_3 |ll\rangle = (1+l)\left(-\frac{1}{\sqrt{2}}B_+\right)|ll\rangle = (l+1)|\psi\rangle \quad (18.50)$$

Теперь очевидно, что $|\psi\rangle$ - старший вектор с $L = l+1, M = l+1$ (с точностью до нормировочного множителя):

$$1\left(-\frac{1}{\sqrt{2}}B_+\right)|ll\rangle = U_l |l+1, l+1\rangle \quad (18.51)$$

Соответствующий матричный множитель U_l называется приведённым матричным элементом для вектора. В случае скаляра для каждого l существует единственный матричный элемент, в случае же вектора матричных элементов будет 3 (в случае когда l складывается с единицей). Для старшего вектора ответ получен. Для всех остальных нужно применять оператор l_-. Единичка слева в последнем равенстве означает коэффициент Клебша-Гордана, который равен $C^{l+1,l,1}_{l+1,l,1}$.

Теперь применим оператор l_- к обеим частям равенства:

$$U_l\sqrt{2(l+1)}\,|l+1,l\rangle = \left[l_-, \left(-\frac{1}{\sqrt{2}}B_+\right)\right]|ll\rangle + \left(-\frac{1}{\sqrt{2}}B_+\right) l_-|ll\rangle =$$

$$= \sqrt{2}B_3|ll\rangle + \left(-\frac{1}{\sqrt{2}}B_+\right)\sqrt{2l}\,|l,l+1\rangle \quad (18.52)$$

Поделив на $\sqrt{2(l+1)}$, можно получить коэффициенты Клебша-Гордана перед слагаемыми. Можно ещё раз подействовать оператором l_- и убедиться, что:

$$U_l |l+1, m\rangle =$$

$$= C^{l+1,l,1}_{m,m+1,-1}\left(\frac{1}{\sqrt{2}}B_+\right)|l,m+1\rangle + C^{l+1,l,1}_{m,m,0}B_3|l,m\rangle + C^{l+1,l,1}_{m,m-1,1}\left(-\frac{1}{\sqrt{2}}B_+\right)|l,m-1\rangle \quad (18.53)$$

Вообще это не единственный способ сложить момент l с моментом единица. Можно сложить эти два момента и получить не $l+1$, а, например, l. Тогда соответствующее равенство будет очень похоже, только коэффициенты Клебша-Гордана изменятся:

$$V_l |l, m\rangle =$$

$$= C^{l,l,1}_{m,m+1,-1}\left(\frac{1}{\sqrt{2}}B_+\right)|l,m+1\rangle + C^{l,l,1}_{m,m,0}B_3|l,m\rangle + C^{l,l,1}_{m,m-1,1}\left(-\frac{1}{\sqrt{2}}B_+\right)|l,m-1\rangle \quad (18.54)$$

Следует отметить, что матричный элемент уже будет другой - V_l. Именно поэтому на каждое l приходится три числа. Аналогично можно записать для третьего матричного

элемента, соответствующего $l-1$:

$$W_l \left|l-1,m\right\rangle =$$

$$= C^{l-1,l,1}_{m,m+1,-1}\left(\frac{1}{\sqrt{2}}B_+\right)\left|l,m+1\right\rangle + C^{l-1,l,1}_{m,m,0}B_3\left|l,m\right\rangle + C^{l-1,l,1}_{m,m-1,1}\left(-\frac{1}{\sqrt{2}}B_+\right)\left|l,m-1\right\rangle \tag{18.55}$$

Однако проку от таких формул особо нет. Хочется знать по отдельности каждое слагаемое без примеси других. В нашем случае имеем матрицу 3×3 коэффициентов Клебша-Гордана, её надо обратить (из-за её свойств достаточно транспонировать, это обсуждалось ранее). Тогда получим три уравнения с тремя неизвестными.

$$\left(\frac{-1}{\sqrt{2}}B_+\right)\left|l,m-1\right\rangle =$$

$$= C^{l+1,l,1}_{m,m-1,1}U_l\left\langle l+1,m\right| + C^{l,l,1}_{m,m-1,1}V_l\left\langle l,m\right| + C^{l-1,l,1}_{m,m-1,1}W_l\left\langle l-1,m\right| \tag{18.56}$$

Кроме этого существует ещё две компоненты оператора B. Запишем аналогичные равенства для B_- и B_3:

$$\left(\frac{1}{\sqrt{2}}B_-\right)\left|l,m+1\right\rangle =$$

$$= C^{l+1,l,-1}_{m,m+1,1}U_l\left\langle l+1,m\right| + C^{l,l,1}_{m,m+1,-1}V_l\left\langle l,m\right| + C^{l-1,l,1}_{m,m+1,-1}W_l\left\langle l-1,m\right| \tag{18.57}$$

$$B_3\left|l,m\right\rangle =$$

$$= C^{l+1,l,-1}_{m,m,0}U_l\left\langle l+1,m\right| + C^{l,l,1}_{m,m,0}V_l\left\langle l,m\right| + C^{l-1,l,1}_{m,m,0}W_l\left\langle l-1,m\right| \tag{18.58}$$

Замечания:

1. У нас оператор B соответствует наблюдаемой величине, поэтому все его компоненты эрмитовы. Из-за этого на самом деле матричные элементы U и W связаны между собой. Имеем пропорциональности:

$$U_l \sim \left\langle l+1,m\right| B_3\left|l,m\right\rangle \tag{18.59}$$

$$W_l \sim \left\langle l-1,m\right| B_3\left|l,m\right\rangle \tag{18.60}$$

   В последнем соотношении увеличим l на единицу:

$$W_{l+1} \sim \left\langle l,m\right| B_3\left|l+1,m\right\rangle \tag{18.61}$$

   А затем сопряжём комплексно (оператор B_3 эрмитов):

$$W^*_{l+1} \sim \left\langle l+1,m\right| B_3\left|l,m\right\rangle \sim U_l \tag{18.62}$$

   Получили, что матричные элементы действительно пропорциональны, связаны

между собой.

2. В атомной физике было утверждение, что $l \to l \pm 1$. Однако, согласно рассуждениям выше, l мог бы и не меняться. Дело в том, что для оператора координаты $V_l \equiv 0$, поэтому l должен сдвигаться на единицу. Для других операторов это не обязательно так.

