

# КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ

## ЧАСТЬ I

ПАРФЁНОВ  
КОНСТАНТИН ВЛАДИМИРОВИЧ

---

ФИЗФАК МГУ



ФИЗИЧЕСКИЙ  
ФАКУЛЬТЕТ  
МГУ ИМЕНИ  
М.В. ЛОМОНОСОВА

Парфёнов К.В.  
**Квантовая теория**  
 Семинарские занятия и лекционный материал

## Содержание

<b>Семестр 1</b>	<b>3</b>
Семинар 1 . . . . .	3
Математический аппарат . . . . .	3
Свойства эрмитовых операторов . . . . .	3
Алгебра операторов . . . . .	4
Семинар 2 . . . . .	5
Система аксиом канонического квантования . . . . .	5
Семинар 3 . . . . .	7
Чистые и смешанные состояния, операторы (матрицы) плотности . . . . .	7
Модификация аксиом . . . . .	7
Семинар 4 . . . . .	10
Эволюция квантовой системы. Картина Шрёдингера и Гейзенберга . . . . .	10
Семинар 5 . . . . .	12
Задача о Дираковской яме . . . . .	14
Семинар 6 . . . . .	17
Линейный гармонический осциллятор . . . . .	17
Линейный гармонический осциллятор в термостате с температурой $T$ . . . . .	18
Испускание ядром $\gamma$ -кванта . . . . .	18
Эффект Мессбауэра . . . . .	19
Семинар 8 . . . . .	19
Задача о Дираковской гребёнке . . . . .	20
Семинар 9 . . . . .	22
Семинар 10 . . . . .	22
Семинар 11 . . . . .	26
Сложение моментов. Коэффициенты Клебша–Гордана . . . . .	26
Семинар 12 . . . . .	28
Стационарная теория возмущений . . . . .	28
Семинар 13 . . . . .	30
Квазиклассика и метод Вентцеля–Крамерса–Бриллюэна . . . . .	31
Явление холодной эмиссии . . . . .	33
<b>Семестр 2</b>	<b>35</b>
Семинар 1 . . . . .	35
Теория Дирака . . . . .	35
Примеры решения задач . . . . .	38
Задача о парадоксе Клейна . . . . .	40
Семинар 2 . . . . .	41
Релятивистская ковариантность в теории Дирака . . . . .	41
Клиффордов вакуум . . . . .	43
Нерелятивистское приближение . . . . .	43
Примеры решения задач . . . . .	44

Преобразование Фолди–Ваутхайзена и квазирелятивистское ( $\sim \frac{1}{c^2}$ ) прибли- жение . . . . .	46
Семинар 3 . . . . .	47
Принцип неразличимости тождественных частиц . . . . .	48
Обменные эффекты в двухчастичной системе . . . . .	50
Семинар 5 . . . . .	53
Примеры решения задач . . . . .	56
Семинар 6 . . . . .	59
Статистические методы. Приближение самосогласованного поля. Вариаци- онные методы . . . . .	59
Семинар 7 . . . . .	64
Статистические методы. Самосогласованное поле. Модель Томаса–Ферми . . . . .	64
Примеры решения задач . . . . .	66
Иерархический подход теории возмущений, $LS$ - и $jj$ -связи . . . . .	68
Семинар 8 . . . . .	71
Теория Дирака, обменные эффекты и многочастичные квантовые системы . . . . .	71
Примеры решения задач . . . . .	73
Семинар 9 . . . . .	76
Метод вторичного квантования . . . . .	76
Работа со «сложными» гамильтонианами . . . . .	77
Примеры решения задач . . . . .	79
Семинар 10 . . . . .	81
Квантование свободного электромагнитного поля . . . . .	81
Примеры решения задач . . . . .	84
Элементы квантовой электродинамики . . . . .	86
Семинар 11 . . . . .	89
Теория переходов . . . . .	89
Примеры решения задач . . . . .	91
Переход состояний дискретного спектра . . . . .	93

# Семестр 1

## Семинар 1

Отличие квантовой теории от классической физики: в классической физике выработана некая последовательная система и т.п., в квантовой теории нет единой онтологической картины.

### Математический аппарат

Это теория линейных операторов в гильбертовом пространстве.

Гильбертово пространство  $H$  — бесконечномерное евклидово пространство.

Микрочастицы не являются ни частицами, ни волнами.

$H$  — бесконечномерное сепарабельное полное евклидово линейное пространство над  $\mathbb{C}^1$  (полем комплексных чисел).

Евклидово — в нём определено скалярное произведение и определённая метрика.  $H : \{|\psi\rangle\}$  — кет.  $\langle\psi|$  — бра.  $\langle\psi| \equiv (|\psi\rangle)^+$  — эрмитово сопряжение вектора.

$\langle\psi_1|\psi_2\rangle \in \mathbb{C}^1$ ,  $\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \langle\psi_2|\psi_1\rangle^*$ , выполняется неравенство треугольника.

Полное — любая фундаментальная последовательность сходится.

Сепарабельное — гарантия существования счётного полного ортонормированного базиса (ПОБ):  $\{|\psi_n\rangle\}$ ,  $n \in \mathcal{N} : \forall |\psi\rangle \in H : |\psi\rangle = \sum_{n \in \mathcal{N}} \langle\psi_n|\psi\rangle \cdot |\psi_n\rangle$ .

Существует также представление вида:  $|\psi\rangle = \int_{V_1}^{V_2} \partial V \langle\psi_V|\psi\rangle |\psi_V\rangle$ .

$\hat{F}|\psi\rangle = |\tilde{\psi}\rangle \in H$ , оператор  $\hat{F}$  действует на  $\psi$ ; т.к. переводит в  $H$ , то это тоже в гильбертовом пространстве.

Эрмитово сопряжение:  $\hat{F} \longrightarrow \hat{F}^+$  — соответствие.  $\langle\psi_1|\hat{F}\psi_2\rangle = \langle\psi_2|\hat{F}^+\psi_1\rangle^*$ .

Если есть ПОБ:  $\{|\psi_n\rangle\} : \hat{F} \longleftrightarrow \hat{F}_{nv} = \langle\psi_n|\hat{F}\psi_n\rangle$ ,  $((F^+)_{nv'} = F_{H'H})$ ,  $\hat{F}^+ = \hat{F}$  — эрмитов оператор.

### Свойства эрмитовых операторов

$$\hat{F}|\psi_1\rangle = f|\psi_1\rangle$$

1) Собственные значения вещественные:  $f \in \mathbb{R}'$ .

2) Если  $f_1 \neq f_2$ , то  $\langle\psi_{f_1}|\psi_{f_2}\rangle = 0$  — ортогональны.

3) Для любого эрмитова оператора система его собственных векторов  $\{|\psi_F\rangle\}$  полна в  $H$  ( $\implies \exists$  ПОБ из  $|\psi_F\rangle$ ).

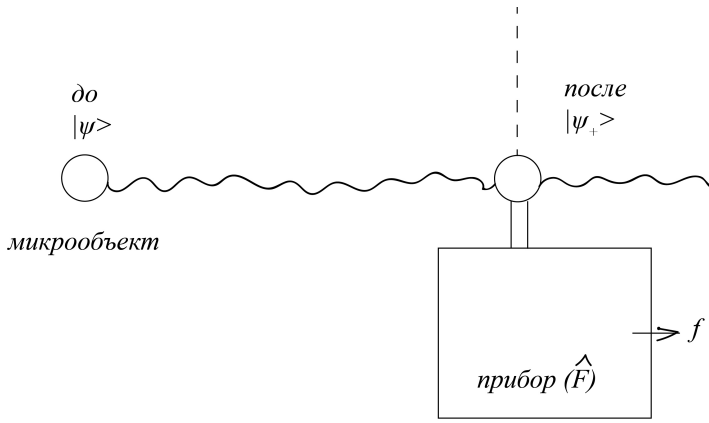
4) Два эрмитовых оператора  $\hat{F}$  и  $\hat{G}$  имеют общую полную систему собственных векторов тогда и только тогда, когда их коммутатор  $[\hat{F}, \hat{G}] = 0 \implies \hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F} = 0$ .

«Чистые» состояния микрообъекта  $\longleftrightarrow |\psi\rangle \in H$ , причём ( $\| |\psi\rangle \| = 1$  — единичная норма вектора) — «каждому состоянию отвечает вектор с единичной нормой».

Измерительная процедура  $\longleftrightarrow \hat{F}$  (эрмитова оператора в  $H$ ).

Взаимодействие между прибором и частицей. «Микрообъект в определённом состоянии» — идеальное измерение.





Некоммутирующие — одновременно неизмеримые величины.

Коммутирующие — одновременно измеримые.

## Алгебра операторов

Алгебра — правила работы с операторами.

Если есть функция  $f(x)$ , разложимая в ряд Тейлора в некоторой окрестности  $x = 0$ , то можем определить  $f(\hat{A}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} \hat{A}^n$ ,  $A \rightarrow A^{-1} : \hat{A} \cdot \hat{A}^{-1} = \hat{A}^{-1} \hat{A} = 1$ .

Пример.  $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C} \neq 0$ ,  $[\hat{A}, \hat{C}] = [\hat{B}, \hat{C}] = 0$  — пара операторов, коммутирующих со своим коммутатором.

Если есть  $[\hat{A}, f(\hat{B})] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} [\hat{A}, \hat{B}^n]$  (1), то

$$\begin{aligned} [\hat{A}, \hat{B}^n] &= \hat{A}\hat{B}^n - \hat{B}^n\hat{A} = \hat{A}\hat{B}^n - \hat{B}\hat{A}\hat{B}^{n-1} + \hat{B}\hat{A}\hat{B}^{n-1} - \hat{B}^n\hat{A} = \{\text{перезгруппируем}\} = \\ &= (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\hat{B}^{n-1} + \hat{B}(\hat{A}\hat{B}^{n-1} - \hat{B}^{n-1}\hat{A}) = i\hat{C}\hat{B}^{n-1} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{B}^{n-1}] = \{\text{рекуррентное}\} = \\ &= 2i\hat{C}\hat{B}^{n-1} + \hat{B}^2[\hat{A}, \hat{B}^{n-2}] = \dots = ni\hat{C}\hat{B}^{n-1}. \end{aligned}$$

Подставим в (1), получим:  $[\hat{A}, f(\hat{B})] = i\hat{C} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} n\hat{B}^{n-1}$ .

Вывод:  $[\hat{A}, f(\hat{B})] = i\hat{C}f'(\hat{B})$ .

$f'$  — производная.

Пример 1.  $[\hat{A}, \cos(\omega\hat{B})] = -i\omega\hat{C}\sin(\omega\hat{B})$  и т.д.

Пример 2. Для тех же  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  выразить  $\exp^{\hat{A}+\hat{B}}$  через  $\exp^{\hat{A}}$  и  $\exp^{\hat{B}}$ .

Определение.  $x$  — вещественное число;  $x \in \mathcal{R}$ ,  $\hat{F}(x) \equiv \exp^{x(\hat{A}+\hat{B})} \cdot \exp^{-x\hat{B}} \cdot \exp^{-x\hat{A}}$ .

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{F}}{dx} &= \{\text{пропустим}\} = \exp^{x(\hat{A}+\hat{B})} \cdot (\hat{A}+\hat{B}) \cdot \exp^{-x\hat{B}} \cdot \exp^{-x\hat{A}} + \exp^{x(\hat{A}+\hat{B})} \cdot \exp^{-x\hat{B}} \cdot (-\hat{B}) \cdot \exp^{-x\hat{A}} + \\ &+ \exp^{x(\hat{A}+\hat{B})} \cdot \exp^{-x\hat{B}} \cdot (-\hat{A}) \cdot \exp^{-x\hat{A}} = \exp^{x(\hat{A}+\hat{B})} [\hat{A}\exp^{-x\hat{B}} - \exp^{-x\hat{B}}\hat{A}] \exp^{-x\hat{A}} = -xi\hat{C}\hat{F}(x). \end{aligned}$$

$$\hat{F}(0) = 1 \implies \hat{F}(x) = \exp^{-\frac{i}{2}x^2\hat{C}},$$

$$x = 1 : \exp^{\hat{A}+\hat{B}} \exp^{-\hat{B}} \exp^{-\hat{A}} = \exp^{-\frac{i}{2}\hat{C}} \exp^{\hat{A}} \exp^{\hat{B}}.$$

$$\boxed{\exp^{\hat{A}+\hat{B}} = \exp^{\hat{A}} \exp^{\hat{B}} \exp^{-\frac{i}{2}\hat{C}}}$$

## Семинар 2

1. Пример  $H$ .

$$L_2 : \left\{ \psi(x) : \psi \in \mathcal{C}^1, x \in \mathcal{R}. \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_1^*(x) \psi_2(x), \text{ требуем } \int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi(x)|^2 < \infty \right\}.$$

$l_2$  — пространство комплексных последовательностей  $\{C_n\}$ :  $n \in \mathcal{N}$ ,  $C_n \in \mathcal{C}^1$ ,  $\begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ C_3 \end{pmatrix}$ ,

$$\langle C_I | C_{II} \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} C_{I_n}^+ C_{II_n}, \quad \psi(x) \sum_n C_n \psi_n(x).$$

2.  $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$ ,  $\hat{p}_x$  — проекция.

$$\hat{x}\hat{p}_x\psi(x) = \hat{x} \left( -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) = -i\hbar x \frac{\partial \psi}{\partial x}, \quad \hat{p}_x \hat{x} \psi(x) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (x\psi) = -i\hbar \psi - i\hbar x \frac{\partial \psi}{\partial x}.$$

Вычтем и получим  $i\hbar$ .

3.  $\hat{T}x(a) = \exp^{-\frac{i}{\hbar} a \hat{p}_x}$ .

$$\exp^{\frac{i}{\hbar} a \hat{p}_x} \psi(x) \equiv \exp^{a \frac{d}{dx}} \psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{d^n \psi}{dx^n}(x) a^n = \psi(x+a) \text{ — Тейлор, } \hat{T}_x(a) \cdot \psi(x) = \psi(x+a).$$

## Система аксиом канонического квантования

A1 («о состояниях»): «чистому» состоянию (замкнутой) квантовой системы соответствует (с точностью до выбора начальной фазы  $\exp^{i\alpha}$ ) вектор  $|\psi\rangle \in H$ , нормированный на единицу:  $\langle \psi | \psi \rangle = 1$ .

A2 («об измерениях»): наблюдаемым соответствуют эрмитовы операторы в  $H$ ; измерение наблюдаемой  $\hat{F}$  в состоянии  $|\psi\rangle$  может выдать только одно из собственных значений  $f$  оператора  $\hat{F}$  с вероятностью  $w_f = |\langle \psi_f | \psi \rangle|^2$ .

Следствие: среднее значение  $\hat{F}$  в состоянии  $\psi$ :  $\hat{F}_\psi \equiv \sum_f w_f f = \langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle$ ,

$$(\hat{F} - \hat{F}_\psi)^2_\psi = P_\psi \hat{F}^2 = \langle \psi | \hat{F}^2 | \psi \rangle - (\langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle)^2.$$

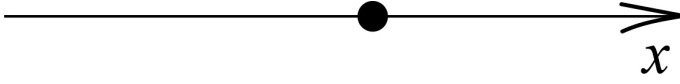
A3 («соответствия»): наблюдаемой, имеющей классический аналог  $F_{\kappa\lambda}(x, p_x, t)$  соответствует оператор  $\hat{F} = F_{\kappa\lambda}(\hat{x}, \hat{p}_x, t)$ , где  $\hat{x}$  и  $\hat{p}_x$  — линейные эрмитовы операторы, удовлетворяющие  $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$  — каноническое коммутационное соотношение.

A4 («об эволюции»): эволюция квантовой системы описывается соотношениями картины Шредингера (Гейзенберга, Дирака, ...).

Рассмотрим в качестве примера квантовую систему с одной степенью свободы и одной наблюдаемой  $\hat{F}$  с невырожденным спектром:  $\hat{F}|f\rangle = f|f\rangle = \{ |f\rangle \}$  — ПОБ в  $H$ .

$$\forall |\psi\rangle (f) = \sum_f \langle f | \psi \rangle |f\rangle, \quad f \in \{\text{спектр } \hat{F}\}, \quad \psi \in \mathcal{C}^1. \quad \psi(f) \text{ — есть волновая функция}$$

состояния  $|\psi\rangle$  в  $f$ -представлении.



$$\hat{x}|x = x|>, x \in \mathcal{R}'.$$

По определению  $\psi(x) \equiv \langle x|\psi \rangle$ . A2  $\implies |\psi(x)|^2 = |\langle x|\psi \rangle|^2$ .

Например,  $\hat{p}_x|p \rangle = p|p \rangle$ ,  $p \in \mathcal{R}'$ .  $\tilde{\psi}(p) = \langle p|\psi \rangle$ .

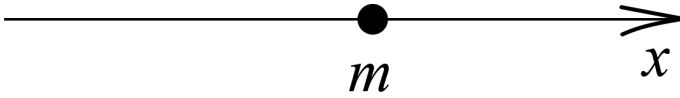
$$\psi_p(x) \equiv \langle x|p \rangle: \hat{x}|\psi \rangle = |\hat{\psi} \rangle \longrightarrow \hat{x}\psi(x) = \tilde{\psi}(x) = \langle x|\tilde{\psi} \rangle = \langle x|\hat{x}|\psi \rangle = x \langle x|\psi \rangle = x\psi(x)$$

— любой оператор в сообществе представляет действие как умножение функции на аргумент.

$$\hat{p}_x: [\hat{x}, \hat{p}_x]\psi(x) = i\hbar\psi(x), \hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, -i\hbar\frac{\partial\psi_p}{\partial x} = p\psi_p \implies \psi_p = \text{const} \cdot \exp\frac{ipx}{\hbar}.$$

$$\langle \psi_p|\psi_{p'} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_p^*(x)\psi_{p'}(x) = \delta(p' - p), \psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\frac{ipx}{\hbar}.$$

Пример.



$$U(x) = U_0 \cos\left(\frac{x}{a}\right).$$

$\hat{H}$  (в  $x$ - и  $p$ -представлениях):  $\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + U(\hat{x})$ .

В  $x$ -представлении (координатном):  $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U_0 \cos\left(\frac{x}{a}\right)$ .

Собственные значения и собственные функции:  $\hat{H}\psi_E = E\psi_E$ .

В  $p$ -представлении:  $\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + U_0 \cos\left(\frac{1}{a}i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)$ ,

$$\cos\left(\frac{i\hbar}{a}\frac{\partial}{\partial p}\right) = \frac{1}{2} \left[ \exp\frac{\hbar}{a}\frac{\partial}{\partial p} + \exp^{-\frac{\hbar}{a}\frac{\partial}{\partial p}} \right] = \frac{1}{2} \left[ T_p\left(\frac{\hbar}{a}\right) + T_p\left(-\frac{\hbar}{a}\right) \right],$$

$$T_p(q)\tilde{\psi}(p) = \tilde{\psi}(p+q), \hat{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{U_0}{2} \left[ \hat{T}_p\left(\frac{\hbar}{a}\right) + \hat{T}_p\left(-\frac{\hbar}{a}\right) \right],$$

$$\left(E - \frac{p^2}{2m}\right)\tilde{\psi}(p) = \frac{U_0}{2} \left[ \tilde{\psi}\left(p + \frac{\hbar}{a}\right) + \tilde{\psi}\left(p - \frac{\hbar}{a}\right) \right]$$

— линейное квазилокальное уравнение.

Для незамкнутой квантовой системы можно строить её описание, проводя усреднение по влиянию неконтролируемых внешних факторов. В этом случае теряется возможность сопоставления состояниям системы векторов состояний (волновых функций) — от «чистых» состояний необходимо перейти к «смешанным», которым сопоставляются операторы плотности. Эти операторы можно определить, задав для них следующий набор свойств:

- эрмитовость:  $\hat{\rho}^+ = \hat{\rho}$ ;
- нормировка:  $Tr(\hat{\rho}) = 1$ ;
- неотриц. опред.:  $\forall |\psi \rangle: \langle \psi|\hat{\rho}|\psi \rangle \geq 0$ ;
- $Tr(\hat{\rho}^2) < \infty$ .

Для чистых состояний соответствующий оператор плотности является проектором на вектор состояния и удовлетворяет требованию:  $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$ . Оператор плотности смешанного

состояния может быть представлен в виде комбинации проекторов на векторы некоторого набора состояний с весовыми коэффициентами, имеющими смысл вероятностей того, что результат измерения в смешанном состоянии будет совпадать с результатом измерения в соответствующем чистом состоянии.

Средние значения наблюдаемой в смешанном состоянии вычисляются по формуле:  
 $\bar{F}_\rho = \text{Tr}(\hat{\rho} \cdot \hat{F})$ .

## Семинар 3

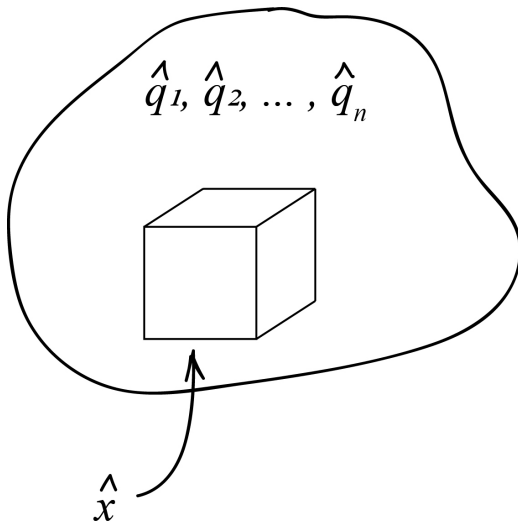
### Чистые и смешанные состояния, операторы (матрицы) плотности

Чистое состояние — вектор в  $H$ .

Смешанное — учёт неконтролируемых внешних факторов.

Три типовых определения оператора плоскости:

*Определение 1* (в духе Ландау). Рассмотрим замкнутую физическую систему, внутри — подсистема.



Существует волновая функция  
 $\psi(xq_1 \dots q_n), \rho(x, x') \equiv \int dq_1, \dots, dq_n,$   
 $\psi(xq_1 \dots q_n) \psi^*(x', q_1 \dots q_n).$

*Определение 2* (в духе Фока). Оператор плоскости  $\hat{\rho} = \sum_n w_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n|$ ,

$\langle \psi_n | \psi'_n \rangle = \delta_{nn'}$ ,  $w_n \geq 0$ ,  $\sum_n w_n = 1$ . Т.е. смешанное состояние (это  $\hat{\rho}$ ) есть некогерентная смесь чистых состояний  $|\psi_n\rangle$  с весами  $w_n$ .

*Определение 3* (наиболее распространённое, «обычное»). Смешанные состояния описываются оператором плоскости  $\hat{\rho}$ :

1.  $\hat{\rho}^+ = \hat{\rho}$  (эрмитов).
2. Его след равен 1,  $\text{Tr}(\hat{\rho}) = 1$ .
3.  $\forall |\psi\rangle \langle \psi | \hat{\rho} | \psi \rangle \geq 0$  — вещественное неотрицательное число.
4.  $\text{Tr}(\hat{\rho}^2) < \infty$  (следствие 1 и 2) — след оператора  $\hat{\rho}^2$  конечен.

### Модификация аксиом

(A1 о состоянии)  $\rightarrow$  (A1'). Состояниям квантовой системы отвечают операторы плотности  $\hat{\rho}$ , определённые в  $H$  (гильбертовом пространстве чистых состояний, если бы не неконтролируемые внешние влияния) любым из определений 1–3.

(A2 об измерении)  $\rightarrow$  (A2'). Измерение наблюдаемой  $\hat{F}$  в состоянии  $\hat{\rho}$  может иметь результатом только  $f \in \{\text{спектру } \hat{F}\}$  с вероятностью  $w_f = \langle \psi_f | \hat{\rho} | \psi_f \rangle$ .

Следствие:  $\hat{F}_\rho = Tr(\hat{\rho}\hat{f})$ .

$\hat{\rho}$  — чистое состояние, если  $\psi(x, q_1, \dots, q_n) = \Phi(x) \cdot \Phi(q_1, \dots, q_n) \implies \boxed{\rho(x, \hat{x}) = \Phi(x)\Phi^x(x)}$   
— то это чистое состояние.

Эквивалент:  $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$  — не является проектором.

Эквивалент: если  $\hat{\rho}$  — не проектор  $\implies$  одно приектир. = два = три и т.д.:  $\boxed{\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}}$  — критерий чистоты состояний.

Пример. Есть  $\hat{F}|n\rangle = f_n|n\rangle$ ,  $\{|n\rangle\}$  — ПОБ. В этом базисе есть:

$$\hat{\rho} = \frac{1}{4}|1\rangle\langle 1| + \frac{i}{4}|1\rangle\langle 2| - \frac{i}{4}|2\rangle\langle 1| + \frac{3}{4}|2\rangle\langle 2|.$$

$$n = 1, 2, 3, \dots, \rho_{nn'} = \begin{pmatrix} \frac{i}{4} & \frac{i}{4} & \emptyset \\ -\frac{i}{4} & \frac{i}{4} & \emptyset \\ \emptyset & \emptyset & \emptyset \end{pmatrix}, \bar{F}_\rho, D_\rho F - ?$$

$$\bar{F}_\rho = Tr(\hat{\rho}\hat{F}) = Tr\left(\begin{pmatrix} \frac{1}{4} & \frac{i}{4} \\ -\frac{i}{4} & \frac{3}{4} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} f_1 & \emptyset \\ \emptyset & f_2 \end{pmatrix}\right) = Tr\begin{pmatrix} \frac{1}{4}f_1 & \\ & \frac{3}{4}f_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{4}f_1 + \frac{3}{4}f_2,$$

вероятность·значение+вероятность·значение и т.д.

Дисперсия:

$$D_\rho F = \overline{F_\rho^2} - \overline{F}_\rho^2 = \frac{1}{4}f_1^2 + \frac{3}{4}f_2^2 - \left(\frac{1}{4}f_1 + \frac{3}{4}f_2\right)^2 = \frac{3}{16}(f_1^2 - 2f_1f_2 + f_2^2) = \frac{3}{16}(f_1 - f_2)^2.$$

Если  $f_1$  совпадает с  $f_2$  (вырожденное собственное значение), то смешанное состояние — смесь состояний с одним и тем же  $f$ .

Пример 2.1. Рассмотрим чистое состояние одномерной квантовой системы:

$$\psi_{Dp}(x) \equiv \frac{1}{(2\pi D)^{1/4}} \exp^{-\frac{x^2}{4D} + \frac{i}{\hbar}px}, p \in \mathcal{R}', D > \emptyset.$$

Гауссовы волновые пакеты:  $\bar{x}_\psi, \bar{p}_{x\psi}, D_{\psi x}, D_{\psi p_x} - ?$

$$\bar{x} \int_{-\infty}^{+\infty} dx x |\psi_{Dp}|^2 = \emptyset.$$

Дисперсия координаты:

$$D_{\psi x} = \overline{x_\psi^2} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx x^2 |\psi_{Dp}|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} dx x^2 \frac{1}{\sqrt{2\pi D}} \exp^{-\frac{x^2}{2D}} = \left\{ t = \frac{x}{\sqrt{2D}} \right\} = \frac{2D}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dt t^2 \exp^{-t^2} =$$

$$= -\frac{D}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} t d(\exp^{-t^2}) = \frac{D}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \exp^{-t^2} = \frac{D}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\pi} = D.$$

$$\bar{p}_{x\psi} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx = \psi_{Dp}^* (-i\hbar) \frac{d\psi_{Dp}}{dx} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi_{Dp}|^2 \cdot \left( i\hbar \frac{x}{2D} + p \right) = p,$$

комплексная часть = 0, т.к. результат не может быть комплексным.

$$D_{\psi p_x} = \overline{p_{x\psi}^2} - \bar{p}_{x\psi}^2, \bar{p}_{x\psi}^2 = -\hbar^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_{Dp}^* \frac{d^2\psi_{Dp}}{dx^2} = \hbar^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left| \frac{d\psi_{Dp}}{dx} \right|^2 = -\hbar^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left( \frac{d\psi_{Dp}}{dx} \right)^2 =$$

$$= i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi D_p|^2 \cdot \left( \frac{p^2}{\hbar^2} + \frac{x^2}{4D^2} \right) = p^2 + \frac{\hbar^2}{4D^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \cdot |\psi D_p|^2 x^2.$$

Только для нашего гауссового волнового пакета!  $D_\psi x \cdot D_\psi p_x = \frac{\hbar^2}{4}$ .

Гауссов волновой пакет минимизирует соотношение неопределённостей; состояния, которые минимизируют — когерентные.

Пример 2.2. Есть оператор плоскости в  $x$ -представлении.

$$\rho(x, x') = \frac{1}{2\sqrt{2\pi D}} \left( 1 + \frac{xx'}{D} \right) \exp \frac{-x^2 + x'^2}{4D}.$$

$\bar{x}_\rho$ —?  $D_\rho x$ —? Чистое или смешанное состояние—?

$$\bar{x}_\rho = Tr(\hat{p}\hat{x}) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx (\hat{p}\hat{x})(x, x), \quad (\hat{A}\hat{B})(x, x') = \int_{-\infty}^{+\infty} A(x, x'') B(x'', x') dx'',$$

$$\rho(x, x'') x(x'', x) = x \delta(x'' - x), \quad \bar{x}_\rho = \int_{-\infty}^{+\infty} dx x \rho(x, x) = 0, \quad D_\rho x = \bar{x}_\rho^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} dx x^2 \rho(x, x) =$$

$$= \frac{1}{2\sqrt{2\pi D}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx x^2 \left( 1 + \frac{x^2}{D} \right) \exp^{-\frac{x^2}{2D}} = \frac{D}{2} + \frac{1}{2D\sqrt{2\pi D}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx x^4 \exp^{-\frac{x^2}{2D}} =$$

$$= \frac{D}{2} + \underbrace{\frac{3}{2} \frac{1}{\sqrt{2\pi D}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx x^2 \exp^{-\frac{x^2}{2D}}}_{=D} = 2D.$$

Чистое или смешанное—? Вычислим:

$$\rho^2(x, x') = \int_{-\infty}^{+\infty} dx'' \rho(x, x'') \rho(x'', x') = \frac{1}{2\sqrt{2\pi D}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx'' \frac{1}{2\sqrt{2\pi D}} \exp \frac{-x^2 + x'^2}{4D} \exp^{-\frac{x''^2}{2D}} \left( 1 + \frac{xx''}{D} \right) \times$$

$$\times \left( 1 + \frac{x''x'}{D} \right) = \frac{1}{2\sqrt{2\pi D}} \exp \frac{-x^2 + x'^2}{4D} \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx'' \frac{1}{\sqrt{2\pi D}} \exp^{-\frac{x''^2}{2D}} \left( 1 + \underbrace{\frac{(x+x')}{D} x''}_{=\emptyset} + \underbrace{\frac{xx'}{D^2} x''^2}_{=\emptyset} \right) =$$

$$= \frac{1}{2} \underbrace{\frac{1}{2\sqrt{2\pi D}} \exp \frac{-x^2 + x'^2}{2 \cdot 2D}}_{\bar{f}(x, x')} \left( 1 + \frac{xx'}{D} \right),$$

$$\rho^2(x, x') = \frac{1}{2} \rho(x, x') - \rho(x, x') - \text{смешанное.}$$

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \emptyset \\ \emptyset & \frac{1}{2} \end{pmatrix} : \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \emptyset \\ \emptyset & \frac{1}{2} \end{pmatrix}^2 = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & \emptyset \\ \emptyset & \frac{1}{4} \end{pmatrix} \Rightarrow$$

$\Rightarrow \exists$  общие  $\rho(x, x')$ , имеющие такой вид.

## Семинар 4

### Эволюция квантовой системы. Картина Шрёдингера и Гейзенберга

1. Шрёдингер:

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = \hat{H} |\psi\rangle \\ |\psi\rangle_{t_0} = |\psi^{(0)}\rangle \end{cases} \implies |\psi_{III}(t)\rangle, \hat{F}_{III} = F(t, \hat{x}_{III}, \hat{\rho}_{III}), \hat{x}_{III}, \hat{\rho}_{III} = const.$$

2. Гейзенберг:

$$\begin{cases} |\psi\rangle_{\Gamma} = |\psi(0)\rangle, \forall t, \\ \frac{d\hat{F}}{dt} = \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}], \\ \hat{F}(t_0) = \hat{F}(0). \end{cases}$$

Существует унитарное преобразование:  $\hat{U}(t)$  ( $\hat{U}\hat{U}^+ \equiv 1$ ),

$$|\psi_{III}(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi_{\Gamma}\rangle, \hat{F}_{\Gamma} = \hat{U}^+ \hat{F}_{III} \hat{U}, \langle \psi_{III} | \hat{F}_{III} | \psi_{III} \rangle = \langle \psi_{\Gamma} | \hat{U}^+ \hat{F}_{III} \hat{U} | \psi_{\Gamma} \rangle =$$

$$= \langle \psi_{\Gamma} | \hat{F}_{\Gamma} | \psi_{\Gamma} \rangle, \hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2, i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = \hat{H}_1 |\psi\rangle, \frac{d\hat{F}}{dt} = \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_2, \hat{F}].$$

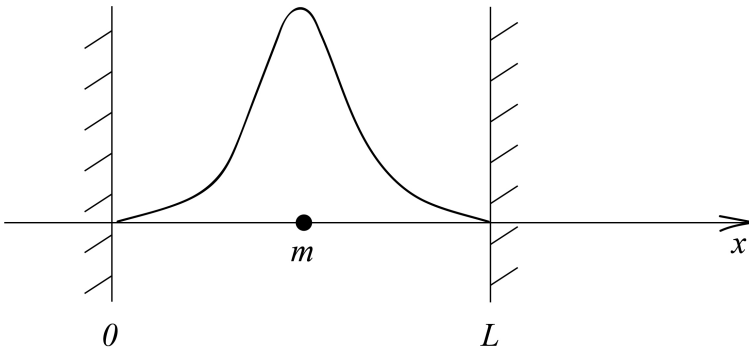
3. Как определить, является ли  $\hat{F}$  интегралом движения: время идёт, а значения остаются неизменными:  $\frac{\partial \hat{F}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}] = 0$ .

Галилеев момент для замкнутого квантового состояния:  $\hat{\vec{K}} = \sum_i m_i \hat{\vec{r}}_i - t \sum_i \hat{\vec{p}}_i$ .

4. Эволюционное уравнение для  $\hat{\rho}$  в формализме Шрёдингера:  $i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = [\hat{H}, \hat{\rho}]$ .

$$\begin{cases} \frac{d\hat{\rho}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}] = \frac{i}{\hbar} [\hat{\rho}, \hat{H}], \\ \hat{\rho}|_{t_0} = \hat{\rho}^{(0)} \implies \hat{\rho}_{III}(t). \end{cases}$$

Пример 1.



$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}.$$

Условие непроницаемости стенок:  $\begin{cases} \forall t \psi(x, t) \equiv 0, \\ \text{для } x \leq 0, x \geq L. \end{cases}$

Начальные условия: пусть  $\psi^{(0)}(x, 0) = \frac{4}{\sqrt{5}L} \sin^3\left(\frac{\pi x}{L}\right)$ .  $\psi(x, t)$ —?

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}, \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0 \implies |\psi(t)\rangle = \sum_n C_n(t) |\psi_n\rangle, |\psi_n\rangle \text{ — собственный вектор } \hat{H} :$$

$$\begin{aligned} \hat{H} |\psi_n\rangle &= E_n |\psi_n\rangle, i\hbar \sum_n \frac{dC_n}{dt} |\psi_n\rangle = \sum_n C_n E_n |\psi_n\rangle, \frac{dC_n}{dt} = -\frac{i}{\hbar} E_n C_n \implies \\ &\implies C_n(t) = C_n(0) \exp^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}, C_n(0) = \langle \psi_n | \psi^{(0)} \rangle. \end{aligned}$$

Таким образом, можем сделать вывод: для любой стационарной системы решение задачи эволюции в представлении Шрёдингера:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n \langle \psi_n | \psi^{(0)} \rangle \exp^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} |\psi_n\rangle, \hat{H} \psi_n = E_n \psi_n \implies \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi n x}{L}\right),$$

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2, C_n = \langle \psi_n | \psi^{(0)} \rangle = \int_0^L dx \psi_n^*(x) \psi^{(0)}, \sin^3 \alpha = \frac{3}{4} \sin(\alpha) - \frac{1}{4} \sin(3\alpha),$$

$$\psi^{(0)}(x, 0) = \frac{3}{\sqrt{5}L} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) - \frac{1}{\sqrt{5}L} \sin\left(\frac{3\pi x}{L}\right),$$

$$C_1 = \frac{3}{\sqrt{10}}, C_3 = \frac{1}{\sqrt{10}}, \text{ остальные } C_n = 0.$$

$$\text{Ответ: } \psi(x, t) = \frac{3}{\sqrt{5}L} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \exp^{-\frac{i\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} t} - \frac{1}{\sqrt{5}L} \sin\left(\frac{3\pi x}{L}\right) \exp^{-\frac{i9\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} t}.$$

В общем случае (Гейзенберг):  $\hat{F}_\Gamma = F_{\mathcal{KL}}(\hat{x}_\Gamma, \hat{p}_{x\Gamma}, t)$ .  $\hat{x}_\Gamma(t)$ ,  $\hat{p}_{x\Gamma}(t)$ —?  
Фундаментальные уравнения Гейзенберга:

$$\begin{cases} \frac{d\hat{x}_\Gamma}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{x}], \hat{x}_\Gamma(0) = \hat{x}^{(0)}, \\ \frac{d\hat{p}_x}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{p}_x], \hat{p}_{x\Gamma}(0) = \hat{p}_x(0). \end{cases}$$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2} \text{ — линейный гармонический осциллятор.}$$

$$[\hat{H}, \hat{x}] = \frac{1}{2m} \underbrace{[\hat{p}_x^2, \hat{x}]}_{=2\hat{p}_x(-i\hbar)} = -\frac{\hbar}{m} \hat{p}_x, \begin{cases} \frac{d\hat{x}}{dt} = \frac{1}{m} \hat{p}_x, \hat{x}(0) = x, \\ \frac{d\hat{p}_x}{dt} = -m\omega^2 \hat{x}, \hat{p}_x(0) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}. \end{cases}$$

$$[\hat{H}, \hat{p}_x] = \frac{m\omega^2}{2} \underbrace{[\hat{x}^2, \hat{p}_x]}_{=2\hat{x}i\hbar} = im\omega^2 \hbar \hat{x}, \frac{d^2 \hat{x}}{dt^2} + \omega^2 \hat{x} = 0, \hat{x}(t) = \hat{A} \cos(\omega t) + \hat{B} \sin(\omega t),$$

$$\hat{p}_x(t) = m \frac{d\hat{x}}{dt} = -m\omega \hat{A} \sin(\omega t) + m\omega \hat{B} \cos(\omega t), x = \hat{A}, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} = m\omega \hat{B}.$$

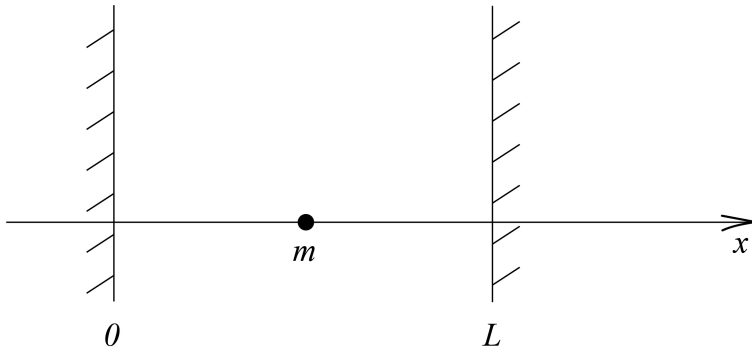
Отсюда выражаем  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$ .

$$\begin{cases} \hat{x}_\Gamma(t) = x \cos(\omega t) - \frac{i\hbar}{m\omega} \sin(\omega t) \frac{\partial}{\partial x}, \\ \hat{p}_{x\Gamma}(t) = -m\omega x \sin(\omega t) - i\hbar \cos(\omega t) \frac{\partial}{\partial x}. \end{cases}$$

Все квантовые системы — незамкнутые.

Пример 3. При  $t = 0$  — смешанные состояния.





$$\begin{aligned} \rho(x, x'', 0) = &= \frac{1}{L} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{\pi x'}{L}\right) \times \\ &\times \left\{ 1 + \frac{i}{2} \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right) - \frac{i}{2} \cos\left(\frac{\pi x'}{L}\right) + \right. \\ &\left. + 4 \cos\left(\frac{\pi x}{2}\right) \cos\left(\frac{\pi x'}{L}\right) \right\}. \end{aligned}$$

$$\rho(x, x', t) - ?$$

Комментарий. Если  $\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0$  (система стационарна) и найдено решение спектральной задачи  $\hat{H}|\psi_m\rangle = E_n|\psi_n\rangle$ , то  $\hat{\rho}^{(0)} = \sum_{nn'} \rho_{nn'}^{(0)} |\psi_n\rangle \langle \psi_{n'}|$ .

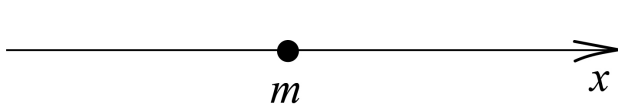
$$\rho_{nn'} \equiv \langle \psi_n | \hat{\rho}^{(0)} | \psi_{n'} \rangle, \quad \hat{\rho}(t) = \sum_{nn'} \langle \psi_n | \hat{\rho}^{(0)} | \psi_{n'} \rangle |\psi_n\rangle \langle \psi_{n'}| \exp\left(\frac{i}{\hbar}(E_{n'} - E_n)t\right),$$

$$\begin{aligned} \rho(x, x', 0) = \frac{1}{2} \psi_1(x) \psi_1^+(x') + \frac{i}{8} \psi_2(x) \psi_1^*(x') - \frac{i}{8} \psi_1(x) \psi_2^*(x') + \frac{1}{2} \psi_2(x) \psi_2^*(x') \Rightarrow \\ \Rightarrow \rho_{nn'} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{i}{8} & 0 & \dots \\ \frac{i}{8} & \frac{1}{2} & 0 & \dots \end{pmatrix} \end{aligned}$$

—эрмитова,  $Tr() = 1$ , неотрицательный определитель, «хорошая матрица».

$$\begin{aligned} \text{Ответ: } \rho(x, x', t) = \frac{1}{L} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{\pi x'}{L}\right) \left\{ 1 + \frac{i}{8} \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right) \exp^{-i \frac{3\pi^2 \hbar}{2mL^2} t} - \right. \\ \left. - \frac{i}{2} \cos\left(\frac{\pi x'}{L}\right) \exp^{i \frac{3\pi^2 \hbar}{2mL^2} t} + 4 \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right) \cos\left(\frac{\pi x'}{L}\right) \right\}. \end{aligned}$$

## Семинар 5



$$U(x) \Rightarrow \left[ \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + U(\hat{x}) \right] |\psi\rangle = E|\psi\rangle.$$

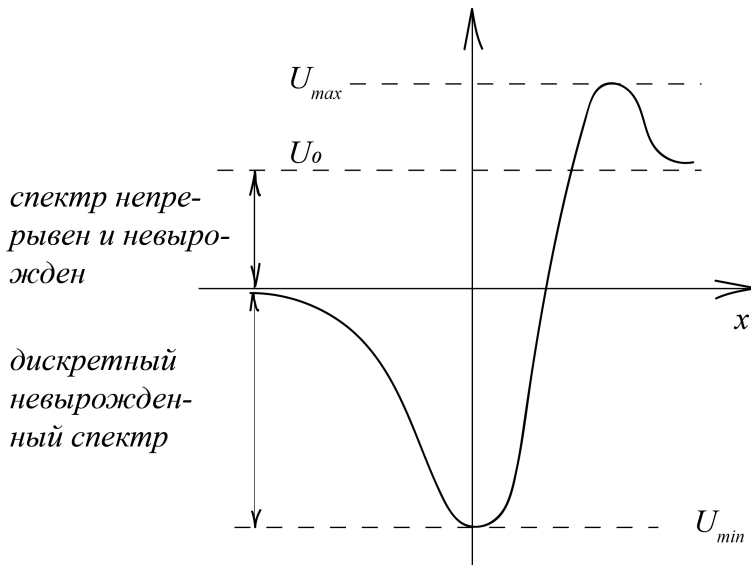
1. Какое из двух представлений ( $x$  и  $p_x$ ) удобнее для  $U^{(1)}(x) = -Fx$ ,  $U^{(2)}(x) = \alpha x^4$ :

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar} [-U(x) + E] \psi = 0,$$

$$U\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial p}\right) \tilde{\psi}(p) = \left(E - \frac{p^2}{2m}\right) \tilde{\psi}(p)$$

— проще для линейной.

2.



$U_{min} < E \leq 0$  — дискретный невырожденный спектр.

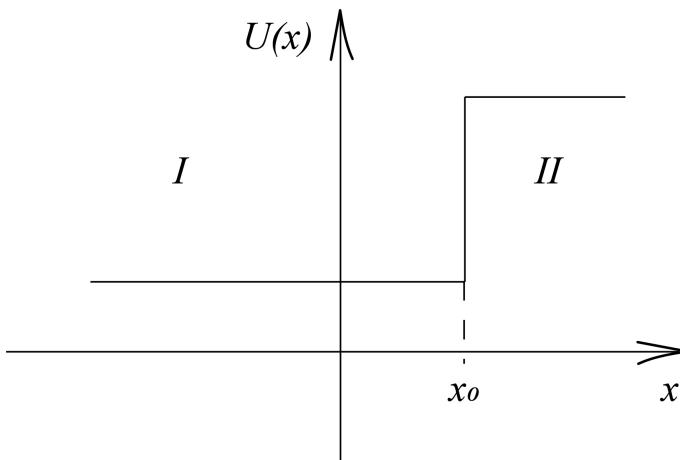
$0 < E \leq U_0$  — непрерывный невырожденный спектр.

$E > U_0$  — спектр непрерывен, двукратно вырожден.

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}[E - U(x)]\psi = 0, \text{ + угловые нормировки для дискретного спектра.}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi|^2 = 1, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_E^* \psi_{E'} = \delta(E' - E).$$

3.

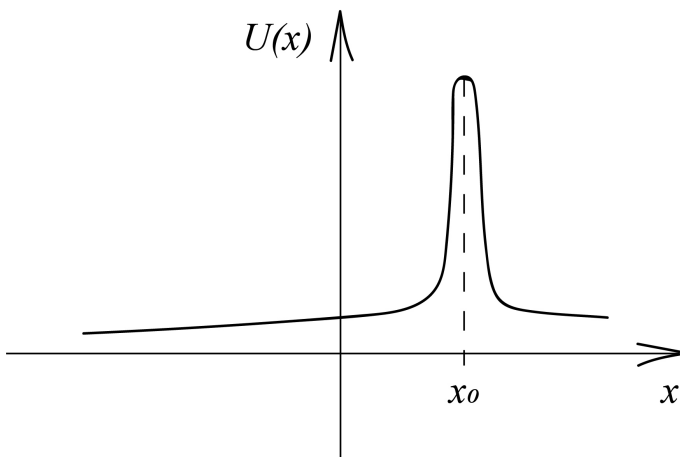


Условия сшивки:

$$\psi(x_0 + 0) = \psi(x_0 - 0),$$

$$\psi'(x_0 + 0) \neq \psi'(x_0 - 0).$$

4.



