ФИЗИЧЕСКИЙ
ФАКУЛЬТЕТ
МГУ ИМЕНИ
М.В. ЛОМОНОСОВА

teach-in
ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

ВВЕДЕНИЕ В КВАНТОВУЮ ФИЗИКУ. СЕМИНАРЫ

РУБЦОВ
АЛЕКСЕЙ НИКОЛАЕВИЧ

ФИЗФАК МГУ

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

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

Содержание

1 Семинар 1. Формула Планка. Спектр излучения нагретого тела. 5
1.1 Максимум спектрального излучения 6
1.2 Максимум излучения солнца 6
1.3 Зависимость полной энергии от температуры (излучение во всем интервале частот 6
1.4 Характерная температура на поверхности Земли. Формула Стефана-Больцмана 7
1.5 Максимальная скорость фотоэлектрона, выбитого фотоном с поверхности алюминия 9
1.6 Определение единиц СГС для сопротивления и ёмкости 10
1.7 Определение времени в атомной системе единиц 12
1.8 Напряженность поля в атомной системе единиц 12

2 Семинар 2. Дифракция оптических лучей 13
2.1 Дифракция оптических лучей. Положения по углам дифракционных максимумов 13
2.2 Энергия электронного пучка при дифракции на кристалле. Дифракция волн Де Бройля 16
2.3 Оценки в квантовой физике 17
2.4 Характеристики атома водорода. Соотношения неопределенностей . . . 18

3 Семинар 3. Эффект Казимира 22
3.1 Электромагнитное поле 22
3.2 Плоская волна в электрическом поле. Одномерный случай 24
3.3 Плоская волна в электрическом поле. Трехмерный случай 24
3.4 Плоская волна в электрическом поле. Двумерный случай 25
3.5 Геометрическое место волновых векторов 25
3.6 Электромагнитный вакуум в состоянии нулевой температуры 27

4 Семинар 4. Матрицы Паули 30
4.1 Линейные пространства. Линейные операторы 30
4.2 Унитарные операторы. Некоммутативность 31
4.3 Вычисление коммутаторов и степеней операторов 34
4.4 Стационарное уравнение Шредингера 35

5 Семинар 5. Одномерное движение 39
5.1 Одномерное движение 40

5.2 Задача о потенциальной яме конечной глубины 44

6 Семинар 6. Прохождение частиц через барьеры 52

6.1 Задача о прохождении частицы через один барьер 52
6.2 Задачи о прохождении частицы через несколько барьеров 54
6.3 Волновая функция в окрестности x_n скачка (дельта-барьера) 55

7 Семинар 7. Движение в центральном поле 59

7.1 Физика атома водорода 59
7.2 Классификация угловой части волновой функции. p, s-орбитали 60
7.3 Радиальная часть уравнения Шредингера 63

8 Семинар 8. Теория возмущений 69

8.1 Уровни в прямоугольной потенциальной яме 69
8.2 Квантовая электроника, атом во внешнем поле 70
8.3 Резонансный случай. Блоковская волна и Брегговское отражение . . . 74
8.4 Частный случай точного резонанса 75

9 Семинар 9. Конденсат Бозе-Эйнштейна 79

9.1 Спектральное поведение атома при воздействии резонансного поля . . 80
9.2 Кубит 81
9.3 Бозе-Эйнштейновское распределение и конденсация 82

10 Семинар 10. Перепутанные состояния 86

10.1 Перепутанные состояния. Парадокс Эйнштейна — Подольского — Розена. Неравенство Белла 86
10.2 бразование электрон-позитронной пары 88
10.3 Неравенство Белла 90

Семинар 1. Формула Планка. Спектр излучения нагретого тела.