3. Выше был доказан кусок теоремы Вигнера-Эккарта. Сама теорема гласит, что:

$$\langle lm' | \vec{B} | lm \rangle = f(l) \langle lm' | \vec{l} | lm \rangle \tag{18.63}$$

Зависимость от m и m' для всех векторных операторов идентична, она определяется коэффициентами Клебша-Гордана. Поэтому вся разница заключается в приведённом матричном элементе. Видно, что $f(l)$ определяется приведённым элементом V_l. Кусок, потому что в самой теореме можно найти явное выражение:

$$f(l) = \frac{\langle lm'' | \vec{l}\vec{B} | lm'' \rangle}{l(l+1)} \tag{18.64}$$

В данном выражении m'' - может быть любым, потому что $\vec{l}\vec{B}$ - это скалярный оператор, матричный элемент которого не зависит от m. На практике m'' удобнее выбирать нулём или равным l. Выражение для $f(l)$ можно получить двумя способами:

- Вывести выражение для $f(l)$, выведя V_l через $|lm''\rangle$.
- Вывести выражение для $f(l)$, посчитав матричный элемент:

$$\langle lm' | \left[l^2 \left[l^2, \vec{B} \right] \right] | lm \rangle \tag{18.65}$$

Лекция 19. Центрально-симметричное поле.

Неприводимые тензора

При действии скалярного оператора получаем такой же результат как при сложении орбинального момента нуля и орбитальный момент l.

При действии векторного оператора получаем результат как при сложении момент 1 и момент L.

Выясним, будет ли это верно для тензора второго ранга Cij. Очевидно, что верно это не будет, исходя из количества степеней свободы.

Пояснение:

- скаляр – одна степень свободы A $\rightarrow$ 1. Соответственно $|l = 0 m = 0\rangle$ – одно единственное состояние
- вектор – величина с тремя компонентами $B_i \rightarrow 3$. Соответственно $|l = 1 m = \begin{matrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{matrix}\rangle$.

  Получаем 6. Для Cij получаем девять.
- $|l = 2 m = \begin{matrix} 2 \\ 1 \\ 0 \\ -1 \\ -2 \end{matrix}\rangle$ – получаем пять компонент. Для Cij получаем девять.

Возьмем один из частных случаев тензора второго ранга – произведение двух векторных операторов $D_i F_i$

Разберем, почему здесь заложены лишние степени свободы. D_i – момент, равный 1; F_i – момент, равный 1. В результате сложения двух моментов, равных единице, получаем

$$\begin{cases} 2 - 5 \text{ степеней свободы} \\ 1 - 3 \text{ степеней свободы} \\ 0 - 1 \text{ степеней свободы} \end{cases}$$

Начнем с последней строки.

$$\vec{D} \cdot \vec{F} = D_i F_i = D_1 F_1 + D_2 F_2 + D_3 F_3 \tag{19.1}$$

Получили скаляр.

Следовательно для любого тензора второго ранга сумма по повторяющемуся индексу от 1 до 3, являющаяся следом этой матрицы, является скаляром.

$$C_{ii} = C_{11} + C_{22} + C_{33} \tag{19.2}$$

Т.е. величиной, инвариантной относительно вращения.

Замечание. След инвариантен относительно поворотов.

На прошлой лекции было выяснено, что данной векторное произведение является вектором (псевдовектором). Относительно вращений ведет себя как вектор.

$$\vec{G} = \left[\vec{D} \times \vec{F}\right] \tag{19.3}$$

Построим следующий неправильный вектор, используя антисиммитричные части произвольного тензора второго ранга:

$$(C_{23} - C_{32}, C_{31} - C_{13}, C_{12} - C_{21}) \tag{19.4}$$

Оставшуюся часть найдем методом исключения. Видно, что оставшаяся часть должна быть симметричной (шесть компонент)и иметь нулевой след (минус одна компонента). Итого 5 степеней свободы. Симметричный тензор с нулевым следом является объектом с орбитальным моментом l=2.

Запишем его следующим образом. Из произвольного тензора второго ранга выделим компоненту с l=2:

$$C_{ij} + C_{ji} - \frac{2}{3}\delta_{ij}C_{kk} \tag{19.5}$$

Где C_{kk} – след исходного тензора. Получили неприводимый тензор.

Неприводимый тензор – любой кусочек тензора, который имеет определенное значение орбитального момента l. Примеры: скаляр (l=0); вектор (l=1).

Проведем аналогии между компонентами полученного тензора и соответствующими состояниями с определенным орбитальным моментом.

Ранее были найдены следующие аналогии:

$$-\frac{1}{\sqrt{2}} \leftrightarrow |11\rangle$$

$$B_3 \leftrightarrow |10\rangle$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \leftrightarrow |1-1\rangle$$

Воспользуемся частным случаем тензора второго ранга:

$$\left(-\frac{1}{\sqrt{2}}D_+\right)\left(-\frac{1}{\sqrt{2}}F_+\right) = \frac{1}{2}\left(D_1F_1 + iD_1F_2 + iD_2F_1 - D_2F_2\right) \tag{19.6}$$

Получили объеке с максимально возможным числом m. Перепишем в общем случае в терминах тензора C:

$$\frac{1}{2}(C_{11} + iC_{12} + iC_{21} - C_{22}) = \frac{1}{2}C_{++} \tag{19.7}$$

Эта конструкция является аналогом старшего вектора с моментом, равным двум :

$$\frac{1}{2}(C_{11} + iC_{12} + iC_{21} - C_{22}) \leftrightarrow |l = 2m = 2\rangle \tag{19.8}$$

Дома вывести формулы для всех матричных элементов неприводимого тензора (18.7).Начать со следующего элемента:

$$\frac{1}{2}C_{++}\,|ll\rangle = p_l\,|l + 2l + 2\rangle \tag{19.9}$$

Аналог теоремы Вигнера–Эккарта

Рассмотрим усеченный аналог теоремы Вигнера–Эккарта. Пусть есть какой-то симметричный тензор второго ранга

$$C_{ij} = C_{ji} \tag{19.10}$$

Так как он симметричный, нет компоненты l=1. Присутствуют только компоненты l=0 и l=2 так как вектор – антисимметричная часть тензора.

Поскольку матричные элементы тензора C_{ij} будут состоять из коэффициентов Клебша-Гордана, а матричные элементы другого тензора, составленного, например, из самих компонент момента, будут тоже содержать только коэффициенты Клебша-Гордана, отсюда вытекает следующее выражение:

$$\langle lm'|\,C_{ij}\,|lm\rangle = f(l)\,\langle lm'|\,l_il_i + l_jl_i - \frac{2}{3}\delta_{ij}l^2\,|lm\rangle + g(l)\,\langle lm'|\,\delta_{ij}l^2\,|lm\rangle \tag{19.11}$$

Где $f(l)\,\langle lm'|\,l_il_i + l_jl_i - \frac{2}{3}\delta_{ij}l^2\,|lm\rangle$ – кусочек симметричного тензора с моментом 2; $g(l)\,\langle lm'|\,\delta_{ij}l^2\,|lm\rangle$ – кусочек, соответствующий скалярному оператору.