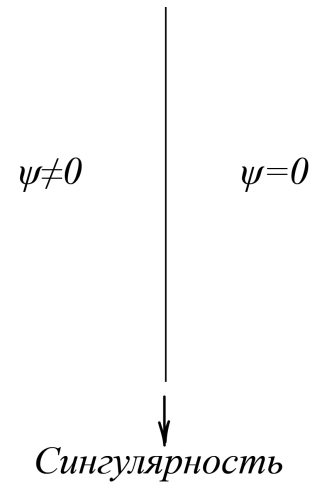
$$\psi(x_0 + 0) = \psi(x_0 - 0),$$

$$\psi'(x_0 + \xi) - \psi'(x_0 - \xi) = \int_{x_0 - \xi}^{x_0 + \xi} \psi''(x) dx =$$

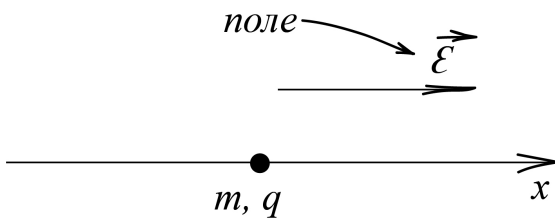
$$= \frac{2m}{\hbar^2} \int_{x_0 - \xi}^{x_0 + \xi} dx [\underbrace{U_{reg}(x)}_{=0} - E + \underbrace{V_0(\delta(x - x_0))}_{=0}] \psi(x),$$

$$\psi'(x_0 + 0) - \psi'(x_0 - 0) = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \psi(x_0).$$

Если неинтегрируемая сингулярность, то:



Пример 1.



$$U(x) = -qEx.$$

В импульсном представлении (непрерывный и невырожденный спектр):

$$\left(\frac{p^2}{2m} - E\right) \tilde{\psi}(p) - q\mathcal{E}\hbar \frac{d\tilde{\psi}}{dp} = 0, \quad \frac{d\tilde{\psi}}{\tilde{\psi}} = \frac{1}{q\mathcal{E}\hbar} \left[E - \frac{p^2}{2m}\right] dp, \quad \tilde{\psi}_E(p) = C \exp^{\frac{i}{q\mathcal{E}\hbar} \left(Ep - \frac{p^3}{6m}\right)},$$

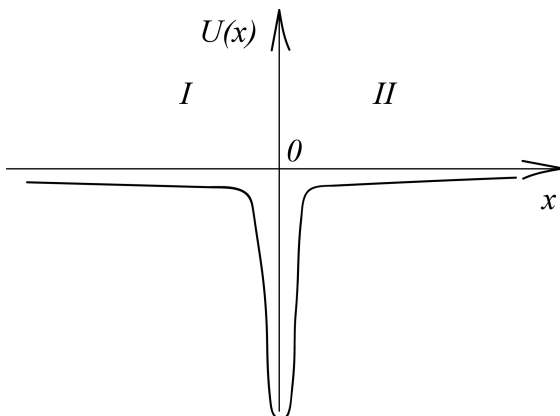
$$\int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}_E^*(p) \tilde{\psi}_{E'}(p) dp = \delta(E - E'), |C^2| \int_{-\infty}^{+\infty} dp \exp^{\frac{i}{q\mathcal{E}\hbar} (E' - E)p} = 2\pi |C^2| \delta\left(\frac{E' - E}{q\mathcal{E}\hbar}\right) =$$

$$= \left\{ \delta(ax) = \frac{1}{a} \delta(x), \int dx \exp^{i\alpha x} = 2\pi \delta(x) \right\} = \underbrace{2\pi q\mathcal{E}\hbar |C^2|}_{=1} \delta(E' - E), \quad C = \frac{1}{\sqrt{2\pi q\mathcal{E}\hbar}}.$$

Окончательно,  $\bar{\psi}_E(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi q\mathcal{E}\hbar}} p^{\frac{i}{q\mathcal{E}\hbar} \left[Ep - \frac{p^3}{6m}\right]}$ ,  $\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp \tilde{\psi}(p) \exp^{\frac{i}{\hbar} px}$  — Фурье-преобразование.

### Задача о Дираковской яме

$U(x) = -V_0\delta(x)$ , бесконечно узкая и бесконечно глубокая яма.



$E < 0$  — дискретный спектр.  
 $E > 0$  — непрерывный спектр,  
 кратность вырождения 2 (т.к. в обе стороны).

a)  $E < 0$ .

$$I (x < 0) : \psi'' + \underbrace{\frac{2mE}{\hbar^2}}_{=-\kappa^2} \psi = 0, \quad \kappa = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar},$$

$$\psi_I(x) = A_I \exp^{\kappa x} + B_I \exp^{-\kappa x}, \quad \psi_I(x) \rightarrow 0, x \rightarrow \infty \Rightarrow B_I = 0, \quad \psi_I(x) = A_I \exp^{\kappa x}.$$

$$II (x > 0) : \psi_{II}(x) = A_{II} \exp^{\kappa x} + B_{II} \exp^{-\kappa x}, \quad \psi_{II}(x) \rightarrow 0, x \rightarrow \infty \Rightarrow A_{II} = 0,$$

$$\text{в области II} : \psi_{II}(x) = B_{II} \exp^{-\kappa x}, \quad \psi_I(0) = \psi_{II}(0) \Rightarrow A_I = B_{II} \equiv N,$$

$$\psi(x) = N \begin{cases} \exp^{\kappa x}, & x < 0 \\ \exp^{-\kappa x}, & x > 0 \end{cases} \equiv N \exp^{-\kappa(x)}, \quad \psi'_{II}(0) - \psi'_I(0) = -\frac{2mV_0}{\hbar^2} \psi(0).$$

$$-\kappa N - \kappa N = -\frac{2mV_0}{\hbar^2} N, \quad N \neq 0 \Rightarrow \kappa = \frac{mV_0}{\hbar^2}, \quad \kappa = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} = \frac{mV_0}{\hbar^2} \Rightarrow E = -\frac{mV_0}{2\hbar^2}$$

— единственный уровень дискретного спектра.

$$V \text{ — из нормировки: } 1 = \int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi|^2 = N^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp^{-2\kappa|x|} = 2N^2 \int_0^{+\infty} dx \exp^{-2\kappa x} = \frac{N^2}{\kappa} = 1$$

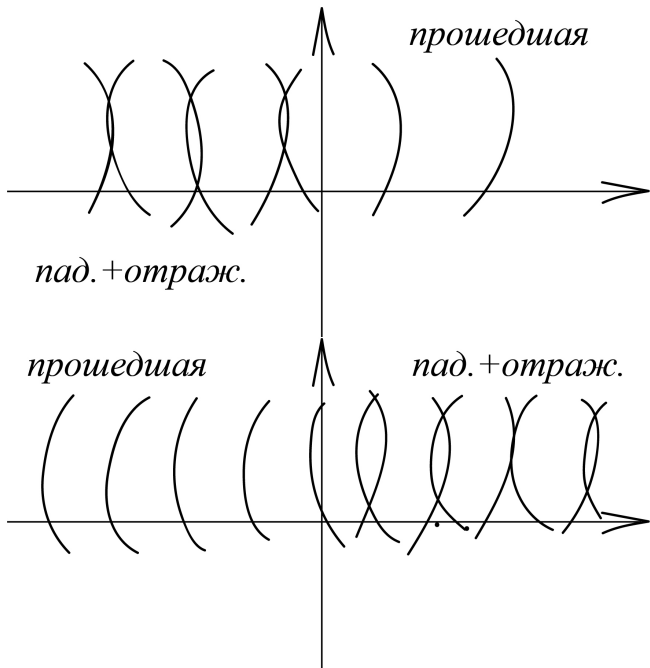
$$\Rightarrow N = \sqrt{\kappa}, \text{ т.е. волновая функция стационарного состояния с } E_0:$$

$$\boxed{\psi_0(x) = \frac{\sqrt{mV_0}}{\hbar} \exp^{-\frac{mV_0}{\hbar^2}(x)}}.$$

б)  $E \geq 0$ .

$$I \text{ и } II : \psi'' + \underbrace{\frac{2mE}{\hbar^2}}_{=k^2} \psi = 0, \quad \psi_{I,II} = A_{I,II} \exp^{ikx} + B_{I,II} \exp^{-ikx}.$$

Два линейно независимых решения —  $\psi_k^{(+)}$  и  $\psi_k^{(-)}$ .



Дополнительное условие:  $\psi_k^{(+)}(B_{II} = 0)$ .

$$\psi_k^{(-)}(A_I = 0).$$

Хорошо сколлимированный пучок — разброс импульса с широкой апертурой.

Для этих решений определим величины:  $R^{(\pm)} \equiv \frac{j^{(omp)}}{j^{(nad)}}$  — коэффициент отражения,  
 $T^{(\pm)} \equiv \frac{j^{(прош)}}{j^{(nad)}}$  — коэффициент прохождения.  $j$  — поток вероятности.

$$j_x = \frac{i\hbar}{2m} \left[ \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} \right], \quad A = A \exp^{ikx} \Rightarrow j_x = \frac{\hbar k}{m} |A|^2,$$

$$R = \left| \frac{A_{omp}}{A_{nad}} \right|^2, \quad T = \left| \frac{A_{прош}}{A_{nad}} \right|^2 \cdot \frac{K_{прош}}{K_{nad}}.$$

Построим  $\psi_k^{(+)}$ :

$$I : \psi_I = A_I \exp^{ikx} + B_I \exp^{-ikx},$$

$$II : \psi_{II} = A_{II} \exp^{ikx}.$$

Сшивки:  $x = 0$ :  $A_I + B_I = A_{II}$ ,

$$ikA_{II} - ik(A_I - B_I) = -\frac{2mV_0}{\hbar^2} A_{II}, \quad A_I - B_I = A_{II} \left( 1 - i \frac{2mV_0}{\hbar^2 k} \right), \quad 2A_I = 2A_{II} \left( 1 - i \frac{2mV_0}{\hbar^2 k} \right).$$

Пусть  $A_I = N \Rightarrow A_{II} = \frac{N}{1 - i \frac{mV_0}{\hbar^2 k}} = \frac{\hbar k}{\hbar^2 k - imV_0} N.$

$$B_I = A_{II} - A_I = \frac{imV_0}{\hbar^2 k - imV_0} N,$$

$$\psi_k^{(+)} = N \begin{cases} \exp^{ikx} + \frac{imV_0}{\hbar^2 k - imV_0} \exp^{ikx}, & x < 0, \\ \frac{\hbar^2 k}{\hbar^2 k - imV_0} \exp^{ikx}, & x > 0. \end{cases}$$

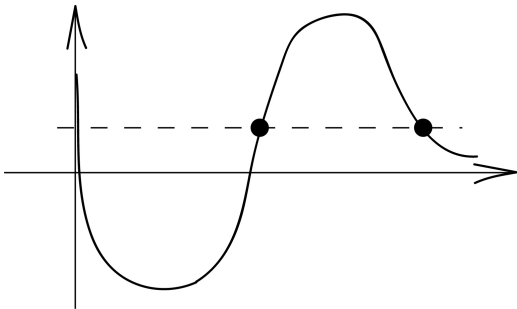
$N$  — из угл. нормировки:  $\int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_k^{(+)*} \psi_k^{(+)} = \delta(k' - k).$

$$R = \frac{m^2 V_0^2}{\hbar^4 k^2 + m^2 V_0^2}, \quad T = \frac{\hbar^4 k^2}{\hbar^4 k^2 + m^2 V_0^2}.$$

$R + T = 1$  всегда.

$$\frac{mV_0^2}{2\hbar^2} = -E_0, \quad \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E, \quad R = -\frac{E_0}{E - E_0}, \quad T = \frac{E}{E - E_0}.$$

Квазистационарный случай:



Есть уровни, где вероятность туннелирования крайне мала — квазидискретные уровни.

## Семинар 6

### Линейный гармонический осциллятор

$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2}$ ,  $\hat{H}|n\rangle = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) |n\rangle$ ,  $n = 0, 1, 2, \dots$  — спектр невырожденный и дискретный.

$$1. \psi_n = \left(\frac{na}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \exp^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} H_n \left(x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right),$$

$$\tilde{\psi}_n(p) = \frac{1}{(\pi\hbar m\omega)^{1/4}} \frac{1}{2^n n!} \exp^{-\frac{p^2}{2m\omega\hbar}} H_n \left(\frac{p}{\sqrt{m\omega\hbar}}\right).$$

$$2. \hat{a} = \frac{m\omega \hat{x} + i\hat{p}_x}{\sqrt{2m\omega\hbar}} = \sqrt{n}|n-1\rangle = \hat{a}|n\rangle, \hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle, [\hat{a}, \hat{a}^+] = 1.$$

$$3. \langle n|\hat{p}_x^2|n\rangle = 2m \langle n|\frac{\hat{p}_x^2}{2m}|n\rangle = \frac{\hbar m\omega}{2}(2n+1), \hat{p}_x = \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} \frac{1}{i}(\hat{a} - \hat{a}^+), \hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^+),$$

$$\langle n|\hat{p}_x^2|n\rangle = \frac{\hbar m\omega}{2} \langle n|\hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a} - \hat{a}^2 - \hat{a}^{+2}|n\rangle = \frac{\hbar m\omega}{2}(2n+1)$$

— теорема Вириала.

Энергетическое представление — представление новых и канонических операторов — выгодно использовать для осциллятора.

Типичная задача.  $t = 0$ :  $|\psi^{(0)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\emptyset\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle$ .  $x(t)$ ,  $D_x(t)$ ,  $\overline{p_x}(t)$ ,  $Dp_x(t)$ ,  $\overline{E}$ ,  $D\overline{E}$ —?

Считаем в картине Шрёдингера:  $|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\emptyset\rangle \exp^{-i\frac{\omega}{2}t} + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle \exp^{-i\frac{3\omega}{2}t}$ .

$\overline{E}$  и  $D\overline{E}$  от  $t$  не зависят.

$$\overline{E} = \underbrace{\frac{1}{2}E_0}_{=\frac{\hbar\omega}{2}} + \underbrace{\frac{1}{2}E_1}_{=\frac{3\hbar\omega}{2}} = \hbar\omega, \overline{E^2} = \frac{1}{2}\left(\frac{\hbar\omega}{2}\right)^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{3\hbar\omega}{2}\right)^2 = \frac{5}{4}\hbar^2\omega^2, D\overline{E} = \overline{E^2} - \overline{E}^2 = \left(\frac{\hbar\omega}{2}\right)^2.$$

$$\overline{x}(t) = \langle \psi(t)|\hat{x}|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \emptyset|\exp^{i\frac{\omega}{2}t} + \frac{1}{\sqrt{2}} \langle 1|\exp^{i\frac{3\omega}{2}t} | \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^+) \times$$

$$\times \left[ \frac{1}{\sqrt{2}}|\emptyset\rangle \exp^{-i\frac{i\omega}{2}t} + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle \exp^{-i\frac{3\omega}{2}t} \right] = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\langle \emptyset|\hat{a}|1\rangle \exp^{-i\omega t} + \langle 1|\hat{a}^+|\emptyset\rangle \exp^{i\omega t}) =$$

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \cos(\omega t).$$

$$\overline{x^2} = \langle \psi(t)|\hat{x}^2|\psi(t)\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \left( \frac{1}{2} \underbrace{\langle \emptyset|\hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a}|\emptyset\rangle}_{=1} + \frac{1}{2} \underbrace{\langle 1|\hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a}|1\rangle}_{=3} \right) = \frac{\hbar}{m\omega}.$$

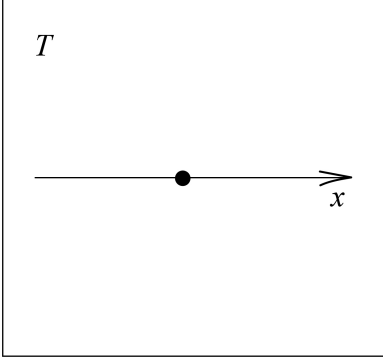
$$\langle n|\hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^+|n\rangle = 2n + 1.$$

$$Dx(t) = \overline{x^2} - \overline{x}^2 = \frac{\hbar}{m\omega} - \frac{\hbar}{2m\omega} \cos^2(\omega t) = \frac{\hbar}{2m\omega} (1 + \sin^2(\omega t)).$$

$$\overline{p_x}(t) = m \frac{d\bar{x}}{dt} = -\sqrt{\frac{\hbar m \omega}{2}} \sin(\omega t), \quad \overline{p_x^2} = \{m = m(t)\} = 2m \frac{1}{2} \langle E \rangle = \hbar m \omega,$$

$$Dp_x(t) = \hbar m \omega - \frac{\hbar m \omega}{2} \sin^2(\omega t) = \frac{\hbar m \omega}{2} (1 + \cos^2(\omega t)).$$

Линейный гармонической осциллятор в термостате с температурой  $T$



$$w_n \sim \exp^{-\frac{E_n}{kT}} C, \quad \sum_{n=0}^{\infty} w_n = 1.$$

Т.е. состояние осциллятора в тепловом равновесии с термостатом:

$$\hat{\rho} = \sum_{n=0}^{\infty} w_n |n\rangle \langle n|, \quad w_n = C \exp^{-\frac{\hbar \omega}{kT} (n + \frac{1}{2})} = \tilde{C} \exp^{-\frac{\hbar \omega}{kT} n}, \quad 1 = \sum_{n=0}^{\infty} w_n = \tilde{C} \sum_{n=0}^{\infty} \left( \exp^{-\frac{\hbar \omega}{kT}} \right)^n =$$

$$= \frac{\tilde{C}}{1 - \exp^{-\frac{\hbar \omega}{kT}}}, \quad w_n = 1 - \exp^{-\frac{\hbar \omega}{kT}} \exp^{-\frac{\hbar \omega}{kT} n}.$$

$$\overline{x_T} = 0, \quad D_{yT} = \overline{x_T^2} = T_+ (\hat{\rho} \hat{x}^2) = \left( 1 - \exp^{-\frac{\hbar \omega}{kT}} \right) \sum_{n=0}^{\infty} \exp^{-\frac{\hbar \omega}{kT} n} \frac{\hbar}{2m\omega} (2n + 1) =$$

$$= \frac{\hbar}{2m\omega} + \frac{\hbar}{m\omega} \left( 1 - \exp^{-\frac{\hbar \omega}{kT}} \right) \sum_{n=1}^{\infty} n \exp^{-\frac{\hbar \omega}{kT} n}, \quad \sum_{n=1}^{\infty} n q^n = q \frac{d}{dq} \left( \sum_{n=0}^{\infty} q^n \right) = \frac{q}{(1 - q)^2}.$$

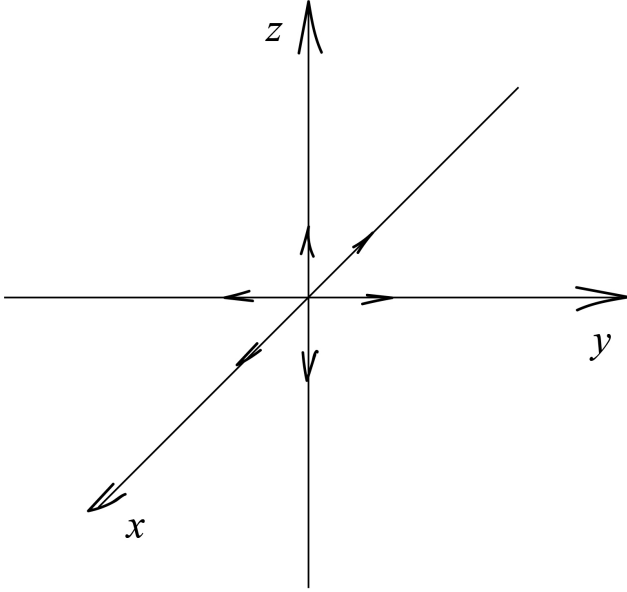
$$D_{xT} = \frac{\hbar}{2m\omega} + \frac{\hbar}{m\omega} \frac{1}{\exp^{\frac{\hbar \omega}{kT}} - 1}.$$

Здесь  $T$  — заданная температура. Видно, что если  $T \rightarrow 0$ , то осцилляторы упадут в основные состояния.

### Испускание ядром $\gamma$ -кванта

$$\Delta E = \varepsilon_j + \frac{p_{\text{я}}^2}{2m_{\text{я}}} = \varepsilon_j + \frac{\varepsilon_j^2}{2m_{\text{я}}c^2}, \quad \varepsilon_j = \underbrace{\Delta E}_{\sim 1 \text{ МэВ}} - \underbrace{\frac{(\Delta E)^2}{2m_{\text{я}}c^2}}_{\sim 100 \text{ эВ}}, \quad \delta E_j \sim 1 \text{ эВ}.$$

## Эффект Мессбауэра



$\hbar\omega \sim 10^2 - 10^4$  эВ. Заморозили решётку,  $T \rightarrow 0$ . Везде частота колебаний равна  $\omega$ .

$T \rightarrow 0$ :  $x : |\emptyset >_x$ ,  $y : |\emptyset >_y$ ,  $z : |\emptyset >_z$ .

Рассмотрим движение по оси  $x$ :  $|\emptyset >_x \xrightarrow{исп. \gamma} \hat{T}_{p_x}(-\hbar k_x)|\emptyset >_x$ ,  $\hat{T}_{p_x}(q) = \exp^{-\frac{i}{\hbar} q \hat{x}} = \exp^{ik_x \hat{x}}$ .

Вероятность, что, испустив  $\gamma$ -квант, ядро не испытает отдачу в С.О., связ. с кристаллом:  $w_x = |\langle \emptyset | \exp^{ik_x \hat{x}} | \emptyset >|^2$ .

Т.е. импульс отдачи примет вся кристаллическая решётка:

$$\langle \emptyset | \exp^{ik_x \hat{x}} | \emptyset > = \langle \emptyset | \exp^{ik_x \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^+)} | \emptyset >, \quad z = k_x \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}, \quad \exp^{iz\hat{a}^+} + \exp^{iz\hat{a}} =$$

$$= \{iz\hat{a}^+ = \hat{A}, \quad iz\hat{a} = \hat{B}\} = \exp^{\hat{A}} + \exp^{\hat{B}}, \quad [\hat{A}, \hat{B}] = -z^2[\hat{a}^+, \hat{a}] = z^2,$$

$$\exp^{\hat{A}} + \exp^{\hat{B}} = \exp^{-\frac{z^2}{2}} \exp^{iz\hat{a}^+} \exp^{iz\hat{a}}.$$

$$\langle \emptyset | \exp^{ik_x \hat{x}} | \emptyset > = \exp^{-\frac{\hbar k_x^2}{4m\omega}} \langle \emptyset | \exp^{iz\hat{a}^+} \exp^{iz\hat{a}} | \emptyset > = \exp^{-\frac{\hbar k_x^2}{4m\omega}}, \quad w_x = \exp^{-\frac{\hbar k_x^2}{4m\omega}}.$$

Аналогично  $w_y$ ,  $w_z$ .  $w = w_x w_y w_z = \exp^{-\frac{\hbar k^2}{2m\omega}} = \exp^{-\frac{\varepsilon^2}{(2mc^2)(\hbar\omega)}}$ ,  $2mc^2 \sim 10^2$ ,  $\hbar\omega \sim 10^4$ , т.е.  $w \equiv 99\%$  — ядра испускали  $\gamma$ -квант без отдачи.

$|n >$  — собственный вектор  $\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2}$  (собственные значения  $E_n$ ).

$$\Theta(z) = \begin{cases} 1, & z > 0, \\ 0, & z < 0, \end{cases} \quad \hat{T}_p(q) : \hat{T}_p(q) \tilde{\psi}(p) \equiv \tilde{\psi}(p+q), \quad \hat{T}_x(a) : \hat{T}_x(a) \psi(x) \equiv \psi(x+a).$$

## Семинар 8

Пусть есть унитарный оператор  $\hat{U}^+ = \hat{U}^{-1}$ .

$$|\psi' > = \hat{U} |\psi >, \quad \langle \psi_1 | \hat{f} | \psi_2 > = \langle \psi'_1 | \hat{F}' | \psi'_2 >, \quad \hat{F} \equiv \hat{U} \hat{F} \hat{U}^+.$$

Частным случаем унитарного преобразования является эволюция системы  $\psi = \psi(t)$ .

Пример.  $|\psi(t) > = \hat{U}(t, t_0) \psi(t_0) >.$



Симметрия динамики системы с гамильтонианом  $\hat{H}$ : такие  $\hat{U}$ , что уравнения эволюции являются форм-инвариантом: для  $|\psi\rangle$  и  $|\psi'\rangle$  одинаково.

$$i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = \hat{H}|\psi\rangle, |\psi\rangle = \hat{U}^+ |\psi'\rangle, i\hbar \frac{\partial \hat{U}^+}{\partial t} + i\hbar \hat{U}^+ \frac{\partial |\psi'\rangle}{\partial t} = \hat{H} \hat{U}^+ |\psi'\rangle,$$

$$i\hbar \frac{\partial |\psi'\rangle}{\partial t} = \left( -i\hbar \hat{U} \frac{\partial \hat{U}^+}{\partial t} + \hat{U} \hat{H} \hat{U}^+ \right) |\psi'\rangle = \hat{H} |\psi'\rangle.$$

$$\hat{H} = -i\hbar \hat{U} \frac{\partial \hat{U}^+}{\partial t} + \hat{U} \hat{H} \hat{U}^+, \hat{U} \frac{\partial \hat{U}^+}{\partial t} + \frac{\partial \hat{U}}{\partial t} \hat{U}^+ = 0, \frac{\partial \hat{U}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{U}] = 0.$$

В результате оператор  $\hat{U}$  — оператор симметрии динамики.

Для  $\forall$  унитарного  $\hat{U}$  существует такой эрмитов  $\hat{F} = \hat{F}^+ : \hat{U} = \exp i\hat{F}$ , и тогда  $\hat{F}$  — интеграл движения.

Если  $\hat{U}(x)$  — группа ( $\hat{U}(x_1)\hat{U}(x_2) \equiv \hat{U}(x)$ ,  $x = f(x_1, x_2)$ ),

$$\boxed{\hat{U}(x) = \exp ixF, \text{ то } \hat{F} \text{ — генератор данной группы } \hat{U}(x).}$$

$\hat{T}_x(a) = \exp \frac{i}{\hbar} a \hat{p}_x$ ,  $a$  — величина трансляции.

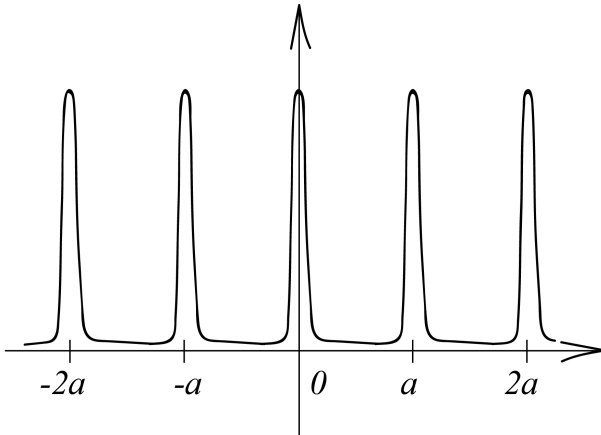
$i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = \hat{H}|\psi\rangle \implies |\psi(t)\rangle = \exp^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}} |\psi(t_0)\rangle \implies \hat{H}$  — генератор сдвигов по времени, значит,  $\hat{H}$  — интеграл движения.

Пусть  $\frac{\partial \hat{U}}{\partial t} = 0 \implies \hat{U}$  — симметрия динамики, если  $[\hat{H}, \hat{U}] = 0$  ( $\hat{U} = \exp i\hat{F} \implies \implies [\hat{H}, \hat{F}] = 0$ ).

Если нужно решить спектральную задачу  $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$  (1), т.е. найти собственные значения и построить ПОБ (т.е. найти  $E_n$  и построить ПОБ  $\{|\psi_n\rangle\}$ ). Раз  $[\hat{H}, \hat{F}] = 0$ , то можно использовать тот факт, что  $\hat{H}$  и  $\hat{F}$  имеют общий ПОБ. Можно сначала решить  $\hat{F}\psi = F|\psi\rangle$  (2) ( $\hat{U}|\psi\rangle = U|\psi\rangle$  (2')) и искать решение (1) среди решений (2) или (2').

### Задача о Дираковской гребёнке

$$U(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} V_0 \delta(x - na).$$



Бесконечная последовательность  $\delta$ -выбросов через равные интервалы.  
Спектр  $\hat{H}$ -?

Пусть  $(U) \equiv (na, (n+1)a)$ ,  $x \in (U) : \psi'' + \underbrace{\frac{2mE}{\hbar^2}}_{=k^2 (E \geq 0)} \psi = 0$ ,  $\psi_n = A_n \exp^{ikx} + B_n \exp^{-ikx}$ .

$\hat{T}_x(a) = \exp i/\hbar a \hat{p}_x$  — симметрия динамики.

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + U(\hat{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x).$$

Можно искать собственные функции  $\hat{H}$  среди собственных функций  $\hat{T}_x(a)$ .

$$\hat{T}_x(a)\psi(x) = \exp^{iqa} \psi(x), \quad q \in \left(-\frac{\pi}{a}, +\frac{\pi}{a}\right].$$

$$\psi(x+a) = \exp^{iqa} \psi(x) \quad (2'), \quad \psi'' + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi = 0 \quad (1').$$

Если  $x \in (n) \implies (x+a) \in (n+1)$ .

$$A_{n+1} \exp^{ik(x+a)} + B_{n+1} \exp^{-ik(x+a)} = \exp^{iqa} [A_n \exp^{ikx} + B_n \exp^{-ikx}], \quad \forall x \in (n) \implies$$

$$\implies \begin{cases} A_{n+1} = A_n \exp^{i(q-k)a} \\ B_{n+1} = B_n \exp^{i(q+k)a} \end{cases} \implies \begin{cases} A_n = A_0 \exp^{in(q-k)a} \\ B_n = B_0 \exp^{in(q+k)a} \end{cases}.$$

Условия сшивки в точке  $x = a$ :

$$\underbrace{A_1 \exp^{ikq}}_{=A_0 \exp^{iqa}} + \underbrace{B_1 \exp^{-ika}}_{=B_0 \exp^{iqa}} = A_0 \exp^{ika} + B_0 \exp^{-ika},$$

$$\boxed{[\exp^{iqa} - \exp^{ika}] A_0 + [\exp^{iqa} - \exp^{ika}] B_0 = 0}. \quad (a)$$

Для скачка производной:

$$ikA_1 \exp^{ikq} - ikB_1 \exp^{-ika} - ikA_0 \exp^{ikq} + ikB_0 \exp^{ika} = \frac{2mV_0}{\hbar^2} (A_0 \exp^{iqq} + B_0 \exp^{iqq}).$$

$$\frac{mV_0}{\hbar^2} = \varkappa, \quad [\exp^{iqa} \left(1 + 2i\frac{\varkappa}{a}\right) - \exp^{ika}] A_0 + [\exp^{iqa} \left(-1 + 2i\frac{\varkappa}{a}\right) + \exp^{-ika}] B_0 = 0. \quad (б)$$

Условие разрешённости  $\{a, б\}$ :  $\det \|\hat{\cdot}\| \equiv 0$  — уравнение на  $E$ .

$$[\exp^{iqa} - \exp^{ika}] [\exp^{iqq} \left(-1 + 2i\frac{\varkappa}{a}\right) + \exp^{-ika}] - [\exp^{iqa} - \exp^{-ika}] \times \\ \times [\exp^{iqq} \left(1 + 2i\frac{\varkappa}{a}\right) - \exp^{ikq}] = 0,$$

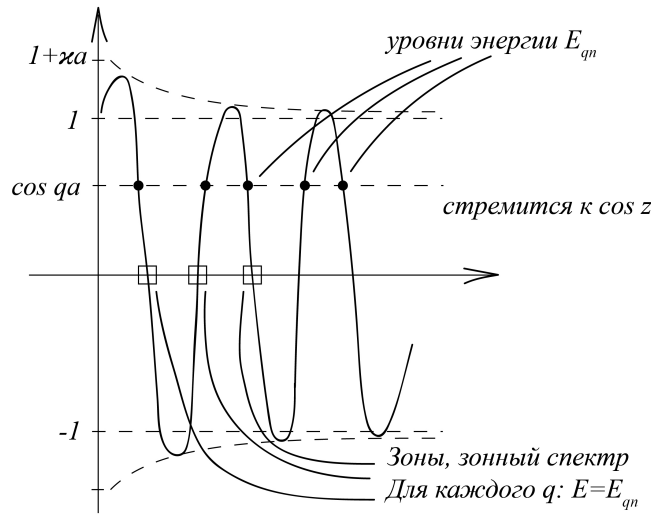
$$\exp^{2iqa}(-2) + \exp^0(-2) + \exp^{i(q+k)a} \left(2 - 2i\frac{\varkappa}{a}\right) + \exp^{i(q-k)a} \left(2 + 2i\frac{\varkappa}{a}\right) = 0.$$

Умножим на  $\frac{1}{4} \exp^{-iqa}$ , получим:

$$-\cos(qa) + \cos(ka) + \frac{\varkappa}{k} \sin(ka) = 0,$$

$$\cos(ka) + \frac{\varkappa}{a} \sin(ka) = \cos(qa),$$

$$ka \equiv z \left( E = \frac{\hbar^2}{2ma^2} z^2 \right).$$



## Семинар 9

1.  $[\hat{l}_i, \hat{l}_j] = i\varepsilon_{ijk}\hat{l}_k, [\hat{l}_i, \hat{l}_j] = 0.$
2.  $[\hat{x}, \hat{l}_j] = \frac{\varepsilon_{jkl}}{\hbar}[\hat{x}_i, \hat{x}_n\hat{p}_l] = \frac{\varepsilon_{jkl}}{\hbar}\hat{x}_k \underbrace{[\hat{x}_i, \hat{p}_l]}_{=i\hbar\delta_{il}} = i\varepsilon_{jki}\hat{x}_n.$

## Семинар 10

Спин  $\bar{e}$  — в системе отсчёта, где электрон покоится.

$S$  — собственный момент количества движения в системе отсчёта, где электрон покоится.

$$[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\varepsilon_{ijk}\hat{S}_k, [\hat{S}_i, \hat{S}^2] = 0, [\hat{S}_i, \hat{x}_j] = 0, [\hat{S}_i, \hat{p}_j] = 0.$$

Спиновые волновые функции — Паули.

$$\psi(\vec{r}, t) = \begin{pmatrix} \psi_1(\vec{r}, t) \\ \psi_2(\vec{r}, t) \end{pmatrix}.$$

$$\langle \psi_I | \psi_{II} \rangle = \int d^3\vec{r} \psi_I^\dagger \psi_{II} = \int d^3\vec{r} \{ \psi_{I_1}^* \psi_{I_2} + \psi_{I_2}^* \psi_{II_2} \}.$$

$\hat{\delta} = \frac{1}{2}\hat{\vec{\sigma}}$ , матрица Паули в стандартном представлении:

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

$$\hat{\sigma}_i^+ = \hat{\sigma}_i, \text{Tr}(\hat{\sigma}_i) = 0, \hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j = \delta_{ij} \text{Tr} + i\varepsilon_{ijk} \hat{\sigma}_k.$$

$$\hat{\sigma}'_i \equiv \hat{U} \hat{\sigma}_i \hat{U}^\dagger, \hat{U} \hat{U}^\dagger = 1, \hat{S}^2 = \underbrace{\hat{S}_x^2}_{=1/2} + \underbrace{\hat{S}_y^2}_{=1/2} + \underbrace{\hat{S}_z^2}_{=1/2} = \frac{3}{4} \hat{I}_z.$$

$$\forall \psi : \hat{S}^2 \psi = \frac{3}{4} \psi = S(S+1) \psi, S = 1/2.$$

$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}_p \psi$ .  $\hat{H}_p$  — гамильтониан Паули:

$$\hat{H}_p = \frac{\left[ \hat{\vec{p}} - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}, t) \right]^2}{2m} + e\varphi(\vec{r}, t) - 2\mu_0 \hat{S} \underbrace{\text{rot} \vec{A}(\vec{r}, t)}_{=\vec{B}(\vec{r}, t)}.$$

$\mu_0 = \frac{e\hbar}{2mc}$  — для электрона это магнетон Бора.

Т.е. ядро вносит меньший вклад в магнетизм, чем электронная оболочка.

Опыт Штерна–Герлаха — пучок расщепляется по спину.

$S = 1$  — три пучка,  $S = 1/2$  — два пучка.

Особая ситуация в теории Паули — однородное магнитное поле:  $\vec{B} = \vec{B}(t)$  — не зависит от  $r$ .

$$\hat{H}_p = \underbrace{\hat{H}_r}_{\text{коорд. часть}} + \underbrace{\hat{H}_S}_{\text{спиновая часть}} \implies \text{разбиение волновой функции.}$$

$$\forall t: \psi(r, t) = \phi(r, t) \cdot \chi(t).$$

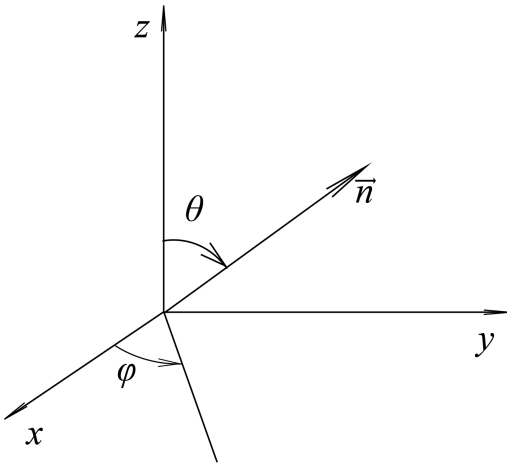
$\phi(r, t)$  — координатная часть,  $\chi(t)$  — спиновая часть, спинор  $\begin{pmatrix} u(t) \\ v(t) \end{pmatrix}$ .

$$i\hbar = \hat{H}_p \psi \implies \begin{cases} i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = \hat{H}_p \phi \\ i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} = \hat{H}_S \chi \end{cases}.$$

Важно понимать: направление спина — направление  $\vec{n}$  в пространстве, такое, что проекция спина на направление  $n$   $\hat{S}_{\vec{n}}$  имеет значение  $+1/2$  с вероятностью 1.

$$\text{Т.е. } \hat{S}_{\vec{n}} \psi = +\frac{1}{2} \psi.$$

$$\hat{S}_{\vec{n}} = \vec{n} \hat{S} = \frac{1}{2} \vec{n} \hat{\sigma} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} n_z & n_x - in_y \\ n_x + in_y & -n_z \end{pmatrix},$$



$$\begin{aligned} n_x &= \sin \theta \cos \varphi \\ n_y &= \sin \theta \sin \varphi \\ n_z &= \cos \theta \end{aligned}$$

$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \exp^{-i\varphi} \\ \sin \theta \exp^{i\varphi} & -\cos \theta \end{pmatrix}$  — эрмитова матрица; сама в себя переходит при комплексном транспонировании.

$$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \exp^{-i\varphi} \\ \sin \theta \exp^{i\varphi} & -\cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = +\frac{1}{2} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix},$$

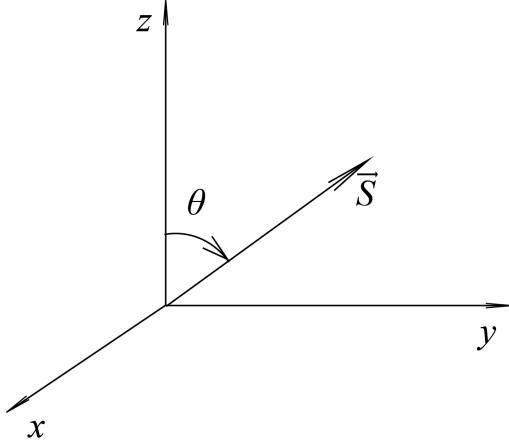
$$\begin{cases} \cos \theta \Psi_1 + \sin \theta \exp^{-i\varphi} \Psi_2 = +\psi_1, \\ \sin \theta \exp^{-i\varphi} \Psi_1 - \cos \theta \Psi_2 = \psi_2, \end{cases},$$

$C_1 = C_2 = 0$  — тривиальное решение. При  $\forall \theta$  и  $\varphi$   $\det = 0$ .

$$\psi_1 = \phi(\vec{r})u \implies \psi_2(\vec{r}) = \phi(\vec{r})v, \quad \sin \theta \exp^{i\varphi} u = (1 + \cos \theta)v, \quad |u|^2 + |v|^2 = 1.$$

Спин по оси  $n$ :  $\psi_{\vec{n}} = \phi(\vec{r}) \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) \exp^{i\varphi} \end{pmatrix}$ , где  $\phi(\vec{r})$  — координатная часть,  
 $\begin{pmatrix} \cos(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) \exp^{i\varphi} \end{pmatrix}$  — спинор  $\chi_{\vec{n}}$ .

Важно: если среднее значение проекции спина на ось  $z$ :



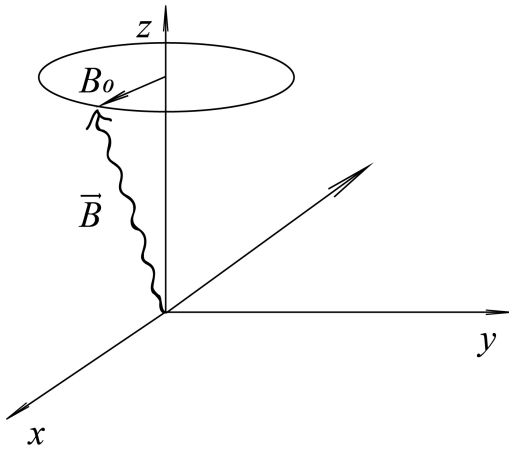
$$\langle S_z \rangle = \frac{1}{2} \langle \psi_{\vec{n}} | \frac{1}{2} \hat{\sigma}_z | \psi_{\vec{n}} \rangle =$$

$$= \frac{1}{2} [\cos(\theta/2) | \sin(\theta/2) \exp^{-i\varphi} ] \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} \cos(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) \exp^{i\varphi} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \left[ \cos^2 \left( \frac{\theta}{2} \right) - \sin^2 \left( \frac{\theta}{2} \right) \right] = \frac{1}{2} \cos \theta.$$

Только для спина  $\frac{1}{2}$  и 0:  $\vec{S} \sim \cos \theta$ .

Пример. Электрон в однородном нестационарном магнитном поле:  $\vec{B} = B_0 \vec{e}_z + B_1 [\cos(\omega t) \vec{e}_x + \sin(\omega t) \vec{e}_y]$ .



В  $t = 0$ : спин электрона направлен по оси  $z$ . Найти вероятность переворота спина к моменту времени  $t$ . Т.е. нужна только спиновая часть.

Волновая функция  $\chi(t)$ :

$$i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} = +2\mu_0 \frac{1}{2} (\vec{\sigma} \vec{B}) \chi, \quad (\vec{\sigma} \vec{B}) = \begin{pmatrix} B_z & B_x - iB_y \\ B_x + iB_y & -B_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_0 & B_1 \exp^{-i\omega t} \\ B_1 \exp^{i\omega t} & -B_0 \end{pmatrix}.$$

Обозначения:  $\frac{\mu_0 B_0}{\hbar} = \Omega_{\parallel}$ ,  $\frac{\mu_0 B_1}{\hbar} = \Omega_{\perp}$ .  $\chi = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \left( \equiv u \underbrace{\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}}_{\text{спин по } z} + v \underbrace{\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}}_{\text{спин против } z} \right).$

$$(|u|^2 \equiv w_+(t), |v|^2 \equiv w_-(t)).$$

$$i \begin{pmatrix} \frac{du}{dt} \\ \frac{dv}{dt} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Omega_{\parallel} & \Omega_{\perp} \exp^{-i\omega t} \\ \Omega_{\perp} \exp^{i\omega t} & -\Omega_{\parallel} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \iff \begin{cases} i \frac{du}{dt} = \Omega_{\parallel} u + \Omega_{\perp} \exp^{-i\omega t} v, \\ i \frac{dv}{dt} = \Omega_{\perp} \exp^{i\omega t} u - \Omega_{\parallel} v. \end{cases}$$

$$\chi \Big|_{t=0} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \implies u(0) = 1, v(0) = 0.$$

$$\begin{aligned} u(t) &\equiv f(t) \exp^{-i\frac{\omega}{2}t}, & i \frac{df}{dt} + f \frac{\omega}{2} &= \Omega_{\parallel} f + \Omega_{\perp} g, \\ v(t) &\equiv g(t) \exp^{i\frac{\omega}{2}t}, & i \frac{dg}{dt} - g \frac{\omega}{2} &= \Omega_{\perp} f - \Omega_{\parallel} g. \end{aligned} \quad \text{Начальные условия : } \begin{cases} f(0) = 1, \\ g(0) = 0. \end{cases}$$

$$\begin{aligned} f &= \frac{i}{\Omega_{\perp}} \frac{dg}{dt} + \frac{\Omega_{\parallel} - \frac{\omega}{2}}{\Omega_{\perp}} g, \\ -\frac{1}{\Omega_{\perp}} \frac{d^2g}{dt^2} + i \frac{\Omega_{\parallel} - \frac{\omega}{2}}{\Omega_{\perp}} \frac{dg}{dt} - i \frac{\Omega_{\parallel} - \frac{\omega}{2}}{\Omega_{\perp}} \frac{dg}{dt} - \frac{(\Omega_{\parallel} - \frac{\omega}{2})^2}{\Omega_{\perp}} g &= \Omega_{\perp} g, \\ \frac{d^2g}{dt^2} + \underbrace{\left[ \Omega_{\perp}^2 \left( \Omega_{\parallel} - \frac{\omega}{2} \right)^2 \right]}_{=\Omega^2} g &= 0. \end{aligned}$$

$$g(0) = 0 \implies \text{сразу исключаем косинус} \implies g(t) = A \sin(\Omega t).$$

$$f(t) = \frac{i}{\Omega_{\perp}} \Omega A \cos(\omega t) + \frac{\Omega_{\parallel} - \frac{\omega}{2}}{\Omega_{\perp}} A \sin(\Omega t).$$

$$A = f(0) = i \frac{\Omega}{\Omega_{\perp}} A \implies A = -i \frac{\Omega_{\perp}}{\Omega}.$$

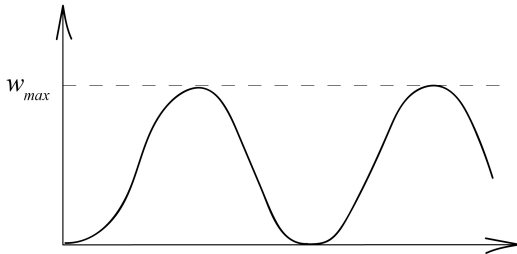
$$g(t) = -i \frac{\Omega_{\perp}}{\Omega} \sin(\Omega t), \quad f(t) = \cos(\Omega t) - i \frac{\Omega_{\parallel} - \frac{\omega}{2}}{\Omega} \sin(\Omega t).$$

$$v(t) = \exp^{i\frac{\omega}{2}t} g(t) = -i \exp^{i\frac{\omega}{2}t} \frac{\Omega_{\perp}}{\Omega} \sin(\Omega t).$$

$w_-(t)$  — вероятность переворота:

$$w_-(t) = |v(t)|^2 = \frac{\Omega_{\perp}^2}{\Omega^2} \sin^2(\Omega t) = \frac{\Omega_{\perp}^2}{\Omega_{\perp}^2 + (\Omega_{\parallel} - \frac{\omega}{2})^2} \sin^2 \left( \sqrt{\Omega^2 + (\Omega_{\parallel} - \frac{\omega}{2})^2} t \right),$$

$$\Omega_{\perp} = \frac{a_0 B_1}{\hbar}, \quad \Omega_{\parallel} = \frac{a_0 B_0}{\hbar}.$$



$$w_{max} = \frac{\Omega_{\perp}^2}{\Omega_{\perp}^2 + (\Omega_{\parallel} - \frac{\omega}{2})^2}.$$

Существует резонанс: если  $w = 2\Omega_{\parallel} = \frac{2\mu_0 B_0}{\hbar}$ , то  $w_{max} = 1$  — т.е. спин электрона то вверх, то вниз, в среднем половину времени вверх, а другую половину вниз. Из-за переходов будет излучать с частотой  $\frac{2\mu_0 B_0}{\hbar}$ . Это электронный парамагнитный резонанс.

Есть орбитальные моменты и спиновые моменты, связанные с природой частиц. Полный момент — интеграл движения.

## Семинар 11

### Сложение моментов. Коэффициенты Клебша–Гордана

$(j)-(2j+1)$ -мерное.  $j = 0, 1, 2, 3$ .

$$[(1) + (2)] \otimes (1) = \underbrace{(0)}_1 + \underbrace{2(1)}_{2 \cdot 3} + \underbrace{2(2)}_{2 \cdot 5} + \underbrace{(3)}_{3 \cdot 7}.$$

Задача сложения моментов — взять из таблиц Клебша коэффициенты (и всё).