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

Трёхмерное движение материальной точки

Теорема: Для того, чтобы построить теорию трехмерного движения материальной точки, надо взять теорию одномерного движения материальной точки и над всеми величинами поставить стрелочки.

Убедимся в верности этого утверждения. $\hat{\vec{x}}$ у оператора координаты теперь три компоненты, потому что оператор координаты и оператор импульса определяются каноническим коммутационным соотношением :

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_i] = i\hbar\delta_{ij} \tag{19.12}$$

В отличие от одномерия, разные компоненты координаты и разные компоненты импульса коммутируют между собой.:

$$\left[\hat{x}_i, \hat{x}_j\right] = 0 \tag{19.13}$$

$$\left[\hat{p}_i, \hat{p}_j\right] = 0 \tag{19.14}$$

Далее проделаем те же операции, что делали для одномерного случая. Строим обобщенный собственный вектор оператора координаты:

$$\hat{\vec{x}}\,|\vec{x}\rangle = \vec{x}\,|\vec{x}\rangle \tag{19.15}$$

Обобщенный собственный вектор оператора импульса:

$$\hat{\vec{p}}\,|\vec{p}\rangle = \vec{p}\,|\vec{p}\rangle \tag{19.16}$$

Определяем волновую функцию в координатном представлении:

$$\psi(\vec{x}) \equiv \langle\vec{x}|\psi\rangle \tag{19.17}$$

Определяем волновую функцию в импульсном представлении:

$$\psi(\vec{p}) = \langle\vec{p}|\psi\rangle \tag{19.18}$$

Найдем произведение двух обобщенных собственных векторов:

$$\langle\vec{x}|\vec{p}\rangle = \frac{e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{x}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \tag{19.19}$$

Переход из одного представления в другое :

$$\psi(\vec{x}) = \int d^3\vec{p}\frac{e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{x}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\psi(\vec{p}) \tag{19.20}$$

Физический смысл волновой функции в координатном представлении и в импульсном представлении – плотность вероятности найти части частицу в точке x или найти частицу с импульсом p соответственно.

Гамильтониан:

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{x}) \tag{19.21}$$

Нестационарное уравнение Шрёдингера:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(t,\vec{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{x}) + V(\vec{x})\psi(\vec{x}) \tag{19.22}$$

Стационарное уравнение Шрёдингера:

$$\Delta\psi(\vec{x}) + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - V(\vec{x})\right)\psi(\vec{x}) = 0 \tag{19.23}$$

Запишем уравнение непрерывности. Пусть плотность вероятности найти частицу в точке x в момент времени t – ρ

$$\rho(t,\vec{x}) = |\psi(t,\vec{x})|^2 \tag{19.24}$$

Трехмерный аналог потока вероятности обозначм буквой $\vec{j}$

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi}\left(\overset{*}{\psi}(t,\vec{x})\vec{\nabla}\psi(t,\vec{x}) - \psi(t,\vec{x})\vec{\nabla}\overset{*}{\psi}(t,\vec{x})\right) \tag{19.25}$$

Тогда запишем дифференциальный и интегральный законы сохранения вероятности:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(t,\vec{x}) = -div\vec{j} \tag{19.26}$$

Для объема V с границей Г получим, что уменьшение вероятности быть в этом объеме – это вытекающая наружу вероятность.

$$\frac{d}{dt}P_v = -\int\limits_{\Gamma}\vec{j}d\vec{s} \tag{19.27}$$

Подставим в эти соотношения решение стационарного уравнения Шрёдингера:

$$\int\limits_{\Gamma}\vec{j}d\vec{s} = 0 \tag{19.28}$$

То есть поток через любую границу Г, ограничивающую некоторую область для любого решения стационарного уравнения Шрёдингера равняется нулю.

Замечание. Этот вывод справедлив не всегда. Он справедлив для самосопряженного Гамильтониана.

Центрально-симметричный потенциал

Пусть потенциал зависит только от модуля x.

$$V(\vec{x}) = V(|\vec{x}|) = V(r) \tag{19.29}$$

Выясним основные свойства спектра. Есть гамильтониан, т.к. ищем уровни энергии системы H, есть интегралы движения, являющиеся компонентами орбитального момента $\vec{l}$. Так как потенциал V(r) инвариантен относительно вращения, значит есть симметрия, что дает три интеграла движения. $\Rightarrow$ Полный набор наблюдаемых H, l^2, l_z, l_x, l_y

Заметим, что интегралы движения l_x, l_y не коммутируют с l_z.

Замечание. Ранее была рассмотрена теоремая о том, что наличие некоммутирующих интегралов движения означает выраждение энергии.

Построим $l_\pm$ из l_x, l_y. $l_\pm$ коммутируют с H, l^2, но не с l_z. Получим, что два эти оператора не могут изменить гамильтониан и l^2, но изменяют l_z на единицу. Вывод: можно записать три квантовых числа

$$\begin{aligned} H &\to n_r \\ l^2 &\to l \\ l_z &\to m \end{aligned}$$

Энергия вырождена по квантовому числу m. Значит, энергия зависит только от n_r и l.

Получим радиальное уравнение Шрёдингера. Ищем волновую функцию в центрально-симметричном потенциале в следующем виде:

$$\psi(\vec{x}) = R(r) \cdot Y_{lm}(\theta, \varphi) \tag{19.30}$$

Где $Y_{lm}(\theta, \varphi) = |lm\rangle$.

Для того, чтобы получить уравнение на радиальную часть волновой функции, подставим ψ в стационарное уравнение Шрёдингера. Получим

$$R''(r) + \frac{r}{r}R'(r) + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - V(r) - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}\right) \cdot R(r) = 0 \tag{19.31}$$

Заметим, что $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}$ – центробежный потенциал. Его физический смысл – кинетическая

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

энергия движения по углам.

Стандартная замена:

$$R(r) = \frac{U(r)}{r} \tag{19.32}$$

Это позволяет свести уравнение к нормальному одномерному уравнению Шрёдингера без первой производной R'. Получаем обычное одномерное уравнение Шрёдингера на половине оси(r>0):

$$U''(r) + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - V(r) - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}\right)U(r) = 0 \tag{19.33}$$

Граничное условие:

$$U(r=0) = 0 \tag{19.34}$$

Получается, что в начале координат стоит бесконечный потенциал. Граничное условие на бесконечном потенциале и есть нулевое граничное условие.

Рассмотрим два случая:

а) $l \neq 0$. **Замечание**: пусть сингулярность в потенциале меньше чем $\frac{1}{r^2}$.

Получаем особую точку при $r \to 0$. При $r \to 0$ получаем два асимптотических решения:

$$U(r) = r^{l+1} \cdot C \tag{19.35}$$

$$U(r) = r^{-l} \cdot C \tag{19.36}$$

Условие квадратичной интегрируемости запретит вторую неправильную асимптотику (18.36), так как должно выполняться следующее условие:

$$\int d^2x\, |\psi(\vec{x})|^2 = 1 \tag{19.37}$$

$$\int r^2 dr \sin\theta d\theta d\varphi\, |Y_{lm}(\theta,\varphi)|^2 \cdot |R(r)|^2 = 1 \tag{19.38}$$

Подставляем сюда (18.32) и получаем

$$\int_0^\infty |U|^2 dr = 1 \tag{19.39}$$

То есть условие нормировки такое же как для одномерного уравнения Шрёдингера.

Видно, что при $l \neq 0$ решение (18.36) не подходит. Соответствующий интеграл будет расходиться в окрестности r=0.

b) l=0 – s-состояние. В данном случае оба решения (18.40) и (18.41) удовлетворяют условию квадратичной интегрируемости.

$$U(r) = r^1 \cdot C \tag{19.40}$$

$$U(r) = r^0 \cdot C \tag{19.41}$$

С точки зрения среднего значения кинетической энерги, константы быть не может. То есть второе решение не подходит. Убедимся в этjv/

$$R(r) = \frac{C}{r} \tag{19.42}$$

$$\psi\vec{x} = \frac{C}{r} \cdot Y_{00} \sim \frac{C}{r} \tag{19.43}$$

Убедимся, что кинетическая энергия при интегрировании по маленькой окрестности нуля даст бесконечность. Среднее значение кинетической энергии:

$$\langle T \rangle = \int\limits_O d^3\vec{x} \frac{C^*}{r} \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta \right) \frac{C}{r}$$

$$= \int d^2\vec{x}|C|^2 \frac{1}{r}\frac{\hbar^2}{2m} \cdot 4\pi \cdot \delta(\vec{x}) = \infty \tag{19.44}$$

Вычисляем вклад в кинетическую энергию по маленькой окрестности начала координат, ибо только там знаем асимптотику волновой функции.

Учитываем, что $\Delta\frac{C}{r} = -4\pi\delta(\vec{x})$

$$\langle T \rangle = \int d^2\vec{x}|C|^2 \frac{1}{r}\frac{\hbar^2}{2m} \cdot 4\pi \cdot \delta(\vec{x}) = \infty \tag{19.45}$$

Именно поэтому второй вариант решения не подходит.

Оценка Бармана Следующее соотношение называется оценкой Бармана. Это оценка сверху на количество уровней при данном орбитальном моменте l. То есть при данном l радиальное уравнение Шрёдингера даст не больше уровней чем следующий интеграл

$$N_l \leqslant \frac{1}{2l+1} \int\limits_0^\infty dr \cdot r \cdot \frac{2m}{\hbar^2}\tilde{V}(r) \tag{19.46}$$

Где $\tilde{V}$ имеет вид

$$\tilde{V}(r) = \begin{cases} 0, & V(r) > 0 \\ \left|V(r)\right|, & V(r) < 0 \end{cases} \tag{19.47}$$

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

Пример: для кулоновского потенциала формально уровней бесконечно много и они сгущаются к нулевой энергии за счет расходимости кулоновского потенциала.

Падение на центр

Возьмем следующий потенциал

$$V(r) = -\frac{A}{r^2} \tag{19.48}$$

Решим радиальное уравнение Шрёдингера.

$$R'' + \frac{2}{r}R' + \left(\frac{2m}{\hbar^2}E - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2}A \cdot \frac{1}{r^2}\right) \cdot R = 0 \tag{19.49}$$

Примем

$$R = \frac{W(r)}{\sqrt{r}} \tag{19.50}$$

Подставим

$$W'' + \frac{1}{r}W' + \left(\begin{cases} k^2 \\ -\varkappa^2 \end{cases} - \frac{1}{r^2}\left(\left(l+\frac{1}{2}\right)^2 - \frac{2m}{\hbar^2}A\right)\right)W = 0 \tag{19.51}$$

Если а если $\left(\left(l+\frac{1}{2}\right)^2 - \frac{2m}{\hbar^2}A\right) < 0$, то $\left(\left(l+\frac{1}{2}\right)^2 - \frac{2m}{\hbar^2}A = -\xi^2\right.$

- $\left(\left(l+\frac{1}{2}\right)^2 - \frac{2m}{\hbar^2}A\right) > 0$, то $\left(\left(l+\frac{1}{2}\right)^2 - \frac{2m}{\hbar^2}A\right) = \nu^2$,
- $\left(\left(l+\frac{1}{2}\right)^2 - \frac{2m}{\hbar^2}A\right) < 0$, то $\left(\left(l+\frac{1}{2}\right)^2 - \frac{2m}{\hbar^2}A\right) = -\xi^2$.

Рассмотрим 4 случая.

1. $\underline{k^2 \text{ и } \nu^2}$
   Допустим, энергия положительна $\rightarrow k^2$ и скобка положительна $\rightarrow \left(\left(l+\frac{1}{2}\right)^2 - \frac{2m}{\hbar^2}A\right) = \nu^2$

   Запишем общее решение соответствующего уравнения Бесселя

   $$W = A \cdot J_\nu(kr) + B \cdot J_{-\nu}(kr) \tag{19.52}$$

2. $\underline{-\kappa^2 \text{ и } \nu^2}$

   $$W = A \cdot I_\nu(\varkappa r) + B \cdot K_\nu(\varkappa r) \tag{19.53}$$

   $I_\nu(\varkappa r) \sim e^{\kappa r}$; $K_\nu(\varkappa r) \sim e^{-\kappa r}$

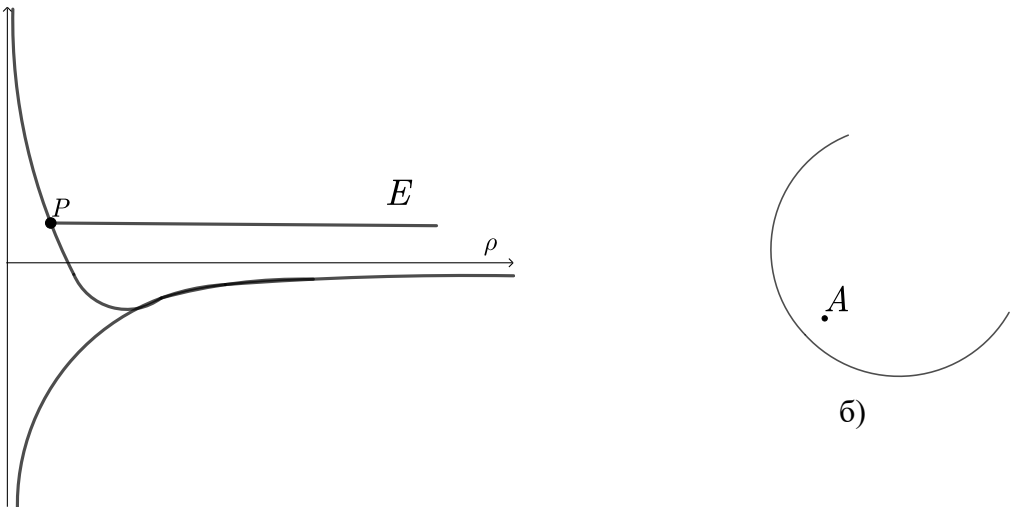
3. в двух оставшихся случаях ню заменится на чисто мнимый индекс $\nu \rightarrow i\xi$. Возникнет функция Бесселя с чисто мнимым индексом.