Алгоритм подсчёта  $C$  (построение  $|jmj_1j_2\rangle$ ).

Начинаем с состояния  $\max(\min)$  максимального  $j$ :

$(*)|j_{\max} + j_{\max}j_1j_2\rangle = |m_1 = +j_1, m_2 = +j_2 \text{ (и только)}\rangle \equiv |j_1 + j_2\rangle \cdot |j_2 + j_2\rangle, \text{ т.е.}$

$$C_{j_1+j_2, j_1+j_2}^{j_1+j_2}(j_1j_2) \equiv 1 \quad \forall j_1j_2.$$

$$\hat{j}_- = j_x - i j_y, \quad \hat{j}_- |jm\rangle = \underbrace{jm-1}_{\text{понижающий оператор}} = \sqrt{(j+m)(j+1-m)}, \quad \hat{j}_- = \hat{j}_1^- + \hat{j}_2^-.$$

$$\hat{j}_-(*) : \sqrt{2j_{\max}} \cdot |j_{\max}, j_{\max}-1, j_1, j_2\rangle = \sqrt{2j_1} |j_1(j_1-1)\rangle |j_2+j_2\rangle + \sqrt{j_2} |j_1+j_1\rangle |j_2(j_2-1)\rangle,$$

$$C_{j_1+j_2, j_1+j_2-1}^{j_1-1, j_2}(j_1j_2) = \sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}}, \quad C_{j_1+j_2, j_1+j_2-1}^{j_1, j_2-1} = \sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}}$$

и т.д.  $\hat{j}_- (xx) \dots$  до  $m = -j_1 - j_2$ , а далее используется соотношение ортогональности и нормировки, вот и весь рецепт.

Пример.  $\hat{S} = \hat{S}_1 + \hat{S}_2$ , где  $S_1$  и  $S_2 = 1/2$ . Базис для одной частицы:  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  и  $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ .  
 $S_1 = 1/2, m_1 = +1/2. S_2 = 1/2, m_2 = -1/2$ . Тогда базис двух частиц:

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

$$\max S \longrightarrow (S = 0 (m_S = 0), 1 (m_S = +1, 0, -1)).$$

$$|1+1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad C_{1+1}^{+\frac{1}{2}+\frac{1}{2}} \left( \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right) = 1.$$

$$\hat{S}_- = \hat{S}_{1-} + \hat{S}_{2-}, \quad \hat{S}_- |1+1\rangle = \sqrt{(1+1)(1+1+1)},$$

$$(\hat{S}_{1-} + \hat{S}_{2-}) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \hat{S}_- \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \hat{S}_- (|\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right) \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2} + 1\right)} \left(\frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2}\right) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

$$\boxed{(**)|10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right].}$$

Таким образом:  $C_{10}^{+\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 2 \end{pmatrix} = C_{10}^{-\frac{1}{2}+\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 2 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}.$

Ясно, что  $|1-1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ . Или:  $C_{1-1}^{-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} = 1.$

$$|00\rangle = \alpha \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \beta \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad \| |00\rangle \| = 1 \implies |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1.$$

$$\langle 00|10\rangle = 0 = \alpha \frac{1}{\sqrt{2}} + \beta \frac{1}{\sqrt{2}} \implies \beta = -\alpha \implies 2\alpha^2 = 1 \implies \alpha = \frac{1}{\sqrt{2}}, \beta = \frac{1}{\sqrt{2}}.$$

$$|00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right], \quad C_{00}^{+\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 2 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad C_{00}^{-\frac{1}{2}+\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 2 \end{pmatrix} = -\frac{1}{\sqrt{2}}.$$

Для будущих лекций. Обратим внимание:

$$\begin{cases} |1+1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ |10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right] \\ |1-1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{cases} \quad - \text{триплет},$$

$$|10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right] \quad - \text{синглет}.$$

Все триплеты симметричны по отношению к перестановке спиноров:

$$\chi_{SM_S}(S_1, S_2) = \chi_{1m_S}(S_1 S_2) = +\chi_{1m_S}(S_2 S_1).$$

Синглеты — антисимметричны:

$$\chi_{00}(S_1 S_2) = -\chi_{00}(S_2 S_1).$$

Вместе:

$$\chi_{SM_S}(S_2 S_1) = (-1)^{S+1} \chi_{SM_S}(S_1 S_2).$$

Пример. Есть замкнутая система частиц со спином  $1/2$   $S_1 = S_2 = 1/2$ .

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} + U_1(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) + U_2(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \hat{S}_1 \hat{S}_2.$$

$$\hat{r}_1 \hat{r}_2 \hat{p}_1 \hat{p}_2 \longrightarrow \begin{cases} \vec{R} = \frac{m_1 \hat{r}_1 + m_2 \hat{r}_2}{m_1 + m_2} \\ \vec{p} = \hat{p}_1 + \hat{p}_2 \\ \vec{r} = \hat{r}_1 - \hat{r}_2 \\ \vec{p} = \frac{m_1 \hat{p}_1 - m_2 \hat{p}_2}{m_1 + m_2} \end{cases}$$

$$[\hat{x}_i p_j] - i\hbar \delta_{ij} = [\hat{x}_j \hat{p}_j], \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2M} + \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + U_1(|r|) + U_2(|r|) \hat{S}_1 \hat{S}_2, \quad M = m_1 + m_2, \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}.$$

$$\hat{S}_1 \hat{S}_2 = \frac{1}{4} \hat{P}_{tr} - \frac{3}{4} \hat{P}_S.$$



$$\Psi(\vec{r}_1 S_1 \vec{r}_2 S_2) = \Phi(\vec{R}) \varphi(\vec{r}) \chi_{SM_S}(S_1 S_2), \quad S = 1: \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2M} + \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + \underbrace{U_1(r) + \frac{1}{r} U_2(r)}_{=U_{Tr}(r)}.$$

Для  $S = 0$ :  $U_S(r) = U_1(r) - \frac{3}{4} U_2(r)$ .

## Семинар 12

### Стационарная теория возмущений

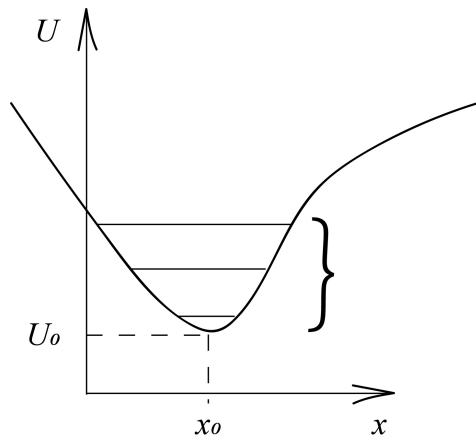
$$E_n'' = V_{nn} = \langle \psi_n^{(0)} | \hat{V} | \psi_n^{(0)} \rangle, \quad \psi_n'' = \sum_{k \neq n} \frac{V_{nk}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \psi_k^{(0)}.$$

$$S = 1: \quad E_n^{(2)} = \sum_{n \neq k} \frac{(V_{nk})^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}},$$

$S > 1$ :  $E_{n\alpha}^{(1)}$  — корни.

Достаточное условие применимости:  $|V_{nk}| \ll |E_n^{(0)} - E_k^{(0)}|$ .

Пример 1. Найти низколежащие уровни энергии  $E_n$ .



- для низколежащего уровня сильно сжимает на параболу

Разложение в ряд Тейлора:

$$\begin{aligned} U(x) &\approx U_0 + U_0'(x - x_0) + \frac{U_0''}{2}(x - x_0)^2 + \dots, \\ U_0^{(x)} &\equiv U^{(n)}(x_0) \Big| + \frac{U_0'''}{6}(x - x_0)^3 + \frac{U_0^{(4)}}{24}(x - x_0)^4 + \dots \Rightarrow \\ \Rightarrow \hat{H} &= \left\{ \frac{U_0''}{2} \equiv \frac{m\omega^2}{2}, \quad \frac{U_0'''}{6} = \alpha, \quad \frac{U_0^{(4)}}{24} = \beta, \quad \hat{x} \longrightarrow \hat{x} - x_0 \right\} = \\ &= \underbrace{U_0 + \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}'^2}{2}}_{\equiv \hat{H}_0} + \underbrace{\alpha \hat{x}^3 + \beta \hat{x}^4}_{=\hat{V}} + \dots \end{aligned}$$

$\hat{H}_0$  — невозмущённый гамильтониан,  $\hat{V}$  — низшая ангармоническая поправка.

Либо эта  $\hat{V}$  мала и следующие поправки ещё меньше, либо затем бессмысленны. Считаем  $\hat{V}$  малой:  $\hat{H}_0|n\rangle = E_n^{(0)}|n\rangle$  — уровни энергии гармонического линейного осциллятора,  $n = 0, 1, 2, \dots$

$$E_n^{(0)} = U_0 + \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad E_n^{(1)} = \langle n|\hat{V}|n\rangle = \alpha \langle n|\hat{x}^3|n\rangle + \beta \langle n|\hat{x}^4|n\rangle.$$

Из соображений симметрии  $\alpha \langle n|\hat{x}^3|n\rangle = 0$ .

Для осциллятора  $\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^+)$ ,  $(\hat{a} + \hat{a}^+)$  — некоммутирующие.

$$\begin{aligned} E_n^{(1)} &= \beta \frac{\hbar^2}{4m^2\omega^2} \langle n|(\hat{a} + \hat{a}^+)^4|n\rangle = \frac{\hbar^2\beta}{4m^2\omega^2} \langle n|\hat{a}\hat{a}\hat{a}^+\hat{a}^+ + \hat{a}\hat{a}^+\hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}\hat{a}^+\hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}^+\hat{a}\hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a}\hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}^+\hat{a}^+\hat{a}\hat{a} + \hat{a}^+\hat{a}^+\hat{a}^+\hat{a} + \\ &\quad + \hat{a}^+\hat{a}\hat{a}\hat{a}^+ = \left\{ \hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad \hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \right\} = \\ &= \frac{\hbar^2\beta}{4m^2\omega^2} [(n+1)(n+2) + (n+1)^2 + n(n+1) + n(n-1) + n^2 + n(n+1)] = \frac{\hbar^2\beta}{4m^2\omega^2} [6n^2 + 6n + 3], \end{aligned}$$

$$E_n^{(1)} = \frac{3\hbar^2\beta}{2m^2\omega^2} \left( n^2 + n + \frac{1}{2} \right), \quad E_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} \frac{|V_{kn}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} = \underbrace{O}_{\sim \alpha^2} + \underbrace{O}_{\sim \alpha\beta} + \underbrace{O}_{\sim \beta^2},$$

$$E_n^{(2)} \simeq \sum_{k \neq n} \frac{|\langle k|\alpha\hat{x}^3|n\rangle|^2}{\hbar\omega(n-k)} = \alpha^2 \left( \frac{\hbar}{2m\omega} \right)^3 \frac{1}{\hbar\omega} \sum_{k \neq n} \frac{|k|(\hat{a} + \hat{a}^+)^3|n\rangle|^2}{n-k},$$

$$\begin{aligned} \langle k|(\hat{a} + \hat{a}^+)^3|n\rangle &= \langle n|\hat{a}^3 + \hat{a}\hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}\hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}^+\hat{a}\hat{a} + \hat{a}^+\hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}^+\hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}\hat{a}^+\hat{a}^+ + (\hat{a}^+)^3|n\rangle = \\ &= \delta_{k,n-3}\sqrt{n(n-1)(n-2)} + \delta_{k,n-1}3n^{3/2} + \dots + \delta_{k,n+1}3(n+1)^{3/2} + \delta_{k,n+3}\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)}. \end{aligned}$$

$$|\langle \dots \rangle|^2 = \delta_{k,n-3}n(n-1)(n-2) + \delta_{k,n-1}9n^2 + \delta_{k,n+1}9(n+1)^3 + \delta_{k,n+3}(n+1)(n+2)(n+3),$$

$$E_n^{(2)} \simeq \frac{\hbar^2\alpha^2}{8m^3\omega^4} \underbrace{\left( \frac{n(n-1)(n-2)}{3} + \frac{9n^3}{1} + \frac{9(n+1)^3}{-1} + \frac{(n+1)(n+2)(n+3)}{-3} \right)}_{=-30n^2-30n-11},$$

$$E_n^{(2)} \simeq \frac{-15\hbar^2\alpha^2}{4m^3\omega^4} \left( n^2 + n + \frac{11}{30} \right),$$

$$E_n \simeq U_0 + \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) + \frac{3\hbar^2\beta}{2m^2\omega^2} \left( n^2 + n + \frac{1}{2} \right) - \frac{15\hbar^2\alpha^2}{4m^3\omega^4} \left( n^2 + n + \frac{11}{30} \right),$$

$$\omega \equiv \sqrt{\frac{U_0''}{m}}, \quad \alpha = \frac{U_0'''}{6}, \quad \beta = \frac{U_0^{(4)}}{24}.$$

Условия применимости:

$$\max \left\{ \frac{3\hbar^2\beta}{2m^2\omega^2} \left( n^2 + n + \frac{1}{2} \right), \frac{15\hbar^2\alpha^2}{4m^3\omega^4} \left( n^2 + n + \frac{11}{30} \right) \right\} \ll \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right),$$

$$\forall n \left( \frac{n^2 + n + \frac{1}{2}}{n^2 + n + \frac{11}{30}} \right) \simeq \left( n + \frac{1}{2} \right)^2 = n^2 + n + \frac{1}{4},$$

$$\left( n + \frac{1}{2} \right) \ll \min \left\{ \frac{2m^2\omega^4}{3\hbar\beta}, \frac{4m^3\omega^5}{15\hbar\alpha^2} \right\}.$$

На этот пример можно ссылаться.

Пример 2. Вырождение есть:

$$\hat{H} = \underbrace{\frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \left( \frac{m\omega^2(\hat{x}^2 + \hat{y}^2)}{2} \right)}_{=\hat{H}_0} + \underbrace{\lambda\hat{x}\hat{y}}_{=\hat{V}},$$

$$\hat{H}_0|n_x n_y\rangle = \underbrace{\hbar\omega(n_x + n_y + 1)}_{E_n^{(0)} = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})}|n_x n_y\rangle, \quad n \equiv n_x + n_y.$$

$$S(E_n^{(0)}) = n + 1, \quad \alpha = n_x + 1 = 1, \dots, n + 1,$$

$$\left\{ \begin{array}{l} n_x = \alpha - 1 \\ n_y = n + 1 - \alpha \end{array} \right. \quad \left| \psi_{n\alpha}^{(0)} \right\rangle = \underbrace{|\alpha - 1\rangle}_{=n_x} \underbrace{|n + 1 - \alpha\rangle}_{=n_y} = |\alpha - 1\rangle_x |n + 1 - \alpha\rangle_y.$$

$$n = 0 : E_1^{(0)} = \hbar\omega, \quad S = 1, \quad E_0^{(1)} = 0.$$

$$n = 1 : E_1^{(0)} = 2\hbar\omega, \quad S = 2, \quad |\psi_{11}^{(0)}\rangle = |0\rangle_x |1\rangle_y, \quad |\psi_{12}^{(1)}\rangle = |1\rangle_x |0\rangle_y,$$

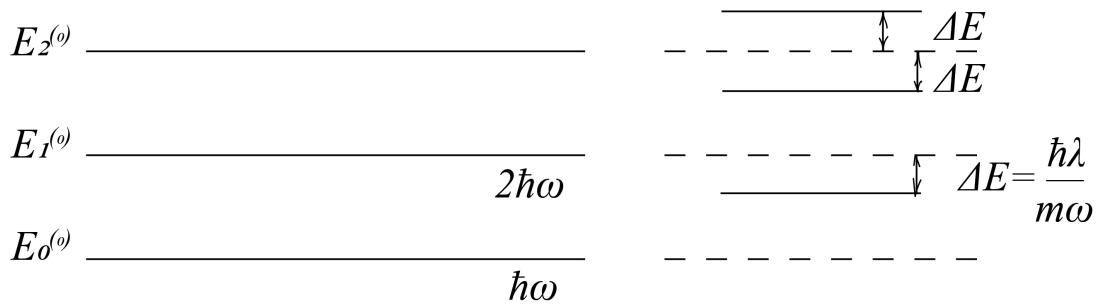
$$V_{\alpha\beta}^{(n)} \cdot V_{11}^{(n)} = \langle \psi_{11}^{(0)} | \lambda \hat{x} \hat{y} | \psi_{11}^{(0)} \rangle = \lambda \cdot 0 = 0 = V_{22}(n).$$

$$V_{12}(n) = \langle \psi_{11}^{(0)} | \lambda \hat{x} \hat{y} | \psi_{12}^{(0)} \rangle \equiv V_{21}^{(n)}, \quad V_{12}^{(n)} = V_{21}^{(n)} = \lambda < 0 | \hat{x} | 1 \rangle < 1 | \hat{y} | 0 \rangle,$$

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}_x + \hat{a}_x^+), \quad \hat{y} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}_y + \hat{a}_y^+).$$

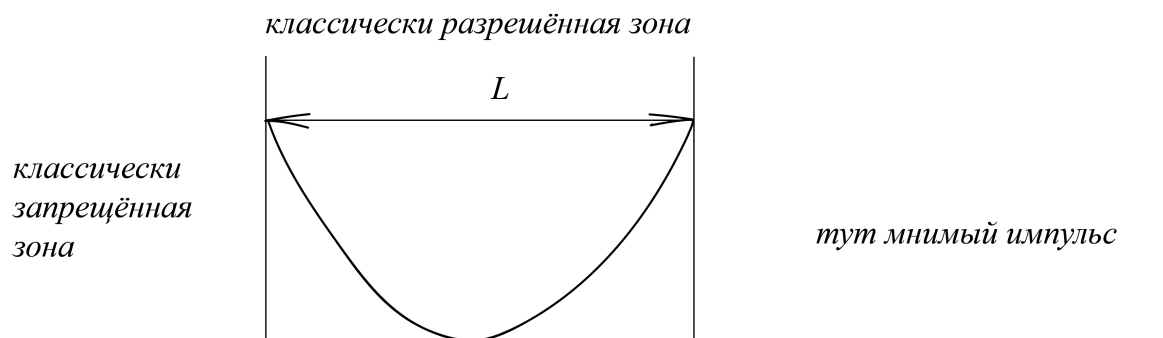
$$\det \begin{pmatrix} 0 - E & \frac{\hbar\lambda}{2m\omega} \\ \frac{\hbar\lambda}{2m\omega} & 0 - E \end{pmatrix} = 0 - \underline{\text{секулярное уравнение.}}$$

$$E^2 - \left( \frac{\hbar\lambda}{2m\omega} \right)^2 = 0, \quad E_1^{(1)} = \pm \frac{\hbar\lambda}{2m\omega}.$$



## Семинар 13

Квазиклассика и метод Вентцеля–Крамерса–Бриллюэна



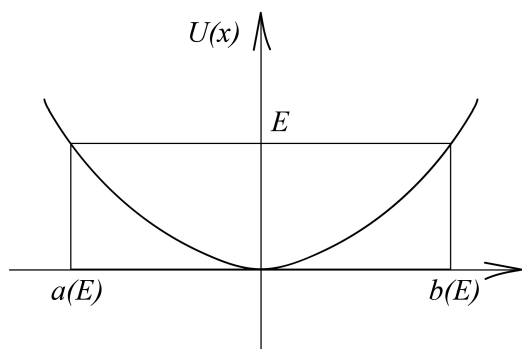
Идея метода Вентцеля–Крамерса–Бриллюэна (ВКБ):  $\hat{H}\psi_E = E\psi_E \longrightarrow \psi_E = a \exp^{i/\hbar S}$ ,  
 $S$  — фаза.

$$a \equiv a_0 \longrightarrow a_1 + \hbar^2 a_2 + \dots, \quad S \equiv S_0 \longrightarrow \hbar S_1 + \hbar^2 S_2 + \dots, \quad a_0 = \frac{\text{const}}{\sqrt{p(x)}},$$

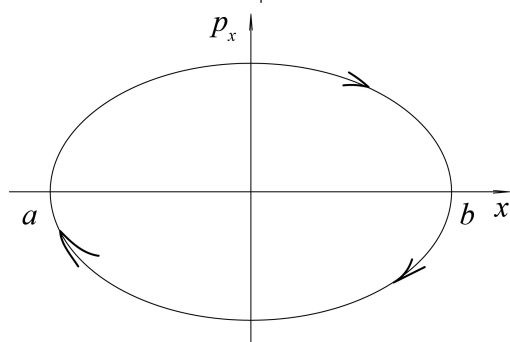
$$S_0 = \int p(x) dx, \quad E \longrightarrow p_x(x) = \pm \sqrt{2m(E - U(x))}.$$

Квазиклассика:  $\lambda \ll L$ .

Бор–Зоммерфельд:

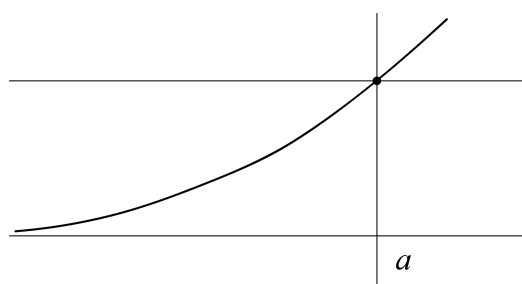


$$\frac{2}{2\pi} \oint_{C_E} p_x dx = \hbar \left( n + \gamma + o\left(\frac{1}{n}\right) \right) =$$

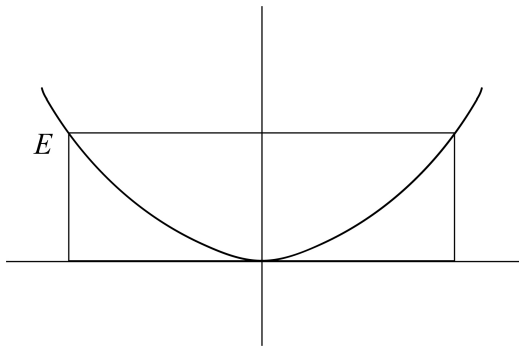


$$= \frac{1}{\pi} \int_a^b dx \sqrt{2m(E - U(x))}.$$

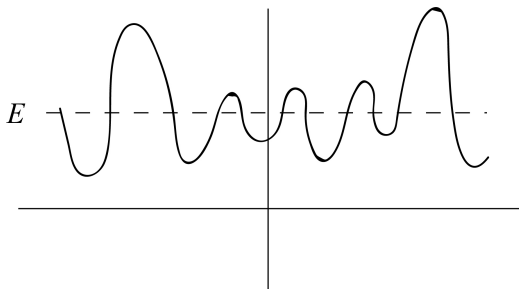
$$\gamma \sim 1: \quad \gamma \equiv \gamma(a) + \gamma(b).$$



$$\gamma(x) = \begin{cases} 1/4, & x \text{ — точка остановки,} \\ 1/2, & x \text{ — стенка,} \\ 0, & x \text{ — остальные случаи.} \end{cases}$$

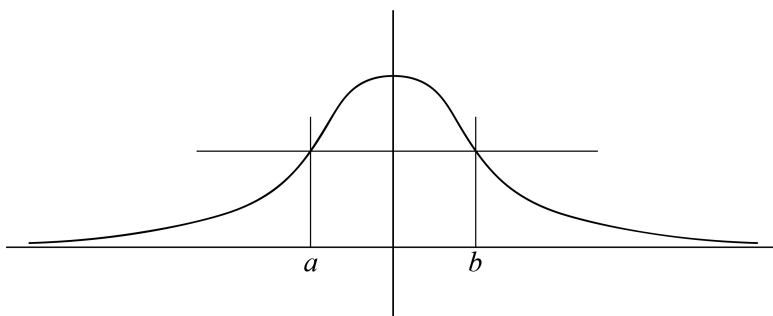


Тут работает Б.-З.



Тут Б.-З. не работает.

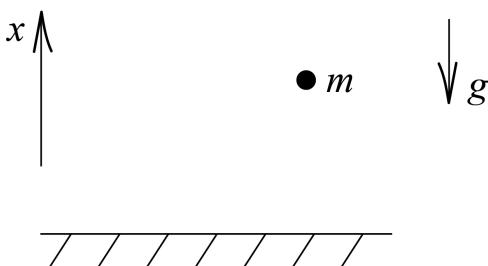
$$T(E) = \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_a^b dx \sqrt{2m(E - U(x))} \right\}.$$



Усл. пр-ти:  
 $\frac{1}{\hbar} \int_a^b dx \sqrt{2m(E - U(x))} \gg 1$ .  
 $< 10^{-4}$  — нормальные  $T$  для квазиклассики.

$$dN_{KB} = \frac{d^3 \vec{r} d^3 \vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} (2S + 1), \quad \hbar^3 \text{ — это объём «клеточки» на одно квантовое состояние.}$$

Пример 1.

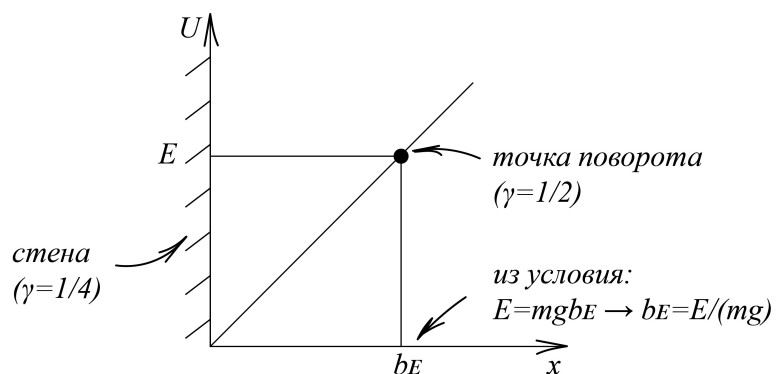


В квазиклассике найти уровни энергии.  
 $U(x) = mgx$ .

Бор-Зоммерфельд:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\pi} \int_0^{b_E} \sqrt{2m[E - mgx]} dx = \\ = \hbar \left( n + \frac{3}{4} + o\left(\frac{1}{4}\right) \right). \end{aligned}$$

Введём  $t = \frac{x}{b_E}$ .



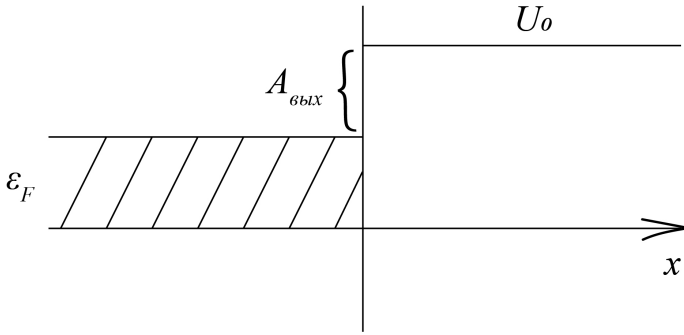
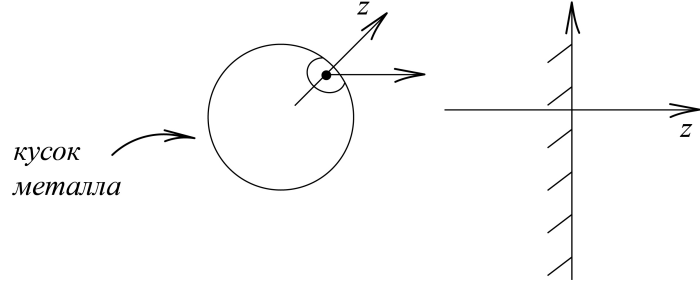
$$\frac{1}{\pi} \sqrt{2mE} \frac{E}{mg} \underbrace{\int_0^1 \sqrt{1-t} dt}_{=2/3} = \hbar \left( n + \frac{3}{4} + o\left(\frac{1}{4}\right) \right) = \frac{2\sqrt{2}}{3\pi g} \frac{-1}{\sqrt{m}} E^{-3/2},$$

$$E_n = \left[ \frac{3\pi g \sqrt{m} \hbar}{2\sqrt{2}} \left( n + \frac{3}{4} \right) \right]^{2/3}.$$

### Явление холодной эмиссии

$T \approx 0$ .

Электроны, которые связаны, вряд ли вылетят, значит, смотрим электроны проводимости.



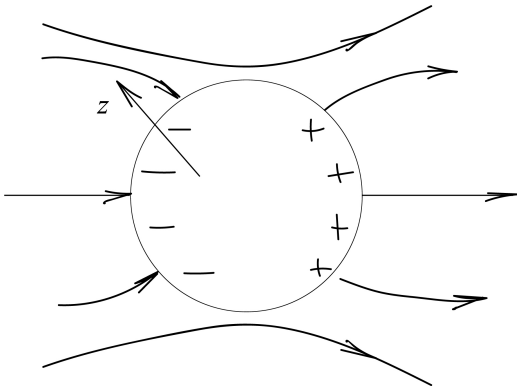
$$U(t < 0) = 0.$$

$$|\vec{p}| < p_F.$$

$$N_e = N_{KB}^{(3an.)} = V, \quad N_e = N_{KB}^{(3an.)} = \frac{V \frac{4\pi}{3} p_F^3}{2\pi \hbar \beta} \cdot 2 \Rightarrow n_l = \frac{N_e}{V} = \frac{1}{3\pi^2 \hbar^3} p_F^3,$$

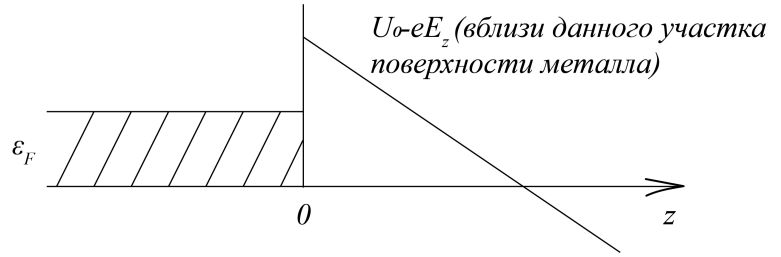
$$p_F = \hbar(3\pi^2 n_l)^{1/3}, \quad \epsilon_F = \frac{p_F^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n_l)^{2/3}.$$

$n_l$  — эмпирический параметр. Второй параметр —  $A_{вых} \equiv A$ ,  $U_0 = A + \epsilon_F$ . Включаем внешнее поле:



Поле ( $\sim 10^5$  В/м) меньше, чем внутри-кристаллическое ( $\sim 10^9$  В/м).

С точки зрения электрона:



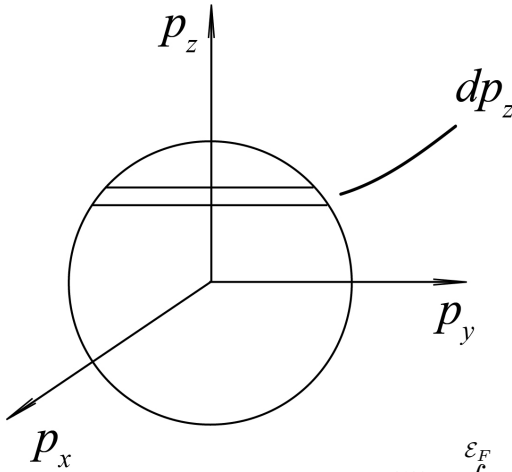
$j_e$  — плотность эмиссионного тока.

Вероятность туннелирования зависит от  $E_{кин}$  вдоль оси  $z$ :

$$T(\mathcal{E}_z), \mathcal{E}_z = \frac{p_z^2}{2m}, T(\mathcal{E}_z) \simeq \exp^{-\frac{2}{\hbar} \int_0^b \sqrt{2m(U - \mathcal{E}_z)} dz}, \mathcal{E}_z = U_0 - eEb \Rightarrow b = \frac{U_0 - \mathcal{E}_z}{eE}.$$

$$\int_0^b dz \sqrt{U_0 - eEz - \mathcal{E}_z} = \sqrt{2m(U_0 - \mathcal{E}_z)} = \left\{ t = \frac{z}{b} \right\} = \frac{U_0 - \mathcal{E}_z}{eE} \int_0^1 \sqrt{1-t} dt = \frac{2}{3} \frac{\sqrt{2m}}{eE} (U_0 - \mathcal{E}_z)^{3/2}.$$

$$T(\mathcal{E}_z) \approx \exp^{-\frac{4\sqrt{2m}}{3eE\hbar} (A + \mathcal{E}_F - \mathcal{E}_z)^{3/2}}, j_e = \int_0^{p_F} e \frac{p_z}{m} \frac{\pi(p_F^2 - p_z^2) dp_z V}{(2\pi\hbar)^3} \cdot 2T(\mathcal{E}_z) =$$



$$= \frac{e}{4\pi^2\hbar^3} \int_0^{p_F} \underbrace{dp_z \frac{p_z}{m}}_{=d\mathcal{E}_z} (p_F^2 - p_z^2) T(\mathcal{E}_z) =$$

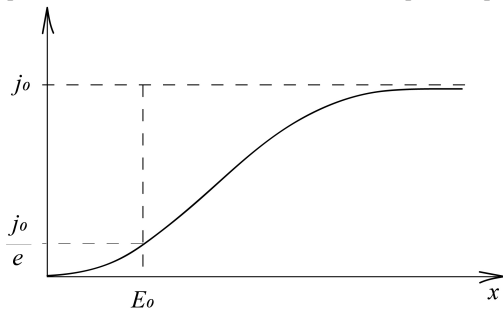
$$= \frac{em}{2\pi^2\hbar^3} \int_0^{\mathcal{E}_F} d\mathcal{E}_z (\mathcal{E}_F - \mathcal{E}_z) \exp^{-\frac{4\sqrt{2m}}{3eE\hbar} (A + \mathcal{E}_F - \mathcal{E}_z)^{3/2}}.$$

$\frac{4\sqrt{2m}}{3eE\hbar} A^{3/2} \equiv E_0$  — некое характерное значение напряжённости для металла.  
 $\mathcal{E}_F - \mathcal{E}_z \equiv \mathcal{E}$ . Точная формула:

$$j_e = \frac{em}{2\pi^2\hbar^3} \int_0^{\mathcal{E}_F} d\mathcal{E} \mathcal{E} \exp^{-\frac{E_0}{E} (1 + \frac{\mathcal{E}}{A})^{3/2}}.$$

Это выражение через неполную гамма-функцию.

Приближение «плохого» проводника (в нём мало электронов проводимости, большая работа выхода).  $\mathcal{E}_F \ll A$ , пренебрегаем, получаем:



$$j_e \simeq \frac{em}{2\pi^2\hbar^3} \exp^{-\frac{E_0}{E}} \int_0^{\mathcal{E}_F} d\mathcal{E} \mathcal{E} = \underbrace{\frac{em\mathcal{E}_F^2}{2\pi^2\hbar^3}}_{=j_0} \exp^{-\frac{E_0}{E}} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow j_e \simeq j_0 \exp^{-\frac{E_0}{E}}.$$

$j_0$  — эмиссионный ток насыщения.

## Семестр 2

### Семинар 1

#### Теория Дирака

$S = 1/2$ .

30-е годы XX века. Переход к квантовой релятивистской теории.

Рассмотрим задачу о свободной частице.

Свободная частица:  $\psi = N \exp^{-\frac{i}{\hbar}Et + \frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}}$ ,  $N$  — нормировочная константа.

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}, \quad \hat{H}\psi = E\psi, \quad \frac{\hat{p}^2}{2m}\psi = E\psi, \quad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = E\psi, \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial \vec{r}^2}\psi = \frac{\hat{p}^2}{2m}\psi, \quad i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial \vec{r}^2}.$$

Релятивистская теория:

$$E^2 = m^2c^4 + c^2\vec{p}^2 \implies \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)^2\psi = m^2c^4\psi + c^2\left(-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial \vec{r}^2}\right)\psi, \quad \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} - \frac{\partial^2\psi}{\partial \vec{r}^2} + \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\psi = 0.$$

$$\partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu}, \quad x^\mu = (ct, \vec{r}), \quad \left[\partial^\mu\partial_\mu + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\right]\psi = 0$$

— уравнение Клейна–Гордона–Фока (КГФ) (1).

Нам надо также построить плотность вероятности  $\rho$  и поток вероятности  $\vec{j}$  ( $j^\mu = c\vec{p}_i$ ).  $\rho$  должна быть сохраняющейся.

$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \text{div}\vec{j} = 0$ , которое должно следовать из КГФ (1).

$$\rho = \left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} - \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right)\frac{i\hbar}{2mc^2}, \quad \vec{j} = -\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial \vec{r}} - \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial \vec{r}}\right),$$

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\partial\vec{j}}{\partial \vec{r}} = \frac{i\hbar}{2mc} \left[ \underbrace{\psi^*\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} - \frac{\partial^2\psi}{\partial \vec{r}^2}\right)}_{=-\frac{m^2c^2}{\hbar^2}\psi} - \underbrace{\psi\left(\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\psi^*}{\partial t^2} - \frac{\partial^2\psi^*}{\partial \vec{r}^2}\right)}_{=-\frac{m^2c^2}{\hbar^2}\psi^*} \right] = 0.$$

Но! (упрёк 1)  $\rho$  не является положительно определённой, т.е. надо определить, что такое отрицательная вероятность. Это — центральная проблема КГФ.

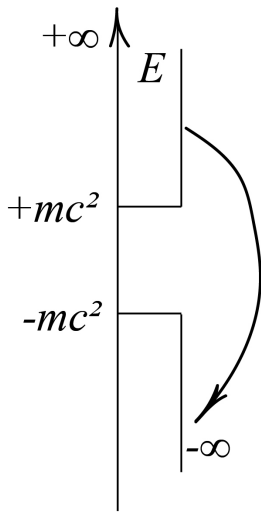
Упрек 2:  $E^2 = m^2c^4 + c^2\vec{p}^2 \implies E = \pm\sqrt{m^2c^4 + c^2\vec{p}^2}$ . В классике минус выкидываем.

Минус нельзя выкинуть в квантовой теории, т.к. в этом случае базис волновой функции  $\psi_{E\vec{p}}$  не будет полным.

Нормированные на 1 волновые пакеты нельзя разложить по остатку базиса с  $E > 0$ .

Поэтому минус нельзя выкидывать. Но и оставить нельзя из-за динамической нестабильности.





Т.е. может падать бесконечно, т.е.  $\vec{p} \uparrow \implies$  все частицы должны разлетаться со скоростью света.

Упрёк 3. Где спин? В нерелятивистской теории спин выкинули вручную сами, он ниоткуда не выводится; тут то же самое. Эйнштейн: в принципе нельзя объединить квантовую теорию и теорию относительности.

Дирак, 1-й курс, диафантова задача на олимпиаде: поймали (-2) рыбы 3 рыбака.

Ложка Дирака: нужно уравнение для  $\psi$ :

— инвариант относительно преобразований Лоренца;

— приводило к  $\rho \geq 0$  и удовлетворяло уравнению непрерывности:  $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \vec{j} = 0$ ;

— для свободной частицы  $E^2 = m^2 c^4 + c^2 \vec{p}^2$ .

Необходимо:

- чтобы  $\rho$  не содержало  $\frac{\partial}{\partial t}$ ;
- но тогда, т.к.  $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \vec{j} = 0$ , необходимо следствие уравнения, которое мы ищем. Тогда это уравнение — первого порядка по  $\frac{\partial}{\partial t} \implies$  оно также первого порядка по  $\frac{\partial}{\partial \vec{r}}$ .

Значит, это уравнение должно записываться в форме  $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi$ , где  $\hat{H}$  — линейная функция  $\vec{p}$ .  $\hat{H} = c\vec{\alpha}\vec{p} + mv^2\beta$ ,  $\vec{\alpha}$  и  $\beta$  — четыре безразмерные константы.

$$\hat{H}^2 \psi_{E\vec{p}} = E^2 \psi_{E\vec{p}} = [m^2 c^4 + c^2 \vec{p}^2] \psi_{E\vec{p}}^+$$

$$\hat{H}^2 \psi_{E\vec{p}} = [c\vec{\alpha}\vec{p} + mc^2\beta]^2 \psi_{E\vec{p}} = [c^2(\vec{\alpha}\vec{p})^2 + m^2 c^4 \beta^2 + mc^3(\vec{\alpha}\vec{p}\beta + \beta\vec{\alpha}\vec{p})] \psi_{E\vec{p}} = (m^2 c^4 + c^2 \vec{p}^2) \psi_{E\vec{p}},$$

$E\vec{p}$  — соответствующие определения энергии и импульса.

Т.е. для  $\forall \vec{p}$ :  $c^2(\vec{\alpha}\vec{p})^2 + m^2 c^4 \beta^2 + mc^3[(\vec{\alpha}\vec{p})\beta + \beta(\vec{\alpha}\vec{p})] = m^2 c^4 + c^2 \vec{p}^2 \implies$

$$\implies \begin{cases} \beta^2 = 1 \\ (\vec{\alpha}\vec{p})^2 = \vec{p}^2 \forall \vec{p} \\ \vec{\alpha}\beta + \beta\vec{\alpha} = 0, \text{ т.е. это не числа} \end{cases} \implies \begin{cases} \beta^2 = \alpha_1^2 = \alpha_2^2 = \alpha_3^2 = 1 \\ \beta\alpha_i + \alpha_i\beta = 0 \\ \alpha_i\alpha_j + \alpha_j\alpha_i = 0, j \neq i \end{cases} \quad p_i p_j = \frac{1}{2}(p_i p_j + p_j p_i).$$

$\beta$  и  $\alpha$  могут быть реализованы как матрицы. При приведении к диагональной форме и

$$\beta, \text{ и } \alpha \text{ должны быть } \begin{pmatrix} +1 & & & \\ & -1 & & \\ & & +1 & \\ & & & -1 \\ & & & & \dots \end{pmatrix}, \text{ т.е. } \pm \text{ на диагонали.}$$

К тому же, на примере  $\alpha_1$ , след  $\alpha_1$ :

$$\text{Tr}(\alpha_1) = \text{Tr}(\alpha_1 \beta^2) = -\text{Tr}(\beta \alpha_1 \beta) = -\text{Tr}(\beta^2 \alpha_1) = -\text{Tr}(\alpha_1), \text{ т.е. } \text{Tr}(\alpha_1) = -\text{Tr}(\alpha_1) \implies \text{Tr}(\alpha_1) = 0. \text{ Т.е. все 4 матрицы бесследны, чётной размерности.}$$

$\beta$  и  $\alpha$  — бесследовые матрицы чётной размерности, квадрат каждой из которых равен 1, эрмитовы и линейно независимы.

В размерности 2 ( $\dim=2$ ) — только 3 матрицы (Паули-матрицы).

$\dim=4$  — такой набор есть (их предложил Дирак).

Стандартный набор матриц Дирака:

$$\beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & -I_2 \end{pmatrix} \text{ (блочная форма).}$$

$$\alpha_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_1 \\ \sigma_1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_2 \\ \sigma_2 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\alpha_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_3 \\ \sigma_3 & 0 \end{pmatrix}.$$

Любой другой набор  $\beta' = U\beta U^+$  или  $\vec{\alpha}' = U\vec{\alpha}U^+$ , где  $UU^+ = 1$ .

Вывод:  $\hat{H}$  — матрица  $4 \times 4 \rightarrow \psi_{E\vec{p}}$  — четырёхкомпонентна.

Что со спином?  $\hat{j} = \hat{l} + \hat{s}$  — очевидный интеграл движения свободной частицы. Т.е.  $[\hat{j}_i, \hat{H}_D] = 0$ ,  $\hat{H}_D$  — Дирака.

$$l_i = \frac{1}{\hbar} \varepsilon_{ijk} x_j p_k, \quad [\hat{l}_i, \hat{H}_d] = \frac{1}{\hbar} \varepsilon_{ijk} c \alpha_m \underbrace{[\hat{x}_i \hat{p}_k \hat{p}_m]}_{=i\hbar \delta_{im} p_k} = i c \varepsilon_{ijk} \alpha_i \hat{p}_k \neq 0.$$

Т.е. у частицы Дирака есть спин.

$\hat{S}$  — не содержит  $\hat{x}_i$  и  $\hat{p}_j$  и при этом  $[\hat{S}_i, \hat{H}_D] = -i c \varepsilon_{ijk} \alpha_i \hat{p}_k$ .

$\hat{H}_D = c \hat{\alpha}_k p_k + m_i \beta \Rightarrow \hat{S}_i = -\frac{i}{4} \varepsilon_{ijk} \alpha_j \alpha_k = -\frac{i}{4} [\vec{\alpha} \times \vec{\alpha}]$ , в стандартном представлении

$$\hat{S} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix}, \quad \vec{\sigma} \text{ — матрица Паули.}$$

$$\hat{S}^2 = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} \vec{\sigma}^2 & 0 \\ 0 & \vec{\sigma}^2 \end{pmatrix} = \frac{3}{4} I_4 = S(S+1) \hat{I}_4 \Rightarrow S = \frac{1}{2} \text{ — спин частицы Дирака.}$$

Т.е. мы чисто математически поняли!

Т.е. спин — естественное свойство релятивистской частицы.

У  $S = \frac{1}{2}$  две независимых проекции:  $S_z = \pm \frac{1}{2}$ , а у волновой функции  $\psi_{E\vec{p}}$  — 4 независимых компоненты. Дело в том, что при заданном импульсе  $\vec{p}$   $E = \pm \sqrt{m^2 c^4 + c^2 \vec{p}^2} = \mathcal{E} \sqrt{m^2 c^4 + c^2 \vec{p}^2}$ , где квантовое число  $\mathcal{E} = \pm 1$  (знак энергии).

Но ещё нужно выбрать спиновое квантовое число, измеряемое одновременно с энергией  $E$  ( $c\mathcal{E}$  и  $\vec{p}$ ).

Проекция  $\hat{S}$  на  $\vec{p}$ , т.е.  $\vec{\lambda} \equiv \frac{\hat{S}\vec{p}}{|\vec{p}|}$  — спиральность — совпадает с проекцией  $\hat{j}$  на  $\vec{p}$  и поэтому является интегралом движения.  $[\lambda, H_D] = 0$ .

Итак, базисные волновые функции, задающие стационарные состояния частицы Дирака:

$$\psi_{\mathcal{E}\lambda\vec{p}} \longleftrightarrow E_{\mathcal{E}\vec{p}} = \mathcal{E} \sqrt{m^2 c^4 + c^2 \vec{p}^2}.$$

При этом  $\rho = \psi^+ \psi = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + |\psi_3|^2 + |\psi_4|^2$  — нужная плотность, где  $\varphi$  — неотрицательно определённая функция.

$\vec{j} = c\psi^+ \vec{\alpha} \psi = c\psi^+ \hat{\alpha} \psi$ , то нетрудно прямой подстановкой убедиться:  $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \vec{j} = 0$ .