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

КОНСПЕКТ ПОДГОТОВЛЕН СТУДЕНТАМИ, НЕ ПРОХОДИЛ
ПРОФ РЕДАКТУРУ И МОЖЕТ СОДЕРЖАТЬ ОШИБКИ
СЛЕДИТЕ ЗА ОБНОВЛЕНИЯМИ НА VK.COM/TEACHINMSU

Рассмотрим задачу падения на центр.

Пусть есть потенциал притяжения A, мимо которого летит частица с энергией E. При дотаточно большом орбитальном моменте центробежный потенциал тоже достаточно велик, и частица отразится от него в точке поворота P. В таком случае частица никогда не упадет на центр(см. рис. 18.1). Это случай консервативного движения материальной точки.



а) б)

Рис. 19.1: а) зависимость энергии частицы от расстояния до потенциала притяжения ; б) траектория движения частицы

Если частица летит близко к центру, центробежный потенциал мал. Тогда частица падает в потенциал притяжения. Это тоже консервативное движение системы (см. рис. 18.2).

Замечание. Если поведение системы не консервативно, т.е. частица изменяет свою энергию, то задача о падении на центр теняет смысл.

Вернемся к квантовой теории. Рассмотрим случай ξ, κ. Т.е. энергия больше нуля. В данном случае можем воспользоваться асимптотиками функции Бесселя при $r \to 0$.

$$J_\nu(z)\Big|_{z\to 0} \sim z^\nu \tag{19.54}$$

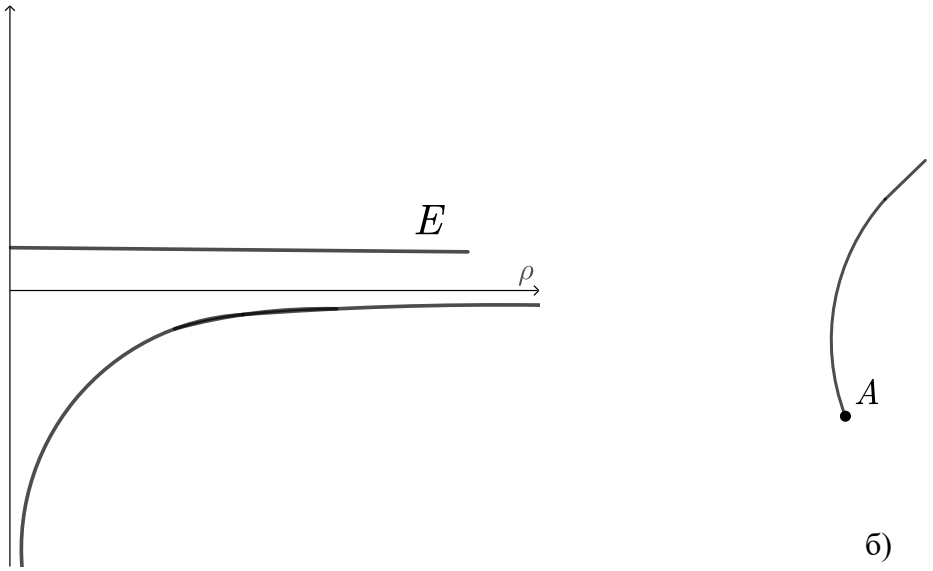
Это значит, что

$$J_{i\xi}(kr) \sim r^{i\xi} \sim e^{i\xi \ln r} \tag{19.55}$$

То есть наблюдаем существенную особую точку в нуле. Наблюдаем осцилляции бесконечной частоты.

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

КОНСПЕКТ ПОДГОТОВЛЕН СТУДЕНТАМИ, НЕ ПРОХОДИЛ
ПРОФ РЕДАКТУРУ И МОЖЕТ СОДЕРЖАТЬ ОШИБКИ
СЛЕДИТЕ ЗА ОБНОВЛЕНИЯМИ НА VK.COM/TEACHINMSU



а) б)

Рис. 19.2: а) зависимость энергии частицы от расстояния до потенциала притяжения ; б) траектория движения частицы

Рассмотрим радиальную часть волновой функции

$$R(r)\Big|_{r\to 0} \sim A\cdot r^{-\frac{1}{2}+i\xi} + B\cdot r^{-\frac{1}{2}-i\xi} \tag{19.56}$$

В области E<0 решением является величина $K_{i\xi}(\alpha r)$. Эта функция экспоненциально убывает на бесконечности при любой κ. Эта квадратично интегрируемая функция с непрерывно меняющейся κ, поэтому здесь не стоит говорить о дискретных уровнях.

В данном случае наблюдаются отличия от спектра эрмитова оператора в связи с тем, что в данном случае эрмитов оператор не является самосопряженным. Все рассмотренные ранее теоремы справедливы именно для самосопряженного оператора.

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

КОНСПЕКТ ПОДГОТОВЛЕН СТУДЕНТАМИ, НЕ ПРОХОДИЛ
ПРОФ РЕДАКТУРУ И МОЖЕТ СОДЕРЖАТЬ ОШИБКИ
СЛЕДИТЕ ЗА ОБНОВЛЕНИЯМИ НА VK.COM/TEACHINMSU

Лекция 20. Уравнение Паули.

Падение на центр

Ранее был рассмотрен пример потенциала, способный победить центробежный потенциал при больших A:

$$-\frac{A}{r^2} \tag{20.1}$$

В таком решением являются функции Бесселя. Далее будет рассмотрен случай $E > 0$,когда индекс функции Бесселя чисто мнимый $i\xi$.

Замечание. Условие на константу A, при котором индекс становится мнимым, в классическом пределе совпадают с условием падения на центр в классической теоретической механике.