## Примеры решения задач

Уравнение Дирака:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}_D \psi = [c\vec{\alpha} \vec{p} + mc^2 \beta] \psi,$$

$\vec{\alpha}$  и  $\beta$  — матрицы Дирака.

$$\hat{H}_D \psi_{\mathcal{E}\lambda \vec{p}} = E_{\mathcal{E}\vec{p}} \psi_{\mathcal{E}\lambda \vec{p}}, \quad \mathcal{E} = \text{sign}(E).$$

$\lambda$  — собственные значения:  $\hat{\lambda} = \frac{\vec{p} \hat{S}}{|\vec{p}|}$ .  $p$  — импульс,  $E_{\mathcal{E}\vec{p}} = \mathcal{E} \sqrt{m^2 c^4 + c^2 p^2}$ .

$$\psi_{\mathcal{E}\lambda \vec{p}} = \phi \exp^{-\frac{i}{\hbar} E_{\mathcal{E}\vec{p}} t + \frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{r}}, \quad \phi = \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \phi_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}.$$

$$\begin{pmatrix} mc^2 & c(\vec{\sigma} \vec{p}) \\ c(\vec{\sigma} \vec{p}) & -mc^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}, \quad \begin{cases} (mc^2 - E)u + c(\vec{\sigma} \vec{p})v = 0, \\ c(\vec{\sigma} \vec{p})u - (mc^2 + E)v = 0. \end{cases}$$

$$\det \parallel \dots \parallel = 0 \iff E^2 - m^2 c^4 - c^2 p^2 = 0.$$

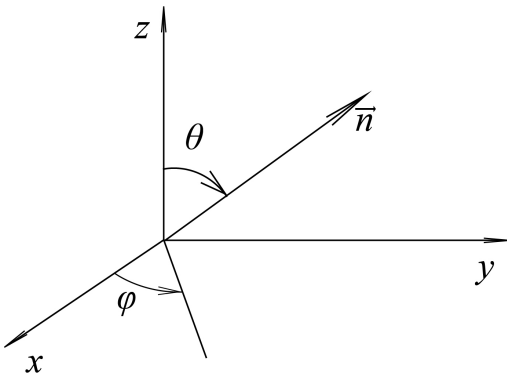
$$E = \pm \sqrt{m^2 c^4 + c^2 p^2} = \mathcal{E} \sqrt{m^2 c^4 + c^2 p^2}, \quad \mathcal{E} = \pm 1, \quad u — \text{спинор}.$$

$$v = \frac{c(\vec{\sigma} \vec{p})}{mc^2 + E_{\mathcal{E}\vec{p}}} u, \quad \phi = \begin{pmatrix} u \\ \frac{c(\vec{\sigma} \vec{p})}{mc^2 + E_{\mathcal{E}\vec{p}}} u \end{pmatrix}, \quad \hat{\lambda} \phi = \lambda \phi, \quad \lambda = \pm \frac{1}{2}.$$

$$\hat{\lambda} = \frac{\vec{p} \hat{S}}{|\vec{p}|} \equiv \vec{n} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \hat{\sigma} & 0 \\ 0 & \hat{\sigma} \end{pmatrix}, \quad \frac{1}{2} (\vec{n} \hat{\sigma}) u = \lambda u, \quad \frac{1}{2} (\vec{n} \hat{\sigma}) \frac{c|\vec{p}| \cdot (\vec{u} \hat{\sigma})}{mc^2 + E_{\mathcal{E}\vec{p}}} u = \lambda \frac{c|\vec{p}| \cdot (\vec{n} \hat{\sigma})}{mc^2 + E_{\mathcal{E}\vec{p}}} u.$$

$\boxed{\frac{1}{2} (\vec{n} \hat{\sigma}) u = \lambda u}$  — уравнение на 2-компон. спинор. Для Паули точно такая же.

$$u_{+\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \exp^{i\varphi} \end{pmatrix}, \quad u_{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} -\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \exp^{-i\varphi} \\ \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{pmatrix}.$$



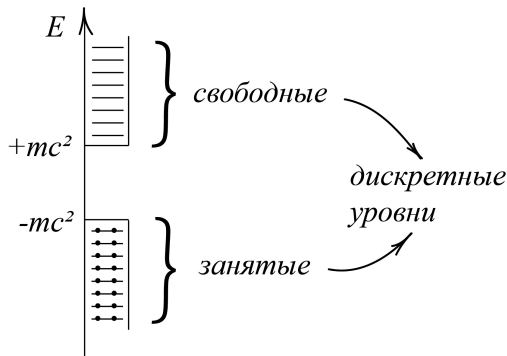
$$\psi_{\mathcal{E}\lambda \vec{p}} = N \begin{pmatrix} u_{\lambda}(\vec{n}) \\ \frac{c|\vec{p}| 2\lambda}{mc^2 + E_{\mathcal{E}\vec{p}}} u_{\lambda}(\vec{n}) \end{pmatrix} \exp^{-\frac{i}{\hbar} E_{\mathcal{E}\vec{p}} t + \frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{r}}.$$

Это явный вид плосковолнового решения. Условие нормировки:

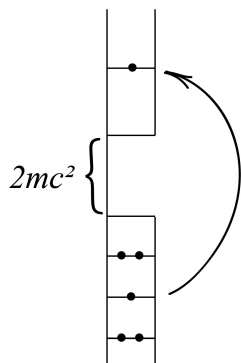
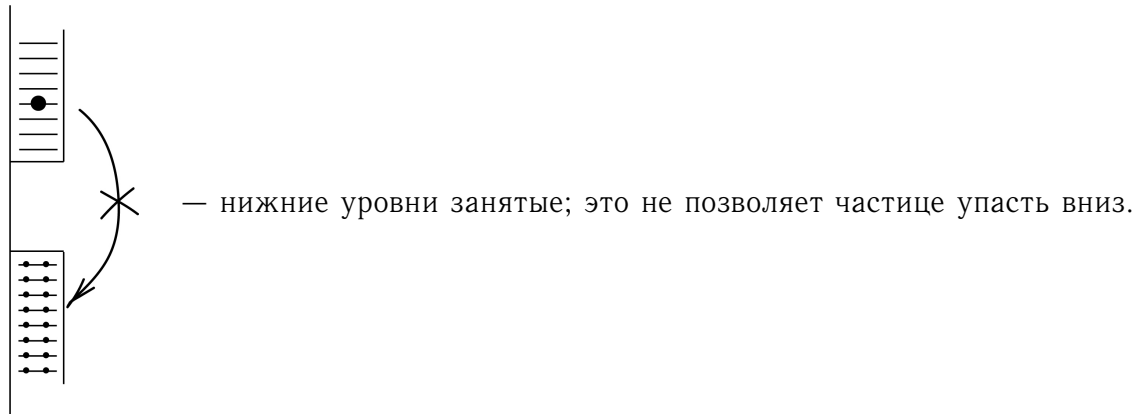
$$\int d^3\vec{r} = \frac{mc^2}{|E_{\vec{p}}|} \psi_{\vec{\epsilon}'\lambda'\vec{p}}^\dagger \psi_{\vec{\epsilon}\lambda\vec{p}} = \delta_{\vec{\epsilon}\vec{\epsilon}'} \delta_{\lambda\lambda'} \delta(\vec{p} - \vec{p}').$$

$$\vec{\epsilon} = +1, \lambda = +\frac{1}{2}, \vec{p} = p\vec{e}_x = mc\sqrt{3}\vec{e}_x, \theta = \frac{\pi}{2}, \varphi = 0.$$

$$u_{+\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}, \psi = N \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix} \exp^{-\frac{i \cdot 2mc^2}{\hbar}t + \frac{imc\sqrt{3}}{\hbar}x}, E_{\vec{p}} = 2mc^2.$$



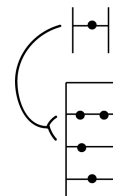
Дирак: фермионы + принцип запрета Паули  $\Rightarrow$  вакуум Дирака  $\Rightarrow$  вакуум не «вакуум», не пустота.



Частицу отправили вверх. Т.е. фотон с энергией более чем  $2mc^2$  пропал, и возникла частица со спином  $\frac{1}{2}$  (т.е. как бы дырочная проводимость и пара:  $\gamma\gamma \rightarrow e^+e^-$ ).

Т.е. Дирак предсказал античастицы ( $p^+p^-$ ,  $e^+e^-$ , нейтрон–антинейтрон и т.д.).

$e^+e^- \rightarrow \gamma\gamma$  — это обратный переход.



В реальности не наблюдаем одиночную частицу.

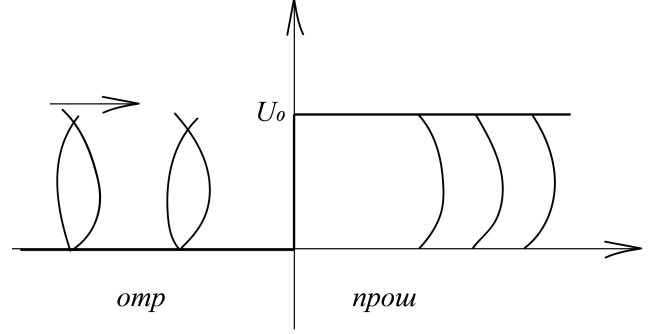
### Задача о парадоксе Клейна

Внешнее поле, действующее на частицу Дирака:

$$U(\vec{r}) = U_0 \theta(z).$$

$$\psi_{nad} \longrightarrow \mathcal{E} = +1, \lambda = +\frac{1}{2}, \vec{p} = p\vec{e}_z.$$

Коэффициент отражения  $R$ —?



$$\psi_{nad} = A\psi_{+1+\frac{1}{2}p\vec{e}_z} = AN \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ cp \\ mc^2 + E \end{pmatrix} \exp^{-\frac{i}{\hbar}Et + \frac{i}{\hbar}pz},$$

$A$  — некая амплитуда падающей волны.

$$\psi_{отр} = B\psi_{+1+\frac{1}{2}p\vec{e}_z} + D\psi_{+1-\frac{1}{2}p\vec{e}_z} = N \left\{ B \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ cp \\ mc^2 + E \end{pmatrix} + D \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ cp \\ 0 \end{pmatrix} \right\} \times$$

$$\times \exp^{-\frac{i}{\hbar}Et - \frac{i}{\hbar}pz}.$$

$$E - U_0 = \sqrt{m^2c^4 + c^2\tilde{p}^2} \implies \tilde{p} = \frac{1}{c}\sqrt{E - U_0^2 - m^2c^4},$$

$$\psi_{прош} = F\psi_{+1+\frac{1}{2}\tilde{p}\vec{e}_z} + G\psi_{+1-\frac{1}{2}\tilde{p}\vec{e}_z} = N \left\{ F \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ c\tilde{p} \\ mc^2 + E - U_0 \\ 0 \end{pmatrix} + G \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ c\tilde{p} \\ mc^2 + E - U_0 \end{pmatrix} \right\} \times$$

$$\times \exp^{-\frac{i}{\hbar}E + \frac{i}{\hbar}\tilde{p}z}.$$

Надо сшить на границе:

$$(\psi_{nad} + \psi_{отр}) \Big|_{t=0} = \psi_{прош} \Big|_{z=0}.$$

$$(1) A + D = F$$

$$(2) 0 + B = G$$

$$(3) \frac{cp}{mc^2 + E}(A - D) = \frac{c\tilde{p}}{mc^2 + E - U_0}F$$

$$(4) 0 + \frac{cp}{mc^2 + E}B = -\frac{c\tilde{p}}{mc^2 + E - U_0}G$$

Чтобы удовлетворяло условиям (2) и (4) надо, чтобы  $B = G = 0$ .

$$(1), (3) \Rightarrow \begin{cases} A + D = F \\ A - D = \kappa F \end{cases}, \quad \kappa = \frac{\tilde{p}(mc^2 + E)}{p(mc^2 + E - U_0)} = \frac{mc^2 + E}{mc^2 + E - U_0} \sqrt{\frac{(E - U_0)^2 - m^2 c^4}{-m^2 c^4 + E^2}}.$$

$$F = \frac{2}{1 + \kappa} A, \quad D = \frac{1 - \kappa}{1 + \kappa} A, \quad R = \left| \frac{D}{A} \right|^2 = \left( \frac{1 - \kappa}{1 + \kappa} \right)^2.$$

Почему задача о парадоксе Клейна?

Если  $E > U_0 + mc^2 \Rightarrow \kappa > 0$ , т.е.  $0 < R < 1$  ( $T = 1 - R \Rightarrow 0 < T < 1$ ).

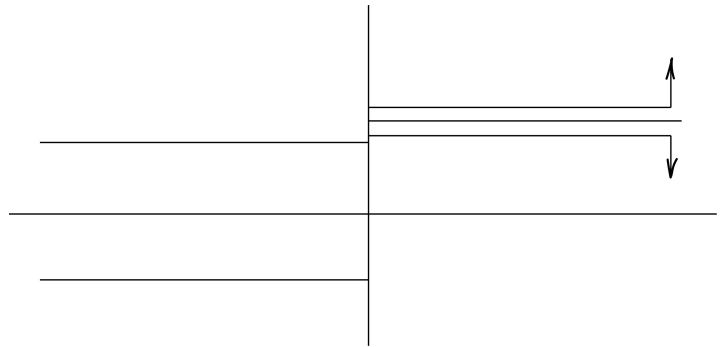
Уменьшаем энергию:  $U_0 - mc^2 < E < U_0 + mc^2$ .  $\kappa$  — чисто мнимое,  $\kappa = i\gamma$ .

$$R = \left| \frac{1 - i\gamma}{1 + i\gamma} \right|^2 = \frac{1 + \gamma^2}{1 + \gamma^2} = 1$$

— полное отражение,  $T = 0$ .

Если  $E < U_0 - mc^2$  (если  $U_0 > 2mc^2$ ), то  $\kappa < 0$  и  $R > 1 \Rightarrow T < 0$  — вот и парадокс.

Если слишком высокий барьер, то отражённый поток больше падающего, а за барьером:



Т.е. вакуум не остаётся без участия, рождённая частица — античастица, «анти» отражается, т.е. на барьере — рождение пар.

В релятивистских системах число частиц перестаёт быть постоянным.

Некое квантовое поле, не локализованное в пространстве (частица–античастица на фоне вакуума).

## Семинар 2

### Релятивистская ковариантность в теории Дирака

Уравнение Дирака:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -i\hbar c \left( \vec{\alpha} \frac{\partial \psi}{\partial \vec{r}} \right) + mc^2 \beta \psi \quad \Big| \times \beta.$$

$x^\mu = (ct, \vec{r})$  — хотим.

$$\left\{ i\hbar \left[ \beta_c^c \frac{\partial}{\partial t} + \beta \vec{\alpha} c \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \right] - mc^2 \right\} \psi = 0.$$

Определим  $\gamma^\mu = (\beta, \beta \vec{\alpha})$ .

$$\gamma^0 = \beta = \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & -I_2 \end{pmatrix}, \quad \vec{\gamma} = \beta \vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\gamma} \\ -\vec{\gamma} & 0 \end{pmatrix}, \quad (\gamma^+)^+ = -\vec{\gamma},$$

$\begin{pmatrix} 0 & \vec{\gamma} \\ -\vec{\gamma} & 0 \end{pmatrix}$  — матрица Паули,  $(\gamma^+)^+ = -\vec{\gamma}$  — антиэрмитова.

$$(\gamma^0)^2 = 1, \quad (\gamma^1)^2 = (\gamma^2)^2 = (\gamma^3)^2 = -I_2,$$

$$\gamma^0 \gamma^1 = \beta - \beta \alpha_1 = \alpha_1 = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_1 \\ \sigma_1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^1 \gamma^0 = \beta \alpha_1 \beta = -\alpha = -\begin{pmatrix} 0 & \sigma_1 \\ \sigma_1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Матрицы  $\gamma$  с разными индексами антикоммутируют.

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = \gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2g^{\mu\nu} I_4, \quad g^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} +1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Получается, что  $\boxed{[i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu - mc]\psi = 0}$  (1) — уравнение Дирака.

Т.е.  $\gamma^\mu$  — Лоренцев вектор.

Рассмотрим произвольные преобразования Лоренца.

$\chi^\mu \xrightarrow{\Lambda} \chi'^\mu = \Lambda^\mu_\nu \chi^\nu$  — линейное, однородное и ортогональное преобразование.

$\det(\Lambda) = \pm 1$ .  $+1$  — собственные  $\lambda$  (преобразование Лоренца).  $-1$  — несобственные  $\lambda$  (- преобразование Лоренца).

$\lambda_0^0 > 0$  — ортохронные  $\lambda$  — сохранение направления времени.

$\lambda_0^0 < 0$  — антиортохронные  $\lambda$ .

Обычно для связи системы отсчёта используют собственные ортохронные преобразования.

Поведение решений уравнения Дирака. Существует унитарное ( $\hat{S}^{-1} = \hat{S}^+$ ) преобразование:

$$\psi \xrightarrow{\lambda} \psi' = \hat{S}(\lambda)\psi.$$

$S^+$  — матрица преобразования дираковски сопряжённой функции  $\bar{\psi} \equiv \psi^\dagger \gamma^0$ .

$$\bar{\psi} \xrightarrow{\lambda} \bar{\psi}' = \bar{\psi} \hat{S}^+(\lambda).$$

Основное свойство  $S(\lambda)$ .

Рассмотрим преобразование уравнения Дирака:

$[i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu - mc]\psi = 0$ ,  $\chi^\mu \longrightarrow \chi'^\mu = \Lambda^\mu_\nu \chi^\nu$ ,  $\frac{\partial}{\partial \chi^\mu} = \partial_\mu = \Lambda^\nu_\mu \partial'_\nu$ ,  $\psi = \hat{S}(\lambda)\psi'$ , подставим в ур-е:

$$[i\hbar\gamma^\mu \Lambda^\nu_\mu \partial'_\nu - mc]\hat{S}(\lambda)\psi' = 0 \quad \Bigg| \times \hat{S}^+ \text{ слева,}$$

$$[i\hbar\hat{S}^+\gamma^\mu\hat{S}\Lambda^\nu_\mu\partial'_\nu - mc]\psi' = 0, \quad [i\hbar\gamma^\nu\partial'_\nu - mc]\psi' = 0, \quad \hat{S}^+\gamma^\mu S\Lambda^\nu_\mu = \gamma^\nu.$$

Окончательно:

$$\boxed{\hat{S}^+(\lambda)\gamma^\mu\hat{S}(\lambda) = \Lambda^\mu_\nu\gamma^\nu} \quad (2).$$

Следствия:

1. Плотность  $\rho = \psi^\dagger \psi \longrightarrow \bar{\psi}\gamma^0\psi$ ; плотность потока  $\vec{j} = c\psi^\dagger \vec{\alpha}\psi = c\bar{\psi}\vec{\gamma}\psi(\gamma^0\vec{\alpha} \equiv \vec{\gamma})$ .  $\bar{\psi}$  — пси-сопряжённое.

$$j^\mu = (c\rho, \vec{j}) = c\bar{\psi}\gamma^\mu\psi, \quad (\partial_\mu j^\mu = 0).$$

2.  $\bar{\psi}\gamma^\mu\psi$  —  $u$ -вектор.

3. Рассмотрим другие билинейные комбинации Дираковских спинорных волновых функций  $K \equiv \bar{\psi}\hat{K}\psi$ .

Определение. Матрица  $\gamma^5 \equiv i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3$  в стандартном представлении:  $\gamma^5 = \begin{pmatrix} 0 & \hat{I}_2 \\ \hat{I}_2 & 0 \end{pmatrix}$ .

Ясно, что  $\gamma^5 \gamma^\mu = -\gamma^\mu \gamma^5 \forall \mu$ .

Рассмотрим билинейную комбинацию  $\bar{\psi} \gamma^5 \psi \xrightarrow{\lambda} ?$

$$\bar{\psi}' \gamma^5 \psi' = \bar{\psi} \hat{S}^+ \gamma^5 \hat{S} \psi = i \bar{\psi} \underbrace{\hat{S}^+ \gamma^0 \hat{S}}_{=\lambda_\mu^0 \gamma^\mu} \underbrace{\hat{S}^+ \gamma^1 \hat{S}}_{=\lambda_\gamma^1 \mu^\nu} \underbrace{\hat{S}^+ \gamma^2 \hat{S}}_{=\lambda_\sigma^2 \mu^\tau} \underbrace{\hat{S}^+ \gamma^3 \hat{S}}_{=\lambda_\tau^3 \mu^\tau} \psi = \lambda_\mu^0 \lambda_\nu^1 \lambda_\sigma^2 \lambda_\tau^3 i \gamma^\mu \gamma^\nu \gamma^\tau \gamma^\tau.$$

Из-за свойства ортогональности преобразований Лоренца слагаемые, в которых в ряду индексов  $\mu\nu\sigma\tau$  есть совпадающие, порождают суммы типа  $\sum_\mu \lambda_\mu^0 \lambda^1 = 0 \Rightarrow$  выживают только те, где  $\mu, \nu, \sigma, \tau$  — различны, т.е.  $\mu\nu\sigma\tau$  есть перестановка 0123. Таким образом,

$$\bar{\psi}' \gamma^5 \psi' = (-1)^P \begin{pmatrix} \mu & \nu & \sigma & \tau \\ 0 & 1 & 2 & 3 \end{pmatrix} \cdot \lambda_\mu^0 \lambda_\nu^1 \lambda_\sigma^2 \lambda_\tau^3 \bar{\psi} (i \gamma^0 \gamma^1 \gamma^2 \gamma^3) \psi = \det(\lambda) \bar{\psi} \gamma^5 \psi.$$

$P$  — число перестановок. Т.е.  $p \equiv \bar{\psi} \gamma^5 \psi$  — псевдоскаляр.  $p' \equiv \bar{\psi}' \gamma^5 \psi' \xrightarrow{\lambda} p = \det(\lambda) P$ .

$A^\mu \equiv \bar{\psi} \gamma^\mu \gamma^5 \psi$  — псевдовектор. Таких конструкций 4 и они — ЛН произведение 3-х матриц Дирака. Произведение 2-х матриц:

$$\gamma^\mu \gamma^\nu = \frac{1}{2}(\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu) + \frac{1}{2}(\gamma^\mu \gamma^\nu - \gamma^\nu \gamma^\mu) = g^{\mu\nu} I_4 + \frac{1}{2}[\gamma^\mu \gamma^\nu].$$

Обычно определяют 6 линейно независимых матриц  $\sigma^{\mu\nu} = \frac{i}{4}[\gamma^\mu, \gamma^\nu]$  и вытаск., чтобы получалась эрмитова матрица.

$T^{\mu\nu} = \bar{\psi} \gamma^{\mu\nu} \psi$  — антисимметричный тензор 2-го ранга.

Добавим к списку  $\bar{\psi} \hat{I}_4 \psi = \bar{\psi} \psi \xrightarrow{\lambda} \bar{\psi}' \psi' = \bar{\psi} \hat{S}^* \hat{S} \psi = \bar{\psi} \psi$  — скаляр.

$$\begin{cases} S = \bar{\psi} \hat{I}_4 \psi — \text{скаляр}, P = \bar{\psi} \gamma^5 \psi — \text{псевдоскаляр}. \\ V^\mu = \bar{\psi} \gamma^\mu \psi — \text{вектор}. \\ A^\mu = \bar{\psi} \gamma^\mu \gamma^5 \psi — \text{псевдовектор}. \\ T^{\mu\nu} = \bar{\psi} \gamma^{\mu\nu} \psi — \text{антисимметричный тензор 2-го ранга}. \end{cases}$$

Всего 16. И 16 линейно независимых матриц  $I_4, \gamma^5, \gamma^\mu, \gamma^\mu \gamma^5, \sigma^{\mu\nu}$  — образуется базис в пространстве матриц  $4 \times 4$ .

## Клиффордов вакуум

Взаимодействие с векторным полем (электромагнитное поле  $A^\mu$ ).

Уравнение:  $\hat{p}^\mu \longrightarrow \hat{P}^\mu = \hat{p}^\mu - \frac{e}{c} A^\mu$ .

Уравнение Дирака:  $\{[i\hbar\partial_\mu - \frac{e}{c} A_\mu] \gamma^\mu - mc\} \psi = 0$  — ковариантная форма уравнения Дирака.

$\frac{i\hbar\partial\psi}{\partial t} = [c\vec{\alpha}\vec{P} + mc\beta + e\varphi] \psi$  — гамильтонова форма уравнения Дирака.

## Нерелятивистское приближение

$\psi_\varepsilon = +1\lambda\vec{p} \Big|_{|\vec{p}| \rightarrow 0 \ (|\vec{p}| < mc)} \longrightarrow N \left( -\frac{u\lambda}{2c} u\lambda \right) e, -\frac{v}{2c} u\lambda \longrightarrow 0$  в нерелятивистском приближении.



Пусть  $\psi = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \exp^{-\frac{i}{\hbar} mc^2 t}$ .

$$\begin{pmatrix} i\hbar \frac{\partial u}{\partial t} \exp^{-\frac{i}{\hbar} mc^2 t} \\ i\hbar \frac{\partial v}{\partial t} \exp^{-\frac{i}{\hbar} mc^2 t} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} mc^2 + e\varphi & c(\vec{\sigma}\hat{p}) \\ c(\vec{\sigma}\hat{p}) & -mc^2 + e\varphi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \exp^{-\frac{i}{\hbar} mc^2 t}.$$

$$i\hbar \frac{\partial u}{\partial t} \exp^{-\frac{i}{\hbar} mc^2 t} + mc^2 u \exp^{-\frac{i}{\hbar} mc^2 t} = mc^2 u \exp^{-\frac{i}{\hbar} mc^2 t} + e\varphi u \exp^{-\frac{i}{\hbar} mc^2 t} + c(\vec{\sigma}\hat{p})v \exp^{-\frac{i}{\hbar} mc^2 t},$$

$$i\hbar \frac{\partial v}{\partial t} \exp^{-\frac{i}{\hbar} mc^2 t} + mc^2 v \exp^{-\frac{i}{\hbar} mc^2 t} = c(\vec{\sigma}\hat{p})u \exp^{-\frac{i}{\hbar} mc^2 t} - mc^2 v \exp^{-\frac{i}{\hbar} mc^2 t} + e\varphi v \exp^{-\frac{i}{\hbar} mc^2 t}.$$

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial u}{\partial t} = e\varphi u + c(\vec{\sigma}\hat{p})v, \\ i\hbar \frac{\partial v}{\partial t} + 2mc^2 v - e\varphi v = c(\vec{\sigma}\hat{p})u. \end{cases}$$

$$i\hbar \frac{\partial v}{\partial t} \sim \mathcal{E}_{\text{нерел.} v}, \mathcal{E}_{\text{нерел.}} \ll mc^2 \implies \boxed{v \simeq \frac{c(\vec{\sigma}\hat{p})}{2mc} u}.$$

### Примеры решения задач

1.  $\bar{\psi}\gamma^\mu(1 - \gamma^5)\psi = V^\mu - A^\mu$ .

2. Уравнение Дирака для частицы в электромагнитном поле  $A^\mu = (\varphi, \vec{A})$ :

Гамильт.:  $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} [c\vec{\alpha} \underbrace{\hat{\vec{P}}}_{\equiv \hat{\vec{p}} - \frac{e}{c}\vec{A}} + mc^2\beta + e\varphi]\psi$ .

3. Нерелятивистский предел (2) — это уравнение Паули.

4. Вид  $\vec{A}$  для  $B = eB_z$ :

$$\vec{B} = \text{rot}\vec{A}, B_z = \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \begin{cases} \vec{A} = xB\vec{e}_y \\ \vec{A}' = -yB\vec{e}_x \\ \vec{A}'' = \frac{B}{2}(x\vec{e}_y - y\vec{e}_x) \end{cases}.$$

Пример. Найти уровни энергии электрона в однородном постоянном поле.

$$\vec{B} = \text{rot}\vec{A}, B_z = \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \begin{cases} \vec{A} = xB\vec{e}_y \\ \vec{A}' = -yB\vec{e}_x \\ \vec{A}'' = \frac{B}{2}(x\vec{e}_y - y\vec{e}_x) \end{cases},$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = [c\vec{\alpha} \underbrace{\hat{\vec{P}}}_{\equiv \hat{\vec{p}} - \frac{e}{c}\vec{A}} + mc^2\beta + e\varphi]\psi, \psi_E = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \exp^{-\frac{i}{\hbar} Et},$$

$$E \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} mc^2 & c(\vec{\sigma}\hat{\vec{P}}) \\ c(\vec{\sigma}\hat{\vec{P}}) & -mc^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}.$$

$$\begin{cases} [mc^2 - E]u + c(\vec{\sigma}\hat{\vec{P}})v = 0, \\ c(\vec{\sigma}\hat{\vec{P}})u - (mc^2 + E)v = 0, \end{cases} \text{ выразим } v, \quad v = \frac{c(\vec{\sigma}\hat{\vec{P}})}{mc^2 + E}u, \quad \left( mc^2 - E + \frac{c^2(\vec{\sigma}\hat{\vec{P}})^2}{mc^2 + E} \right) u = 0.$$

$(\vec{\sigma}\hat{P})^2$ ,  $\hat{a}$  и  $\hat{b}$  — два произвольных вектора.

$$(\vec{\sigma}\hat{a})(\vec{\sigma}\hat{b}) = (\hat{a} - \hat{b}) + i\vec{\sigma}[\hat{a} \times \hat{b}], \quad (\vec{\sigma}\hat{P})^2 = \hat{p}^2 + i\vec{\sigma}[\hat{p} \times \hat{p}],$$

$$\begin{aligned} [\hat{p} \times \hat{p}]_z &= \hat{p}_x \hat{p}_y - \hat{p}_y \hat{p}_x = (\hat{p}_x \frac{e}{c} A_x)(\hat{p}_y + \frac{e}{c} \hat{A}_y) - (\hat{p}_y + \frac{e}{c} A_y)(\hat{p}_x + \frac{e}{c} A_x) = \\ &= \frac{e}{c} \{ \hat{p}_x A_y + A_x \hat{p}_y - A_y \hat{p}_x - \hat{p}_y A_x \} = -i\hbar \frac{e}{c} \left[ \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right] = -i\hbar \frac{e}{c} B_z \equiv \frac{eB}{c} (-i\hbar). \end{aligned}$$

$$(\vec{\sigma}\hat{P})^2 = \left( \hat{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + \frac{e\hbar}{c} B \hat{\sigma}_z, \text{ и тогда}$$

$$\left\{ m^2 c^4 - E^2 + \frac{1}{2m} \left[ \hat{p}_x^2 + \left( \hat{p}_x^2 + \frac{eB}{c} x \right) + p_z^2 \right] + \frac{e\hbar B}{2mc} \sigma_z \right\} u = 0.$$

$u = U(x, y, z)$ . Введём  $\hat{p}_y U = p_y U$ ,  $\hat{p}_z U = p_z U$ , требуем  $\sigma_z U = \sigma U$ ,  $\sigma = \pm 1$ .

Таким образом:  $U(x, y, z) = \phi(x) \chi_\sigma \exp \frac{i}{\hbar} p_y y + \frac{i}{\hbar} p_z z$ ,  $\chi_\sigma$  — спинор.

$$\left\{ \frac{m^2 c^4 - E^2}{2mc^2} + \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2m} \left( p_y + \frac{eB}{c} x \right)^2 + \frac{\hat{p}_z^2}{2m} + \frac{e\hbar B}{2mc} \sigma \right\} \phi(x) = 0.$$

$$x \longrightarrow x' = x + \frac{cp_y}{eB}, \quad p'_x = \hat{p}_x, \quad \Omega = \frac{eB}{mc}.$$

$$\left\{ \frac{\hat{p}_x'^2}{2m} + \frac{m\Omega^2 x'^2}{2} \right\} \phi(x) = \underbrace{\left\{ \frac{E^2 - m^2 c^4}{2mc^2} - \frac{p_z^2}{2m} - \frac{\hbar\Omega}{2} \sigma \right\}}_{\equiv \mathcal{E}} \phi(x).$$

Значит:  $\mathcal{E} = \mathcal{E}_n = \hbar\Omega \left( n + \frac{1}{2} \right)$ .

$$\phi_n(x') = \left( \frac{m\Omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \exp^{-\frac{m\Omega x'^2}{2\hbar}} H_n \left( x' \sqrt{\frac{m\Omega}{\hbar}} \right),$$

$$E^2 - m^2 c^4 = 2mc^2 \left[ \hbar\Omega \left( n + \frac{1}{2} \right) + \frac{p_z^2}{2m} - \frac{\hbar\Omega}{2} \sigma \right],$$

$$E = \mathcal{E} \sqrt{m^2 c^4 + c^2 p_z^2 + 2mc^2 \hbar\Omega \left( n + \frac{1}{2} - \frac{\sigma}{2} \right)},$$

$\mathcal{E} = \pm 1, \frac{\sigma}{2}$  — проекция спина на ось  $z$ ,  $\frac{\sigma}{2} = m_S$ .

$$E_{\mathcal{E}_n p_z m_S} = \mathcal{E} \sqrt{m^2 c^4 + c^2 p_z^2 + 2mc^2 \hbar\Omega \left( n + \frac{1}{2} - m_S \right)} — \text{уровни энергии.}$$

В системе отсчёта  $p_z = 0$  спектр дискретный; задаётся  $n$  и  $m_S$ .

Соответствующие уровни — уровни Ландау, между ними возможны переходы.

Соответствующие собственные функции:

$$\psi_{\mathcal{E}_n p_z m_S} = N \left( \frac{\phi_n(x') \chi_{m_S}}{\frac{c(\vec{\sigma}\hat{P})}{mc^2 + E} \phi_n(x') \chi_{m_S}} \right) \exp^{-\frac{i}{\hbar} Et + \frac{i}{\hbar} p_y y + \frac{i}{\hbar} p_z z}, \quad x' = x + \frac{cp_y}{eB}.$$

Пример. Доказать, что  $A^\mu = \bar{\psi}\gamma^\mu\gamma^5\psi$  является псевдовектором.

$$A^\mu \xrightarrow{\lambda} A'^\mu = \det(\lambda)\lambda_\nu^\mu A^\nu.$$

$$A'^\mu = \bar{\psi}'\gamma^\mu\gamma^5\psi' = \bar{\psi}\hat{S}^+\gamma^\mu\gamma^5\hat{S}\psi = \bar{\psi}\underbrace{\hat{S}^+\gamma^\mu\hat{S}}_{=\lambda_\nu^\mu\gamma^\nu}\underbrace{\hat{S}^+\gamma^5\hat{S}}_{=\det(\lambda)\gamma^5}\psi,$$

$$A'^\mu = \lambda_\nu^\mu\bar{\psi}\gamma^\nu\gamma^5\psi\det(\lambda) = \det(\lambda)\lambda_\nu^\mu A^\nu, \quad \gamma^5\psi_{\mathcal{E}\lambda\vec{p}} = \mathcal{E}(2\lambda)\psi_{\mathcal{E}\lambda\vec{p}}, \quad \mathcal{E} = \pm 1, \quad 2\lambda = \pm 1.$$

$\eta = \pm 1$  — хиральность.

$$\hat{H} = c\underbrace{\vec{\alpha}}_{=\gamma^0\vec{\gamma}} + \underbrace{mc^2}_{\rightarrow 0}\beta. \text{ При } m = 0: \begin{pmatrix} [\gamma^5, \vec{\alpha}] = 0 \\ [\gamma^5, \beta] = 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^5\beta = -\beta\gamma^5.$$

$\eta = +1$  — правохиральная частица.

$\eta = -1$  — левохиральная частица.

Масса нейтрино — единственный момент, не укладывающийся в стандартную модель.

$$\psi(t, \vec{r}) = \begin{pmatrix} u(t, \vec{r}) \\ v(t, \vec{r}) \end{pmatrix} \exp^{-\frac{i}{\hbar}mc^2t}, \quad v(t, \vec{r}) \simeq \frac{(\vec{\sigma}\vec{p})}{2mc}u(t, \vec{r}).$$

Динамика нерелятивистской частицы Дирака описывается двухкомпонентной волновой функцией  $u(t, \vec{r})$ :

$$i\hbar\frac{\partial u}{\partial t} = e\varphi u + c(\vec{\sigma}\vec{p})v = e\varphi u + \frac{1}{2m}(\vec{\sigma}\vec{p})^2u = \left\{ \frac{(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A})^2}{2m} + \frac{e\hbar}{2mc}\underbrace{\vec{\sigma}\vec{p}}_{\equiv \mu_0\vec{S}}\vec{B} + e\varphi \right\} u,$$

$\mu_0$  — магнетон Бора.

$$i\hbar\frac{\partial u}{\partial t} = \left\{ \frac{(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A})^2}{2m} + e\varphi - 2\mu_0\vec{S}\vec{B} \right\} u$$

— получили уравнение Паули, т.е. нерелятивистское приближение корректно. Шрёдингер — дрожание.

Преобразование Фолди–Ваутхайзена и квазирелятивистское ( $\sim \frac{1}{c^2}$ ) приближение

$$\hat{H} = c(\vec{\alpha}\vec{p}) + mc^2\beta \Big|_{\hat{p}\psi=\vec{p}\psi} = \begin{pmatrix} mc^2 & c(\vec{\sigma}\vec{p}) \\ c(\vec{\sigma}\vec{p}) & -mc^2 \end{pmatrix} \equiv \hat{F} + \hat{G}.$$

$$\text{Чётная часть } \hat{F} \equiv \begin{pmatrix} mc^2 & 0 \\ 0 & -mc^2 \end{pmatrix}, \quad \hat{G} = \begin{pmatrix} 0 & c(\vec{\sigma}\vec{p}) \\ c(\vec{\sigma}\vec{p}) & 0 \end{pmatrix}.$$

Рассмотрим некоторое унитарное преобразование:

$$\hat{U} = \exp^{i\hat{S}} = \exp^{i\frac{\hat{G}}{|\vec{p}|c}\theta} = 1 + \frac{i\hat{G}}{|\vec{p}|c}\theta + \frac{1}{2!}(-i)\frac{\hat{G}^2}{p^2c^2}\theta^2 + \dots,$$

$$\hat{G}^2 = \begin{pmatrix} 0 & c(\vec{\sigma}\vec{p}) \\ c(\vec{\sigma}\vec{p}) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & c(\vec{\sigma}\vec{p}) \\ c(\vec{\sigma}\vec{p}) & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c^2(\vec{\sigma}\vec{p})^2 & 0 \\ 0 & c^2(\vec{\sigma}\vec{p})^2 \end{pmatrix} = c^2p^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\hat{U} = I_4 \left( 1 - \frac{\theta^2}{2} + \frac{\theta^4}{4} + \dots \right) + \frac{i\hat{G}}{c|\vec{p}|} \left( \theta - \frac{\theta^3}{3!} + \frac{\theta^5}{5!} - \dots \right) = \cos(\theta) + \frac{i\hat{G}}{c|\vec{p}|} \sin \theta = \hat{U}.$$

$$\begin{aligned}
\text{Перейдём в } \hat{H}' &= \hat{U} \hat{H} \hat{U}^+ = \left[ \cos(\theta) + \frac{i\hat{G}}{c|\vec{p}|} \sin(\theta) \right] [\hat{F} + \hat{G}] \left[ \cos(\theta) - \frac{i\hat{G}}{c|\vec{p}|} \sin(\theta) \right] = \\
&= \left[ \cos(\theta) + \frac{i\hat{G}}{c|\vec{p}|} \sin(\theta) \right] \left[ \hat{F} \cos(\theta) - \frac{i\hat{F}\hat{G}}{c|\vec{p}|} \sin(\theta) - ic|\vec{p}| \sin(\theta) + \hat{G} \cos(\theta) \right] = \\
&= \hat{F} \cos^2 \theta + \frac{i\hat{G}\hat{F}}{c|\vec{p}|} \sin \theta \cos \theta - \frac{i\hat{F}\hat{G}}{c|\vec{p}|} \sin \theta \cos \theta + \frac{\hat{G}\hat{F}\hat{G}}{c^2 p^2} \sin^2 \theta - ic|\vec{p}| \sin \theta \cos \theta + \hat{G} \sin^2 \theta + \hat{G} \cos^2 \theta + \\
&\quad + i\hat{C}|\vec{p}| \sin \theta \cos \theta = \hat{F} \cos 2\theta + \hat{G} + \frac{i\hat{G}\hat{F}}{c|\vec{p}|} \sin 2\theta.
\end{aligned}$$

$$\hat{G}\hat{F} = \begin{pmatrix} 0 & c(\vec{\sigma}\vec{p}) \\ c(\vec{\sigma}\vec{p}) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} mc^2 & 0 \\ 0 & -mc^2 \end{pmatrix}.$$

Если подобрать  $\theta$  так, чтобы  $\hat{H}$  диагонализ., то  $\hat{H}' = \beta \sqrt{m^2 c^4 + c^2 \vec{p}^2}$ . Тогда

$$\theta = \frac{1}{2} \arcsin \left( \frac{c|\vec{p}|}{\sqrt{m^2 c^4 + c^2 \vec{p}^2}} \right).$$

Если использовать приближённое значение  $\theta \approx \frac{|\vec{p}|}{2mc} \ll 1$ ,  $\frac{1}{c|\vec{p}|} \hat{G} \theta = \frac{\hat{G}}{2mc^2}$  — диагонализует  $\hat{H}$  с точностью до  $\sim \left( \frac{|\vec{p}|}{mc} \right)^1$ .

$$\hat{H}' = \hat{F}' + \hat{G}', \quad \hat{H}'' = \hat{F}'' + \hat{G}'' \longleftarrow \sim \left( \frac{|\vec{p}|}{mc} \right)^2, \quad \hat{H}''' = \hat{F}''' + \hat{G}''' \longleftarrow \sim \left( \frac{|\vec{p}|}{mc} \right).$$

$$\hat{F}''' \equiv \hat{\beta} \left[ \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{\hat{p}^4}{8m^3 c^2} - 2\mu_0 \hat{S} \vec{B} + e\varphi \right] - \frac{i\hbar}{8m^2 c^2} \left\{ 2i\hbar (S \text{rot} \vec{E} + 4\vec{S}[\vec{E} \times \hat{p}] + \hbar \text{div}(\vec{E})) \right\}.$$

$$\vec{B} = \text{rot} \vec{A}, \quad \vec{E} = -\text{grad} \varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}.$$

$$\hat{H}_{Pauli} + \hat{V}_{Vl} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + e\varphi - 2\mu_0 \hat{S} \vec{B} + \hat{V}_{кин} + \hat{V}_{ls} + \hat{V}_{\infty},$$

$\hat{V}_{ls}$  — спин-орбит.,  $\hat{V}_{\infty}$  — Дарвин.

$$\hat{V}_{кин} = -\frac{\hat{p}^4}{8m^3 c^2}, \quad \hat{V}_{ls} = -\frac{e\hbar}{4m^2 c^2} \{ i\hbar [\vec{S} \text{rot} \vec{E}] + 4\vec{S}[\vec{E} \times \hat{p}] \},$$

$$\vec{E} = +\frac{Ze}{r^3} \vec{r}, \quad \text{rot} \vec{E} = 0, \quad \hat{V}_{ls} = -\frac{Ze^2 \hbar}{2m^2 c^2} \frac{1}{r^3} \underbrace{\vec{S}[\vec{r} \times \vec{p}]}_{= \hbar \vec{l}} = -\frac{Ze^2 \hbar^2}{2m^2 c^2} \frac{1}{r^3} \vec{S} \vec{l}, \quad \hat{V}_{\alpha} = -\frac{e^2 \hbar^2}{8m^2 c^2} \text{div} \vec{E}.$$

### Семинар 3

Тождественные частицы — одинаковые массы, спины, заряды — неразличимы.

## Принцип неразличимости тождественных частиц

Тождественные частицы — частицы с одинаковыми массами, спинами и зарядами (всеми!).

Аксиоматический принцип (1). Тождественные частицы принципиально неразличимы: не существует измерительной процедуры, описываемой оператором  $\hat{F}$ , с помощью которой можно различить 2 состояния квантовой системы, отличающиеся только перестановкой тождественных частиц.

Определение.  $\hat{P}_{ij}$  — оператор парной перестановки  $i$ -ой и  $j$ -ой частиц:

$$\psi(\vec{r}_1 S_1, \vec{r}_2 S_2, \dots, \vec{r}_i S_i, \dots, \vec{r}_j S_j, \dots, \vec{r}_N S_N), \hat{P}_{ij} \psi = \psi(\vec{r}_1 S_1, \vec{r}_2 S_2, \dots, \vec{r}_j S_j, \dots, \vec{r}_i S_i, \dots, \vec{r}_N S_N).$$

Существует наблюдаемая  $\hat{F} \forall i, j$  (тождественных частиц):  $[\hat{F}, \hat{P}_{ij}] = 0$  ( $\equiv$  принципу отбора наблюдаемых).

Для  $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3)$ :  $\hat{p}_{12} : \hat{p}_1 - \hat{p}_2$  — не наблюдаемая,  $\hat{P} = \hat{p}_1 + \hat{p}_2 + \hat{p}_3$  — наблюдаемая.

Можно ли придумать измерения, подтверждающие факт неразличимости частиц?

Экспериментальные эффекты, в которых проявляется неразличимость тождественных частиц — «обменные эффекты». Обменные эффекты делятся на 3 типа:

- обменные расщепления уровней энергии;
- правила отбора квантовых чисел систем тождественных частиц;
- обменные эффекты в рассеянии частиц (позже).

Обменные эффекты для  $N = 2$  частиц: существует единственный оператор парной перестановки  $\hat{P}_{12}$ , и для  $\forall \hat{F}$  (опер. наблюд.):  $[\hat{F}, \hat{P}_{12}] = 0$ .

Пусть  $\hat{F}_1, \dots, \hat{F}_S$  — полный набор наблюдаемых (ПНН), тогда все общие собственные функции  $\psi_{f_1, \dots, f_S}(\vec{r}_1 S_1, \vec{r}_2 S_2)$  — собственные функции  $\hat{P}_{12}$ . Ясно, что собственные значения  $\hat{P}_{12} \rightarrow \pm 1$ , т.е.  $\forall$  собственная функция  $\forall$  ПНН чётна или нечётна по отношению к перестановке частиц:  $\psi(\vec{r}_1 S_1, \vec{r}_2 S_2) = \pm \psi(\vec{r}_2 S_2, \vec{r}_1 S_1)$ .

+: для  $S = 0, 1, 2, \dots$ ;

–: для  $S = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots$

Бозоны — частицы, подчиняющиеся статистике Бозе–Эйнштейна, то, что они с целым спином — это следствие теоремы о связи спина со статистикой.

Рассмотрим систему 2-х частиц со спином  $\frac{1}{2}$ . Все интересные и частые задачи в природе именно с  $S = \frac{1}{2}$ .

Пусть нужно решить:  $\hat{H}\psi = E\psi$ , если

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} + U(\vec{r}_1) + U(\vec{r}_2) + V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$$

— т.е. вроде уровни энергии и не зависят от спина, если бы не принцип неразличимости.

Нам мешает  $V \Rightarrow$  пусть  $\hat{V}$  достаточно мало для использования теории возмущений:

$$\sim \hat{V} : \hat{H} = \hat{H}_0 = \sum_{i=1}^2 \left[ \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + U(\vec{r}_i) \right] \equiv \dots$$

Тогда, если известно решение одночастичной задачи (коорд.):

$$\left[ \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\vec{r}) \right] \phi_n(\vec{r}) = \mathcal{E}_n \Phi_n(\vec{r}).$$

Тогда собственные функции  $\hat{H}_0 : \psi^{(0)}(\vec{r}_1 S_1, \vec{r}_2 S_2) = \Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \chi(S_1, S_2)$ , а  $\Phi_{n_1 n_2}(\vec{r}_1 \vec{r}_2) = \Phi_{n_1}(\vec{r}_1) \Phi_{n_2}(\vec{r}_2)$ ; соответствующие собственные значения:  $E_{n_1 n_2}^{(0)} = \mathcal{E}_{n_1} + \mathcal{E}_{n_2}$ .

НО (!): если частицы тождественны, нужно ещё подчинить наше решение принципу неразличимости:  $\psi^{(0)}(\vec{r}_1 S_1, \vec{r}_2 S_2) = -\psi^{(0)}(\vec{r}_2 S_2, \vec{r}_1 S_1)$ .

В пространстве функций  $\chi \exists$  полный ортонормированный базис:

$$\chi_{SM_S}(S_1 S_2) \longrightarrow S = \underbrace{0}_{\rightarrow M_S=0}, \underbrace{1}_{M_S=+1,0,-1},$$

$M_S = 0$  — синглетное состояние,  $M_S = +1, 0, -1$  — триплетное состояние.

$$\chi_{00}(S_1 S_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right\},$$

$$\chi_{1+1}(S_1 S_2) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\chi_{10}(S_1 S_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right\},$$

$$\chi_{1-1}(S_1 S_2) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

т.е.  $\chi_{SM_S}(S_1 S_2) = (-1)^{S+1} \chi_{SM_S}(S_1 S_2)$ , и достаточно тогда потребовать, чтобы  $\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = (-1)^S \Phi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)$ .

Значит,  $\Psi_{n_1 n_2 SM_S, n_1 \neq n_2}^{(0)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \Phi_{n_1}(\vec{r}_1) + \Phi_{n_2}(\vec{r}_2) + (-1)^S \Phi_{n_1}(\vec{r}_2) \Phi_{n_2}(\vec{r}_1) \} \chi_{SM_S}(S_1 S_2)$ .

Есть С.Ф.  $\hat{H}_0$  с С.З.  $F_{n_1 n_2}^{(0)} = \mathcal{E}_{n_1} + \mathcal{E}_{n_2}$  и С.Ф.  $\hat{P}_{1,2}$  с С.З.  $-1$ .

Для  $n_1 = n_2 \equiv n$  возможно только состояние с  $S = 0$  и  $M_S = 0$ :

$$\Psi_{nnS_1 n_1}^{(0)} = \Psi_{nn00}^{(0)}(\vec{r}_1 S_1, \vec{r}_2 S_2) = \Phi_n(\vec{r}_1) \Phi_n(\vec{r}_2).$$

Перейдём к первому порядку теории возмущений:  $\sim V^1$ , поправка первого порядка:

$$E_{n_1 n_2 S}^{(1)} = \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \Psi_{n_1 n_2 SM_S}^{(0)+} \hat{V} \Psi_{n_1 n_2 SM_S}^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \{ \phi_{n_1}^*(\vec{r}_1) \phi_{n_2}^*(\vec{r}_2) +$$

$$+ (-1)^S \phi_{n_1}^*(\vec{r}_2) \phi_{n_2}^*(\vec{r}_1) \} V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \{ \phi_{n_1}(\vec{r}_1) \phi_{n_2}(\vec{r}_2) + (-1)^S \phi_{n_1}(\vec{r}_2) \phi_{n_2}(\vec{r}_1) \} =$$

$$= \{ \text{заметим, что } V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = V(r_2 - r_1) \} = C_{n_1 n_2} + (-1)^S I_{n_1 n_2},$$

где  $C_{n_1 n_2} \equiv \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) |\phi_{n_1}(\vec{r}_1)| \cdot |\phi_{n_2}(\vec{r}_2)|^2$  — кулоновский интеграл.

$$I_{n_1 n_2} = \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \phi_{n_1}^*(\vec{r}_1) \phi_{n_1}(\vec{r}_2) \phi_{n_2}^*(\vec{r}_1) \phi_{n_2}(\vec{r}_2)$$

— обменный интеграл.

$$E_{nm}^{(0)} \text{ — } \left. \begin{array}{c} \text{---} \end{array} \right\} S=0,1 \quad |\Delta E| = 2|I_{n_1 n_2}|.$$

$$\begin{array}{lcl}
& & \text{----- } S=0 \\
I_{n_1 n_2} > 0 \implies & & \text{----- } S=1 \\
& & \text{----- } S=1 \\
I_{n_1 n_2} < 0 \implies & & \text{----- } S=0
\end{array}$$

А если  $N \geq 3$ ?

$\geq 3$  — оператор парной перестановки  $\hat{P}_{ij}$ .

Проблема: сами  $\hat{P}_{ij}$  не являются наблюдаемыми, т.к. они не коммутируют друг с другом. Например,

$$\hat{P}_{12}\hat{P}_{23}\psi(1, 2, 3) = \hat{P}_{12}\psi(1, 3, 2) = \psi(2, 3, 1), \quad \hat{P}_{23}\hat{P}_{12}\psi(1, 2, 3) = \hat{P}_{23}\psi(2, 1, 3) = \psi(3, 1, 2),$$

т.е.  $[\hat{P}_{ij}, \hat{P}_{jk}] \neq 0 \quad i \neq k \implies$  они не наблюдаемые. Т.е. общие собственные функции всех  $\hat{P}_{ij}$  существуют, но не образуют полного базиса в гильбертовом пространстве состояний  $\implies$  при построении базиса из собственных функций  $\hat{H}$  нельзя обобщить только полностью симметричной или антисимметричной волновой функцией!

Нужен новый оператор «перестановочной симметрии»:

$$\hat{Q} = f(\hat{P}_{ij}), \quad [\hat{Q}, \hat{P}_{ij}] = 0 \quad \forall ij. \quad N = 2, \quad \hat{Q} = \hat{P}_{12}.$$

### Обменные эффекты в двухчастичной системе

1)  $\forall \hat{F}, \quad \forall ij \quad [\hat{F}, \hat{P}_{ij}] = 0$  — принцип неопределённости.

2)  $\psi(\vec{r}_1 S_1 \vec{r}_2 S_2) = \pm \psi(\vec{r}_2 S_2 \vec{r}_1 S_1)$ ,  $+$ :  $S = 0, 1, 2$ ,  $-$ :  $S = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$

3)  $|\Delta E| = 2 \left| \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \phi_{n_1}^*(\vec{r}_1) \phi_{n_1}(\vec{r}_2) \phi_{n_2}^*(\vec{r}_2) \phi_{n_2}(\vec{r}_1) \right|$ .

$$\begin{aligned}
4) \quad \hat{H} &= \frac{\hat{p}^2}{2(2m)} + \frac{\hat{p}^2}{2(\frac{m}{2})} + V(|\vec{r}|), \quad \psi - \text{функция } (\vec{R} \cdot \phi_{oml}(\vec{r}) \cdot \chi_{SM_S}), \quad \vec{R} = \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2}, \quad \vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2, \\
&\frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right\}.
\end{aligned}$$

$$\phi_{oml}(-\vec{r}) = \phi_{oml}(\vec{r}), \quad Y_{lm}(\pi - \theta, \varphi + \pi) = (-1)^l Y_{lm}(\nu, \varphi),$$

$$S = 0 \implies l = 0, 2, 4, \dots, \quad S = 1 \implies l = 1, 3, 5, \dots, \quad l + S - \text{чётное}.$$

Пример.  $N = 2, \quad S = \frac{1}{2}$ .  $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2}{2}$ . Найти минимальное значение энергии системы при полном спине 1 ( $S = 1$ ).

$$\vec{R} = \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2} \quad (\hat{p} = \hat{p}_1 + \hat{p}_2), \quad \vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \quad (\hat{p} = \frac{\hat{p}_1 - \hat{p}_2}{2}).$$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2M} + \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + \frac{k\vec{r}^2}{2} \quad (M = 2m, \quad \mu = \frac{m}{2}).$$

Собственные функции:  $\frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \exp \frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{R}$ . Собственные значения:  $\mathcal{E}_{\mathcal{M}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} \xrightarrow{\min} 0$ .

Собственные функции:  $\phi_{nlm}(\vec{r}) \rightarrow \mathcal{E}_n = \hbar\omega \left(n + \frac{3}{2}\right)$ ,  $\omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$ .

$S = 1 \Rightarrow (l + S \text{ чётно}) \quad l = 1, 3, 5, \dots \Rightarrow n_{\min} = 1 \Rightarrow \mathcal{E}_{n \min} = \frac{5}{2}\hbar\omega$ ,  $E_{\min} \Big|_{S=1} = \frac{5}{2}\hbar\omega$ .

Пример. Исследовать обмен расщеплённого основного и низшего возбуждённого уровней (электростатическое отталкивание электронов  $\frac{e^2}{(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)}$  считать малым возмущением).

$$\hat{H} = \underbrace{\frac{\hat{p}_1^2}{2m} - \frac{2e^2}{r_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} - \frac{2e^2}{r_2}}_{\hat{H}_0} + \underbrace{\frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}}_{\hat{V}}, \quad \left( \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{2e^2}{r} \right) \phi_{nlm} = \mathcal{E}_n \phi_{nlm}.$$

$\mathcal{E}_n$  в случае He:  $\mathcal{E}_n = -\frac{4e^2}{2an^2} = -\frac{2e^2}{an^2}$ ,  $a$  — боровский радиус,  $a = \frac{\hbar^2}{me^2}$ ,  $n = 1, 2, 3, \dots$   
 $\phi_{nlm} = R_{nl}(\vec{r}) \cdot Y_{lm}(\theta, \varphi)$ .

Основное состояние:  $1S^2$ .

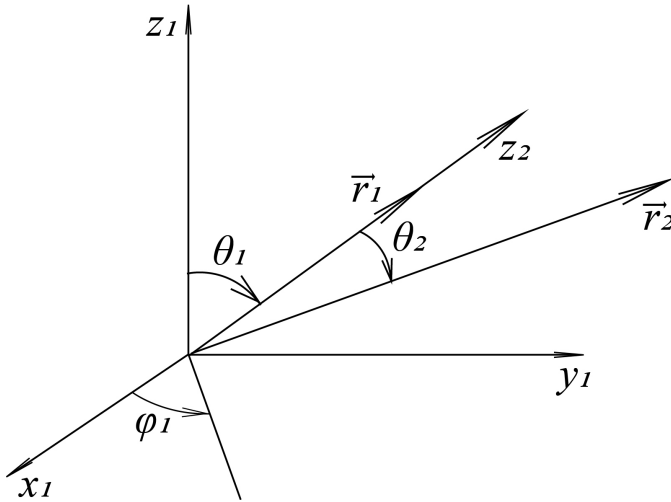
$$\phi_{100}(\vec{r}) = \left( \frac{8}{\pi a^3} \right)^{1/2} \exp^{-\frac{2r}{a}}, \quad \psi_{1S,1S}^{(0)} = \phi_{100}(r_1)\phi_{100}(r_2)\chi_{00}(S_1S_2), \quad S = 0 \Rightarrow E_{1S,1S}^{(1)} = C_{1S,1S},$$

$C_{1S,1S}$  — кулон. интегр. Никакого обменного расщепления нет.

Низшее возбуждение:  $1S^12S^1$ . Поправка к энергии 1-го порядка:

$$E_{1S2S}^{(1)} = C_{1S2S} + \underbrace{(-1)^S I_{1S2S}}_{\text{расщепление}}.$$

$$I_{1S2S} = \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \frac{e^2}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|} \phi_{100}^*(r_1)\phi_{100}(r_2)\phi_{200}^*(\vec{r}_2)\phi_{200}(\vec{r}_1), \quad \phi_{200}(r) = \left( \frac{1}{\pi a^3} \right)^{1/2} \left( 1 - \frac{r}{a} \right) \exp^{-\frac{r}{a}}.$$



Сферическая система координат.  
 $|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| = \sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \theta_n}$ .

$$\int_0^{2\pi} d\varphi_{\parallel}^2 = 2\pi, \quad \int_0^{\pi} d\theta_1 \sin \theta_1 = 2.$$

$$I_{1S2S} = \frac{8e^2}{\pi^2 a^6} \int_0^{\infty} dr_1 \int_0^{\infty} dr_2 \int_0^{\pi} d\theta_2 r_1^2 r_2^2 \sin \theta_2.$$

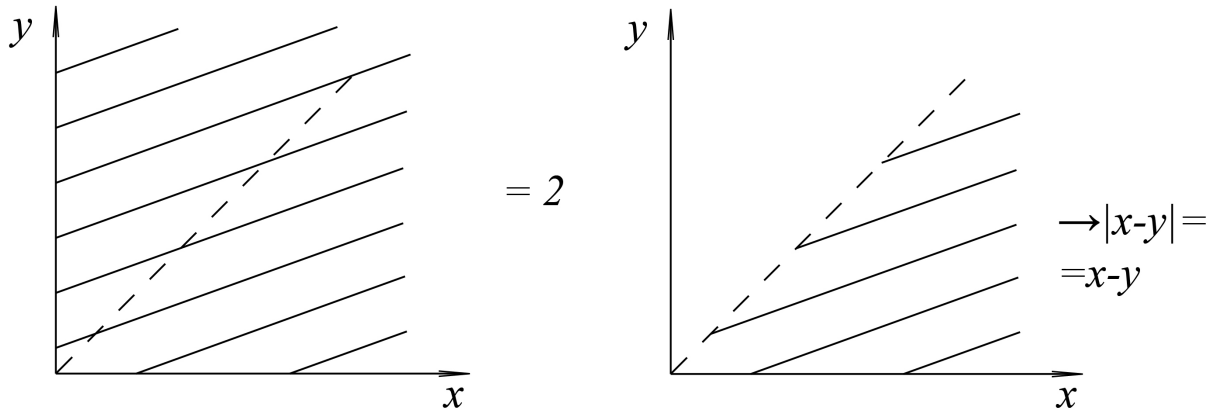
$$\left( 1 - \frac{r_1}{a} \right) \exp^{-\frac{3r_1}{a}} \left( 1 - \frac{r_2}{a} \right) \exp^{-\frac{3r_2}{a}} \frac{1}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \theta_2}} = \left( \begin{array}{l} x = \frac{3r_1}{a}, \quad t = \cos \theta_2 \\ y = \frac{3r_2}{a} \end{array} \right) =$$



$$= \int_0^\infty dx \int_0^\infty dy x^2 y^2 \left(1 - \frac{x}{3}\right) \exp^{-x} \left(1 - \frac{y}{3}\right) \exp^{-y} \int_{-1}^1 \frac{dt}{\sqrt{x^2 + y^2 - 2xyt}} \frac{64e^2}{243a},$$

$$\int_{-1}^1 \frac{dt}{\sqrt{a-bt}} = -\frac{2}{b} \sqrt{a-bt} \Big|_{-1}^{+1} = \frac{2}{b} \left( \sqrt{a+b} - \sqrt{a-b} \right) = \frac{1}{xy} (x+y - |x-y|).$$

$$I_{1S2S} = \frac{64e^2}{243a} \int_0^\infty dx \int_0^\infty dy xy \left(1 - \frac{x}{3}\right) \exp^{-x} \left(1 - \frac{y}{3}\right) \exp^{-y} (x+y - |x-y|).$$



$$I_{1S2S} = \frac{256e^2}{243a} \int_0^\infty dx x \left(1 - \frac{x}{3}\right) \exp^{-x} \int_0^x dy y^2 \left(1 - \frac{y}{3}\right) \exp^{-y},$$

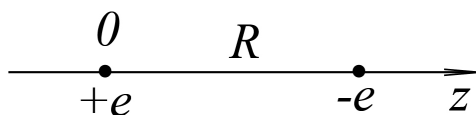
$$\int_0^x dy y^2 \exp^{-y} = \frac{1}{3} \int_0^x \exp^{-y} d(y^3) = \frac{1}{3} x^3 \exp^{-x} + \frac{1}{3} \int_0^x dy y^3 \exp^{-y},$$

$$I_{1S2S} = \frac{256e^2}{729a} \int_0^\infty dx x^4 \left(1 - \frac{x}{3}\right) \exp^{-2x}, \quad \int_0^\infty dx x^4 \exp^{-px} = \frac{1}{p^{n+1}} \int_0^\infty dt t^n \exp^{-t} = \frac{n!}{p^{n+1}},$$

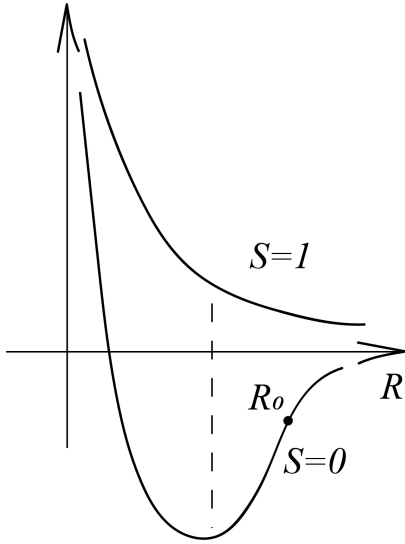
$$I_{1S2S} = \frac{256e^2}{729a} \left[ \frac{4!}{2^5} - \frac{1}{3} \cdot \frac{5!}{2^6} \right] = \frac{32e^2}{729a} = \Delta E.$$

$$E_{1S2S}^{(0)} \quad \text{-----} \quad \begin{array}{c} \text{-----} \quad S=0 \\ \updownarrow \Delta E \\ \text{-----} \quad S=1 \end{array}$$

Пример. Задача про электронные оболочки  $H_2$  в основном состоянии.



Тогда



$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m} - \frac{e^2}{r_1} - \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{R}|} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} - \frac{e^2}{r_2} - \frac{e^2}{|\vec{r}_2 - \vec{R}|} + \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}.$$

## Семинар 5

В прошлый раз  $N \geq 3$ , построение оператора перестановочной симметрии  $\hat{Q}$ :

1.  $\hat{Q} = f(\hat{P}_{ij})$ .

2. Чтобы он сам был наблюдаемой:  $[\hat{Q}, \hat{P}_{ij}] = 0 \forall ij$ . Желательно существование удобной процедуры построения собственных функций. Используются на практике только линейные реализации  $\rightarrow$  факторизованный оператор перестановочной симметрии:

$\hat{Q} = \left( \sum_{i < j} \hat{P}_{ij}^{(r)} \right) \cdot \left( \sum_{i < j} \hat{P}_{ij}^{(s)} \right)$ ,  $\hat{P}_{ij}^{(r)}$  — оператор перестановки только координат  $\vec{r}_i$  и  $\vec{r}_j$ ,  $\hat{P}_{ij}^{(s)}$  — оператор перестановки спиновых переменных. Ясно, что  $\hat{P}_{ij}^{(r)} \cdot \hat{P}_{ij}^{(s)} \equiv \hat{P}_{ij} \rightarrow$  нефакторизованный оператор перест. симметрии.  $\hat{Q}' \equiv \sum_{i < j} \hat{P}_{ij}$ .

Построение собственных функций оператора суммы перестановок: используется метод схем Юнга.

Схема Юнга — таблица из  $N$  клеток, расположенных построчно в порядке убывания длины строк.

$N=8$

1	2	3	4
5	6	7	
8			

Клетка  $\longleftrightarrow$  номер;  $1 \leq i \leq N$ .

1	5	7	4
6	3	8	2

Идея: используем некую «затравочную функцию»  $N$  переменных  $f(x_1, \dots, x_N)$ .

Функции, построенные по схеме Юнга, назовём  $F(x_1, \dots, x_n) \equiv \{f(x_1, \dots, x_N)\}_{\overleftarrow{S} A \uparrow}$ . Сначала симметризация, потом антисимметризация.

$\overleftarrow{S}$  — симметризация по переменным строки:

$$\{f(x_1, \dots, x_k)\}_{\overleftarrow{S} 1, \dots, k} = C_k \sum_{\text{перест. } x_1, \dots, x_k} f(x_1, \dots, x_k),$$

$C_k$  — нормировочный множитель.  $A \downarrow$  — антисимметризация по столбцам.

$$\{f(x_1, \dots, x_k)\}_{A \downarrow} = C_n \sum_{\text{пер. } x_1, \dots, x_k} (-1) f(x_1, \dots, x_k).$$

Для  $f(x_1, \dots, x_k) = f_1(x_1)f_2(x_2)\dots f_k(x_k)$   $A \downarrow$  удобно реализовать в виде определителя Слэтера:

$$\{f(x_1, \dots, x_k)\}_{A \downarrow} = C_n \begin{vmatrix} f_1(x_1) & \dots & f_1(x_k) \\ f_2(x_1) & \dots & f_2(x_k) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ f_k(x_1) & \dots & f_k(x_k) \end{vmatrix},$$

если  $f_1(x), f_2(x), \dots, f_k(x)$  — ортонормированный набор функций, то нормировка

$$C_H = \frac{1}{\sqrt{k!}}.$$

Заметим, что для  $N = 2$   $\hat{Q} = \hat{Q}' = \hat{P}_{12}$ .

Итак, требования к волновой функции любого полного набора наблюдаемых для системы из  $N$  тождественных частиц:  $\hat{Q}\psi = \lambda_Q\psi$  ( $Q'\psi = \lambda_{Q'}\psi$ ).

$\lambda_Q > 0$  (для целого спина);

$\lambda_Q < 0$  (для полуцелого спина).

Пример. Затравочная  $f(x_1, x_2, x_3) = \sin x_1 \cdot \cos x_2 \exp^{-x_3}$ .

$$\begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline 3 & \\ \hline \end{array} \longrightarrow F(x_1, x_2, x_3) \equiv \{f(x_1, \dots, x_N)\}_{S \leftarrow A \downarrow} =$$

$$= C_H \{\sin x_1 \cos x_2 \exp^{-x_3} + \sin x_2 \cos x_1 \exp^{-x_3}\}_{A \downarrow} =$$

$$= C'_H \{\sin x_1 \cos x_2 \exp^{-x_3} + \sin x_2 \cos x_1 \exp^{-x_3} - \sin x_3 \cos x_2 \exp^{-x_1} - \sin x_2 \cos x_3 \exp^{-x_1}\}.$$

Замечание: не для любой схемы Юнга и любой затравочной функции  $f$   $f \exists$ .

Пример.  $f(x_1 x_2) = \sin(x_1 + x_2)$ .

$$\begin{array}{|c|} \hline 1 \\ \hline 2 \\ \hline \end{array} - F \equiv 0!$$

Утверждение. Функция, построенная по схеме Юнга, либо  $\equiv 0$  (когда некий конфликт симметрии затрагивает функции и схемы Юнга), либо собственные функции оператора суммы перестановок  $! \implies$  с помощью схем Юнга строятся собственные функции  $\hat{Q}$  и  $\hat{Q}'$ .

Для  $N \geq 3$  и  $S = \frac{1}{2}$  удобно при построении собственных функций  $\psi = \phi(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_n) \chi(S_1 \dots S_n)$  строить их как собственные функции  $\hat{Q}$ .

Определение. Схема Юнга, сопряжённая к данной — транспонированная и с изменением порядка операций.

$$\begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 3 \\ \hline 4 & & \\ \hline \end{array} \quad \text{Сопряжённая для неё:} \quad (*) \longleftarrow \{\}_{A \downarrow \leftarrow S}.$$

$$\begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 4 \\ \hline 2 & \\ \hline 3 & \\ \hline \end{array} *$$

Утверждение. Функция, построенная по сопряжённой схеме Юнга, также есть соб-

ственная функция оператора суммы перестановок с противоположным собственным значением ( $\lambda_Q^k = -\lambda_Q$ ).

Таким образом, если строим  $\Phi(r_1 \dots r_n) \chi(S_1 \dots S_n)$ , тогда

$$\hat{Q}\Psi = \lambda^* \lambda \Psi = -\lambda^2 \Psi.$$

1	4
2	
3	

1	2	3
4		

Такой подход гарантирует отрицательные собственные значения.

$\lambda_Q = -\lambda^2 < 0!$  — именно так для фермионов.

Дополнительно возникает ещё одно полезное обстоятельство.

$$\hat{S}_{ij}^2 \equiv (\hat{S}_i + \hat{S}_j)^2 \longrightarrow \text{собственные значения } S_{ij} = 0 \ (M_{ij} = 0), 1 \ (M_{ij} = -1, 0, 1).$$

$$\hat{P}_{ij}^{(S)} \chi(\dots S_i S_j \dots) = \begin{cases} +\chi(\dots S_j S_i \dots) & S_{ij} = 0, \\ -\chi(\dots S_j S_i \dots) & S_{ij} \neq 0. \end{cases} \quad \hat{S}_{ij}^2 \chi(\dots S_i S_j \dots) = \begin{cases} 0, & S_{ij} = 0, \\ 2\chi(\dots), & S_{ij} = 1. \end{cases}$$

$$\text{Т.е. } \hat{S}_{ij}^2 = 1 + \hat{P}_{ij}^{(S)}, \ (\hat{S}_i + \hat{S}_j)^2 = \underbrace{\hat{S}_i^2}_{=\frac{3}{4}} + \underbrace{\hat{S}_j^2}_{=\frac{3}{4}} + 2\hat{S}_i \hat{S}_j = \frac{3}{2} + 2\hat{S}_i \hat{S}_j.$$

$$\text{Вывод: для } S = \frac{1}{2} \text{ оператор перестановки } \boxed{\hat{P}_{ij}^{(S)} = \frac{1}{2} + 2\hat{S}_i \hat{S}_j} \text{ — только для } S = \frac{1}{2}.$$

Если для  $N$  частиц:

$$\hat{S}^2 \equiv (\hat{S}_1 + \dots + \hat{S}_N)^2 = N \frac{3}{4} + \sum_{i < j} 2\hat{S}_i \hat{S}_j = \frac{3N}{4} \sum_{i < j} \left( \hat{P}_{ij}^{(S)} - \frac{1}{2} \right) = N - \frac{N^2}{4} + \sum_{i < j} \hat{P}_{ij}^{(S)},$$

т.е.  $\forall$  волновая функция  $\Psi$ , для которой верно  $\Psi = \phi \chi$  и которая является собственной функцией  $\hat{Q}$ , обязательно есть собственная функция оператора  $\hat{S}^2$ . Собственные значения:  $S(S+1) = N - \frac{N^2}{4} + \lambda$ ,  $\lambda$  — собственные значения оператора  $\sum_{i < j} \hat{P}_{ij}^{(S)}$ , зависящие только от вида схемы Юнга для  $\chi$ .

Ясно, что схема Юнга для  $\chi$  при  $S = \frac{1}{2}$  содержит не более двух строк (есть всего 2 спиновых состояния), и  $\chi_{затрав.}$  — произведение  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  и  $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ , и антисимметризация по  $S_1 S_2 S_3$  всегда даёт  $\chi \equiv 0$  и то же для 4, 5...

Пример.

$N-k$			
$k$			

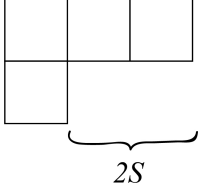
$k$  — длина нижней строки,  $k \leq \frac{N}{2}$ .

$$\begin{aligned} \text{Собственные значения: } \lambda &= \left\{ +1 \frac{k(k-1)}{2} + (+1) \frac{(N-k)(N-k+1)}{2} + (-1)k \right\} \Rightarrow \\ \Rightarrow N - \frac{N^2}{4} + \lambda &= \frac{N-2k}{2} \left( \frac{N-2k}{2} + 1 \right) \Rightarrow \boxed{S = \frac{N-2k}{2}}. \end{aligned}$$

Итак, возникает рецепт построения волновых функций систем из произвольного числа  $N$  тождественных частиц спина  $1/2$ .

Пусть есть ортонормированный набор координатных одночастичных волновых функций  $\phi_n(F)$  и спиноры  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  и  $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ .

Волновая функция  $\Psi(\vec{r}_1 S_1 \dots \vec{r}_N S_N) = \Phi(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N) \chi_{SM_S}(S_1 \dots S_N)$ , в которой  $\chi$  — из затравочного произведения  $\chi_m$  ( $N$  штук) по схеме Юнга из двух строк:



— верхняя строка на  $2S$  выступает над нижней.

$M_S = \sum m_S$ , а  $\Phi$  строится из затравочного произведения:  $\phi_{\mathcal{E}}(\vec{r}_{\mathcal{E}}) \cdot \phi_m(\vec{r}_n)$  ( $m \leq N$ ) по сопряжённой схеме Юнга. Соответственно,

- удовлетворяет требованиям принципа неразличимости;
- отвечает определённым значениям  $S$  и  $M_S$ ;
- если  $\phi_n$  — есть собственная функция некоторого одночастичного оператора

$\hat{F}^{(1)} \phi_n = f_n \phi_n$ , то  $\psi$  — собственная функция  $\hat{F}^{(M)} = \sum_{i=1}^N \hat{F}_i^{(1)}$ , где  $F = \sum_{i=1}^N f_i$ , т.е. можно

построить базис из собственных значений  $\hat{H} = \sum_{i=1}^N \hat{H}_i^{(1)}$  — без взаимодействия между частицами.

Для взаимодействия подобных частиц:  $\Phi(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N)$  — не строится из произведений  $\phi$ . Но, всё равно, она должна обладать симметрией (по отношению к перестановкам), соответствующей сопряжённой и спиновой схеме Юнга.

Почти никогда такое решение для  $N \geq 3$  построить не удаётся.

Приближённые решения: если возмущение можно рассматривать как малое, то рецепт нас полностью устраивает, т.к.  $\sim \hat{V}_0$ ,  $\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^N \hat{H}_i^{(1)}$ , и его собственные функции  $\psi^{(\theta)}$  можно построить по этому рецепту, а далее использовать формулы теории возмущений.

В реальной задаче точность такого подхода, как правило, недостаточна.

## Примеры решения задач

$$1) \hat{Q} = \left( \sum_{kj} \hat{P}_{ij}^{\vec{r}} \right) \left( \sum_{i < j} \hat{P}_{ij}^{(k)} \right).$$

$$2) F(x_1 x_2 x_3 x_4),$$

123	$\phi_1(x_1) \phi_1(x_2) \phi_2(x_3)$
231	$\phi_1(x_2) \phi_1(x_3) \phi_2(x_1)$
312	$\phi_1(x_3) \phi_1(x_1) \phi_2(x_2)$
213	$\phi_1(x_2) \phi_1(x_1) \phi_2(x_3)$
132	$\phi_1(x_1) \phi_1(x_3) \phi_2(x_2)$
321	$\phi_1(x_3) \phi_1(x_2) \phi_2(x_1)$

Пример. Построить все возможные волновые функции, описывающие состояние из 3-ех частиц,  $S = 1/2$  (тождественных) (свободных). Свободные частицы — не взаимодей-

ствующие ни между собой, ни с полями. Определить значение  $E$ ,  $\vec{p}$ .  $S = \frac{1}{2}$ ,  $M_S = +\frac{1}{2}$ .

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^3 \left( \frac{\hat{p}_i^2}{2m} \right), \quad \hat{\vec{p}} = \hat{\vec{p}}_1 + \hat{\vec{p}}_2 + \hat{\vec{p}}_3, \quad \hat{\vec{S}} = \hat{\vec{S}}_1 + \hat{\vec{S}}_2 + \hat{\vec{S}}_3.$$

$$\begin{cases} \psi(\vec{r}_1 S_1 \vec{r}_2 S_2 \vec{r}_3 S_3), \quad \hat{H}\psi = E\psi, \quad \hat{\vec{P}}\psi = \hat{\vec{p}}\psi, \\ \hat{Q}\psi = \phi\psi(\phi < a), \quad \hat{S}^2\psi = \frac{3}{4}\psi, \quad \hat{S}_z\psi = +\frac{1}{2}\psi, \\ \psi = \Phi(\vec{r}_1 \vec{r}_2 \vec{r}_3) \chi(S_1 S_2 S_3). \end{cases}$$

Из  $\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{r}}$ :

1	3
2	

Из  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  и  $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ :

1	2
3	

$$\begin{aligned} \chi : \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right\}_{\overleftarrow{S} A \uparrow} &= \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right\}_{A \uparrow} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right\}. \\ \Phi : \Phi &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{9/2}} \left\{ \exp^{\frac{i}{\hbar} \vec{p}_1 \vec{r}_1} \cdot \exp^{\frac{i}{\hbar} \vec{p}_2 \vec{r}_2} \cdot \exp^{\frac{i}{\hbar} \vec{p}_3 \vec{r}_3} \right\} = \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)} \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \exp^{\frac{i}{\hbar} (\vec{p}_1 \vec{r}_1 + \vec{p}_2 \vec{r}_2 + \vec{p}_3 \vec{r}_3)} - \exp^{\frac{i}{\hbar} (\vec{p}_1 \vec{r}_2 + \vec{p}_2 \vec{r}_1 + \vec{p}_3 \vec{r}_3)} \right\}_{\overleftarrow{S}} = \\ &= \frac{1}{2(2\pi\hbar)^{9/2}} \left\{ \exp^{\frac{i}{\hbar} (\vec{p}_1 \vec{r}_1 + \vec{p}_2 \vec{r}_2 + \vec{p}_3 \vec{r}_3)} + \exp^{\frac{i}{\hbar} (\vec{p}_1 \vec{r}_3 + \vec{p}_2 \vec{r}_2 + \vec{p}_3 \vec{r}_1)} - \exp^{\frac{i}{\hbar} (\vec{p}_1 \vec{r}_2 + \vec{p}_2 \vec{r}_1 + \vec{p}_3 \vec{r}_3)} - \exp^{\frac{i}{\hbar} (\vec{p}_1 \vec{r}_2 + \vec{p}_2 \vec{r}_3 + \vec{p}_3 \vec{r}_1)} \right\}. \end{aligned}$$

Полная энергия:  $E = \frac{\vec{p}_1^2 + \vec{p}_2^2 + \vec{p}_3^2}{2m}$ .

Полный импульс:  $\vec{p} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \vec{p}_3$ .

Ответ:  $\Psi_{\vec{p}_1 \vec{p}_2 \vec{p}_3 S M_S}(\vec{r}_1 \vec{r}_2 \vec{r}_3) = \Phi_{\vec{p}_1 \vec{p}_2 \vec{p}_3 S} \chi_{S M_S}$ , где  $\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{p}_3$  удовлетворяют уравнениям для полной энергии и полного импульса. На практике:  $\vec{p}_3 = \vec{P} - \vec{p}_1 - \vec{p}_2 + |\vec{p}_2|$  из (k1).

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^2 \left\{ \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + U(r) \right\} \text{ — центрально-симметричное поле.}$$

$$\left( \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(r) \right) \phi_{nlm}(\vec{r}) = \mathcal{E}_{nl} \phi_{nlm}(\vec{r}), \quad \phi_{nlm} = R_{nl}(\vec{r}) \psi_{lm}(\theta\varphi), \quad E = \mathcal{E}_{n_1 l_1} + \mathcal{E}_{n_2 l_2} \mid U l^k.$$

2 условие:  $E = 2\mathcal{E}_{21}(2p^2)$ . Построим волновую функцию:

1.  $\psi = \Phi(\vec{r}_1 \vec{r}_2) \chi(S_1 S_2)$ .

2.  $\chi$  :

$$\begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline \end{array} \longrightarrow S = 1.$$

$$\begin{array}{|c|} \hline 1 \\ \hline \\ \hline 2 \\ \hline \end{array} \longrightarrow S = 0.$$

$$S = 1 : \begin{cases} M_S = +1 \longleftarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \\ M_S = 0 \longleftarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right], \\ M_S = -1 \longleftarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \end{cases}$$

$$S = 0 : \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right].$$

Всего 15 волновых функций:  $1+5+9=15$ .

Интегралы движения:  $\vec{L}^2, \hat{L}_z$  ( $\vec{L} = \hat{l}_1 - \hat{l}_2$ ).

$$\psi = \Phi(\vec{r}_1 \vec{r}_2) \chi(S_1 S_2) = -\Phi(\vec{r}_2 \vec{r}_1) \chi(S_2 S_1) \implies \Phi(\vec{r}_1 \vec{r}_2) = (-1)^S \underbrace{\Phi(\vec{r}_2 \vec{r}_1)}_{=\Phi(\vec{r}_2 \vec{r}_1)(-1)^L}.$$

$(-1)^{L+S} = 1 \implies L + S$  — чётно!

$l_1 = l_2 = 1 \implies L = 0, 1, 2$ . При  $S = 0$ :  $L = 0, 2$ . При  $S = 1 \implies L = 1$  — термы.

Термы  ${}^{2S+1}L$ ;  $S = 0, L = 0, 2$ :  ${}^1S, {}^1D \longleftarrow 5$ .  $L = 1$ :  ${}^3P \longleftarrow 9$ .

$n_1 l_1 n_2 l_2 S L M_S M_L$  — однозначно задаём состояние.

Построим волновую функцию  ${}^1D$  (5 шт.):

$$\psi = \phi \chi, \chi = \chi_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right],$$

$$M_L = +2, \phi_{nlm}(\vec{r}) = \phi_{21m}(\vec{r}), m = +1, 0, -1, m_1 + m_2 = +2.$$

$$\Phi \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{l} \Phi_{M_L} = 2 = \Phi_{21+1}(\vec{r}_1) \Phi_{21+1}(\vec{r}_2) \\ \text{(аналогично } \Phi_{M_1} = -2 = \Phi_{21-1}(\vec{r}_1) \Phi_{21-1}(\vec{r}_2)). \end{array}$$

$$\hat{L} - \Phi_{M_L+2} = 2 \cdot \Phi_{M_L} = +1 \implies \hat{\Phi}_{M_L} = +1 = \frac{1}{2} \hat{L} - \Phi_{M_L+2} = \frac{1}{2} [\hat{l}_{1-} + \hat{l}_{2-}].$$

$$\Phi_{M_L} = +2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \Phi_{210}(\vec{r}) \Phi_{21+1}(\vec{r}_2) + \Phi_{21+1}(\vec{r}_1) \Phi_{210}(\vec{r}_2) \}.$$

$$\text{По аналогии: } \Phi_{M_L} = -\Delta = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \Phi_{210}(\vec{r}_1) \Phi_{21-1}(\vec{r}_2) + \underbrace{\Phi_{21-1}(\vec{r}_1) \Phi_{210}(\vec{r}_2)}_{\sqrt{(L+M_1)(L+1-M_2)}} \right\}.$$

$${}^3P : M_L = +1, M_L = +1 \longrightarrow \chi \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

$${}^1S : \Phi = C_{\text{норм}} [\alpha (\Phi_{21+1}(\vec{r}_1) \cdot \Phi_{21-1}(\vec{r}_2) + \Phi_{21-1}(\vec{r}_1) \Phi_{21+1}(\vec{r}_2) + \beta \Phi_{210}(\vec{r}_1) \Phi_{210}(\vec{r}_2)).$$

$\alpha, \beta$  — т.к. эта функция  $\perp$ -на  $M_L = 0$  из  ${}^1D$  и  ${}^3P$ .  $|2\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ .

## Семинар 6

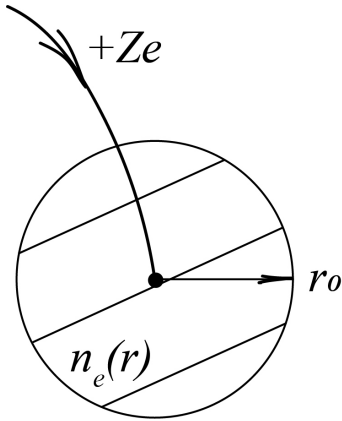
### Статистические методы. Приближение самосогласованного поля. Вариационные методы

Предположение:

1. Число частиц в системе  $N \gg 1 \Rightarrow$
2. Большинство частиц находится в высоковозбуждённых состояниях  $\Rightarrow$  их движение квазиклассично. Каждая частица создаёт поля, движение квазиклассично.
3. Создаваемые частицами силовые поля можно описывать классическими полевыми уравнениями.

Вывод: система взаимодействующих частиц моделируется ферми- (бозе-) газом в самосогласованном поле, определяемым из классического полевого уравнения.

Пример. Электронная оболочка атома в нерелятивистском адиабатическом приближении.



Считаем  $N_e \leq Z$ ,  $N_e \gg 1$  (отрицательно заряженный ион не может быть стабилен, т.к. изолирован).

$n_e(r)$  — плотность.  $\int dr n_e = N_e$ .

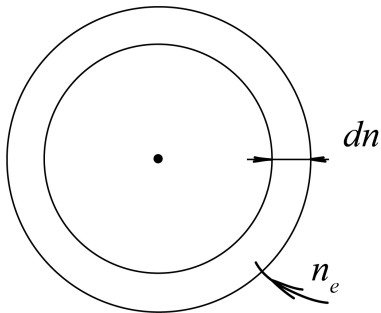
$r_0$  — зарядовый радиус (радиус сферы, в которой весь заряд).

Ясно, что  $U_{\partial\phi\phi} = -e\phi(r)$ .

3)  $\Rightarrow \Delta\phi = -4\pi\rho_{эл} = -4\pi(+Ze\delta(r) - en_e(r))$ .

Используем радиальную часть лапласиана:  $\left[ \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (r\phi) = -4\pi[Ze\delta(\vec{r}) - en_e(r)] \right]$ .

Число квантовых состояний:  $dN_{\kappa\vartheta} = \frac{d^3\vec{r} \cdot d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} (2S+1)$ ,  $S = 2$ .



$$n_e(r) = \frac{2}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3\vec{p}.$$

$$U_{\partial\phi\phi} = -e\phi(r).$$

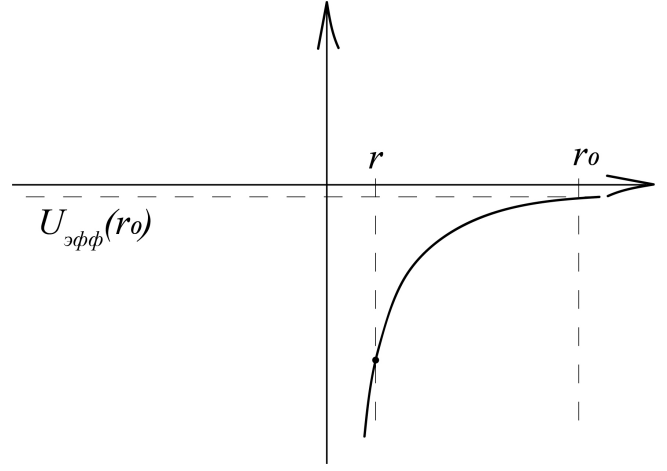


$r_0$  — 3 пр. радиус  $\Rightarrow$

$$\Rightarrow -e\phi(r) = \frac{p^2}{2m} - e\phi(r) \leq -e\phi(r_0) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow |\vec{p}| \leq \sqrt{2me[\phi(r) - \phi_0]} \Rightarrow$$

$$\int d^3\vec{p} = \frac{4\pi}{3} \{2me[\phi(r) - \phi_0]\}^{3/2}.$$



$$n_e(r) = \frac{1}{3\pi^2\hbar^3} \{2me[\phi(r) - \phi_0]\}^{3/2} \quad (2).$$

Необходимо добавить граничные условия в окрестности  $r = 0$ :

$$-\frac{\partial\phi}{\partial r} \simeq e\frac{Ze}{r^2} \Rightarrow \phi(r) \simeq +\frac{Ze}{r} + const + o(r) \quad (3.1).$$

Кроме того,  $\phi$  и  $\frac{d\phi}{dr}$  должны быть непрерывными в точке  $r = r_0$ .

Внешнее поле:  $\phi_{ex} = \frac{(Z - N_e)e}{r}$ ,  $Z - N_e = Z^*$ .

$$\phi(r_0) = \frac{Z^*e}{r_0}, \quad \frac{d\phi}{dr}(r_0) = -\frac{Z^*e}{r_0^2} \quad (3.2, 3.3).$$

(3.1–3.3) — два граничных условия для уравнения (1)+одно уравнение для определения  $r_0$ .

Задача (1–3)  $\Rightarrow \phi(r)$ ,  $n_e(r)$ ,  $r_0$ , поправочные слагаемые  $\sim N_e^{-2/3}$ .

(1–3) — модель Томаса–Ферми.

$$\phi(r) = \phi_0 + \frac{Ze}{r}\chi(x), \text{ где } x = \frac{Z^{1/3}r}{\beta a}, \quad a = \frac{\hbar^2}{me^2}, \quad \beta = \frac{1}{2} \left( \frac{3\pi}{4} \right)^{2/3} \simeq 0,885.$$

Чем удобно?

$$2) \Rightarrow n_e(r) = \frac{1}{3\pi^2\hbar^3} \left[ 2me\frac{Ze}{r}\chi(x) \right]^{3/2} = \left\{ r \rightarrow r = \frac{\beta a}{Z^{1/3}}x \right\} = \frac{2m\sqrt{2me^3}}{3\pi^2\hbar^3} \frac{Z^2 \cdot 1}{\beta^{3/2}a^{3/2}} \left[ \frac{1}{x}\chi(x) \right]^{3/2},$$

$$\frac{m\sqrt{2me^3}}{\hbar^3} = \frac{1}{a^{3/2}}, \quad \frac{1}{\beta^{3/2}} = 2\sqrt{2}\frac{4}{3\pi}.$$

$$n_e(r) = \frac{32Z^2}{9\pi^3a^3} \left[ \frac{1}{x}\chi(x) \right]^{3/2} \text{ — электронная плотность через } \chi \text{ (2')}.$$

$$x = \frac{Z^{1/3}r}{\beta a}. \text{ При } r \neq 0:$$

$$Ze\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(\chi(x)) = +4\pi e\frac{32Z^2}{9\pi^3a^3} \left[ \frac{1}{x}\chi(x) \right]^{3/2}, \quad \frac{1}{r}\frac{1}{dr^2} = \frac{Z}{\beta^3a^3}\frac{1}{x}\frac{1}{dx^2}, \quad \sqrt{x}\frac{d^2x}{dx^2} = \underbrace{\beta^3}_{=\frac{9\pi^2}{128}}\frac{128}{9\pi^2}\chi^{3/2} = \chi^{3/2}.$$

$$\boxed{\sqrt{x}\frac{d^2\chi}{dx^2} = \chi^{3/2} \text{ (1')}} \text{ — уравнение Томаса–Ферми.}$$

$$3.1: \phi(r) \Big|_{r < r_0} = +\frac{Ze}{r} + const + o(r'), \quad \phi_0'' + \frac{Ze}{r} \chi(x). \quad \boxed{\chi(0) = 1 \quad (3.1')}.$$

$$3.2: \phi(r_0) = \phi_0 \Rightarrow \boxed{\chi(x_0) = 0 \quad (3.2)'}, \quad x_0 \equiv \frac{Z^{1/3} r_0}{\beta a}.$$

$$(3.3) \quad \frac{d\phi}{dr} = -\frac{Z^* e}{r_0^2}, \quad \frac{d}{dr} \left( \phi_0 + \frac{Ze}{r} \chi(x) \right) = \frac{Ze}{r} \left( \frac{d\chi}{dr} \right) \Big|_{r_0} \Rightarrow \frac{Ze}{r_0} \frac{Z''^3}{\beta a} \frac{d\chi}{dx}(x_0) = -\frac{Z^* e}{r_0^2}.$$

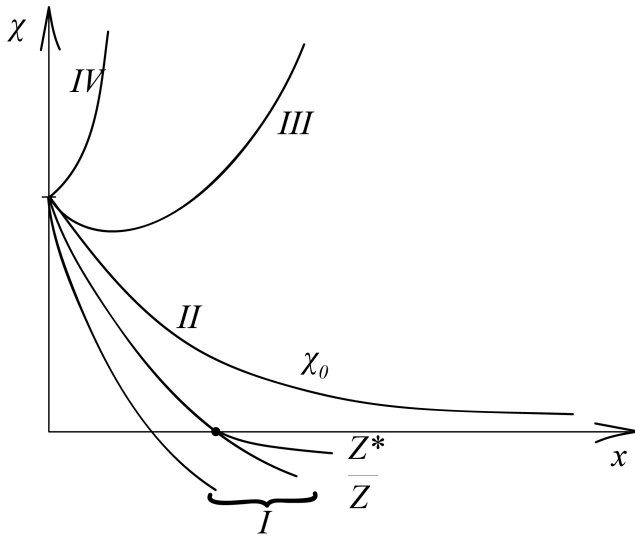
$$\boxed{(3.3)': x_0 \chi'(x_0) = -\frac{Z^*}{Z}}.$$

(1' и 3')  $\Rightarrow \chi(x), x_0 \Rightarrow n_e(r), \phi(r), r_0$ . Решение зависит только от  $\frac{Z^*}{Z}$ . Т.е. для всех нейтральных ( $Z^* = 0$ ) атомов решение одинаково.

Решение также одинаково для ионов с одинаковым  $\frac{Z^*}{Z}$ . Например,  $Z^* = 1, Z = 20$  и  $Z^* = 2, Z = 40$ .

$$\text{Задача Томаса-Ферми: } \begin{cases} \sqrt{x} \frac{d^2 \chi}{dx^2} = \chi^{3/2}, \\ \chi(0) = 1, \chi(x_0) = 0, \\ \chi_0 \chi'(x_0) = -\frac{Z^*}{Z}. \end{cases}$$

Анализ: нужно рассмотреть все интегральные кривые (т.е. графики решений) уравнения Томаса-Ферми, выходящие из точки (0;1).



По поведению все интегральные кривые делятся на 4 класса.

Класс I:  $\chi'(0) < K_{\text{кр}} \simeq -1,59$  — монотонно убывающая до пересечения с осью  $x$ .

$\frac{Z^*}{Z} = -\chi'(x_0)x_0 > 0$  — это электронные оболочки положительных ионов.

Класс II:  $\chi'(0) = K_{\text{кр}} \simeq -1,59 \Rightarrow \chi^{(0)}(x)$ , или функция Томаса-Ферми:

$$\chi^{(0)}(x) \simeq \begin{cases} 1 - 1,59x + o(x^2), & x \ll 1, \\ \frac{1}{144x^3}, & x \gg 1, \end{cases}$$

здесь  $Z^* = 0 \Rightarrow$  нейтральные атомы.

Отметим, что для  $Z^* = 0$  зарядовый радиус  $r_0 = \infty$ . Но при этом

$$r \gg \frac{\beta a}{Z^{1/3}}, \quad n_e(r) \simeq \frac{32Z^2}{4\pi^3 a^3} \left( \frac{1}{x} \frac{1}{144x^3} \right)^{3/2} = \frac{Z^2}{6561\pi^3 a^3} \frac{1}{x^6} \sim \frac{1}{r^6}.$$

$n_e(r)$  мала и быстро убывает.