Должно было получиться следующее:

$$\frac{2m}{\hbar^2}A > \left(l+\frac{1}{2}\right)^2 \tag{20.2}$$

И следовательно в классическом пределе получаем эквивалентность квадрату орбитального момента.

$$2mA > \hbar^2\left(l+\frac{1}{2}\right)^2 \equiv \vec{L}^2 \tag{20.3}$$

Это условие совпадает с условием падения в центр в теоретической механике.

Было найдено решение радиального уравнения Шрёдингера:

$$R(r) \sim \frac{1}{\sqrt{r}}J_{\pm i\xi}(kr) \tag{20.4}$$

Получаем существенно особую точку, потому что асимптотикой функции бесселя является $\sim r^{\pm i\xi}$. Это означает осцилляции с бесконечной частотой при приближении к $r = 0$.

Замечание Падение на центр – консервативный процесс.

Проверим, можно ли упасть на центр при фиксированной энергии E.

Ранее было доказано следующее утверждение. Благодаря закону сохранения вероятности в трехмерном случае для всякого решения стационарного уравнения Шрёдингера для области V с границей Г (см. рис 20.2) выполняется :

Это справедливо в случае, если поток вероятности $\vec{j}$ вычисляется для произвольного

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

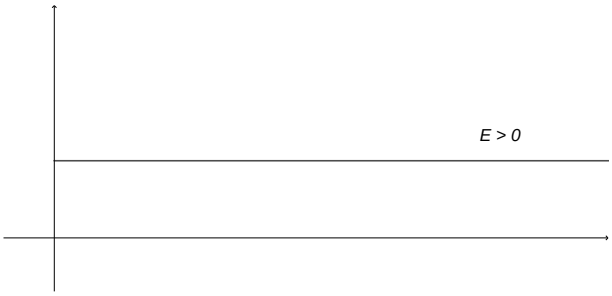


Рис. 20.1: Зависимость энергии от координаты.

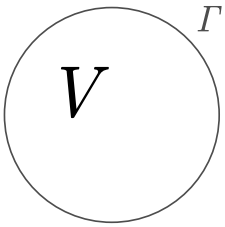


Рис. 20.2: Область рассмотрения.

решения стационарного уравнения Шрёдингера.

Падение на центр – пример нарушения данного весьма очевидного равенства.

Будем интегрировать асимптотику функций Бесселя. В качестве объема V возьмем в окрестности начала координат шарик радиуса r_0, такого, что он достаточно мал, чтобы асимптотикой можно было пользоваться.

Внутри этого шарика и на его поверхности справедливо следующее выражение для волновой функции стационарного уравнения Шрёдингера:

$$\psi(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{2}} J_{i\xi}(kr) \cdot Y_{lm}(\theta, \varphi) \cdot C \tag{20.5}$$

Взяли одно из двух линейно линейно независимых решений с индексом $i\xi$.

Избавляемся от функций Бесселя в силу малости шарика:

$$\psi(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{2}} J_{i\xi}(kr) \cdot Y_{lm}(\theta, \varphi) \cdot C \cdot \left[e^{-\frac{i}{\hbar} Et} \right] = \frac{D}{\sqrt{r}} r^{i\xi} \cdot Y_{lm}(\theta, \varphi) \tag{20.6}$$

Подставим в (1.5).

$$\int_{\Gamma} r_0^2 \sin\theta d\theta d\varphi \cdot \vec{e}_r \cdot \frac{\hbar}{2mi} \cdot \left[\overset{*}{\psi} \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \overset{*}{\psi} \right] \tag{20.7}$$

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

Заметим, что $\vec{\nabla}$ скалярно умножается на $\vec{e}_r$ и остается $\frac{\partial}{\partial r}$.

$$\int_\Gamma r_0^2 \sin\theta d\theta d\varphi \cdot \frac{\hbar}{2mi} \cdot \left[\overset{*}{\psi} \frac{\vec{\partial}}{\partial r} \psi - \psi \frac{\vec{\partial}}{\partial r} \overset{*}{\psi} \right] \Bigg|_{r=r_0} =$$

$$= \int r_0^2 \sin\theta d\theta d\varphi \cdot \frac{\hbar}{2mi} \cdot |D|^2 \cdot |Y_{lm}(\theta,\varphi)|^2 \cdot \left[r^{-\frac{1}{2}-i\xi} \cdot \frac{\partial}{\partial r} r^{-\frac{1}{2}+i\xi} - r^{-\frac{1}{2}+i\xi} \frac{\partial}{\partial r} r^{-\frac{1}{2}-i\xi} \right] =$$

$$= r_0^2 \cdot |D|^2 \cdot \frac{\hbar}{2mi} \left[\left(-\frac{1}{2} + i\xi \right) \cdot r_0^{-2} - \left(-\frac{1}{2} - i\xi \right) \cdot r_0^{-2} \right] = |D|^2 \cdot \frac{\hbar}{2mi} 2i\xi = |D|^2 \cdot \frac{\hbar\xi}{m} \neq 0 \quad (20.8)$$

Это положительный поток вероятности, бегущий наружу сквозь сферу. Сингулярный потенциал испускает частицы, генерирует поток вероятности, который идет наружу.

Если взять второе линейно независимое решение $J_{-i\xi}(kr)$, получился бы результат, отличающийся только знаком. Поток вероятности в этом случае – $-|D|^2 \frac{\hbar\xi}{m}$. Это и есть падение на центр, так как это возможность для вероятности пропасть в начале координат.

Рассмотрим следующую ситуацию. Пусть точка A – притягивающий потенциал. $-\frac{A}{r^2}$. На него напускаем волновой пакет. В результате часть пакета не зааметит потенциал, а для другой части произойдет упругое рассеяние на потенциале, образующее кольцевую волну (шаровой слой). У шарового слоя амплитуда вероятности найти частицу в каждой точке завичит от угла рассеяния θ (см. рис 20.3).

Классическая постановка задачи рассеяния: найти зависимость амплитуды a расходящейся волны от угла θ.

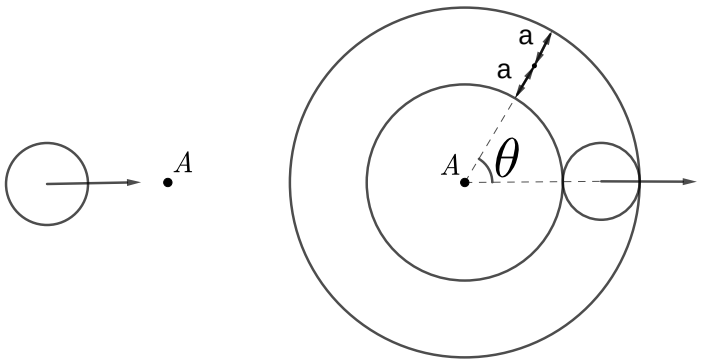


Рис. 20.3: Рассеяние волнового пакета на потенциале.