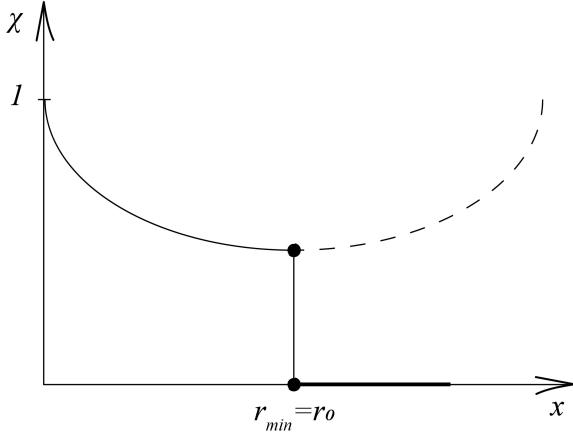
Почти весь заряд электронов в области  $r \leq \frac{a}{Z^{1/3}}$ .

III и IV — неустойчивые конфигурации зарядов.

III класс:  $K_{\kappa p} < \chi'(0) < 0$  убывают до точки минимума, затем растут.

IV класс (плохие):  $\chi'(0) \geq 0$ , монотонно растут.

III и IV — неустановленные конфигурации зарядов. Но из решения (III) можно построить модифицированное решение (III)\*:



— решение типа (III)\*.

$$r_0 = \frac{\beta a}{Z^{1/3}} x_{min}.$$

Здесь  $Z^* = 0$  — нейтральный атом со скачком  $n_e$  на границе.

Эти решения используются для описания электронных оболочек нейтральных атомов в веществе при сверхвысоком давлении ( $p \gtrsim 10^3$  атм).

$$1. \hat{H} = \sum_{i=1}^N \left( \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + U(F_i) \right) + \sum_{i < j} V(\vec{r}_i - \vec{r}_j) = H_0 + W.$$

3. He, основное состояние  $1S^2$ .

$$\phi_{1S} = \left( \frac{\tilde{Z}^3}{\pi a^3} \right)^{1/2} \cdot \exp^{-\frac{\tilde{Z}r}{a}}, \quad \psi = \phi_{1S}(r_1)\phi_{1S}(r_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right].$$

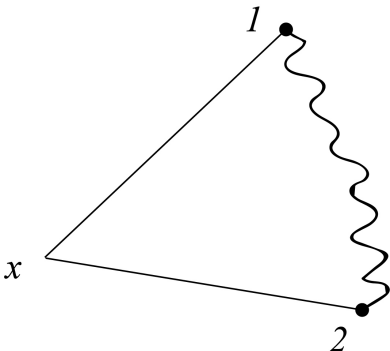
4.  $1S^2$  — основное,  $\phi_{1S}(r) = \phi(r)$ .

$$E(\hat{z}) = \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \psi + \left( \frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} - \frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2} + \frac{e^2}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_2|} \right) \psi, \quad \chi^+ \chi^- = 1, \quad \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \psi \frac{\hat{p}_1^2}{2m} \psi.$$

Пример. Найти энергию основного состояния и сравнить результаты с точным ответом.

$$N = 2, S = \frac{1}{2}.$$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2 + \hat{p}_2^2}{2m} + \frac{m\omega^2(\vec{r}_1^2 + \vec{r}_2^2)}{2} + \frac{k}{2}(r_1 - r_2).$$



$$\psi = \phi(r_1)\phi(r_2) \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right].$$

$$E^{x\phi}[\phi] = \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \psi^{x\phi} + \hat{H} \psi^{x\phi} = 2 \int d\vec{r}' \phi^* \frac{\hat{p}^2}{2m} \phi + 2 \int d\vec{r}' \phi^* \frac{m\omega^2 \vec{r}'^2}{2} \phi + \int d\vec{r}_1 \vec{r}_2 =$$

$$= \phi^*(r_1)\phi^*(r_2)\frac{k}{2}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)' \phi(r_1)\phi(r_2) \quad (1),$$

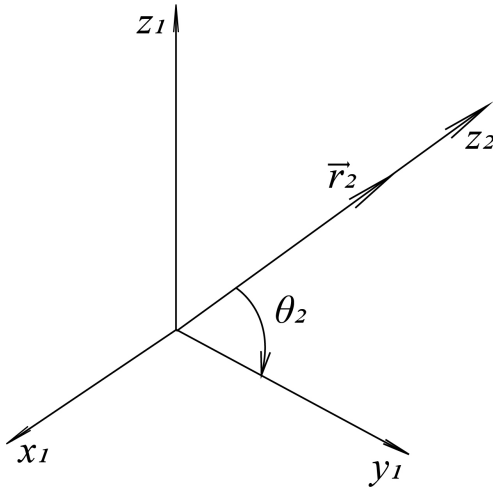
$$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial r'}, \quad \frac{\delta E^{x\phi}}{\delta \phi^*(r)} = 0 + \int d\vec{r}' (\phi(r'))^2 = 1.$$

$$E[\phi] = E^{x\phi}[\phi] - \lambda \left[ \int d\vec{r}' \phi^* \phi - 1 \right], \quad \frac{\delta E}{\delta \phi^*(r)} = 0 \quad \left( \frac{\delta \phi^*(\vec{r}')}{\delta \phi^*(\vec{r})} = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \right).$$

$$(1): (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2 = r_1^2 + r_2^2 - 2\vec{r}_1 \vec{r}_2.$$

$$2\frac{k}{2} \int d\vec{r}' \phi^*(r') r'^2 \phi(r') - k \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 (\vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2) \cdot |\phi(r_1)|^2 \cdot |\phi(r_2)|^2.$$

Выберем:



$$\vec{r}_1 \vec{r}_2 = r_1 r_2 \cos \theta_2.$$

$$\text{В } \int dr_1 dr_2 \text{ входит } \int_0^\pi d\theta_2 \sin \theta_2 \dots \cos \theta_2 = 0.$$

Наш функционал энергии потерял двойной интеграл:

$$E[\phi] = \int dF' \phi^* \left\{ 2\frac{\hat{p}'^2}{2m} + 2\frac{m\omega^2 \vec{r}_1^2}{2} + 2\frac{k}{2} \vec{r}'^2 \right\}, \quad \phi - \lambda \left[ \int d\vec{r}' \phi^* \phi - 1 \right],$$

$$\frac{\delta E[\psi]}{\delta \phi^*(\vec{r})} = 0 \implies 2 \left[ \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{(m\omega^2 + k)}{2} \vec{r}^2 \right] \phi(\vec{r}) - \lambda \phi(\vec{r}) = 0, \quad \left[ \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{(m\omega^2 + k)}{2} \vec{r}^2 \right] \phi(r) = \frac{\lambda}{2} \phi(r),$$

$$\text{т.е. наилучшее самосогласованное поле для этой задачи: } U_{\text{эф}} \phi = \frac{m\tilde{\omega}^2 \vec{r}^2}{2}, \quad \tilde{\omega} = \sqrt{\omega^2 + \frac{k}{m}}.$$

$$\mathcal{E}_{1S} = \frac{3}{2} \hbar \tilde{\omega} = \frac{3}{2} \hbar \sqrt{\omega^2 + \frac{k}{m}}, \quad E_{\text{осн}}^{x\phi} = 2\mathcal{E}_{1S} = 3\hbar \sqrt{\omega^2 + \frac{k}{m}}.$$

Введём  $\mathcal{E} = \frac{k}{m\omega^2}$  — относительный уровень взаимодействия  $\hat{V}$ .  $E_{\text{осн}}^{x\phi} = 3\hbar\omega\sqrt{1 + \mathcal{E}}$ .

Точное решение (нормальные координаты):

$$\vec{R} = \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2}, \quad \vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2, \quad \hat{P} = \hat{p}_1 + \hat{p}_2, \quad \hat{p} = \frac{\hat{p}_1 - \hat{p}_2}{2}.$$

$$\frac{\hat{p}_1^2 + \hat{p}_2^2}{2m} = \frac{\hat{P}^2}{2M} + \frac{\hat{p}^2}{2\mu}, \quad M = 2m, \quad \mu = \frac{m}{2}, \quad \frac{m\omega^2(\vec{r}_1^2 + \vec{r}_2^2)}{2} = \frac{m\omega^2}{2} \frac{(2\vec{R})^2 + \vec{r}^2}{2}.$$

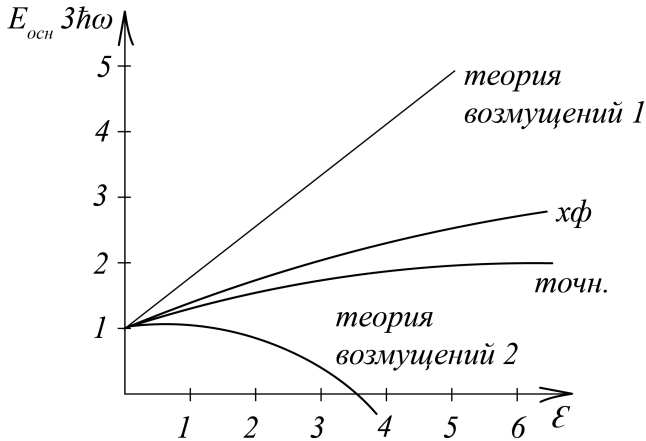
$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{M\omega^2 \vec{R}^2}{2} + \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + \frac{\mu(\omega^2 + \frac{2k}{m})}{2} \hat{p}^2, \quad \omega_\mu = \sqrt{\omega^2 + \frac{2k}{m}} = \omega\sqrt{1 + 2\mathcal{E}},$$

$$E_{осн}^{точн.} = \frac{3}{2}\hbar\omega + \frac{3}{2}\hbar\omega_{\mu} = \frac{3}{2}\hbar\omega(1 + \sqrt{1 + 2\varepsilon}).$$

$\varepsilon$  — параметр разложения в теории возмущений, разложим точное решение в ряд по  $\varepsilon$ :

$$1\text{-ый порядок: } E_{осн} = 3\hbar\omega \left(1 + \frac{\varepsilon}{2}\right).$$

$$2\text{-ой порядок: } E_{осн} = 3\hbar\omega \left(1 + \frac{\varepsilon}{2} - \frac{\varepsilon^2}{4}\right).$$



$$\frac{E_{осн}^{x\phi}}{E_{осн}^{точн.}} = \sqrt{2}(\varepsilon \rightarrow \infty).$$

## Семинар 7

### Статистические методы. Самосогласованное поле. Модель Томаса–Ферми

Особенности молекулярных и ядерных задач в построении приближения самосогласованного поля.

Молекулы: другая симметрия (не может быть сферической симметрии).

Старт: всегда с приближения Гайтлера–Лондона, ядра — покоящиеся заряды, дальше формируется обобществлённая электронная оболочка. Т.к.  $m_e \ll M_{\text{я}}$ , то движение электронов можно рассматривать как очень быстрое по сравнению с очень медленным движением ядер.

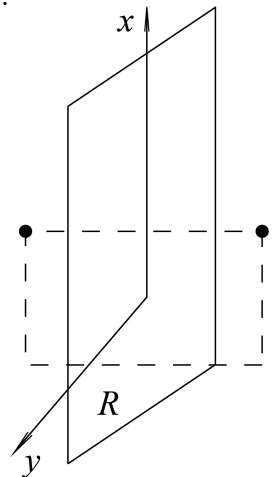
Расположение ядер характеризуется неким набором координационных параметров (обычно это расстояния и углы) и заданной симметрией.

Из симметрии выбирается  $U_{\text{эфф}}$ , решается задача приближения самосогласованного поля  $\rightarrow E_e(R, \alpha)$ , а затем минимизируется полная энергия молекулы:

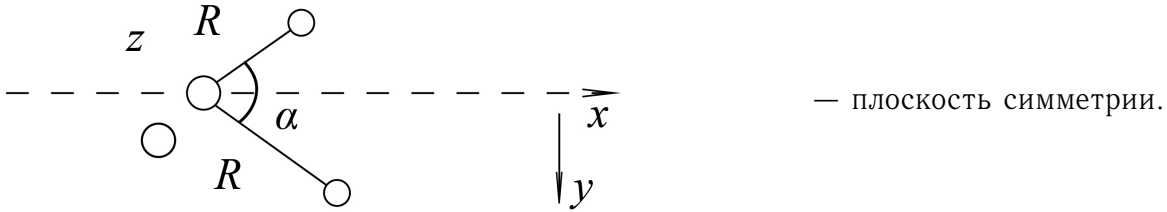
$$E(R, \alpha) = E_e(R, \alpha) + E_{\text{эл}}^{(\text{я})}(R, \alpha) \rightarrow \min \rightarrow R, \alpha.$$

Пример. Молекула водорода симметрична, аксиомы.

$$U_{\text{эфф}} = E_{\text{эфф}}(\rho, |z|).$$



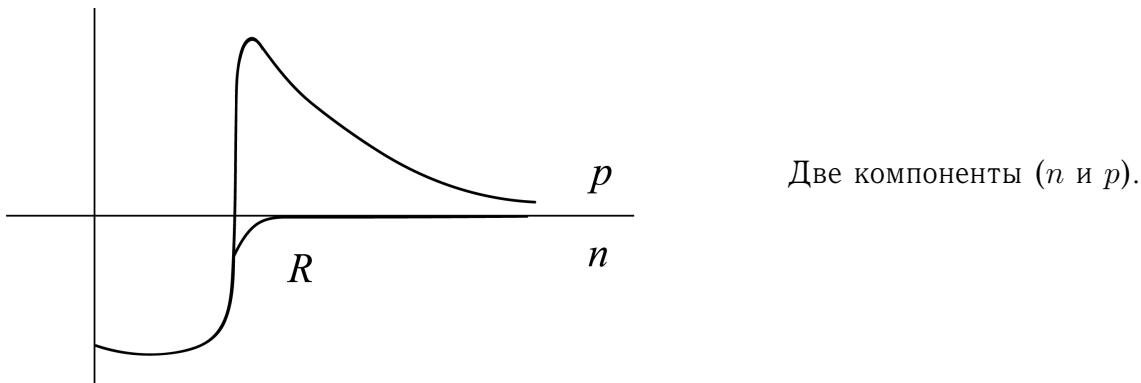
H<sub>2</sub>O:



2 координатных параметра  $R, \alpha$  полностью задают  $U_{\alpha\phi\phi} = U(x, |y|, |z|)$ .

Ядро:

- сохраняется предположение о сферической симметрии;
- существует свойство насыщенных ядерных сил  $\Rightarrow$  самосогласованное поле ядра имеет плоский участок;



- существенны эффекты, связанные со спинами нуклонов, т.е. самосогласованное поле чувствительно по спину;
- эффекты, связанные с кластеризацией ядерного вещества  $\Rightarrow$  переход к методу квазичастиц.

Если надо очень большую точность: следующий шаг после построения приближения самосогласованного поля — учёт поправок к полученному результату с помощью теории возмущений (ТВ).

Здесь есть проблемы, связанные с вырожденностью уровней энергии  $E^{(0)}$ .

Пример. Основное состояние атома N ( $Z = 7$ ).  $1S^2 2S^2 2P^3$ .

$$E_0^{(0)} = \sum_{i=2}^Z \mathcal{E}_{n_i l_i} = \sum_{(об)} K_{nl} \mathcal{E}_{nl} = 2\mathcal{E}_{1S} + 2\mathcal{E}_{2S} + 3\mathcal{E}_{3P},$$

(об) — оболочка. Кратность вырождения:  $S(E^0) = \prod_{(об)} C_{4l+2}^{K_{nl}}$ .

$S(E^0) = C_6^3 = \frac{6!}{3!3!} = 20$ , т.е. самый низший уровень 20-кратно вырожден.

Один из низших возбуждённых уровней:  $1S^1 2P^3 3D^1$ ,  $1 \cdot 2 \cdot 20 \cdot 10 = 400$ .

Даже низковозбуждённые уровни имеют кратность вырождения 10 или 100.

При решении задач с одним оператором возмущения можно избежать решения секулярного уравнения, если выбрать базис  $|\psi^{(0)}\rangle$  с учётом симметрии  $\hat{V}$  (т.е. так, чтобы  $V_{nm} = \langle \psi_n^{(0)} | \hat{V} | \psi_m^{(0)} \rangle$  была диагональна!)

Рассмотрим электронную оболочку атома:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W} + \hat{V}_{\text{рел}} + \hat{V}_{\text{движения ядра}} + \hat{V}_{\text{ext}},$$

где  $\hat{H}_0$  — самосогласованное поле,  $\hat{W} \sim 10^{-2}$ ,  $\hat{V}_{\text{рел}} \sim 10^{-2} \div 10^{-1}$ ,  $\hat{V}_{\text{движения ядра}} \sim 10^{-3}$ ,  $\hat{V}_{\text{ext}}$  — любые внешние воздействия.

Но эти операторы обладают разной симметрией. Например:

$$\hat{W} = \sum_{i < j} \frac{l^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} - \sum_{i=1}^Z \left( U_{\text{эфф}}(r_i) + \frac{Ze^2}{r_i} \right).$$

$\hat{W}$  — сферически симметричный:  $[\hat{W}, \hat{L}] = 0$  и нет  $\hat{S}_i$ , т.е.  $[\hat{W}, \hat{S}] = 0$ .

$\hat{W}$  — диагонализуется в базисе:  $\Psi_{\gamma LM_L SM_S \dots}^{(0)}$ .

$\gamma$  — набор квантовых чисел, фиксирующих конфигурацию  $(n_i l_i) - 2Z$  квантовых чисел (т.е.  $E^{(0)} = E_{\gamma}^{(0)}$ ).

$$\hat{W}_{\text{рел}} = \hat{V}_{ls} + \hat{V}_{\text{кин}} + \hat{V}_D,$$

$\hat{V}_{ls} = \sum_{i=Z_1}^2 f(r_i) \hat{l}_i \hat{S}_i$  — спин-орбит.,  $\hat{V}_{\text{кин}} = -\frac{\hat{p}^4}{8m^3 c^3}$ ,  $\hat{V}_D \sim \text{div} \vec{E}$  — поправка Дарвина.

$$f(r) = \frac{\hbar^2}{2m^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dU_{\text{эфф}}}{dr} (> 0 \forall r!).$$

Из этих поправок только  $\hat{V}_{ls}$  приводит к дополнительному расщеплению уровней, т.к. он имеет другую симметрию:

$$[\hat{V}_{ls}, \hat{L}] = 0, [\hat{V}_{ls}, \hat{S}] \neq 0,$$

т.е. в базисе  $\Psi_{\gamma LM_L SM_S \dots}^{(0)}$   $\hat{V}_{ls}$  не диагонален!

$\hat{V}_{ls}$  инвариантно относительно синхронных вращений в  $\vec{r}$ - и  $\vec{S}$ -пространствах, т.е.  $[\hat{V}_{ls}, \hat{J}] = 0$ ,  $(\hat{J} = \hat{L} + \hat{S})$  —  $\hat{V}_{ls}$  диагонален в базисе  $\Psi_{\gamma LS J M_J \dots}^{(0)}$ , но в этом базисе не диагонален  $\hat{W}$ .

Идея 30-х: подключаем возмущения по очереди.

## Примеры решения задач

Функция Томаса-Ферми:  $\sqrt{x} \chi'' = \chi^{3/2}$ ,  $\chi(0) = 1$ ,  $\chi(x_0) = 0$ .

Пример. Для нейтрального атома ( $Z^*$ ) в модели Томаса-Ферми найти среднее значение кинетической энергии электрона.  $\langle T_e^{(1)} \rangle$ ,  $\langle V_{ee}^{(2)} \rangle$  — отталки.,  $E_i$  — энергия полной ионизации.

$$\langle T_e^{(1)} \rangle = \frac{1}{Z} T_e, \quad \langle V_{ee}^{(2)} \rangle = \frac{2}{Z(Z-1)} V_{ee} \simeq \frac{2}{Z^2} V_{ee}.$$

$\frac{2}{Z(Z-1)}$  даёт завышенную точность.

$E_i = -(T_e + U_{ne} + V_{ee})$ ,  $U_{ne}$  — ядро-электрон,  $V_{ee}$  — отталки.

$$\begin{aligned} U_{ne} &= +Ze + \phi_e(0) = +Ze \left[ \phi(r) - \frac{Ze}{r} \right] \Big|_{r \rightarrow 0} = Ze \frac{Ze}{r} \left[ \chi \left( \frac{Z^{1/3} r}{\beta a} \right) - 1 \right] \Big|_{r \rightarrow 0} = \\ &= \left\{ \chi \approx 1 - 1,59 \frac{Z^{1/3} r}{\beta a} + o(r^2) \right\} = -1,59 \frac{Z^{7/3} e^2}{\beta a} \simeq -1,80 \frac{Z^{7/3} e^2}{a}, \end{aligned}$$

$$U_{nl} = \int_0^\infty dr \cdot 4\pi r^2 (-e) n_e(r) \frac{Ze}{r} = Ze \cdot 4\pi \frac{32 Z^2}{9 \pi^3 a^3} (-e) \left( \frac{\beta a}{Z^{1/3}} \right)^2 \int_0^\infty \underbrace{dr \cdot r}_{=dx \cdot x} \left[ \frac{1}{x} \chi(x) \right]^{3/2} =$$

$$= -\frac{128}{9\pi^2} \frac{1}{4} \left(\frac{3\pi}{4}\right)^{4/3} Z^{7/3} \frac{e^2}{a} \int_0^\infty dx \frac{\chi^{3/2}}{\sqrt{x}} = -\frac{4(6\pi)^{1/3}}{3\pi} Z^{7/3} \frac{e^2}{a} \int_0^\infty dx \frac{\chi^{3/2}(x)}{\sqrt{x}},$$

$n_e(r)$  — электронная плотность,  $\frac{Ze}{r}$  — потенциал ядра.

$$U_{ne} = -1,80 \frac{Z^{7/3} e^2}{a} = -\frac{4(6\pi)^{1/3}}{3\pi} \frac{Z^{7/3} e^2}{a} \int_0^\infty dx \frac{\chi^{3/2}}{\sqrt{x}}$$

$$V_{ee} = \underbrace{\frac{1}{2}} \int dr \cdot 4\pi r^2 (-e) n_e(r) \frac{Ze}{r} [\chi - 1] = \frac{2(6\pi)^{1/3}}{3\pi} \frac{Z^{7/3} e}{a} \int_0^\infty \frac{dx}{\sqrt{x}} \chi^{3/2} (1 - \chi).$$

коэффициент взаимности

Полная кинетическая энергия электронов  $T_e$ :

$$p_F(r) = \hbar(3\pi^2 n_e)^{1/3},$$

$$\begin{aligned} T_e &= \int \frac{d^3 \vec{r} d^3 \vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \cdot 2 \frac{\vec{p}^2}{2m} = \frac{1}{8\pi^3 \hbar^3 m} \int_0^\infty dr \cdot 4\pi r^2 \int_0^{p_F} dp \cdot 4\pi p^2 p^2 = \frac{2\hbar^2}{\pi m \cdot 5} \int_0^\infty dr r^2 (3\pi^2)^{5/3} n_e^{5/3} = \\ &= \frac{2e^2 a}{5\pi} (3\pi^2)^{5/3} \left(\frac{32Z^2}{4\pi^3 a^3}\right)^{5/3} \frac{\beta^3 a^3}{Z} \int_0^\infty \underbrace{dr r^2}_{=dx x^2} \left[\frac{1}{x} \chi\right]^{5/2} = \frac{Z^{7/3} e^2}{a} \frac{2}{5\pi} \frac{1}{(3\pi)^{5/3}} \frac{1}{8} \left(\frac{3\pi}{4}\right)^2 \cdot 32 \cdot 4 \cdot 4^{3/2} = \\ &= \frac{(6\pi)^{1/3}}{3\pi} \frac{Z^{7/3} e^2}{a} \int_0^\infty \frac{dx}{\sqrt{x}} \chi^{5/2} = T_e. \end{aligned}$$

$a = \frac{\hbar^2}{me^2}$  — боровский радиус.

$$V_{ee} = -\frac{1}{2} U_{ne} - \frac{5}{6} T_e \quad \text{— соотношение, связывающее 3 величины.}$$

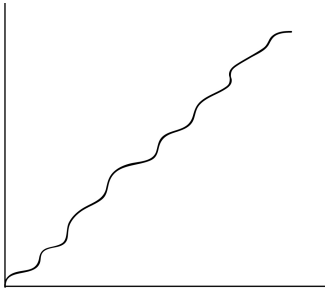
Вспомним, что учитываются только кулоновские взаимодействия  $\Rightarrow$  справедлива теорема вириала:

$$T_e = -\frac{1}{2} U_{ne} - \frac{1}{2} V_{ee}, \quad V_{ee} \left(1 - \frac{5}{12}\right) = U_{ne} \left(-\frac{1}{2} + \frac{5}{12}\right), \quad V_{ee} = -\frac{1}{7} U_{ne} \simeq 0,256 \frac{Z^{7/3} e^2}{a},$$

$$T_e = -\frac{3}{7} U_{ne} \simeq 0,769 \frac{Z^{7/3} e^2}{a}, \quad \langle T_e^{(1)} \rangle \simeq 0,769 \frac{Z^{4/3} e^2}{a},$$

$$\langle V_{ee}^{(2)} \rangle \simeq 0,512 \frac{Z^{1/3} e^2}{a}, \quad E_i \approx 0,769 \frac{Z^{7/3} e^2}{a}.$$

$E_i \approx 20,8 Z^{7/3}$  эВ — на самом деле не так, ибо оболочечные эффекты и т.д.



$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \underbrace{\hat{W} + \hat{V}_{ls}}_{TB}.$$



Установление иерархии возмущений:

$$I|E_W^{(1)}| \gg |E_{lS}^{(1)}| \longrightarrow \begin{matrix} \hat{H}_0 \longrightarrow \hat{H}_0 + \hat{W} \\ -(\hat{H}_0 + \hat{H}_W) + \hat{V}_0 \end{matrix}$$

$$II|E_{lS}^{(1)}| \gg |E_W^{(1)}| \longrightarrow \begin{matrix} \hat{H}_0 \longrightarrow \hat{H}_0 + \hat{V}_{lS} \\ \hat{H}_0 + \hat{V}_{lS} + \hat{W} \end{matrix}$$

## Иерархический подход теории возмущений, $LS$ - и $jj$ -связи

### Схема иерархического подхода теории возмущений.

Пусть  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}_1 + \hat{V}_2 + \dots$ . Тогда иерархия возмущений установлена в данной задаче, если  $|E_1^{(1)}| \gg |E_2^{(1)}| \gg |E_3^{(1)}| \gg \dots$

Тогда наиболее экономная схема использования теории возмущений:

I шаг:  $\hat{H}_0 \longrightarrow \hat{H}_0 + \hat{V}_1$ , выбирая наиболее удобный с точки зрения оператора  $\hat{V}_1$  базис  $|\psi^{(0)}\rangle \implies E_1^{(1)}; |\psi^{(1)}\rangle$ .

II шаг: учитываем максимальную поправку из  $\hat{V}_1^2$  и  $\hat{V}_2^2$ , например,  $\hat{H}_0 + \hat{V}_1 \longrightarrow [\hat{H}_0 + \hat{V}_1] + \hat{V}_2$  (если после шага I ещё остаётся произвол в выборе базиса, он опять используется для минимизации объёма вычислений).

III шаг: учитываем максимальную из оставшихся поправок ( $\hat{V}_1^2$ ,  $\hat{V}_2^2$  или  $\hat{V}_3^1$ ) и т.д.

Пример. Приближение  $LS$ -связи в атомной физике.  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W} + \hat{V}_{lS}$ ,  $|E_W^{(1)}| \gg |E_{lS}^{(1)}|$ .

Первый шаг:  $\hat{H}_0 \longrightarrow \hat{H}_0 + \hat{W}$ .

Удобный базис:  $\psi_{\gamma L M_L S M_S}^{(0)}$ .

С учётом симметрии:  $E_W^{(1)} = E_W^{(1)}(\gamma LS)$ .

Таким образом, уровень  $E_\gamma^{(0)}$  расщеплён на подуровни, отвечающие электронным термам.

Конфигурация  $\longrightarrow$  разложить на термы.

$^{2S+1}L$  (например,  $^5D_1 \implies L = 2, S = 2$ ), и тогда для вычисления  $E_W^{(1)}(^{2S+1}L)$  нужно построить по одной волновой функции из каждого терма и  $E_W^{(1)} = \langle \psi | \hat{W} | \psi \rangle$ .

Пример.  $2p^3$ . Термы:

$l_1 = l_2 = l_3 = 1 \implies L = 0, 1, 2, 3$ .  $S_1 = S_2 = S_3 = \frac{1}{2} \implies S = \frac{1}{2}; \frac{3}{2}$ . Подсчёт состояний:  $2p^3 \longrightarrow C_6^3 = 20$ .

Начинаем с максимального момента:

$$S = \frac{3}{2} \implies \exists \text{ состояния с } M_S = +\frac{3}{2} = m_{S_1} + m_{S_2} + m_{S_3} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \implies$$

$$\implies m_1, m_2, m_3 \text{ — все должны отличаться.}$$

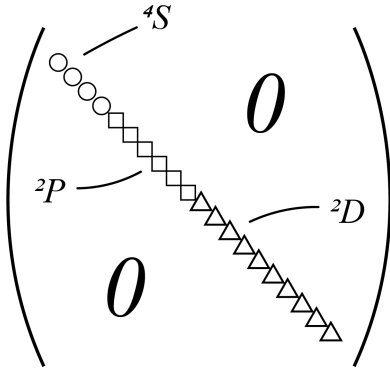
( $l = 1, m = +1, 0, -1$ ), ( $m_1, m_2, m_3 = +1, 0, -1$ ). Но тогда  $M_L = m_1 + m_2 + m_3 = 0$ , т.е.  $L = 0$ , т.е.  $\exists$  терм  $^4S$  (это единственный терм с  $S = \frac{3}{2}$ ). 4 состояния из 20.

Max  $L = 3 \implies \exists$  состояние с  $M_L = +3$ ,  $m_1, m_2, m_3 = +1, +1, +1 \implies m_{S_1}, m_{S_2}, m_{S_3}$  должны отличаться, что невозможно, значит, такого терма нет.

Возможные варианты:  $^2S$  — 2 состояния,  $^2P$  — 6 состояний,  $^2D$  — 10 состояний. Должно быть  $16 \implies ^2S$  — нет.

$$2p^3 \longrightarrow {}^4S, {}^2P, {}^2D.$$

$W_{\alpha\beta} \longrightarrow (20 \times 20)$  — матрица в базисе  $\psi_{\gamma L M_L S M_S \dots}^{(0)}$ .



Считаем 3 диаг. матричный элемент:

$$E_j \xrightarrow{20} \xrightarrow{+W} \begin{array}{l} \text{--- (6) --- } {}^2P \\ \text{--- (10) --- } {}^2D \\ \text{--- (4) --- } {}^4S \end{array}$$

II шаг:  $\hat{H}_0 + \hat{W} \longrightarrow [\hat{H}_0 + \hat{W}] + \hat{V}_{LS}$ .

Матрица  $\hat{V}_{LS}$  ( $20 \times 20$ ) недиагональна. Но нам теперь нужны её 3 блока ( $4 \times 4$ ,  $6 \times 6$ ,  $10 \times 10$ ), где вычисляются матричные элементы между состояниями 1 терма, т.е. с одинаковыми  $L, S$ :

$$V_{LS} = \sum_{i=1}^Z f(r_i) \vec{l}_i \vec{S}_i \text{ в оболочке } 2p \text{ у } \phi_{nlm}(\vec{r}) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi), R_{nl}(r_{123}) = R_{21}(r_{123}).$$

Во всех случаях усреднение  $f(r)$  даст одно и то же:

$$\int_0^\infty dr r^2 R_{21}^*(r) f(r) R_{21}(r) \equiv \xi, \quad \hat{V}_{LS} \longrightarrow \xi \sum_{i=1}^Z (\vec{l}_i \vec{S}_i),$$

$\vec{l}_i$  усредняется по  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ ,  $\vec{S}_i$  — усреднение по  $\chi$  (спиновым частям).

$$\langle \dots |\vec{l}_i| \dots \rangle = \frac{\langle |\vec{l}_i \vec{L}| \rangle}{L(L+1)} \underbrace{\langle \dots |\hat{L}| \dots \rangle}_{\text{одинаковы для сопряжённого терма}}, \quad \langle \dots |\vec{S}_i| \dots \rangle = \frac{\langle |\vec{S}_i \vec{S}| \rangle}{S(S+1)} \langle \dots |\hat{S}| \dots \rangle,$$

т.е.  $\hat{V}_{LS} \longrightarrow \alpha \hat{\vec{L}} \hat{\vec{S}} = \hat{V}_{LS}$ , где  $\alpha$  — const для данного терма,  $\hat{V}_{LS}$  — эффективный оператор орбит в приближении  $LS$ -связи.

Ясно, что собственные значения  $\hat{V}_{LS}$  можно вычислить:

$$\alpha \hat{\vec{L}} \hat{\vec{S}} = \frac{\alpha}{2} [(\hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}})^2 - \hat{\vec{L}}^2 - \hat{\vec{S}}^2] = \frac{\alpha}{2} \left[ \underbrace{\hat{J}^2}_{J(J+1)} - \underbrace{\hat{\vec{L}}^2}_{L(L+1)} - \underbrace{\hat{\vec{S}}^2}_{S(S+1)} \right],$$

где  $J = |L - S|, \dots, L + S$  (шаг через 1), т.е. мы нашли поправки:

$$E_{LS}^{(1)} = \frac{\alpha}{2} [J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)].$$

Подуровень терма на втором шаге расщепляется по  $J$ :

$$\begin{array}{ccc}
 \text{----- } ^2P & \begin{array}{c} \text{----- } (4) \\ \text{----- } (2) \end{array} & \\
 \text{----- } ^2D & \xrightarrow{+V_{ls}} \begin{array}{c} \text{----- } (6) \\ \text{----- } (4) \end{array} & \text{Это тонкая структура.} \\
 \text{----- } ^4S & \text{----- } (4) &
 \end{array}$$

Альтернатива:  $jj$ -связь.

I шаг:  $\hat{H}_0 \longrightarrow \hat{H}_0 + \hat{V}_{ls}$ .

$$\hat{V}_{ls} = \sum_{i=1}^Z f(r_i) \vec{l}_i \vec{S}_i, \quad \vec{l}_i \vec{S}_i = \frac{1}{2} (\vec{j}_i^2 - \underbrace{\vec{l}_i^2}_{2 \rightarrow 2p^3} - \underbrace{\vec{S}_i^2}_{=\frac{3}{4}}), \quad \hat{V}_{ls} = \frac{\xi}{2} \sum_{i=1}^Z \left\{ \hat{j}_i^2 - \frac{11}{4} \right\}, \quad \hat{V}_{ls} \text{ диагонали.}$$

$$\tilde{\Phi}_{\gamma, j_1, \dots, j_z, JM_j}^{(0)}, \quad E_{ls}^{(1)} = \frac{\xi}{2} \sum_{i=1}^Z \left\{ j_i(j_i + 1) - \frac{11}{4} \right\}.$$

$$2p^3 : \left\{ \begin{array}{l} l = 1 \\ S = \frac{1}{2} \end{array} \right\} \Rightarrow j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \quad \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{3}{2} \\ \frac{2}{2} & \frac{2}{2} & \frac{2}{2} \end{pmatrix}; -\frac{3}{2}\xi \\ \begin{pmatrix} \frac{3}{2} & \frac{3}{2} & \frac{3}{2} \\ \frac{2}{2} & \frac{2}{2} & \frac{2}{2} \end{pmatrix}; -\frac{3}{2}\xi \quad \text{— поправка.} \\ \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{2}{2} & \frac{2}{2} & \frac{2}{2} \end{pmatrix}; 0$$

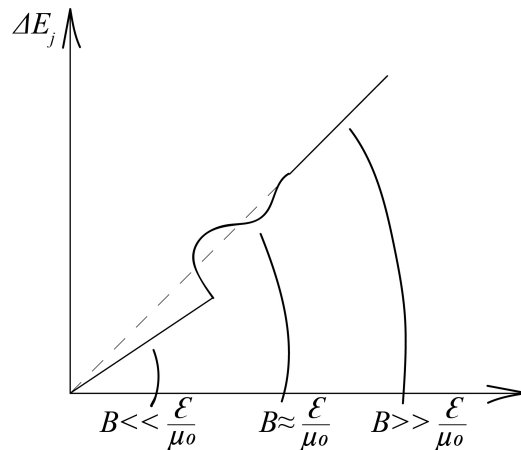
(20) —

II шаг:  $\hat{H}_0 + \hat{V}_{ls} \rightarrow [\hat{H}_0 + \hat{V}_{ls}] + \hat{W}$ .

Матрица  $\hat{W}$ :  $20 \times 20$  — недиагональная, но собственные значения  $\hat{W}$  в базисе для каждой группы не зависят от  $M_J$  (в силу сферической симметрии)  $\Rightarrow$

$$\Rightarrow E_W^{(1)} = E_W^{(1)} |J|.$$

Зееман:



## Семинар 8

### Теория Дирака, обменные эффекты и многочастичные квантовые системы

Ядро нельзя рассматривать как систему нуклонов из-за кластеризации.

#### Метод вторичного квантования

Вторичного — ибо вторичное логически + после канонического квантования.

1. Фоковское пространство.

Постулат 1: существует вакуумное состояние (вакуум) — состояние с определённым числом «частиц», равным нулю.

Постулат 2: существует пространство одночастичных состояний  $\mathcal{H}^{(1)}$  (гильбертово), в котором можно выбрать некий ПОБ  $\{|\psi_n\rangle\}$ . По сути, когда выбираем ПОБ — выбираем, что считаем частицей.

Важно: выбор  $\mathcal{H}^{(1)}$  и базиса  $\{|\psi_n\rangle\}$  задаёт то, что зовём корпускулярной интерпретацией результатов измерений, т.е. определяет смысл термина «Чистые».

Далее: можно (всегда!, но не всегда удобно) строить базис в пространстве двухчастичных состояний из произведений одночастичных волновых функций:  $|\psi_{n_1 n_2}^{(2)}\rangle = \{|\psi_{n_1}\rangle \cdot |\psi_{n_2}\rangle\}_{SA}$ . Тогда пространство  $\mathcal{H}^{(2)}$  есть линейная оболочка этого базиса:  $\mathcal{H}^{(2)} = \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(1)}$ , проделав такое для трёх, четырёх и т.д.-частичных:

$$\mathcal{H}^{(N)} = \underbrace{\mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(1)} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}^{(1)}}_N = \mathcal{H}^{(N)}.$$

Определение. Пространство Фока  $\mathcal{H}^{(F)} \equiv \bigoplus_{N=0}^{\infty} \mathcal{H}^{(N)}$ , где  $\oplus$  — линейная оболочка объединённого базиса,  $\mathcal{H}^{(0)} = \{|\Omega\rangle\}$  — пространство ноль-частичных состояний,  $|\Omega\rangle$  — вектор вакуумного состояния,  $\mathcal{H}^{(1)}$  — пространство одночастичных состояний.

Обратим внимание:

1. В  $\mathcal{H}^{(F)}$  существует вектор  $|\Omega\rangle$  как физическое состояние (можно измерять всякие энергии и т.д.).

2. В  $\mathcal{H}^{(F)}$  существуют вектора, являющиеся линейными комбинациями векторов из разных  $\mathcal{H}^{(N)}$ , и в соответствующих состояниях число частиц не имеет определённого значения. Например:

$$\mathcal{H}^{(F)} \ni |\psi\rangle = \frac{1}{2}|\Omega\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\psi_n\rangle + \frac{i}{2}|\psi_{K_1 K_2}^{(2)}\rangle.$$

$$\text{Ясно, что } N = \left\{ \begin{array}{cc} 0 & w_0 = 1/4 \\ 1 & w_1 = 1/2 \\ 2 & w_2 = 1/4 \end{array} \right\} \longrightarrow |\vec{N}|, DN, \dots$$

3. Операторы рождения и уничтожения.

В соответствии с определением пространства Фока  $\mathcal{H}^{(F)}$ , в нём существует ПОБ «чисел заполнения».

$$|\Omega\rangle = |000\dots\rangle \quad (n = 1\ 2\ 3\dots), \quad |\psi_n\rangle = |00\dots 010\dots\rangle, \quad 1 \text{ на } n\text{-ом месте.}$$

$$|\psi_{K_1 K_2}^{(2)}\rangle = |0\dots 010\dots 010\dots\rangle, \quad 1 \text{ на } K_1 \text{ и } K_2 \text{ местах, } |\psi_{nn}^{(2)}\rangle = |00\dots 02\dots\rangle.$$

$$\boxed{|\psi_{n_1, n_2, \dots, n_k}^{(N)}\rangle = |N_1, N_2, \dots\rangle, \text{ где } \sum_i N_i = N} \text{ — в ПОБ чисел заполнения.}$$

*Определение.* Операторы рождения ( $\hat{a}_n^+$ ) и уничтожения ( $\hat{a}_n^-$ ):

бозоны:  $\hat{a}_n^+|N_1\dots N_N\rangle = \sqrt{N_n+1}|N_1\dots N_{n+1}\dots\rangle$ ,  $\hat{a}_n^-|N_1\dots N_N\rangle = \sqrt{N_n}|N_1\dots N_{n-1}\dots\rangle$ ;  
фермионы:  $\hat{a}_n^+|\dots\hat{1}\dots\rangle = 0$  (нулевому вектору),  $\hat{a}_n^+|\dots 0\dots\rangle = |\dots 1\dots\rangle$ ,  $\hat{a}_n^-|\dots 1\dots\rangle = |\dots 0\dots\rangle$ ,  
 $\hat{a}_n^-|\dots 0\dots\rangle = 0$ .

Таким образом, у вакуум-вектора  $|\Omega\rangle$  существует свойство:  $\forall n \hat{a}_n^-|\Omega\rangle = 0$ ,

$$\forall n \hat{a}_n^-|\psi\rangle = 0 \iff |\psi\rangle = |\Omega\rangle.$$

Свойства  $\hat{a}_n^\pm$ :

1.  $\hat{a}_n^+ = (\hat{a}_n^-)^\dagger$  (в данном случае  $+$  — эрмитово).

2. Алгебра.

Бозоны:

$$\hat{a}_n^- \hat{a}_n^+ |N_1\dots N_n\dots\rangle = (N_n + 1) |N_1\dots N_n\dots\rangle, \quad \hat{a}_n^+ \hat{a}_n^- |N_1\dots N_1\dots\rangle = N_n |N_1\dots N_n\dots\rangle.$$

$$\left. \begin{aligned} [\hat{a}_n^-, \hat{a}_n^+] &= 1 \\ k \neq n [\hat{a}_n^-, \hat{a}_k^+] &= 0 \end{aligned} \right\} \implies [\hat{a}_n^-, \hat{a}_k^+] = \delta_{nk}, \quad [\hat{a}_n^-, \hat{a}_k^-] = [\hat{a}_n^+ \hat{a}_k^+] = 0.$$

Фермионы:

$$\hat{a}_n^+ \hat{a}_k^+ |\Omega\rangle = -\hat{a}_k^+ \hat{a}_n^+ |\Omega\rangle, \quad \{\hat{a}_n^+ \hat{a}_k^+\} = 0 = \{\hat{a}_n^- \hat{a}_k^-\}.$$

$\{\hat{a}_n^+ \hat{a}_k^+\}$  — антикоммутатор,  $\{\hat{a}_n^- \hat{a}_k^-\} = \delta_{nk}$ .

*Замечание.* Эта алгебра получена для введённого определения. Теперь ясно, почему  $\hat{a}_n^\pm$  определялись именно так.

(\*) для определения:

$$\hat{a}_n^+ |N\dots N_1\dots\rangle = f(N_n + 1) |N_1\dots N_n + 1\dots\rangle, \quad \hat{a}_n^- |N_1\dots N_n\dots\rangle = f^*(N_n) |N_1\dots N_n - 1\dots\rangle.$$

Но в этом случае алгебра была бы существенно сложнее.

Ясно, что  $(\sum_n \hat{a}_n^+ \hat{a}_n^-) |N_1 N_2 \dots\rangle = \left( \sum_n N_n \right) |N_1 N_2 \dots\rangle = N |N_1 N_2 \dots\rangle$ , т.е.  $\sum_n \hat{a}_n^+ \hat{a}_n^- = \hat{N}$

— это оператор наблюдаемой и числа «частиц».

Замечание: для (\*)-определения  $\sum_n \hat{a}_n^+ \hat{a}_n^- \equiv |f(\hat{N})|^2$  — тоже неудобно.

3. Определения операторов наблюдаемых.

3.1. Начнём с «одночастичных» операторов, т.е. с таких, которые в  $\mathcal{H}^{(N)}$

$$F^{(N)} \equiv \sum_{\alpha=1}^N \hat{f}_\alpha^{(1)},$$

$\alpha$  — индекс частицы.

Если ввести «фоковский» оператор:

$$F^{(F)} \equiv \sum_{nn'} f_{nn'} \hat{a}_n^+ \hat{a}_{n'}^-, \quad f_{nn'} = \langle \psi_n | \hat{F}^{(1)} | \psi_{n'} \rangle.$$

Ясно, что любой матричный элемент фоковского оператора между состояниями с разными  $N$ :

$$N_1 \neq N_2 \langle \psi^{(N_1)} | \hat{F}^{(F)} | \psi^{(N_2)} \rangle = 0,$$

а любой матричный элемент  $\hat{F}^{(F)}$  между состояниями с одинаковым  $N$ :

$$\langle \psi^{(N)} | \hat{F}^{(F)} | \psi'^{(N)} \rangle = \langle \psi^{(N)} | \hat{F}^{(N)} | \psi'^{(N)} \rangle.$$

Например,

$$\begin{aligned} \langle \psi^{(n)} | \hat{F}^{(N)} | \psi^{(n)} \rangle &= \sum_{\alpha=1}^N \langle \psi^{(n)} | \hat{f}_{\alpha}^{(1)} | \psi^{(n)} \rangle = \\ &= \sum_{nn'} f_{nn'} \frac{N!}{N_1!(N_n-1)!(N'_n-1)!N_k!} \sqrt{\frac{N_1! \dots N_n! \dots N_k!}{n!}} \sqrt{\frac{N_1! \dots N_{n'}! \dots N_k!}{N!}} = \sum_{nn'} f_{nn'} \sqrt{N_n} \sqrt{N_{n'}}, \\ \langle \psi^{(n)} | \sum_{nn'} f_{nn'} \hat{a}_n^+ \hat{a}_{n'}^- | \psi^{(n)} \rangle &= \sum_{nn'} f_{nn'} \sqrt{N_n N_{n'}}, \end{aligned}$$

т.е.  $\hat{F}^{(F)}$  — является расширением семейства  $\left( \sum_{\alpha=1}^N \hat{f}_{\alpha}^{(1)} \right)$  на всё фоковское  $\mathcal{H}^{(F)}$ .

Аналогично, если

$$\begin{aligned} \hat{V}^{(n)} &= \sum_{\alpha, \beta} \hat{v}_{\alpha\beta}^{(2)} \longrightarrow \hat{V}^{(F)} \sum_{nkn'k'} v_{nkn'k'} \hat{a}_n^+ \hat{a}_k^+ \hat{a}_{n'}^- \hat{a}_{k'}^-, v_{nkn'k'} \equiv \langle \psi_{nk}^{(2)} | \hat{v}^{(2)} | \psi_{n'k'}^{(2)} \rangle, \\ \hat{w}^{(N)} &= \sum_{\alpha\beta\gamma} \hat{w}_{\alpha\beta\gamma}^{(3)} \longrightarrow \hat{W}^{(F)} = \sum_{nkmn'k'm'} w_{nkmn'k'm'} \hat{a}_n^+ \hat{a}_k^+ \hat{a}_m^+ \hat{a}_{n'}^- \hat{a}_{k'}^- \hat{a}_{m'}^-, \\ w_{nkmn'k'm'} &= \langle \psi_{nkm}^{(3)} | \hat{w}^{(3)} | \psi_{n'k'm'}^{(3)} \rangle. \end{aligned}$$

Также в  $\mathcal{H}^{(F)}$  можно определить «новые» наблюдаемые, имеющие  $\neq 0$  матричные элементы между векторами  $|\psi^{(N_1)}\rangle$  и  $|\psi^{(N_2)}\rangle$  при  $N_1 = N_2$ .

Пример:  $\hat{G} = \sum_n (g_n \hat{a}_n^- + g_n^+ \hat{a}_n^+)$ .

### Примеры решения задач

1.  $E_{\gamma} =_{kl}(4l+2)$ .

$$2p^2 \hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W} + \hat{V}_{LS} + \hat{V}_B.$$

2.  $L = 0, 1, 2, S = 0, 1, L + S$  чётно  $\implies {}^1S, {}^3P$  и  ${}^1D$  — термы.

Пример. Тонкая структура  $np^2$ .  $LS$ -связь.

1 шаг.  $\hat{H}_0 \longrightarrow \hat{H}_0 + \hat{W}$ ,  $np^2 \longrightarrow {}^1S, {}^3P, {}^1D$  в базисе  $\psi_{\gamma L S M_L M_S}^{(0)}$ .

Матрица  $\hat{W}$  диагональна, диагональные матричные элементы не зависят от  $M_L$  и  $M_S$ .

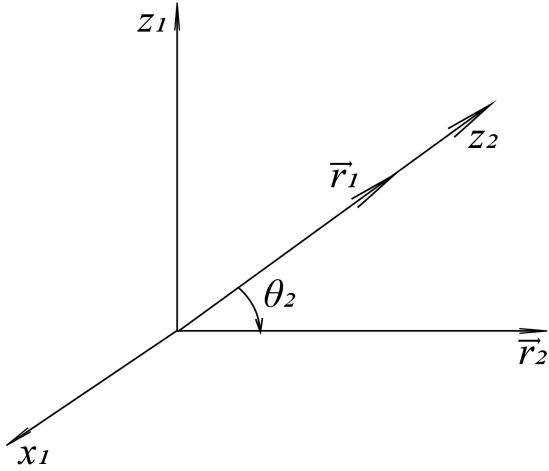
$$\hat{W} = \begin{pmatrix} W_{11} & \dots & & & & \\ & W_{22} & & & & \\ & & \ddots & & & \\ & & & W_{10,10} & & \\ & & & & W_{11,11} & \\ & & & & \dots & W_{15,15} \\ & & & & & & \dots \end{pmatrix} \chi_{S M_S},$$

$W_{11} - {}^1S$ ,  $W_{22} - W_{10,10} - {}^3P$ ,  $W_{11,11}, W_{15,15} - {}^1D$ .

$W_{11,11} - W_{15,15}$ :  $\forall$  волновая функция термина  ${}^1D$ :  $\psi = \Phi_{2+2} \chi_{00}$ ,

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right] = \chi_{00},$$

$$\begin{aligned}
\Phi_{2+2} &= \Phi_{n_1+1}(\vec{r}_1)\Phi_{n_1+1}(\vec{r}_2), \quad \Phi_{n_1+1}(\vec{r}) = R_n(r)Y_{11}(\theta\varphi), \\
W_{11,11} &= \int dr_1 dr_2 \psi^+ \hat{W} \psi = \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \Phi_{n_1+1}^+(\vec{r}_1) \Phi_{n_1+1}^+(\vec{r}_2) \times \\
&\times \left\{ \frac{e^2}{(r_1 - r_2)} + \sum_{i=1}^n \left( \frac{Ze^2}{r_1} + \frac{Ze^2}{r^2} - U_{\partial} \phi \phi(\vec{r}_1) - U_{\partial} \phi \phi(\vec{r}_2) \right) \right\} \Phi_{n_1+1}(\vec{r}_1) \Phi_{n_1+1}(\vec{r}_2), \\
&\int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 |R_{n_1}(r_1)|^2 |R_{n_2}(r_2)|^2 |Y_{1+1}(\theta\varphi)|^2 |Y_{1+1}(\theta_2\varphi_2)|^2 \underbrace{\frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}}_{\frac{e^2}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta_2}}} = F_2 > 0.
\end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
2 \int d\vec{r} |R_{n_1}(r)|^2 |Y_{1+1}(\theta, \varphi)|^2 \left( \frac{Ze^2}{r} - U_{\partial} \phi \phi(r) \right) = \\
= 2 \int_0^{\infty} dr r^2 |R_{n_1}(r)|^2 \left( \frac{Ze^2}{r^2} + U_{\partial} \phi \phi(r) \right) = F_1 > 0,
\end{aligned}$$

т.е. матричные элементы  $W_{11,11} = \dots = W_{15,15} = F_1 + F_2$ .  
 $W_{22} = \dots = W_{10,10} \longleftrightarrow \forall$  волновая функция из терма  ${}^3P$ .

$$M_L = +1, \quad M_S = +1, \quad \Psi = \Psi_{1+1}\chi_{1+1}, \quad \chi_{1+1} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{\sqrt{2}} [\Phi_{n_1+1}(\vec{r}_1)\Phi_{n_10}(\vec{r}_2) - \Phi_{n_1+1}(\vec{r}_2)(\vec{r}_2)\Phi_{n_10}(\vec{r}_1)], \\
N_{22} &= \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 |R_{n_1}(r_1)|^2 |R_{n_1}(r_2)|^2 \frac{1}{2} |Y_{1+1}(\theta_1\varphi_1)Y_{10}(\theta_2\varphi_2) - Y_{1+1}(\theta_2\varphi_1)Y_{10}(\theta_1\varphi_2)|^2 \times \\
&\times \left[ \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} + \sum_{i=1}^2 \left( \frac{Ze^2}{r_1} + U_{\partial} \phi \phi(\vec{r}_1) \right) \right], \\
W_{22} &= \dots = W_{1010} = F_1 - 5F_2, \quad (1) {}^1S.
\end{aligned}$$

Аналогичные вычисления для  ${}^1S$ :  $W_{11} = F_1 + 10F_2$ .

$$\begin{aligned}
\hat{V}_{LS} = \sum_{i=1}^2 f(r_i) \vec{l}_i \vec{S}_i \longrightarrow V_{LS} = \alpha \hat{L} \hat{S}, \quad E_{\gamma}^{(0)} \xrightarrow{(15)} \xrightarrow{+\hat{W}^{(1)}} \begin{array}{c} \text{--- (5) ---} \\ \text{--- (9) ---} \end{array} \begin{array}{l} {}^1D \\ {}^3P \end{array} \\
\alpha = +\frac{\xi}{2}, \quad \xi = \int_0^{\infty} dr r^2 f(r) |R_{n_1}(r)|^2,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\hat{V}_{LS} = \frac{\xi}{4} [\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2] \implies E_{LS}^{(1)} = \frac{\xi}{4} [J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)], \quad J = |L+S|, \dots, L+S, \\
\text{для } {}^1S \implies L = S = 0 \implies E_{LS}^{(1)} = 0.
\end{aligned}$$

$$\begin{array}{c}
\xi < F_1, F_2 \quad \xrightarrow{(1)} \quad {}^1S \quad \xrightarrow{(1)} \\
\\
E_\gamma^{(0)} \xrightarrow{(15)} \xrightarrow{+\hat{W}} \begin{array}{c} \xrightarrow{(5)} {}^1D \\ \text{---} \\ \xrightarrow{(9)} {}^3P \end{array} \xrightarrow{+V_{IS}} \begin{array}{c} \xrightarrow{(5)} \\ \text{---} \\ \xrightarrow{(5)} \\ \text{---} \\ \xrightarrow{(3)} \\ \text{---} \\ \xrightarrow{(1)} \end{array}
\end{array}$$

$${}^1D \implies L=2, S=0 \implies J=2 \implies E_{lS}^{(1)} = 0.$$

$${}^3P \implies L=S=1 \implies J=0,1,2 \implies E_{lS}^{(1)} = \begin{cases} \xi, & J=0, \\ -\frac{2}{4}\xi, & J=1, \\ +\frac{2}{4}\xi, & J=2. \end{cases}$$

А что изменится для  $jj$ ?  
 $np^2, jj$ . Это нереалистично.

$$1. \hat{H}_0 \longrightarrow \hat{H}_0 + \hat{V}_{lS}, \quad \hat{V}_{lS} = \sum_{i=1}^2 f(r_i) \hat{l}_i \hat{S}_i = \frac{\xi}{2} \sum_{i=1}^2 [\hat{j}_i^2 - \hat{l}_i^2 - \hat{S}_i^2] = \frac{\xi}{2} \left( \hat{j}_1^2 + \hat{j}_2^2 - \frac{11}{2} \right).$$

Удобно выбрать другой базис  $\tilde{\psi}_{\gamma j_1 j_2 J M_j}^{(0)} - \hat{V}_{lS}$  — диагональна,  $\gamma j_1 j_2 J M_j$  — одновременно измеримы. На диагонали:  $E_{lS}^{(1)} = \frac{\xi}{2} \left[ j_1(j_1+1) + j_2(j_2+1) - \frac{11}{2} \right]$ .

$$\begin{array}{ccc}
l=1, S=\frac{1}{2} \implies j=\frac{3}{2}, \frac{1}{2}, \\
\left( \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right); & \left( \frac{1}{2}, \frac{3}{2} \right); & \left( \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right) \\
\downarrow & \downarrow & \downarrow \\
+\xi & -\frac{\xi}{2} & -2\xi \\
\downarrow & \downarrow & \downarrow \\
J=0, 1, 2, 3 & J=1, 2 & J=0
\end{array}$$

Для  $J=0, 1, 2, 3 \longrightarrow (1)(3)(5)(7), 0$  и  $2$ . Для  $J=1, 2 \longrightarrow 3$  и  $5$  значений.

$$\begin{array}{c}
E_\gamma^{(0)} \xrightarrow{(15)} \xrightarrow{V_{IS}} \begin{array}{c} \xrightarrow{(6)} \text{---} \xrightarrow{(5)} \left( \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right) \\ \text{---} \xrightarrow{(1)} \\ \text{---} \xrightarrow{(5)} \left( \frac{1}{2}, \frac{3}{2} \right) \\ \text{---} \xrightarrow{(8)} \text{---} \xrightarrow{(3)} \\ \text{---} \xrightarrow{(1)} \left( \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right) \end{array}
\end{array}$$



## Семинар 9

### Метод вторичного квантования

Замечание по процедуре вторичного квантования: выстроенная процедура явно зависит от выбора  $|\psi_n^{(1)}\rangle$  в  $\mathcal{H}^{(1)}$ .

Можно ли «избавиться» от этой зависимости?

*Определение.* Операторы вторичноквантованных амплитуд ( $\hat{\psi}$ -операторы):

$$\hat{\psi}(\vec{r}) = \sum_n \psi_n(\vec{r}) \hat{a}_n^-, \text{ где } \psi_n - \text{коорд. В.Ф. } |\psi_n^{(1)}\rangle, \hat{\psi}^+(\vec{r}) = \sum_n \psi_n^*(\vec{r}) \hat{a}_n^+.$$

Для бозонов:

$$[\hat{\psi}(\vec{r}), \hat{\psi}(\vec{r}')] = 0 = [\hat{\psi}^+(\vec{r}), \hat{\psi}^+(\vec{r}')],$$

$$[\hat{\psi}(\vec{r}), \hat{\psi}^+(\vec{r}')] = \sum_{nn'} \psi_n(\vec{r}) \psi_{n'}^*(\vec{r}') \underbrace{[\hat{a}_n^-, \hat{a}_{n'}^+]}_{=\delta_{nn'}} = \sum_n \psi_n(\vec{r}) \psi_n^*(\vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}'),$$

т.е.  $[\hat{\psi}(\vec{r}), \hat{\psi}^+(\vec{r}')] = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$ .

Для фермионов:  $[\ ; \ ] \longrightarrow \{ \ ; \ \}$ .

Тогда для любой наблюдаемой:

$$\hat{F}^{(N)} = \sum_{\alpha=1}^N \hat{f}_{\alpha}^{(1)} + \sum_{\alpha < \beta} \hat{v}_{\alpha\beta}^{(2)} + \dots,$$

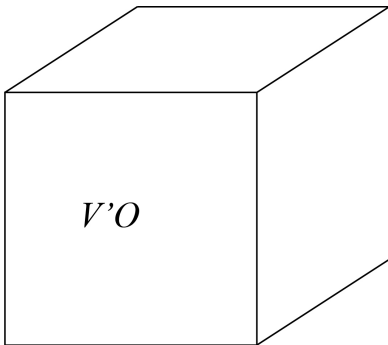
$$\hat{F}^{(F)} = \int d\vec{r} \hat{\psi}^+(\vec{r}) \hat{f}^{(1)} \hat{\psi}(\vec{r}) + \int d\vec{r} d\vec{r}' \hat{\psi}(\vec{r}) \hat{\psi}^+(\vec{r}') \hat{v}^{(2)}(\vec{r}, \vec{r}') \hat{\psi}(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r}') + \dots$$

$\hat{F}^{(F)}$  — фоковский. Пример:

$$\hat{N} = \sum_n \hat{a}_n^+ \hat{a}_n^- = \int d\vec{r} \hat{\psi}^+(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r}) = \int d\vec{r} \hat{n}(\vec{r}), \sum_{nn'} \underbrace{\psi_n(\vec{r}) \psi_{n'}^*(\vec{r}) \hat{a}_n^- \hat{a}_{n'}^+}_{=\int d\vec{r} \psi_{n'}^* \psi_n = \delta_{nn'}}.$$

Т.е. оператор плотности числа частиц:

$$\hat{n}(\vec{r}) = \hat{\psi}^+(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r}) = \sum_{nn'} \psi_n(\vec{r}) \psi_{n'}^*(\vec{r}) \hat{a}_n^- \hat{a}_{n'}^+.$$



$$\hat{N}' = \int_{V'} d\vec{r} \hat{n}(\vec{r}) = \sum_{nn'} C_{nn'} \hat{a}_n^+ \hat{a}_n^-,$$

$$C_{nn'} = \int_{V'} d\vec{r} \psi_{n'}^*(\vec{r}) \psi_n(\vec{r}).$$

Вычисление матричных элементов от операторов наблюдаемых  $\langle \psi_1 | \hat{F}^{(F)} | \psi_2 \rangle$ ,  $|\psi_{1,2}\rangle \in \mathcal{H}^{(F)}$ .

$\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}^{(F)}$  — линейная комбинация векторов  $|N_1, N_2, \dots\rangle$  с определёнными числами заполнения, равными  $C_{норм}(\hat{a}_1^+)^{N_1}(\hat{a}_2^+)^{N_2}\dots|\Omega\rangle$  (вакуум).

$\hat{a}$ , любой оператор наблюдаемой, в фоковском пространстве можно записать через  $\hat{a}^+$  и  $\hat{a}^-$ .

Таким образом, вычисление любых матричных элементов такого вида сводится к вычислению конструкций вида

$$\langle \Omega | \hat{a}_{n_1}^- \hat{a}_{n_2}^- \dots \hat{a}_{n_3}^+ \hat{a}_{n_3}^+ \hat{a}_{n_4}^+ \dots \hat{a}_{n_5}^+ | \Omega \rangle.$$

Их называют вакуумные средние (ВС).

#### Принципы вычисления вакуумных средних:

1. Если число  $\hat{a}_n^+$  в  $\langle \Omega | \dots | \Omega \rangle$  не равно числу  $\hat{a}_n^-$ , то  $\langle \dots \rangle = 0$ .
2. Если в ВС  $\langle \Omega | \dots | \Omega \rangle$  крайним справа стоит  $\hat{a}_n^-$ , или крайним слева стоит  $\hat{a}_n^+$ , то наше ВС  $\langle \dots \rangle = 0$ .
3. Если  $\langle \Omega | (\hat{a}_n^-)^N \cdot (\hat{a}_n^+)^N | \Omega \rangle = N! \cdot \sqrt{N!} | 0 \dots 0 N 0 \rangle$ .
4. Можно «перемещать» в ВС  $\langle \Omega | \dots | \Omega \rangle$   $\hat{a}_n^+$  и  $\hat{a}_n^-$  с помощью коммутационных (для бозонов) или антикоммутационных (для фермионов) соотношений:  
 $\hat{a}_{n_1}^- \hat{a}_{n_2}^+ = \delta_{n_1 n_2} + \hat{a}_{n_2}^+ \hat{a}_{n_1}^-$  — бозон;  
 $\hat{a}_{n_1}^- \hat{a}_{n_2}^+ = \delta_{n_1 n_2} - \hat{a}_{n_2}^+ \hat{a}_{n_1}^-$  — фермион.

#### Работа со «сложными» гамильтонианами

$$\hat{H} = \sum_{nn'} \mathcal{E}_{nn'}^{(1)} \hat{a}_n^+ \hat{a}_{n'}^- + \sum_{nkn'k'} v_{nkn'k'}^{(2)} \hat{a}_n^+ \hat{a}_k^+ \hat{a}_{n'}^- \hat{a}_{k'}^-.$$

Что, если приближение самосогласованного поля работает «плохо» (неточно)?

Выход — использование метода квазичастиц (принадлежит Н. Боголюбову).

Введём новый оператор  $\hat{\alpha}_S^\pm$ :  $\hat{a}_n^- = F_n(\hat{\alpha}_S^-, \hat{\alpha}_S^+)$ ,  $\hat{a}_n^+ = F^*(\hat{\alpha}_S^+, \hat{\alpha}_S^-)$ , где  $F$  ограничена требованием:  $\hat{\alpha}_S^\pm$  должны подчиняться алгебре операторов рождения/уничтожения (требованиям каноничности). Это преобразование используется для упрощения  $\hat{H}$ : «в идеале»  $\hat{H} = E_0 + \sum_S \mathcal{E}_S \hat{\alpha}_S^+ \hat{\alpha}_S^-$ ,  $E_0$  — энергия вакуума,  $\mathcal{E}_S$  — энергия одной квазичастицы.

$\mathcal{E} = \mathcal{E}_S$  — дисперсионное соотношение для квазичастиц. Как вариант:

$$\hat{H} = E_0 + \sum_S \mathcal{E}_S \hat{\alpha}_S^+ \hat{\alpha}_S^- + \sum_{s_1 s_2 s'_1 s'_2} w_{s_1 s_2 s'_1 s'_2} \hat{\alpha}_{s_1}^+ \hat{\alpha}_{s_2}^+ \hat{\alpha}_{s'_1}^- \hat{\alpha}_{s'_2}^-.$$

Применение: твёрдое тело, кристаллы.

Пример. Упругая решётка при низких температурах.

$$\hat{H} = \sum_n \left\{ \frac{\hat{p}_n^2}{2m} - \frac{m\omega_n^2 \hat{r}_n^2}{2} \right\} + \sum \frac{k_{nn'}(\vec{r}_n - \vec{r}_{n'})^2}{2}.$$

Всегда существует переход к нормальным координатам:

$\hat{r}_n, \hat{p}_n \longrightarrow q_s, \pi_s$  (система центра масс:  $3N - 3$  независимых координат).

$$i \longrightarrow \frac{\hat{\pi}_i^2}{2m} + \frac{m\omega_S^2 q_S^2}{2} = \hbar\omega_S \left( \hat{\alpha}_S^+ \hat{\alpha}_S^- + \frac{1}{2} \right),$$

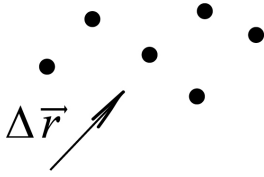
$$\hat{\alpha}_S^- = \frac{m\omega_S \hat{q}_S + i\hat{p}_S}{\sqrt{2m\omega_S \hbar}}, \quad \hat{\alpha}_S^+ = \frac{m\omega_S \hat{q}_S - i\hat{p}_S}{\sqrt{2m\omega_S \hbar}},$$

т.е. существует линейное преобразование  $\vec{r}_n, \vec{p}_n \rightarrow \vec{R}, \vec{P}, \hat{\alpha}_S^\pm$ ,

$$\hat{H} \rightarrow \frac{\hat{p}^2}{2mN} + \sum_{S=1}^{3N-3} \hbar\omega_S \left( \hat{\alpha}_S^+ \hat{\alpha}_S^- + \frac{1}{2} \right) = \left( \frac{\hat{p}^2}{2mN} + \sum_{S=1}^{3N-3} \frac{\hbar\omega_S}{\mathcal{E}_S} \right) + \sum_{S=1}^{3N-3} \underbrace{\hbar\omega_S}_{=\mathcal{E}_S} \hat{\alpha}_S^+ \hat{\alpha}_S^-,$$

т.е. кристалл можно рассматривать как кучу невзаимодействующих бозонов — фононов (кванты звуковых колебаний).

Состояние фононов  $S$ -ой моды можно описать импульсом:



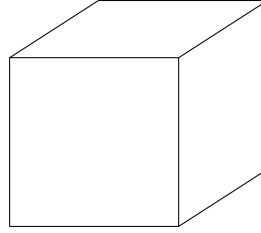
в  $S$ -ой нормальной моде соответствующий сдвиг фаз  $\Delta\varphi_S$ :

$\Delta\varphi_S = (\vec{K}_S, \Delta\vec{r})$ , и тогда  $\vec{p}_S = \hbar\vec{K}$ , тогда  $\mathcal{E}_S = \mathcal{E}(\vec{p}_S) \iff \omega_S = \omega(\vec{K}_S)$ .

Исторически первое: описание фононами колебаний кристаллической решётки.

Твёрдое тело  $\implies$  количество фононов повышается, и появление ангармонических колебаний.

$N$  фермионов ( $S = \frac{1}{2}$ ):



Ферми-газ:

1 шаг: выбор одночастичного базиса (что считаем частицей).

$$\psi_{\vec{K}\sigma}(\vec{r}) = \phi_{\vec{K}}(\vec{r})\chi_\sigma, \quad \chi_{\pm\frac{1}{2}} \begin{cases} \nearrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \searrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{cases}, \quad \varphi_{\vec{K}}(\vec{r}) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{V}} \exp^{i\vec{K}\vec{r}}, & \vec{r} \text{ внутри } V, \\ \sim, & \text{вблизи } \Sigma, \\ 0, & \vec{r} \in \Sigma_V. \end{cases}$$

$$\mathcal{E}_{\vec{K}} = \frac{\hbar^2 \vec{K}^2}{2m}, \quad \hat{H}^{(F)} = \sum_{\vec{K}\sigma} \frac{\hbar^2 \vec{K}^2}{2m} \hat{a}_{\vec{K}\sigma}^+ \hat{a}_{\vec{K}\sigma}^-.$$

Частично-дырочное представление

В основном состоянии ферми-газа числа заполнения  $N_{\vec{K}\sigma} = 1$  для  $\forall |\vec{K}| \leq K_F = \left(3\pi^2 \frac{N}{V}\right)^{1/3}$ , и  $N_{\vec{K}\sigma} \equiv 0$  для  $\forall |\vec{K}| > K_F$ .

Квазичастицы =  $\begin{cases} \text{частицы в состоянии с } |\vec{K}| > K_F, \\ \text{дырки в } |\vec{K}| \leq K_F. \end{cases}$

## Примеры решения задач

Пример. Построить оператор  $\hat{L}^{(F)}$ . Т.е.  $\hat{L}_x^{(F)}$ ,  $\hat{L}_y^{(F)}$ ,  $\hat{L}_z^{(F)}$ .

$$\hat{L}_x^{(F)} = \sum_{nlm n'l'm'} \langle nlm | \hat{l}_x | n'l'm' \rangle \hat{a}_{nlm}^+ \hat{a}_{n'l'm'}^-, \quad \hat{l}_\pm = \hat{l}_x \pm \hat{l}_y, \quad \hat{l}_x = \frac{\hat{l}_+ + \hat{l}_-}{2},$$

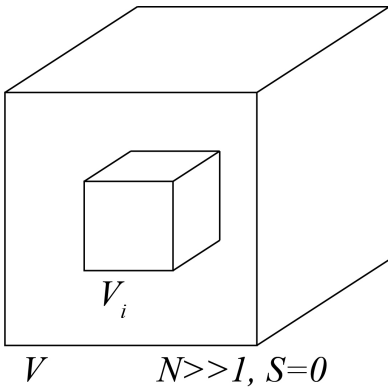
$$\hat{l}_+ |nlm\rangle = \sqrt{l-m(l+1+m)} |nlm-1\rangle, \quad \hat{l}_- |nlm\rangle = \sqrt{l+m(l+1+m)} |nlm+1\rangle, \\ \langle \dots \rangle = \frac{1}{2} \langle nlm | \left\{ \sqrt{(l'-m')(l'+1+m')} |n'l'm'+1\rangle \pm \sqrt{(l'+m')(l'+1-m')} |n'l'm'-1\rangle \right\}.$$

$$\hat{L}_x^{(F)} = \frac{1}{2} \sum_{nlm} \hat{a}_{nlm}^+ \left\{ \sqrt{(l+m)(l+1-m)} \hat{a}_{nlm-1}^- + \sqrt{(l-m)(l+1+m)} \hat{a}_{nlm+1}^- \right\}.$$

$$\hat{l}_y = \frac{\hat{l}_+ - \hat{l}_-}{2i}. \text{ Аналогичные выкладки:}$$

$$\hat{L}_y^{(F)} = \frac{1}{2i} \sum_{nlm} \hat{a}_{nlm}^+ \left\{ \sqrt{(l+m)(l+1-m)} \hat{a}_{nlm-1}^- - \sqrt{(l-m)(l+1+m)} \hat{a}_{nlm+1}^- \right\}.$$

Пример. Основное состояние Бозе-газа: возьмём газ скалярных частиц.



Одночастичный базис :

$$\phi_{\vec{K}}(\vec{r}) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{V}} \exp^{i\vec{K}\vec{r}}, & \vec{r} \text{ внутри } V, \\ \sim, & \text{внутри } \Sigma, \\ 0, & \vec{r} \in \Sigma \text{ (поверхности)}. \end{cases} \quad \mathcal{E}_{\vec{K}} \approx \frac{\hbar^2 \vec{K}^2}{2m}.$$

Пусть существует  $\vec{K}_0 \rightarrow |\vec{K}|_{min}$ .

$$\text{Ground (основное состояние)} : |Gr\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} (\hat{a}_0^+)^N |\Omega\rangle \quad (\hat{a}_{\vec{K}_0}^+ \equiv \hat{a}_0^+).$$

Выделим  $V_1$ . Найти  $\bar{N}_1$  и  $DN_1$  в  $|Gr\rangle$ :

$$\hat{N}_1 = \int_{V_1} d\vec{r} \hat{\psi}^+ \hat{\psi} = \sum_{\vec{K}\vec{K}'} \underbrace{\left( \int_{V_1} d\vec{r} \psi_{\vec{K}}^* \psi_{\vec{K}'} \right)}_{\equiv J_{\vec{K}\vec{K}'}} \hat{a}_{\vec{K}}^+ \hat{a}_{\vec{K}'}^-, \quad J_{\vec{K}\vec{K}'} = \frac{1}{V} \int_{V_1} d\vec{r} \exp^{i(\vec{K}' - \vec{K})\vec{r}}.$$

Явно не можем взять, ибо нам не дали форму области.  $J_{\vec{K}\vec{K}'}$  — Фурье-образ носителя области  $V_1$ .

$$\bar{N}_1 = \langle Gr | \hat{N}_1 | Gr \rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \langle \Omega | (\hat{a}_0^-)^N \sum_{\vec{K}\vec{K}'} J_{\vec{K}\vec{K}'} \hat{a}_{\vec{K}}^+ \hat{a}_{\vec{K}'}^- (\hat{a}_0^+)^N | \Omega \rangle.$$

Интересующая нас величина выразится через вакуумное среднее. Следующий шаг — считаем его.

$$\begin{aligned}
& \langle \Omega | (\hat{a}_0^-)^N \hat{a}_{\vec{K}}^+ \hat{a}_{\vec{K}'}^- (\hat{a}_0^+)^N | \Omega \rangle, \quad \hat{a}_{\vec{K}}^- \hat{a}_0^+ (\hat{a}_0^+)^{N-1} = \delta_{\vec{K}'0} + \hat{a}_0^+ \hat{a}_{\vec{K}}^- (\hat{a}_0^+)^{N-1} = \\
& = \delta_{\vec{K}0} (\hat{a}_0^+)^{N-1} + \hat{a}_0^+ \hat{a}_{\vec{K}}^- (\hat{a}_0^+)^{N-1} = \dots N \text{ раз} \dots = N \delta_{\vec{K}'0} (\hat{a}_0^+)^{N-1} + \underbrace{(\hat{a}_0^+)^N \hat{a}_{\vec{K}'}^-}_{\rightarrow 0}, \\
& (\hat{a}_0^-) \hat{a}_{\vec{K}}^+ = \dots = N \delta_{\vec{K}0} (\hat{a}_0^-)^{N-1} + \underbrace{\hat{a}_{\vec{K}}^+ (\hat{a}_0^-)^N}_{\rightarrow 0}, \\
& \langle \dots \rangle = N^2 \delta_{\vec{K}0} \delta_{\vec{K}'0} \underbrace{\langle \Omega | (\hat{a}_0^-)^{N-1} (\hat{a}_0^+)^{N-1} | \Omega \rangle}_{=(N-1)!} = N! N \delta_{\vec{K}0} \delta_{\vec{K}'0}, \text{ подставляем} \\
& \bar{N}_1 = \frac{1}{N!} \sum_{\vec{K}\vec{K}'} J_{\vec{K}\vec{K}'} \underbrace{N! N \delta_{\vec{K}0} \delta_{\vec{K}'0}}_{B.C.} = N J_{00}, \quad J_{00} = \frac{1}{V} \int_{V_1} d\vec{r} \exp^{i(\vec{K}_0 - \vec{K}_0)\vec{r}} = \frac{V_1}{V}.
\end{aligned}$$

Конечный результат (немного разочаровывает):  $\bar{N}_1 = N \frac{V_1}{V}$ , для  $\forall V_1$  бозе-газ распределён по объёму равномерно.

Ещё дисперсию надо посчитать:

$$\begin{aligned}
DN_1 &= \bar{N}_1^2 - \bar{N}_1^2, \\
\bar{N}_1^2 &= \langle Gr | \hat{N}_1^2 | Gr \rangle = \frac{1}{N!} \sum_{\vec{K}\vec{K}'} \sum_{\vec{q}\vec{q}'} J_{\vec{K}\vec{K}'} J_{\vec{q}\vec{q}'} \langle \Omega | (\hat{a}_0^-)^N \hat{a}_{\vec{K}}^+ \hat{a}_{\vec{K}'}^- \hat{a}_{\vec{q}}^+ \hat{a}_{\vec{q}'}^- (\hat{a}_0^+)^N | \Omega \rangle, \\
B.C. \quad \langle \dots \rangle &= N^2 \delta_{0\vec{K}} \delta_{0\vec{q}'} \langle \Omega | \hat{a}_0^- | N! \underbrace{\hat{a}_{\vec{K}'}^- \hat{a}_{\vec{q}}^+}_{=\delta_{\vec{K}',\vec{q}+\hat{a}_{\vec{q}}^+ \hat{a}_{\vec{K}'}^-}} (\hat{a}_0^+)^{N-1} | \Omega \rangle, \\
\langle \dots \rangle &= N^2 \delta_{0\vec{K}} \delta_{0\vec{q}'} \delta_{\vec{K}'\vec{q}} (N-1)! + N^2 \delta_{0\vec{K}} \delta_{0\vec{q}'} (N-1) \delta_{0\vec{K}'} (N-1) \delta_{0\vec{q}} (N-2)!, \\
\bar{N}_1^2 &= N \sum_{\vec{q}} J_{0\vec{q}} J_{\vec{q}0} + N(N-1) \underbrace{(J_{00})^2}_{=\frac{V_1}{V}}, \\
\sum_{\vec{q}} J_{0\vec{q}} J_{\vec{q}0} &= \frac{1}{V^2} \sum_{\vec{q}} \int d\vec{r} \exp^{i(\vec{K}_0 - \vec{\phi})\vec{r}} \int d\vec{r}' \exp^{i(\vec{q} - \vec{K}_0)\vec{r}'} = \frac{1}{V} \int d\vec{r} d\vec{r}' \exp^{i\vec{K}_0(\vec{r} - \vec{r}')} \times \\
&\times \underbrace{\sum_{\vec{q}} \frac{1}{V} \exp^{i\vec{q}(\vec{r}' - \vec{r})}}_{\substack{= \frac{1}{V} \int_{V_1} d\vec{r}' \cdot 1 = \frac{V_1}{V}}} = \frac{V_1}{V}, \quad \bar{N}_1^2 = N^2 \left( \frac{V_1}{V} \right)^2 + (-N) \left( \frac{V_1}{V} \right)^2 + N \frac{V_1}{V}. \\
&= \sum_{\vec{q}} \psi_{\vec{q}}(\vec{r}') \psi_{\vec{q}}(\vec{r}) = \delta(\vec{r} - \vec{r}')
\end{aligned}$$

Тогда  $DN_1 = N \frac{V_1}{V} \left( 1 - \frac{V_1}{V} \right)$ . Т.е. бозе-частицы не влияют друг на друга. Ферми-газ:

$$\psi_{\vec{K}\sigma} = \phi_{\vec{K}}(\vec{r}) \chi_{\sigma} \implies \mathcal{E}_{\vec{K}\sigma} = \frac{\hbar^2 \vec{K}^2}{2m}, \quad |Gr \rangle = \prod_{|\vec{K}| \leq K_F, \sigma = \pm 1/2} \hat{a}_{\vec{K}\sigma}^+ | \Omega \rangle.$$

$\bar{N}_1 = N \frac{V_1}{V}$  — т.е. тоже равномерно по  $V_1$ .

Но:  $D_{\text{Ферми}} \neq D_{\text{Бозе}}$ .  
Особый случай:

$$\hat{H} = \sum_n \mathcal{E}_n \hat{a}_n^+ \hat{a}_n^- + \sum_{nkn'k'} V_{nkn'k'} \hat{a}_n^+ \hat{a}_k^+ \hat{a}_{n'}^- \hat{a}_{k'}^- + \sum_n [g_n \hat{a}_n^- + g_n^* \hat{a}_n^+],$$

$$[\hat{a}_n^+, \hat{N}] = [\hat{a}_n^+, \sum_k \hat{a}_k^+ \hat{a}_k^-] = \sum_k [\hat{a}_n^+, \hat{a}_k^+ \hat{a}_k^-] = -\hat{a}_n^+.$$

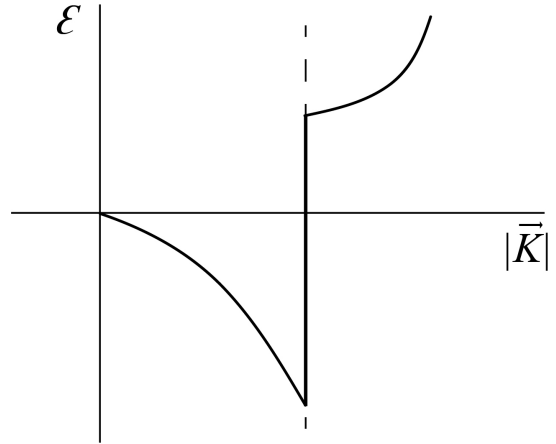
Для  $\hat{H} : [\hat{N}, \hat{H}] \neq 0$ .  
Ферми-газ:

$$\sum_{\vec{K}\sigma} \frac{\hbar^2 K^2}{2m} \hat{a}_{\vec{K}\sigma}^+ \hat{a}_{\vec{K}\sigma}^-, \quad \begin{cases} \hat{a}_{\vec{n}+\frac{1}{2}}^- = U(\vec{K}) \hat{a}_{\vec{K}+\frac{1}{2}}^- + v(\vec{K}) \hat{a}_{-\vec{K}-\frac{1}{2}}^+, \\ \hat{a}_{\vec{n}-\frac{1}{2}}^- = -v(\vec{K}) \hat{a}_{-\vec{K}-\frac{1}{2}}^+ + U(\vec{K}) \hat{a}_{\vec{K}+\frac{1}{2}}^-. \end{cases}$$

$$U(\vec{K}) = \begin{cases} 1, & |\vec{K}| > K_F, \\ 0, & |\vec{K}| \leq K_F, \end{cases} \quad v(\vec{K}) = \begin{cases} 0, & |\vec{K}| > K_F, \\ 1, & |\vec{K}| \leq K_F. \end{cases}$$

$$\begin{aligned} \hat{H} = \sum_{\vec{K}} \frac{\hbar^2 K^2}{2m} \left\{ \left[ U^* \hat{a}_{\vec{K}+\frac{1}{2}}^+ + v^* \hat{a}_{-\vec{K}-\frac{1}{2}}^- \right] \left[ U \hat{a}_{\vec{K}+\frac{1}{2}}^- + v \hat{a}_{-\vec{K}-\frac{1}{2}}^+ \right] + \right. \\ \left. + \left[ v^* \hat{a}_{-\vec{K}-\frac{1}{2}}^- + U^* \hat{a}_{\vec{K}+\frac{1}{2}}^+ \right] \left[ v \hat{a}_{-\vec{K}-\frac{1}{2}}^+ + U \hat{a}_{\vec{K}+\frac{1}{2}}^- \right] \right\} = \sum_{\vec{K}} \frac{\hbar^2 \vec{K}^2}{2m} |v(K)|^2 + \underbrace{\sum_{\vec{K}\sigma} \frac{\hbar^2 \vec{K}^2}{2m} [|U|^2 - |v|^2] \hat{a}_{\vec{K}\sigma}^+ \hat{a}_{\vec{K}\sigma}^-}_{=\mathcal{E}(\vec{K})}, \end{aligned}$$

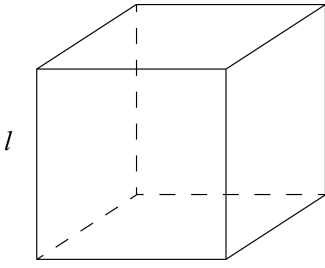
$\sum_{\vec{K}} \frac{\hbar^2 \vec{K}^2}{2m} |v(K)|^2$  — энергия квазичастичного вакуума.



## Семинар 10

Квантование свободного электромагнитного поля

Нет зарядов и токов ( $\rho = 0, \vec{j} = 0$ ).



Вступление: классическая теория.

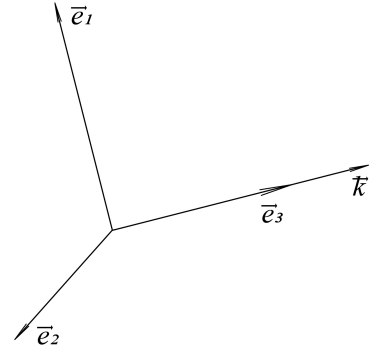
Уравнение Максвелла в вакууме: на языке потенциалов в кулоновской калибровке ( $\text{div} \vec{A} = 0$ ) (1):

$$\begin{cases} \Delta \vec{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} = 0 & (2), \\ \Delta \phi = 0 \implies \phi \equiv 0. \end{cases}$$

$\Delta \phi = 0$  — скалярный множитель, он не является самостоятельной динамической переменной.

$$\vec{A}(t, \vec{r}) = \sum_{\vec{K}, \lambda=1,2,3} N_{\vec{K}} e_{\lambda}(\vec{K}) \left\{ \bar{a}_{\vec{K}\lambda} \exp^{i\vec{K}\vec{r}} + a_{\vec{K}\lambda}^* \exp^{-i\vec{K}\vec{r}} \right\}, \quad a = a(t).$$

(1)  $\implies (\vec{e}_{\lambda}(\vec{K}) \vec{K}) = 0 \implies a_{\vec{K}\lambda} = 0$  — условие поперечности.



$$(2) \implies \frac{d^2 a_{\vec{K}\lambda}}{dt^2} + C^2 |\vec{K}|^2 a_{\vec{K}\lambda} = 0, \quad \omega_{\vec{K}} = C |\vec{K}| \implies a_{\vec{K}\lambda}(t) = \exp^{-i(\omega_{\vec{K}} t + \varphi)} \quad (\text{в } \sum_{\vec{K}} \text{ решение}$$

$\exp^{+i(\omega_{\vec{K}} t + \varphi)}$  уже присутствует как слагаемое  $\vec{K} \rightarrow -\vec{K}$ ).

$$(3) \quad \vec{A}(t, \vec{r}) = \sum_{\vec{K}, \lambda=1,2} N_{\vec{K}} \vec{e}_{\lambda}(\vec{K}) \left\{ a_{\vec{K}\lambda} \exp^{i\vec{K}\vec{r}} + a_{\vec{K}\lambda}^* \exp^{-i\vec{K}\vec{r}} \right\}, \quad \text{где } a_{\vec{K}\lambda} \sim \exp^{-i\omega_K t}.$$

Постулат квантования:  $A = \text{const}(\hat{\psi} + \hat{\psi}^+)$ .

$$= \sum_{\vec{K}\lambda} \phi_{\vec{K}\lambda}^+ \hat{a}_{\vec{K}\lambda}$$

$$(3') = \hat{A}^{(F)}(t, \vec{r}) = \sum_{\vec{K}, \lambda=1,2} N_{\vec{K}\lambda} \vec{l}_{\lambda}(\vec{K}) \left\{ a_{\vec{K}\lambda}^- \exp^{i\vec{K}\vec{r}} + a_{\vec{K}\lambda}^+ \exp^{-i\vec{K}\vec{r}} \right\}.$$

Одночастичная волновая функция:  $\phi_{\vec{K}\lambda} = \text{const} \cdot \vec{e}_{\lambda}(\vec{K}) \exp^{i\vec{K}\vec{r}}$ .

Физическое содержание построенной теории:

$$\hat{E}^{(F)} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = \frac{1}{c} \sum_{\vec{K}, \lambda=1,2} N_{\vec{K}\lambda} \vec{e}_{\lambda}(\vec{K}) i\omega_{\vec{K}} \left\{ \hat{e}_{\vec{K}\lambda} \exp^{i\vec{K}\vec{r}} - a_{\vec{K}\lambda}^+ \exp^{-i\vec{K}\vec{r}} \right\},$$

$$\hat{B}^{(F)}(t, r) = \text{rot}(\vec{A}^{(F)}) = \sum_{\vec{K}, \lambda=1,2} N_{\vec{K}\lambda} i[\vec{e}_{\vec{K}\lambda} \vec{U}] \left\{ a_{\vec{K}\lambda}^- \exp^{i\vec{K}\vec{r}} - a_{\vec{K}\lambda}^+ \exp^{-i\vec{K}\vec{r}} \right\}.$$

Тогда фоковский оператор:

$$\hat{H}^{(F)} = \int_V d\vec{r} \frac{\hat{E}^2 + \hat{B}^2}{8\pi} = \dots = \sum_{\vec{K}, \lambda} \frac{V N^2 |\vec{K}|^2}{4\pi} \left\{ a_{\vec{K}\lambda}^+ a_{\vec{K}\lambda}^- + a_{\vec{K}\lambda}^- a_{\vec{K}\lambda}^+ \right\}.$$

Ясно, что  $a_{\vec{K}\lambda}^{\pm}$  — бозонные операторы рождения/уничтожения.

$$\hat{H} = \sum_{\vec{K}\lambda} \frac{VN^2|\vec{K}|}{2\pi} \left\{ a_{\vec{K}\lambda}^+ a_{\vec{K}\lambda}^- + \frac{1}{2} \right\}.$$

$\frac{VN^2|\vec{K}|}{2\pi}$  — энергия одного фотона  $\mathcal{E}(\vec{K})$ ,  $a_{\vec{K}\lambda}^+ a_{\vec{K}\lambda}^-$  — оператор числа частиц  $\hat{N}_{\vec{K}\lambda}$ ,  $\frac{1}{2}$  — энергия вакуума.

Согласие с экспериментальными данными требует:

$$\mathcal{E}(\vec{K}) = \hbar\omega_{\vec{K}} = \hbar c|\vec{K}|, \quad \frac{VN^2|\vec{K}|^2}{2\pi} = \hbar c|\vec{K}| \implies N^2 = \frac{2\pi\hbar c}{V|\vec{K}|}.$$

Значит: (4) (далее всегда  $\lambda = 1, 2$ ):

$$\hat{A}^{(F)} = \sum_{\vec{K}\lambda} \left( \frac{2\pi\hbar c}{V(\vec{K})} \right)^{1/2} \vec{e}_{\lambda}(\vec{K}) \left\{ \hat{a}_{\vec{K}\lambda}^- \exp^{i\vec{K}\vec{r}} + \hat{a}_{\vec{K}\lambda}^+ \exp^{-i\vec{K}\vec{r}} \right\},$$

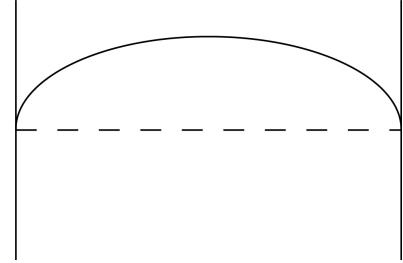
$$\boxed{\vec{\Phi}_{\vec{K}\lambda} = \frac{1}{\sqrt{V}} \vec{e}_{\lambda}(\vec{K}) \exp^{i\vec{K}\vec{r}}.}$$

Свободные электромагнитные поля:

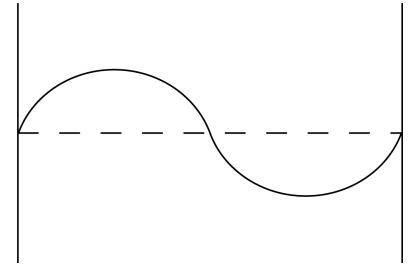
$$\hat{H}_{\gamma}^{(F)} = \sum_{\vec{K}\lambda} \hbar c|\vec{K}| \left\{ a_{\vec{K}\lambda}^+ a_{\vec{K}\lambda}^- + \frac{1}{2} \right\}.$$

Проблемы:

$$1. E_{\gamma}^{(vac)} = \sum_{\vec{K}\lambda} \frac{\hbar c|\vec{K}|}{2} = \sum_{\vec{K}} \hbar c(K) = +\infty.$$



Длины волн могут быть сколь угодно мелкими:



Энергия фотонного вакуума в нашей модели  $= +\infty \longrightarrow$  суперсимметрия, расходимости убивают друг друга.

При учёте всех взаимодействий и метрик эта проблема должна отпасть.

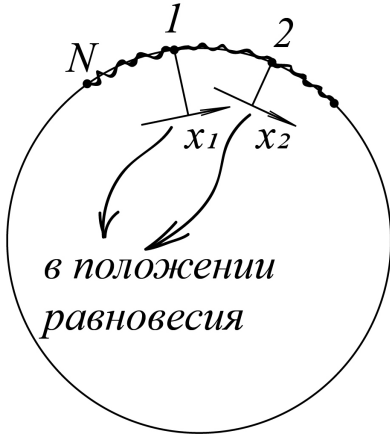
А что делать сейчас? Обойти проблему (перенормировка):

$$E_{\gamma}^{(vac)} \longrightarrow 0, \quad \hat{H}_{\gamma}^{(F,ren)} = \sum_{\vec{K}\lambda} \hbar c|\vec{K}| \hat{a}_{\vec{K}\lambda}^+ \hat{a}_{\vec{K}\lambda}^-.$$



## Примеры решения задач

Пример. Найти спектр энергии возбуждённых и скалярных тождественных частиц. Одномерное движение, периодические граничные условия.



$N$ -ая связь с 1-ой — это периодические граничные условия.

$$\hat{H} = \sum_{k=1}^N \left\{ \frac{\hat{p}_n^2}{2m} + \frac{k(\hat{x}_{n+1} - \hat{x}_n)^2}{2} \right\}, \quad k = m\omega^2,$$

$$\hat{x}_{N+1} \equiv \hat{x}_1 \text{ (периодические граничные условия).}$$

Из общей теории тут  $N$  степеней свободы = 1 трансляционная мода +  $(N - 1)$  колебательная мода.

$$\text{Трансляционная мода (коорд., центр масс): } \hat{Q}_0 = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \hat{x}_n \longleftrightarrow \hat{P}_0 = \sum_{n=1}^N \hat{p}_n.$$

Колебательным модам отвечают  $\omega_S = \omega_1, \dots, \omega_{N-1}$ .

$$\begin{cases} \hat{X}_n = \hat{Q}_0 + \sum_{S=1}^{N-1} C \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_S}} (\hat{\alpha}_S^- \exp^{i\varphi_{Sn}} + \hat{\alpha}_S^+ \exp^{-i\varphi_{Sn}}), \\ \hat{P}_n = \frac{1}{N} \hat{P}_0 + \sum_{S=1}^{N-1} C \sqrt{\frac{\hbar m \omega_S}{2}} \frac{1}{i} (\hat{\alpha}_S^- \exp^{i\varphi_{Sn}} - \hat{\alpha}_S^+ \exp^{-i\varphi_{Sn}}), \end{cases} \quad (1)$$

где  $\hat{X}_n$  — эрмитов оператор,  $C$  — нормировочный множитель,  $\hat{\alpha}_S^-$  — оператор рождения фононов,  $\varphi_{Sn}$  — относительная фаза колебаний  $n$ -ой моды в  $S$ -ом узле.