Данный рисунок справедлив для произвольного потенциала.

В случае падения на центр вероятность найти частицу в пространстве шара до рассеяния была P=1. После столкновения она уменьшилась, ибо в шаровом слое теперь

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

ненулевая вероятность нахождения частиц. В результате интегрирования квадрата модуля соответствующей волновой функции по всему доступному пространству, окажется, что сумма вероятности по всему доступному пространству меньше единицы. Большинство частиц не заметит потенциала, часть рассеится на некоторый ненулевой угол и несколько частиц потеряются в начале координат. То есть на центр упадем тоже с некоторой вероятностью, что и описывается решением, приведенным выше.

Это пример поведения в окрестности центра, благодаря которому часть вероятности может утечь в начало координат. Наблюдается нарушение закона сохранения вероятности из-за того, что данный вещественный потенциал слишком сингулярный.

Движение в магнитном поле

До сих пор мы рассматривали строго нерелятивистскую квантовую теорию.

В магнитном возникает скорость света в виде первой степени. Гамильтониан заряженной частицы в электромагнитном поле записывается как в теоретической механике:

$$H = \frac{\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2}{2m} + e\varphi = \frac{p^2}{2m} - \frac{e}{mc} \cdot \vec{p}\vec{A} + \frac{e}{2mc^2}\vec{A}^2 + e\varphi \tag{20.9}$$

Где $\frac{p^2}{2m}$ – кинетическая энергия; $\frac{e}{mc} \cdot \vec{p}\vec{A}$ – однофотонное слагаемое; $\frac{e}{2mc^2}\vec{A}^2$ – двухфотонное слагаемое; $e\varphi$ – электростатический потенциал.

Мы можем однофотонное слагаемое записать в таком виде, а не $-\frac{e}{2mc}\left(\vec{p}\vec{A} + \vec{A}\vec{p}\right)$. Замнтим, что $\hat{\vec{p}}$ – оператор импульса заряда, а $\vec{A}$ – вектор потенциал $\hat{\vec{A}}(\hat{\vec{x}})$, где в качестве аргумента стоит оператор координаты заряда. Знаем, что импульс и координата не коммутируют.

Значит, выражение (1.10) справедливо, потому что мы работаем в такой калибровке, в которой $div\vec{A} = 0$.

Запишем импульс в координатном представлении :

$$\vec{p} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} \tag{20.10}$$

Поэтому справедливо следующее:

$$\vec{p}\vec{A} - \vec{A}\vec{p} = \frac{\hbar}{i} div \div A = 0 \tag{20.11}$$

Запишем гамильтониан для случая однородного магнитного поля. Пусть поле

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

ориентировано вдоль оси z.

$$H = (0, 0, H_z) \tag{20.12}$$

Вектор-потенциал, который даст такое однородное магнитное поле:

$$\vec{A} = \left(-\frac{y}{2}H_z, \frac{x}{2}H_z, 0\right) \tag{20.13}$$

или

$$\vec{A} = \left(-yH_, 0, 0\right) \tag{20.14}$$

или

$$\vec{A} = (0, xH_z, 0) \tag{20.15}$$

Получили три варианта записи из-за калибровочной свободы.

Рассмотрим случай частицы со спином $\frac{1}{2}$.

В координатном представлении любая волновая функция раскладывается по любому базису $\psi_n(\vec{x})$.

$$\psi(\vec{x}) = \sum C_n \cdot \psi_n(\vec{x}) \tag{20.16}$$

Пусть у частицы есть спиновые степени свободы. Построим для них базис:

$$|\uparrow\rangle : \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad |\downarrow\rangle : \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

У частицы есть степени свободы движения в пространстве и степень свободы – спин. Составная система – это система, базис для которой пишется следующим образом:

$$\psi_n(\vec{x})\,|\uparrow\rangle \quad \psi_n(\vec{x})\,|\downarrow\rangle$$

Две части базисных векторов, каждая из которых состоит из бесконечного количества векторов.

Произвольный вектор Гильбертова пространства состояния частицы со спином $\frac{1}{2}$:

$$|\psi\rangle = \sum_n a_n\psi_n(\vec{x})\,|\uparrow\rangle + b_n\psi_n(x)\,|\downarrow\rangle = \xi(x)\,|\uparrow\rangle + \eta(x)\,|\downarrow\rangle = \begin{pmatrix}\xi(x)\\ \eta(x)\end{pmatrix} \tag{20.17}$$

Заметим, что условия нормировки по отдельности для ξ и η не выполняются.

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

Условие нормировки в данном случае:

$$\sum_n |a_n|^2 + |b_n|^2 = 1 = \int d^3x \left(|\xi(x)|^2 + |\eta(x)|^2 \right) \tag{20.18}$$

В разных местах спин может быть направлен в разные стороны.

Если есть точка x_1: $\eta(x_1) = 0$, то волновая функция в этой точке:

$$\begin{pmatrix} \xi(x_1) \\ 0 \end{pmatrix}$$

То есть в точке x_1 спин $|\uparrow\rangle$ направлен вверх.

Для точки x_2: $\xi(x_2) = 0$, то волновая функция в этой точке:

$$\begin{pmatrix} 0 \\ \eta(x_2) \end{pmatrix}$$

Следовательно, в точке x_1 спин $|\downarrow\rangle$ направлен вниз. В остальных точках спин занимает промежуточные направления.

Замечание. Если есть волновая функция, то есть есть столбец $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$, то спин с достоверностью куда-нибудь направлен, т.е. у него есть направление, которое задается вектором $\vec{n}(\theta, \phi)$. Только в случае смешанных состояний нельзя с достоверностью выбрать направление спина.

Напишем Гамильтониан Паули, который и дает уравнение Паули:

$$H = \frac{\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A} \right)^2}{2m} + e\varphi - 2\mu_0 \vec{H} \cdot \vec{s}, \tag{20.19}$$

где оператор спина $\vec{s} = \frac{1}{2}\vec{\sigma}$, а гиромагнитное отношение для спина – это 2.

Выпишем Гамильтониан заряда в однородном магнитном поле, ориентированном по оси z. Ограничимся однофотонными слагаемыми и возьмём симметричный вариант

векторного потенциала.

$$H = \frac{\left(p_x + \frac{y}{2}H_z \cdot \frac{e}{c}\right)^2}{2m} + \frac{\left(p_y - \frac{x}{2}H_z \cdot \frac{e}{c}\right)^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m} = \frac{1}{2m}p_x y H_z \frac{e}{c} - \frac{1}{2m}p_e x H_z \frac{e}{c} = \\ = -\frac{e\hbar}{2mc}\left[\frac{xp_y - yp_x}{\hbar}\right] \cdot H_z \tag{20.20}$$

Заметим, что $\frac{e\hbar}{2mc} = \mu_0$ – магнетон Бора. Значит, получим следующее

$$H = -\mu_0 l_z \cdot H_z \cdot 1 \tag{20.21}$$

Заметим, что для орбитального момента в отличие от спина гиромагнитное отношение равно 1.

В общем случае однофотонное слагаемое в произвольном однородном магнитном поле имеет вид:

$$-\mu_0 \vec{l}\vec{H} \tag{20.22}$$

Для точного решения задачи о движении заряда в однородном магнитном поле необходимо записать двухфотонные и слагаемые.

Запишем Гамильтониан системы при точном решении задачи:

$$H = -\frac{\vec{p}^2}{2m} - \mu_0 l_z \cdot H_z + \frac{e^2}{8mc^2}H_z^2\left(x^2 + y^2\right) \tag{20.23}$$

Видно, что при выборе векторного потенциала $\vec{A}$ в симметричном виде, получаем гармонический осциллятор $\left(x^2 + y^2\right)$ с добавлением постоянного вклада в энергию $\mu_0 l_z \cdot H_z$ в зависимости от проекции на ось z. Слагаемое $\frac{\vec{p}^2}{2m}$ дает однородное свободное движение по оси z, так как потенциал не зависит от z. Получаем знакомую задачу.

Возьмём несимметричный векторный потенциал $\vec{A}$.

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{\left(p_y - \frac{e}{c}xH_z\right)^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m} \tag{20.24}$$

Проанализируем. В направлении магнитного поля движение осталось свободным. По оси y тоже свободное движение.

Ищем решение в виде:

$$e^{\frac{i}{\hbar}q_z \cdot z} \cdot e^{\frac{i}{\hbar}q_y \cdot y} \cdot f(x) \tag{20.25}$$

$e^{\frac{i}{\hbar}q_z \cdot z}$ и $e^{\frac{i}{\hbar}q_y \cdot y}$ – свободное движение по осям z y соответственно. $f(x)$ – где решение

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

стационарного уравнения Шрёдингера для гармонического осциллятора со смещённым положением равновесия $\left(p_y - \frac{e}{c}xH_z\right)$

Тогда эффективный одномерный гамильтониан:

$$H_{eff} = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{\left(q_y - \frac{e}{c}xH_z\right)^2}{2m} + \frac{q_z^2}{2m} \tag{20.26}$$

Получили равномерное движение по осям z, y и колебания со смещенным положением равновесия по оси x.

Покажем, что полученные результаты не противоречат друг другу. Для симметричного векторного потенциала представим, что волновая функция – это линейная комбинация вращений в точках y_i, где i=1,2,... Если построить такую суперпозицию с

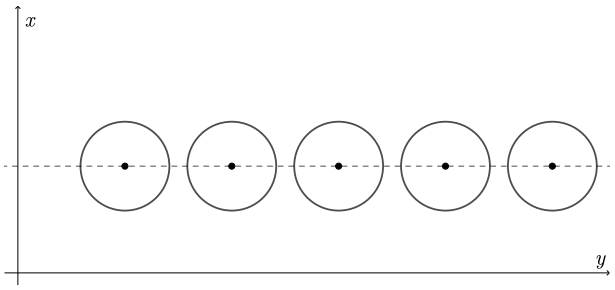


Рис. 20.4: Вращения в точках .

подходящими коэффициентами, можно получить волновую функцию, которая будет являться плоской волной, бегущей в направлении ости y. По оси x колебания сохранятся. Строя линейные комбинации бесконечного количества таких решений, получаем волновую функцию, приведенную выше.

Эффект Ааронова-Бома

Это прямое экспериментальное доказательство того, что вектор-потенциал действует на частицу даже тогда, когда магнитное поле до нее не достает.

Стандартный двухщелевой эксперимент на дифракцию или интерференцию электронов. Между щелями помещают соленоид. Соленоид замечателен тем, что все магнитное поле находится в нем, а снаружи находится только вектор-потенциал.

Найдём интеграл по замкнутому контуру от вектор-потенциала для данной задачи:

$$\oint \vec{A}d\vec{l} = \int \vec{H}s\vec{s} \tag{20.27}$$

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

КОНСПЕКТ ПОДГОТОВЛЕН СТУДЕНТАМИ, НЕ ПРОХОДИЛ
ПРОФ РЕДАКТУРУ И МОЖЕТ СОДЕРЖАТЬ ОШИБКИ
СЛЕДИТЕ ЗА ОБНОВЛЕНИЯМИ НА VK.COM/TEACHINMSU

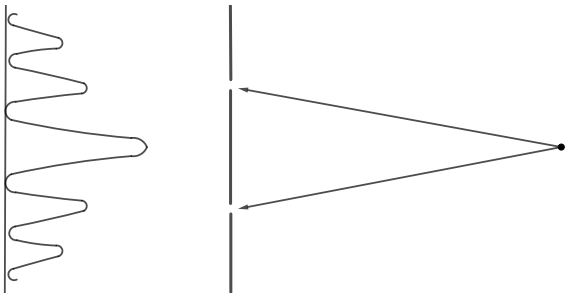


Рис. 20.5: Дифракция электрона на щели.

Благодаря полученной формуле очевидно, что на этом контуре есть ненулевой вектор-потенциал, потому что соответствующий интеграл не равняется нулю, а потоку магнитного поля сквозь соленоид.

Было выяснено, что при ненулевом магнитном поле дифракционная картина сдвигается (см. рис. 19.6).

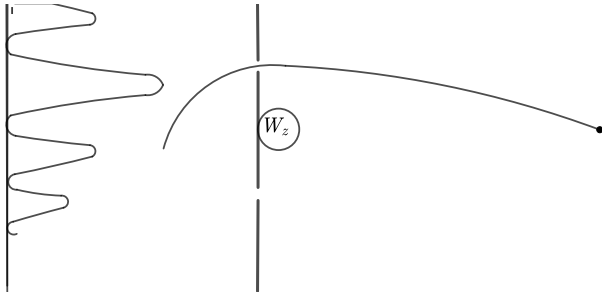


Рис. 20.6: Дифракция электрона на щели при наличии соленоида.

Таким образом было подтверждено, что вектор-потенциал является наблюдаемой физической величиной, а не просто удобной математической конструкцией, которая позволяет вычислять магнитное поле.

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА
teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

ФИЗИЧЕСКИЙ
ФАКУЛЬТЕТ
МГУ ИМЕНИ
М.В. ЛОМОНОСОВА

teach-in

ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