На этом общая теория заканчивается.

Используя свойства решётки, ищем параметры (1):

1)  $\varphi_{Sn}$  — из симметрии решётки,

$$\varphi_{S2} - \varphi_{S1} = \varphi_{S3} - \varphi_{S2} = \varphi_{S4} - \varphi_{S3} = \dots \equiv \Delta\varphi_S, \quad \varphi_{Sn} = \Delta\varphi_S n, \quad n — \text{номер узла.}$$

Кроме того, из периодичности:  $\varphi_{SN+1} - \varphi_{S1} = 2\pi K_S$ ,  $K_S$  — целое число, характерное для данной моды.

$N - \Delta\varphi_S = 2\pi K_S \implies \Delta\varphi_S = \frac{2\pi}{N} K_S$ , но  $0 < \Delta\varphi_S < 2\pi$  (т.к. между узлами решётки ничего нет)  $\iff$  целые  $K_S$ :  $0 < K_S < N$ .

$K_S$  — своё у каждой из  $N - 1$  мод.

Неважно, как нумеровать моды  $\rightarrow$  можно нумеровать моды в порядке возрастания  $K_S$ , тогда  $S \equiv K_S$ . Тогда  $\Delta\varphi_S = \frac{2\pi}{N} S$  и  $\varphi_{Sn} = \frac{2\pi}{N} S n$ .

2. Определяем нормировочную  $C$ : условие каноничности:  $[\hat{x}_n, \hat{p}_{n'}] = i\hbar \delta_{nn'} \iff$

$$\begin{cases} [\hat{Q}_0, \hat{P}] = i\hbar, \\ [\hat{\alpha}_S^-, \hat{\alpha}_{S'}^+] = \delta_{SS'}, \\ [\hat{\alpha}_S^-, \hat{\alpha}_{S'}^+] = [\hat{\alpha}_S^+ \hat{\alpha}_{S'}^+] = 0, \end{cases}$$

$$\begin{aligned}
i\hbar = [\hat{X}_n, \hat{P}_n] &= \left[ +Q_0 + \sum_S C \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_S}} \times \right. \\
&\times (\hat{\alpha}_S^- \exp^{i\varphi_{Sn}} + \hat{\alpha}_S^+ \exp^{-i\varphi_{Sn}}), \frac{\hat{S}}{N} \sum_{S'} C \sqrt{\frac{\hbar m \omega_{S'}}{2}} \frac{1}{i} (\hat{\alpha}_{S'}^- \exp^{i\varphi_{S'n}} - \hat{\alpha}_{S'}^+ \exp^{-i\varphi_{S'n}}) \left. \right] = \\
&= \frac{i\hbar}{N} + \sum_{SS'} C^2 \frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{\omega_{S'}}{\omega_S}} (-i) \{ -\delta_{SS'} \exp^{i(\varphi_{Sn} - \varphi_{S'n})} - \delta_{SS'} \exp^{i(\varphi_{S'n} - \varphi_{Sn})} \} = \\
&= \frac{i\hbar}{N} + i\hbar \sum_{S=1}^{N-1} C^2 \cdot 1 = i\hbar \left[ \frac{1}{N} + C^2(N-1) \right] \Rightarrow \\
&\Rightarrow \frac{1}{N} + C^2(N-1) = 1 \Rightarrow C^2 = \frac{1}{N} \Rightarrow C = \frac{1}{\sqrt{N}}.
\end{aligned}$$

Таким образом, в (1) остались неопределёнными  $\omega_S$  (нормальные частоты).

3)  $\omega_S$  — из условия преобразования  $\hat{H}$  к виду (идеальному):  $\hat{H} = E_{vac} + \sum_S \mathcal{E}(S) \hat{\alpha}_S^+ \hat{\alpha}_S^-$ .

$$\begin{cases} \hat{X}_n = \hat{Q} + \sum_{S=1}^{N-1} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_S N}} (\hat{\alpha}_S^- \exp^{i\varphi_{Sn}} + \hat{\alpha}_S^+ \exp^{-i\varphi_{Sn}}), \\ \hat{P}_n = \frac{\hat{P}_0}{N} + \sum_S \sqrt{\frac{\hbar m \omega_S}{2N}} \frac{1}{i} (\hat{\alpha}_S^- \exp^{i\varphi_{Sn}} - \hat{\alpha}_S^+ \exp^{-i\varphi_{Sn}}), \quad \varphi_{Sn} = \frac{2\pi S n}{N}. \end{cases}$$

Заметим, что если определим для  $\forall m \in Z$ :

$$\sum_N(m) = \sum_{n=1}^N \exp^{i \frac{2\pi m n}{N}} = \sum_{n=1}^N \left( \exp^{i \frac{2\pi m}{N}} \right)^n = \exp^{i \frac{2\pi m}{N}} \frac{1 - \exp^{i \cdot 2\pi m}}{1 - \exp^{i \frac{2\pi m}{N}}} = \begin{cases} 0, & \text{если } m \neq 0, \pm N, \pm 2N, \dots, \\ N, & \text{если } m = 0, \pm N, \pm 2N, \dots \end{cases}$$

$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U}$ ,  $\hat{T}$  — кинетич.,  $\hat{U}$  — потенц.

$$\begin{aligned}
\hat{T} &= \sum_{n=1}^N \frac{\hat{p}_n^2}{2m} = \sum_{n=1}^N \frac{1}{2m} \left\{ \frac{\hat{P}_0^2}{N^2} + 2 \frac{\hat{P}_0}{N} \sum_S \sqrt{\frac{\hbar m \omega_S}{2N}} \frac{1}{i} (\hat{\alpha}_S^- \exp^{i\varphi_{Sn}} - \hat{\alpha}_S^+ \exp^{-i\varphi_{Sn}}) - \right. \\
&\quad \left. - \sum_{SS'} \frac{\hbar m}{2N} \sqrt{m_S m_{S'}} (\hat{\alpha}_S^- \exp^{i\varphi_{Sn}} - \hat{\alpha}_S^+ \exp^{-i\varphi_{Sn}}) (\hat{\alpha}_{S'}^- \exp^{i\varphi_{S'n}} - \hat{\alpha}_{S'}^+ \exp^{-i\varphi_{S'n}}) \right\}.
\end{aligned}$$

1-ое слагаемое:  $\frac{\hat{P}_0^2}{2(Nm)}$ .

2-ое слагаемое: содержит  $\sum_n \exp^{\pm i\varphi_{Sn}} = \sum_{n=1}^N \exp^{i \frac{2\pi}{N} (\pm S)n} = \sum_N (\pm S)$ ,  $S = 1, \dots, N-1 \Rightarrow$

эти суммы = 0.

3-е слагаемое: обзовём его  $\hat{T}_3$ .

$$\hat{T}_3 = \frac{\hbar}{4N} \sum_{SS'} \sqrt{\omega_S \omega_{S'}} \left\{ \underbrace{\hat{\alpha}_S^- \hat{\alpha}_{S'}^+ \sum_N (S - S')}_{=N\delta_{SS'}} + \underbrace{\hat{\alpha}_S^+ \hat{\alpha}_{S'}^- \sum_N (S' - S)}_{=N\delta_{SS'}} - \underbrace{\hat{\alpha}_S^- \hat{\alpha}_{S'}^+ \sum_N (S + S')}_{=N\delta_{S'N-S}} \right\}$$

$$\left. -\hat{\alpha}_S^+ \hat{\alpha}_{S'}^+ \underbrace{\sum_N (-S - S')}_{=N\delta_{S', N-S}} \right\},$$

$$\sum_N (S - S') = N\delta_{SS'} : S - S' = -(N-2), \dots, (N-2), S + S' = 2, \dots, (2N-2).$$

$\delta$  — снимут суммирование. Окончательно:

$$\hat{T} = \frac{\hat{P}_0^2}{2mN} \sum_{S=1}^{N-1} \left\{ \frac{\hbar\omega_S}{4} (\hat{\alpha}_S^+ \hat{\alpha}_S^- + \hat{\alpha}_S^- \hat{\alpha}_S^+) - \frac{\hbar\sqrt{\omega_S, \omega_{N-S}}}{4} (\hat{\alpha}_S^- \hat{\alpha}_{N-S}^- + \hat{\alpha}_S^+ \hat{\alpha}_{N-S}^+) \right\}.$$

То же самое делаем с потенциальной энергией:

$$\hat{U} = \sum_{n=1}^N \frac{m\omega^2 (\hat{x}_{n+1} - \hat{x}_n)}{2}.$$

Выкладки однотипные, но громоздкие. Результат:

$$\hat{U} = \sum_{S=1}^{N-1} \left\{ \frac{\hbar\omega^2 \sin^2 \left( \frac{\pi S}{N} \right)}{\omega_S} (\hat{\alpha}_S^+ \hat{\alpha}_S^- + \hat{\alpha}_S^- \hat{\alpha}_S^+) + \frac{\hbar\omega^2 \sin \left( \frac{\pi S}{N} \right) \sin \left( \frac{\pi(N-S)}{N} \right)}{\sqrt{\omega_S \omega_{N-S}}} (\hat{\alpha}_S^- \hat{\alpha}_{N-S}^- + \hat{\alpha}_S^+ \hat{\alpha}_{N-S}^+) \right\}.$$

Слои  $\hat{\alpha}^- \hat{\alpha}^-$  и  $\hat{\alpha}^+ \hat{\alpha}^+$  сократятся, если  $\omega_S = 2\omega \sin \left( \frac{\pi S}{N} \right)$ .

Таким образом,  $\hat{H} = \frac{\hat{P}_0^2}{2mN} + \sum_{S=1}^{N-1} \frac{\hbar\omega_S}{2} + \sum_{S=1}^{N-1} \hbar\omega_S \hat{\alpha}_S^+ \hat{\alpha}_S^-$ ,  $\frac{\hat{P}_0^2}{2mN} + \sum_{S=1}^{N-1} \frac{\hbar\omega_S}{2}$  — энергия вакуума

$E_{vac}, \sum_{S=1}^{N-1} \frac{\hbar\omega_S}{2}$  — энергия фононов.

Дисперсионное соотношение:  $\mathcal{E} = 2\hbar\omega \sin \left( \frac{\pi S}{N} \right)$ ,  $\frac{\pi S}{N} = \frac{\Delta\varphi_S}{2} = \frac{p_S a}{2\hbar}$ ,  $p_S = \frac{2\pi\hbar}{Na} S$ ,

$$\mathcal{E}(p) = 2\hbar\omega \sin \left( \frac{pa}{2\hbar} \right).$$

$p_S = \hbar K_S$  — импульс фононов.  $a$  — период решётки.

Если забудем про решётку и смотрим прямо на фононы с длиной волны  $\lambda \gg a$ ,  $\frac{pa}{2\hbar} \ll \dots$ , и энергия фонона  $\mathcal{E}(p) \simeq (\omega - p)p = C_{3v}p$ ,  $C_{3v}$  — скорость звука в этой среде.

Т.е. длинноволновые фононы ведут себя как фотоны, но  $C \rightarrow C_{3v}$ .

## Элементы квантовой электродинамики

Проблема II (техническая): мы используем базис однофотонных состояний с определённой поляризацией:  $\vec{\phi}_{\vec{K}\lambda} = \frac{1}{\sqrt{V}} \vec{l}_\lambda \exp i\vec{K}\vec{r}$ , фотон имеет спин  $S = 1$ , и должен существовать базис из состояний с определённой спиральностью  $\begin{pmatrix} \vec{\psi}_S \\ \vec{K}_S \end{pmatrix}$ . Как эти базисы связаны между собой?

## Поляризация и спиральность

Оператор спиральности  $\hat{\lambda} = \frac{(\vec{K}\vec{S}_\gamma)}{|\vec{K}|}$ . Нужен оператор спина фотона.

Ясно, что оператор  $\hat{l} + \hat{s} = \hat{j}$  — генератор преобразования вращения.

Берём  $\vec{r} \longrightarrow \vec{r}' \simeq \vec{r} + \delta\alpha[\vec{n} \times \vec{r}]$ . Изменение волновой функции фотона при таком повороте  $\Phi + \delta\vec{\Phi}(\vec{r}) = \exp^{-i\delta\alpha(\vec{n} \cdot \hat{j})} \vec{\Phi}$ ,

$$\vec{\phi}'(\vec{r}) - \vec{\phi}(\vec{r}) = \phi(\vec{r} - \delta\vec{r}) + \delta\alpha[\vec{n} \times \vec{\phi}] - \vec{\phi}(\vec{r}) = \underbrace{-\delta\alpha([\vec{n} \times \vec{r}]\vec{\nabla})\vec{\Phi}}_{=-i\delta\alpha\vec{n}\vec{l}\psi} + \delta\alpha(\vec{n} \times \vec{\phi}) = -i\delta\alpha\vec{n}(\hat{l} + \hat{S}_j)\vec{\phi},$$

$$-i(\vec{r}\vec{S}_\gamma)\vec{\phi} = [\vec{n} \times \vec{\phi}], \quad (\vec{r} \cdot \hat{S}_\gamma)\vec{\phi} = i[\vec{n} \times \vec{\phi}], \quad \text{выберем}$$

$$\vec{n} = \vec{e}_x \implies \hat{S}_x \begin{pmatrix} \phi_x \\ \phi_y \\ \phi_z \end{pmatrix} = \{\vec{e}_x(\phi_x\vec{e}_x + \phi_y\vec{e}_y + \phi_z\vec{e}_z)\} = \begin{pmatrix} 0 \\ -\phi_z \\ \phi_y \end{pmatrix},$$

$$\hat{S}_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad \text{аналогично :}$$

$$\vec{n} = \vec{e}_y, \quad \hat{S}_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \text{аналогично :}$$

$$\vec{n} = \vec{e}_z, \quad \hat{S}_z = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Теперь

$$\begin{aligned} \hat{S}^2 &= \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = 2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \\ &= S(S+1) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \text{т.е. } S_\gamma = 1. \end{aligned}$$

Пусть  $\hat{U}$  — унитарный оператор, связывающий  $\vec{\psi}_{\vec{K}\varrho}$  и  $\vec{\phi}_{\vec{K}\lambda}$ .

$$\begin{pmatrix} \psi_{\vec{K}+1} \\ \psi_{\vec{K}0} \\ \psi_{\vec{K}-1} \end{pmatrix} = \hat{U} \begin{pmatrix} \phi_{\vec{K}1} \\ \phi_{\vec{K}2} \\ \phi_{\vec{K}3} \end{pmatrix}.$$

$\phi_{\vec{K}3}$  — физически нереализ. В базисе из состояний  $\psi_{\vec{K}\varrho}$ : пусть  $\vec{K} = K\vec{e}_z$ .

$$\hat{S}'_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

$\hat{S}'_x$  и  $\hat{S}'_y$  однозначно определяются из

$$\left\{ \begin{array}{l} [\hat{S}'_x, \hat{S}'_y] = i\hat{S}'_z \\ [\hat{S}'_x, \hat{S}'_z] = -i\hat{S}'_y \end{array} \right\} \Rightarrow \hat{S}'_x = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix}, \hat{S}'_y = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{i}{\sqrt{2}} & 0 \\ -\frac{i}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{i}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{i}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix},$$

$$\text{то } \vec{S}' = \hat{U}^\dagger \vec{S} \hat{U} \Rightarrow \hat{U} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{i}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{i}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix}. \text{ Т.е.}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \psi_{\vec{K}+1} = \frac{1}{\sqrt{2}}\vec{\phi}_{\vec{K}1} + \frac{i}{\sqrt{2}}\vec{\phi}_{\vec{K}2} \text{ правая,} \\ \psi_{\vec{K}0} = \vec{\phi}_{\vec{K}S} - \text{физически нереализуемое,} \\ \psi_{\vec{K}-1} = -\frac{1}{\sqrt{2}}\vec{\phi}_{\vec{K}1} + \frac{i}{\sqrt{2}}\vec{\phi}_{\vec{K}2} - \text{левая циркулярно поляризованная} \end{array} \right\} \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{l} = \vec{\phi}_{\vec{K}R} \\ = \vec{\phi}_{\vec{K}L} \end{array} \right.$$

Переход из базиса в базис — ключ к решению.

Обратный переход (для реализуемых состояний):

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{\phi}_{\vec{K}1} = \frac{1}{\sqrt{2}}\vec{\psi}_{\vec{K}+1} - \frac{1}{\sqrt{2}}\vec{\psi}_{\vec{K}-1}, \\ \vec{\phi}_{\vec{K}2} = -\frac{i}{\sqrt{2}}\vec{\psi}_{\vec{K}+1} - \frac{i}{\sqrt{2}}\vec{\psi}_{\vec{K}-1}. \end{array} \right.$$

Проблема III (техническая). Что такое фотоны (т.е. кванты свободного электромагнитного поля)?

Энергия  $\mathcal{E}_\gamma = \hbar\omega_{\vec{K}} = \hbar c|\vec{K}|$ .

Импульс фотона:  $\hat{p}^{(F)} = \int_V d\vec{r} \frac{c}{4\pi} [\hat{\vec{E}} \times \hat{\vec{B}}] = \dots = \sum_{\vec{K}\lambda} \hbar\vec{K} \hat{a}_{\vec{K}\lambda}^+ \hat{a}_{\vec{K}\lambda}^-, \vec{P}_{vac} = \sum_{\vec{K}\lambda} \frac{\hbar\vec{K}}{2} = 0$ . Т.е.

$p_\gamma = \hbar\vec{K} \Rightarrow \mathcal{E}_\gamma = c|\vec{p}_\gamma| \Rightarrow m_\gamma = 0$  — масса покоя = 0.

Вывод: квантованное свободное электромагнитное поле эквивалентно безмассовому ( $m_\gamma = 0$ ) векторному ( $S_\gamma = 1$ ) бозе-газу (системе невзаимодействующих частиц).

Система «заряженная частица и электромагнитное поле»:

$$\hat{H} = \frac{(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c}\hat{\vec{A}}_\gamma^{(F)})^2}{2m} + U(\vec{r}) + \hat{H}_\gamma = \underbrace{\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + U(\vec{r})}_{=\hat{H}_{part}} + \hat{H}_\gamma + \left( -\frac{e}{mc} (\hat{\vec{p}} \cdot \hat{\vec{A}}_\gamma) + \frac{e^2}{2mc^2} \hat{A}_\gamma^2 \right).$$

$\hat{H}_{part}$  — без поля. Оператор взаимодействия  $\hat{V} = \hat{V}^{(1)} + \hat{V}^{(2)}$ ,  $\hat{V}^{(1)}$  — однофотонная часть, линейная по  $\hat{a}^\pm$ :  $\hat{V}^{(1)} = -\frac{e}{mc} \hat{\vec{p}} \sum_{\vec{K}\lambda} \left( \frac{2\pi\hbar c}{V|\vec{K}|} \right)^{1/2} (\hat{a}_{\vec{K}\lambda}^- \exp^{i\vec{K}\vec{r}} + \hat{a}_{\vec{K}\lambda}^+ \exp^{i\vec{K}\vec{r}})$ ,  $\hat{V}^{(2)}$  — двухфотонная часть,  $\hat{V}^{(2)} = \dots \hat{a}^- \hat{a}^- \hat{a}^+ \hat{a}^+ \hat{a}^- \hat{a}^+ \hat{a}^+ \hat{a}^-$ .

## Семинар 11

### Теория переходов

$t = t_i \longrightarrow |i\rangle$ .

$t = t_f \longrightarrow w_{if}(t_f)$  — вероятность обнаружения в состоянии  $|f\rangle$  (вероятность перехода из  $|i\rangle$  в  $|f\rangle$  за время  $\tau = t_f - t_i$ ).

Общее решение:  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$ .  $\hat{V}(t)$  — нестационарное возмущение, зависит явно от времени.  $\hat{H}_0$  — стационарная часть.

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = [\hat{H}_0 + \hat{V}(t)]|\psi\rangle \\ |\psi\rangle \Big|_{t=t_i} = |i\rangle \end{cases} \quad (1) \implies |\psi_i(t)\rangle \implies \text{вероятность обнаружить :}$$

$$w_{if} = |\langle f | \psi_i(t_f) \rangle|^2.$$

Теория переходов  $\longleftrightarrow$  коллекция методов приближённого решения задачи (1).

I подход: теория возмущений (по  $\hat{V}(t)$ ):

$$\sim V^0 : \hat{H}_0 |n\rangle = E_n^{(0)} |n\rangle, |\psi_i^{(0)}\rangle = \sum_n \langle n | i \rangle |n\rangle \exp^{-\frac{i}{\hbar} E_n^{(0)}(t-t_i)}.$$

Для следующих порядков предлагается решение (1) в виде:

$$|\psi_i(t)\rangle = \sum_n C_n(t) |n\rangle \exp^{-\frac{i}{\hbar} E_n^{(0)}(t-t_i)}, C_n(t_i) = \langle n | i \rangle.$$

Подставим:

$$\begin{aligned} \sum_n |n\rangle \left\{ i\hbar \frac{dC_n}{dt} + E_n^{(0)} C_n \right\} \exp^{-\frac{i}{\hbar} E_n^{(0)}(t-t_i)} &= \sum_n C_n E_n^{(0)} |n\rangle \exp^{-\frac{i}{\hbar} E_n^{(0)}(t-t_i)} + \\ &+ \sum_n C_n \exp^{-\frac{i}{\hbar} E_n^{(0)}(t-t_i)} \hat{V} |n\rangle. \end{aligned}$$

Умножим левую часть на  $\langle k |$  ( $\langle k | n \rangle = \delta_{nk} \longrightarrow \langle k | \hat{V} | n \rangle = V_{kn}$ ):

$$i\hbar \frac{dC_k}{dt} \exp^{-\frac{i}{\hbar} E_k^{(0)}(t-t_i)} = \sum_n V_{kn} \exp^{-\frac{i}{\hbar} E_n^{(0)}(t-t_i)} C_n,$$

$$\frac{E_k^{(0)} - E_n^{(0)}}{\hbar} = \omega_{kn} \text{ — частота перехода.}$$

Тогда получим дифференциальное уравнение:

$$\boxed{\frac{dC_k}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \sum_n V_{kn} \exp^{i\omega_{kn}t} C_n} \quad (2) \text{ — для всех } k.$$

$$C_k(t_i) = \langle k|i \rangle, (2) \iff (1).$$

Если искать  $C_k(t)$  в виде  $C_k(t) = \underbrace{\langle k|i \rangle}_{=C_k^{(0)}} + C^{(1)}(t) + C^{(2)}(t)$ .

$$\sim V^1 : \frac{dC_k^{(1)}}{dt} = \frac{i}{\hbar} \sum_n V_{kn} \exp^{i\omega_{kn}t} C_n^{(0)} = -\frac{i}{\hbar} \sum_n V_{kn} \exp^{i\omega_{kn}t} \langle n|i \rangle.$$

Т.к.  $C_k^{(m)}(t_i) = 0$  для  $\forall m \geq 1$ , то решение в виде:

$$C_k^{(1)}(t_f) = -\frac{i}{\hbar} \sum_n \langle n|i \rangle \int_{t_i}^{t_f} V_{kn}(t) \exp^{i\omega_{kn}t} dt = C_k^{(1)}(t_f).$$

Если  $|i \rangle \equiv |n_i \rangle$ , то  $\langle n|i \rangle = \delta_{nn_i}$ , и в качестве конечного состояния  $|f \rangle = |n_f \rangle$ , вероятность:  $w_{n_i n_f}^{(1)} = \left| \langle n_f | \psi_i^{(1)}(t) \rangle \right|^2 = \left| C_{n_f}^{(1)}(t_f) \right|^2$ , т.е.  $w_{n_i n_f}^{(1)} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{t_i}^{t_f} V_{n_f n_i} \exp^{i\omega_{n_f n_i} t} dt \right|^2$

(ТВ-1а). Эта вероятность должна быть мала, ибо мы используем теорию возмущений.

Очевидное требование:  $w_{n_i n_f}^{(1)} \ll 1$  — необходимое требование.

Это обеспечивается при выполнении двух требований:

1. Среднее по времени:  $\langle |V_{n_f n_i}| \rangle_t \ll |E_{n_f}^{(0)} - E_{n_i}^{(0)}| \equiv \hbar |w_{n_f n_i}|$ . А если любая периодическая функция?

2. Отсутствие резонансов, т.е. совпадений частот в спектре  $V_{n_f n_i}(t)$  и  $\omega_{n_f n_i}$ :  
 $|\omega_V - \omega_{n_f n_i}| \gtrsim |\omega_{n_f n_i}|$ .

Подбор метода решения должен опираться на следующие соображения:

1. Анализ соответствия частот  $\omega_V$  и  $\omega_{if}$ .
2. Анализ величины возмущения.
3. Ограниченность/неограниченность  $V(t)$  по времени.

Из вида ТВ-1а видно, что она будет некорректна при больших  $t_f$ , если

$$|V_{n_f n_i}(t)| \not\rightarrow 0, t \rightarrow +\infty, w_{n_i n_f}^{(1)} = \frac{1}{\hbar} \left| \int_{t_i}^{t_f} V_{n_f n_i}(t) \exp^{i\omega_{n_f n_i} t} dt \right|.$$

$w_{n_i n_f}^{(1)} \not\rightarrow const$  только из-за того, что мы ищем вероятность перехода в старое стационарное состояние  $|n_f \rangle$  (собственный вектор  $\hat{H}_0$ ), а оно теперь нестационарно: если  $\hat{V}(t) \rightarrow \hat{V}_0$  при  $t \rightarrow +\infty$ , то теперь стационарные состояния  $\rightarrow$  С.В.  $\hat{H}_0 + \hat{V}_0$ .

Выводы:

1. ТВ-1а неприменима для таких задач, и условиями применимости ТВ-1а является 3 требования:

- 1) + 2) (см. выше);
- 3):  $\hat{V}(t) \rightarrow 0$  при  $t \rightarrow +\infty$  — требование локальности.  
 $\hat{V}(t)$  должно быть локализовано по времени.

2. Если  $\hat{V}(t) \rightarrow \hat{H}_0 + \hat{V}_0$  при  $t \rightarrow +\infty$ ,  $\hat{V}(t) \rightarrow \hat{H}_0$  при  $t \rightarrow -\infty$  (т.е. наша задача — задача о включении постоянного возмущения).

$$\begin{aligned} C_{n_f}^1(t_f) &= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} V_{n_f n_i}(t) \exp^{i\omega_{n_f n_i} t} dt = -\frac{1}{\hbar \omega_{n_f n_i}} \int_{t_i}^{t_f} V_{n_f n_i} d(\exp^{i\omega_{n_f n_i} t}) = \\ &= -\frac{1}{\hbar \omega_{n_f n_i}} V_{n_f n_i} \exp^{i\omega_{n_f n_i} t} \Big|_{t_i}^{t_f} + \frac{1}{\hbar \omega_{n_f n_i}} \int_{t_i}^{t_f} \frac{\partial V_{n_f n_i}}{\partial t} \exp^{i\omega_{n_f n_i} t} dt = \end{aligned}$$

$$= \frac{(V_0)_{n_f n_i}}{E_{n_i}^{(0)} - E_{n_f}^{(0)}} \exp^{i\omega_{n_f n_i} t_f} + \frac{1}{\hbar \omega_{n_f n_i}} \int_{t_i}^{t_f} \frac{\partial V_{n_f n_i}}{\partial t} \exp^{i\omega_{n_f n_i} t} dt.$$

Отличие  $|\tilde{n}_f\rangle$  (С.В.  $\hat{H}_0 + \hat{V}_0$ ) от  $|n_f\rangle$  (С.В.  $\hat{H}_0$ ) в  $\sim \hat{V}_0^1$ :  $\frac{(V_0)_{n_f n_i}}{E_{n_i}^{(0)} - E_{n_f}^{(0)}}$ .

Таким образом, амплитуда перехода из  $|n_i\rangle \longrightarrow |\tilde{n}_f\rangle$  в  $\sim V^1$ :

$$C_{\tilde{n}_f}^{(1)}(t_f) = \frac{1}{\hbar \omega_{n_i n_f}} \int_{t_i}^{t_f} \frac{\partial V_{n_f n_i}}{\partial t} \exp^{i\omega_{n_f n_i} t} dt.$$

$$w_{n_i n_f}^{(1)} = \frac{1}{\hbar^2 \omega_{n_f n_i}^2} \left| \int_{t_i}^{t_f} \frac{\partial V_{n_f n_i}}{\partial t} \exp^{i\omega_{n_f n_i} t} dt \right|^2 \quad \text{ТВ-1b.}$$

Высшие порядки теории возмущений

$$\frac{dC_k^{(m)}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \sum_n V_{nn'}(t) \exp^{i\omega_{n_f n_i} t} C_n^{(m-1)}(t).$$

Возникает послед. интегрирование.

### Примеры решения задач

Пример. Общее смешанное состояние.  $\hat{\rho}_{mn}$ . Найти долю правополяризованного света.  
 $w_{np} - ? (\iff w_{+1} - ?)$

Явный вид матрицы плотности:

$$\hat{\rho}_{mn} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} + \frac{\xi_3}{2} & \frac{\xi_1 - i\xi_2}{2} \\ \frac{\xi_1 + i\xi_2}{2} & \frac{1}{2} - \frac{\xi_3}{2} \end{pmatrix}.$$

$\langle w_{np} = \langle \psi | \hat{\rho} | \psi \rangle \rangle$  — диагональные элементы имеют смысл вероятности.

$$\begin{pmatrix} |p_{\vec{K}1}\rangle \\ |p_{\vec{K}2}\rangle \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \longrightarrow |\vec{\psi}_{\vec{K}+1}\rangle = \begin{pmatrix} i \\ \sqrt{2} \\ i \\ \sqrt{2} \end{pmatrix},$$

$$w_{np} \equiv w_{+1} = \left( \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}} \right) \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \xi_3 & \xi_1 - i\xi_2 \\ \xi_1 + i\xi_2 & 1 - \xi_3 \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ i \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} (1-i) \begin{pmatrix} 1 + \xi_3 + i\xi_1 + \xi_2 \\ \xi_1 + i\xi_2 + i - i\xi_3 \end{pmatrix} = \frac{1}{4} (1 + \xi_3 + i\xi_1 + \xi_2 - i\xi_1 + \xi_2 + 1 - \xi_3) = \frac{1 + \xi_2}{2} = w_{np}.$$

Доля левополяризованных:  $w_{-1} = 1 - w_{np} = 1 - \frac{\xi_2}{2}$ .

Среднее значение спиральности:

$$\langle \varrho \rangle = (+1)w_{+1} + (-1)w_{-1} = \xi_2.$$



Возьмём  $\vec{\xi} = \vec{e}_2$ . Поляриз. матрица в явном виде:

$$\hat{\beta}_{пол} = \begin{pmatrix} \frac{3}{4} & \frac{1-i}{8} \\ \frac{1+i}{8} & \frac{1}{4} \end{pmatrix}.$$

Для неё вектор  $\vec{\xi} = \frac{1}{4}\vec{e}_1 + \frac{1}{4}\vec{e}_2 + \frac{1}{2}\vec{e}_3$ .

Средняя спиральность:  $\langle \varrho \rangle = +\frac{1}{4}$ .

Дисперсия  $D\varrho = \frac{15}{16}$ .

Пример. Про состояние электромагнитного поля, не свободное, а имеющее резонансное взаимодействие с двухуровневой системой.

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \begin{array}{c} \text{-----} \\ \uparrow \hbar\omega \\ \downarrow \hbar\omega \\ \text{-----} \end{array} \quad \begin{array}{l} - \text{спектр} \\ \text{системы} \end{array} \quad \begin{array}{l} \hat{H} = \hbar\hat{a}^+\hat{a}^-|n\rangle + \frac{\hbar\omega}{2}\hat{\sigma}_3 + \hbar\omega_1[\hat{a}^+\hat{\sigma}_- + \hat{a}^-\hat{\sigma}_+], \\ \hat{a}^\pm \equiv \hat{a}_{рез}^\pm \lambda_{рез}, \text{ рез} - \text{резонансное.} \end{array}$$

$$\hat{\sigma}_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_- \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Найти уровни энергии и С.В. гамильтониана.

Пространство состояний  $\{|n\rangle, \chi_{1,2}\}$ .

$$|\psi\rangle = u\chi_1|u_1\rangle + v\chi_2|n_2\rangle = \begin{pmatrix} u & |n_1\rangle \\ v & |n_2\rangle \end{pmatrix}.$$

$u, v$  — некие коэффициенты.

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle, \quad \hat{H} = \begin{pmatrix} \hbar\omega\hat{a}^+\hat{a}^- + \frac{\hbar\omega}{2} & \hbar\omega_1\hat{a}_- \\ \hbar\omega_1\hat{a}^+ & \hbar\omega\hat{a}^+\hat{a}^- - \frac{\hbar\omega}{2} \end{pmatrix},$$

$$\begin{cases} \hbar\omega\left(n_1 + \frac{1}{2}\right)u|n_1\rangle + \hbar\omega_1\sqrt{n_2}|n_2 - 1\rangle v = Eu|n_1\rangle \\ \hbar\omega_1\sqrt{n_1 + 1}|n + 1\rangle u + \hbar\omega\left(n_2 - \frac{1}{2}\right)|n_2\rangle v = E\langle n_2|v\rangle \end{cases} \implies \det || = 0 (*).$$

Надо:  $n_1 = n_2 - 1$  ( $n_2 = n_1 + 1$ )  $\implies n_1 = n, n_2 = n + 1$ . Получим:

$$\begin{cases} \left[ \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) - E \right] u + \hbar\omega_1\sqrt{n+1}v = 0, \\ \hbar\omega_1\sqrt{n+1}u + \left[ \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) - E \right] v = 0. \end{cases}$$

$$(*) \implies \left[ \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) - E^2 \right] - \hbar^2\omega_1^2(n+1) = 0,$$

$E_n^{(\pm)} = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) \pm \hbar\omega_1 \sqrt{n+1}$  — собственные значения гамильтониана системы, их можно занумеровать квантовым числом  $n$ . Им отвечают собственные векторы  $|\psi_n^{(\pm)}\rangle$ .

$$|\psi_n^{(+)}\rangle \Rightarrow v = u \Rightarrow u = v = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad |\psi_n^{(+)}\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}}|n\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}}|n+1\rangle \end{pmatrix}.$$

$$\psi_n^{(-)} \Rightarrow v = -u \Rightarrow u = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad v = -\frac{1}{\sqrt{2}}.$$

Соответствующие стационарные состояния:

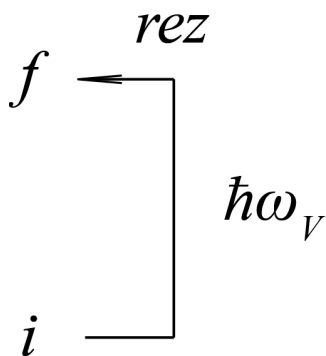
$$|\psi_n^{(-)}\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}}|n\rangle \\ -\frac{1}{\sqrt{2}}|n+1\rangle \end{pmatrix}.$$

Средние значения числа фотонов в каждом состоянии:  $\langle N_\gamma \rangle = n + \frac{1}{2}$ .

## Переход состояний дискретного спектра

Точка ветвления = точка бифуркации.

1. Дискретный (не может быть резонанса)/непрерывный спектр.



Резонанс, причём резонирующих уровней бесконечно много (бесконечнократный резонанс).

Для дискретного спектра: ( $|i\rangle, |f\rangle \in$  дискретному спектру).

2. Есть резонанс/нет резонанса.

В вероятности перехода есть быстрорастущая часть. Если резонансов нет — возникают 3 варианта сопоставления частот.

3.1.  $|\omega_V| \gg |\omega_{if}|$  — внезапные или мгновенные воздействия,  $\omega_{if}$  — вероятность перехода.

Возникает задача о мгновенном включении постоянного возмущения, т.е.

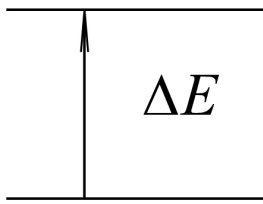
$$\hat{H} = \begin{cases} \hat{H}_0, & t < 0 \\ \hat{H}_0 + \hat{V}_0, & t > \tau \end{cases} \quad \left| \tau \ll \frac{1}{|\omega_{if}|} \right|.$$

При  $t < 0$  — некое начальное стационарное состояние  $|i\rangle \exp^{-\frac{i}{\hbar}E_i t}$ .

При  $t = \tau$  (т.е. сразу после воздействия):  $|\psi\rangle = |i\rangle$ . Система не успевает изменить состояние, но  $|i\rangle$  — теперь не стационарный вектор, т.к. есть новые стационарные вектора  $|\tilde{n}\rangle$  — С.В.  $\hat{H}_0 + \hat{V}_0$ . Но тогда  $w_{i\tilde{f}} = |\langle \tilde{f} | i \rangle|^2$  — формула для вероятности перехода,  $\tilde{f}$  — одно из  $|\tilde{n}\rangle$ . В этом случае  $\hat{V}_0$  — внезапное возмущение — не обязано быть малым, значит, может быть «большим».

На самом деле, этот ответ получен в нулевом порядке по  $\omega, \frac{f}{\tau} \ll 1$ .

3.2.  $|\omega_V| \ll |\omega_{(f)}|$  — адиабатически медленное возмущение.



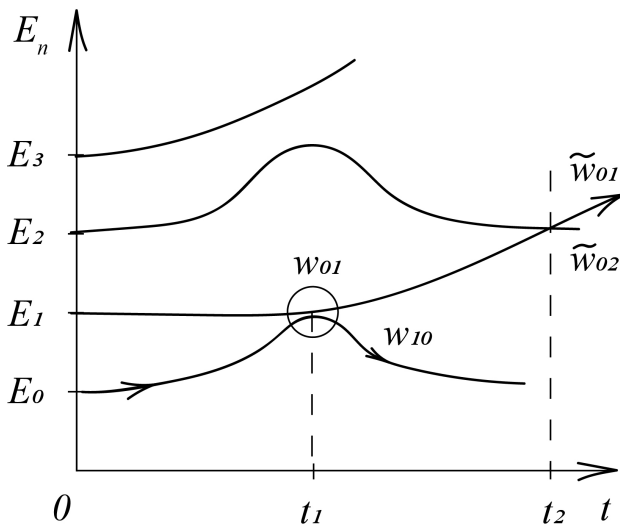
$$\omega_{if} \sim \exp\left[-\left|\frac{\omega_{if}}{\omega_V}\right|\right].$$

$$|V_{max}| \ll \Delta E \text{ — в 0-м порядке.}$$

$$|\hbar\omega_{max}| \ll \Delta E, \left|\frac{\omega_V}{\omega_{if}}\right| \text{ — переходов нет!}$$

Исследование системы строится на основе решения квазистационарного уравнения Шрёдингера:

$$[\hat{H}_0 + \hat{V}(t)]|\psi_n\rangle = E_n(t)|\psi_n\rangle, \quad \hat{V}(t) \longrightarrow E_n(t)|\psi_n\rangle.$$

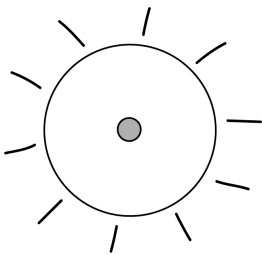


$|\psi_n\rangle$ . Задача состоит в поиске неких «критических» времён, в окрестности которых возможны переходы  $(t_1, t_2, \dots)$ .

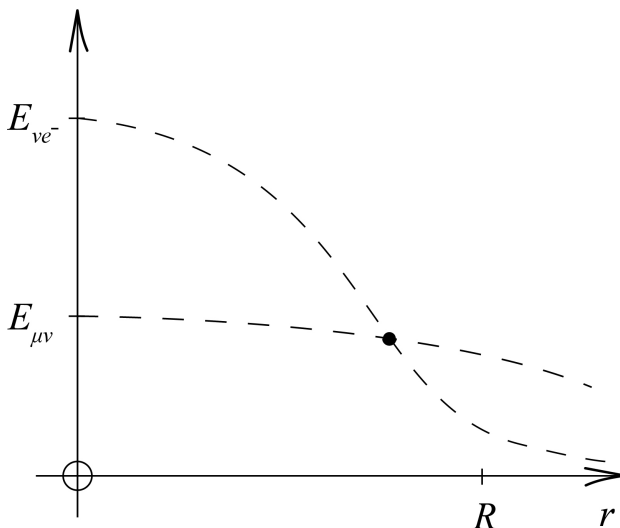
В окрестности каждого из  $t_2$  возникает конечномерная задача типа (2) (чаще всего — двумерная), и она доступна для решения: «всё считается, но долго и нудно».

Пример. Эффект Михеева–Смирнова–Вольфенштейна (МСВ–резонанс).

Есть солнце и ядро, внешнее гравитационное сжатие.



Помимо фотонной светимости, есть ещё и нейтринная.



Тут конверсия  $\gamma_e$  в  $\nu_\mu$  (некий слой).

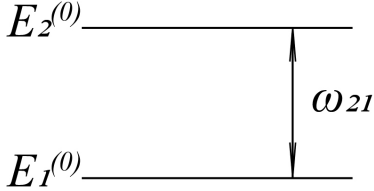
3.3.  $|\omega_V| \sim |\omega_{if}|$ , но нет резонанса.

Для малых  $V$  — теория возмущений.

Для больших  $V$  — анализ точной задачи.

Если есть резонанс в дискретном спектре, то даже для малых  $V$  нельзя использовать теорию возмущений.

Пример. Резонанс на двух уровнях.



$$\omega_{21} = \frac{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}}{\hbar} = \omega,$$

$$\hat{V}(t) = \hat{V}_0 \cos(\omega_V t), \quad \omega_V = \omega + \mathcal{E}, \quad \mathcal{E} \ll \omega.$$

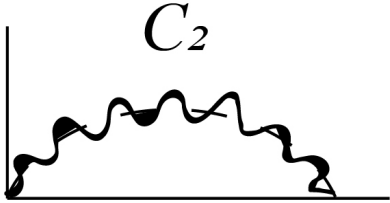
$$\frac{dC_1}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [V_{12} \exp^{-i\omega t} C_2 + V_{11} C_1] \quad (2), \quad \frac{dC_2}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [V_{22} C_2 + V_{21} \exp^{i\omega t} C_1].$$

Пусть  $\hat{V} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{12} & A_{22} \end{pmatrix}$ .

$$\cos(\omega_V t) = \frac{\exp^{i(\omega+\mathcal{E})t} + \exp^{-i(\omega+\mathcal{E})t}}{2},$$

$$\begin{cases} \frac{dC_1}{dt} = -\frac{i}{2\hbar} \{ A_{12}(\exp^{i\mathcal{E}t} + \exp^{-i(2\omega+\mathcal{E})t})C_2 + A_{11}(\exp^{i(n+\mathcal{E})t} + \exp^{-i(n+\mathcal{E})t})C_1 \}, \\ \frac{dC_2}{dt} = -\frac{i}{2\hbar} \{ A_{22}(\exp^{i(n+\mathcal{E})t} + \exp^{-i(n+\mathcal{E})t})C_2 + A_{12}^*(\exp^{i(2\omega+\mathcal{E})t} + \exp^{-i\mathcal{E}t})C_1 \}. \end{cases}$$

$\exp^{i\mathcal{E}t}$ ,  $\exp^{-i\mathcal{E}t}$  — малая частота.



Пренебрежём быстрыми дёрганиями, проанализируем «медленные динамики».

Операция «скользящее усреднение»:

$$C_{1,2}(t) \longrightarrow \overline{C}_{1,2}(t) \equiv \frac{1}{T} \int_{t-\frac{T}{2}}^{t+\frac{T}{2}} C_{1,2}(t') dt', \quad \mathcal{E} \ll \frac{1}{T} \ll \omega.$$

$\overline{C}_{1,2}$  — ведёт себя без «дёрганий».

$$\begin{cases} \frac{d\overline{C}_1}{dt} = -\frac{i}{2\hbar} A_{12} \exp^{i\mathcal{E}t} \overline{C}_2, \\ \frac{d\overline{C}_2}{dt} = -\frac{i}{2\hbar} A_{12}^* \exp^{-i\mathcal{E}t} \overline{C}_1, \end{cases} \quad \overline{C}_1 = f(t) \exp^{i\frac{\mathcal{E}}{2}t}, \quad \overline{C}_2 = g(t) \exp^{-i\frac{\mathcal{E}}{2}t},$$

$$\frac{df}{dt} + i\frac{\mathcal{E}}{2}f = -\frac{i}{2\hbar} A_{12}g, \quad \frac{dg}{dt} - i\frac{\mathcal{E}}{2}g = -\frac{i}{2\hbar} A_{12}^*f \implies f = \frac{2\hbar}{A_{12}^*} \frac{dg}{dt} + \frac{\hbar\mathcal{E}}{A_{12}^*}g.$$

Подставим и получим:

$$i \frac{2\hbar}{A_{12}^*} \frac{d^2 g}{dt^2} + \frac{\hbar \mathcal{E}}{A_{12}^*} \frac{dg}{dt} - \frac{\hbar \mathcal{E}}{A_{12}^*} \frac{dg}{dt} + i \frac{\hbar \mathcal{E}^2}{2A_{12}^*} g = -\frac{i}{2\hbar} A_{11} g, \quad \frac{d^2 g}{dt^2} + \frac{1}{4} \left( \mathcal{E}^2 + \frac{A_{12}^2}{\hbar^2} \right) g = 0.$$

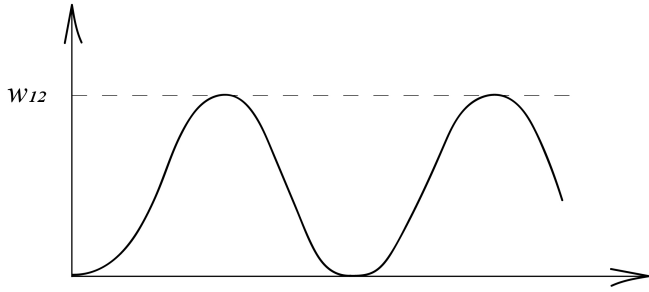
Начальные условия:  $C_1(0) = 1, C_2(0) = 0 \implies g(0) = 0 \implies g = B \sin(\Omega t)$ ,  $B$  — амплитуда.

$$f = \frac{\hbar \mathcal{E}}{A_{12}^*} B \sin(\Omega t) + i \frac{2\hbar \Omega}{A_{12}^*} B \cos(\Omega t).$$

$$f(0) = 1 = i^2 \frac{\hbar \Omega}{A_{12}^*} B \implies B = -i \frac{A_{12}^*}{2\hbar \Omega}, \quad g(t) = -i \frac{A_{12}^*}{2\hbar \Omega} \sin(\Omega t).$$

$$\bar{C}_2 = \exp^{-i \frac{\mathcal{E}}{2} t}, \quad \bar{w}_{12}(t) = |\bar{C}_2|^2 = \frac{|A_{12}|^2}{|A_{12}|^2 + \hbar^2 \mathcal{E}^2} \sin^2(\Omega t).$$

Вероятность перехода:



$$w_{12max} = \frac{|A_{12}|^2}{|A_{12}|^2 + \hbar^2 \mathcal{E}^2} \Big|_{\mathcal{E}=0} = 1 \text{ — половину времени в одном состоянии, половину — в другом. } \omega_V = \omega'_2.$$



ФИЗИЧЕСКИЙ  
ФАКУЛЬТЕТ  
МГУ ИМЕНИ  
М.В. ЛОМОНОСОВА