Рассмотрим формулу Планка. Спектр излучения нагретого тела имеет вид:

Рис. 1.1. Спектр излучения нагретого тела

Кривая с максимумом описывается формулой Планка:

$$I = \frac{\hbar\omega^3}{4\pi^2c^2}\frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}-1} \tag{1.1}$$

Формула имеет два предела:

1) В классическом пределе формула Релея-Джинса, где $\hbar\omega << kT$

$$I = \frac{\omega^2 kT}{4\pi^2c^2} \tag{1.2}$$

2) Формально в пределе высоких частот и фактически неплохое приближение на всей области работает закон Вина, где $\hbar\omega \gtrsim kT$

$$I = \frac{\hbar\omega^3}{4\pi^2c^2}e^{\frac{-\hbar\omega}{kT}} \tag{1.3}$$

Если нарисовать эти две кривые, то классический случай – парабола, а закон Вина – отличающаяся кривая, которая сходится при больших значениях ω.

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

Максимум спектрального излучения

Упражнение 1.1. *Определить при заданной температуре, где находится максимум спектрального излучения нагретого тела.*

Воспользуемся неполным выражением формулы Планка в записи, через закон Вина.

$$I'(\omega) = \left(\frac{\hbar\omega^3}{4\pi^2c^2}e^{\frac{-\hbar\omega}{kT}}\right)' = 0$$

Максимум излучения солнца

Упражнение 1.2. *Оценим, где, на какой частоте и длине волны должен находиться максимум излучения Солнца (выразить в терминах длин волн). Температура - 7000 K.*

1 эВ = 11000 K

Поэтому $3kT \approx 2$

1 эВ = 1200 нм

Обратно, увеличивая энергию, уменьшается длина волны. Она становится в 2 раза меньше, а значит, примерно, 600 нм. Получаем желтый свет, который видим от Солнца. Но по расчетам получается более красная область. Данная оценка неплохо коррелирует с тем, что получится, если численно посчитать максимум точного распределения по формуле Планка. Это трансцендентное уравнение, численно равно 2,8. Поэтому считают, что получившееся значение равное 3 – хорошая оценка нахождения максимума излучения Солнца.

Зависимость полной энергии от температуры (излучение во всем интервале частот

Упражнение 1.3. *(повышенной сложности). Степень ω - размерность пространства. Значит пространство трехмерное.*

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

Если выводить вормулу Планка в друхмерном пространстве, то будет в числителе ω^2, если в одномерном - $\hbar\omega$.

Вопрос: как будет выглядеть график спектра излучения в одномерной системе?

Упражнение 1.4. *Определить, каким образом полная энергия, излучаемая во всем интервале частот, зависит от температуры (характер зависимости от температуры).*

Найдем интеграл:

$$\int I(\omega)d\omega = \int \frac{\hbar\omega^3}{4\pi^2c^2}\frac{d\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}-1} \boxed{=}$$

Пусть

$$x = \frac{\hbar\omega}{kT}$$

$$dx = \frac{\hbar}{kT}d\omega$$

$$\boxed{=} \int_0^\infty \frac{x^3k^3T^3}{4\pi^2c^2\hbar^2}\frac{dxkT}{\hbar(e^x-1)} = T^4\int ...dx$$

x – переменная, которая «пробегает» определенный ряд значений. Пределы интегрирования не зависят от температуры. Утверждаем, что в запись переменной x не будет входить .

Интеграл сходится: на бесконечности – экспоненциально быстрое спадание, в нуле – стремление к 0. Можно утверждать, что закон Стефана-Больцмана установлен с определеностью. «Сильная» зависимость – T^4. Значит, что если одно тело отличается от другого по температуре примерно в 10 раз, то поток излучения будет различатся в 10000 раз.

Характерная температура на поверхности Земли. Формула Стефана-Больцмана

Упражнение 1.5. *Пусть есть диаметр Земли и диаметр Солнца (см. справочники). Оценить характерную температуру на поверхности Земли. При этом положим, что поток энергии, получаемый Землей от Солнца в качестве излучения, весь излучается в открытое пространство по формуле Стефана-Больцмана.*

Если бы Земля находилась где-то в солнечной короне, то температура была такая же, как у короны (6000–7000K). Земля находится далеко, расстояние намного больше диаметра Солнца. Поэтому компенсация происходит за счет уменьшения температуры на поверхности Земли. Регулирование тепловых потоков между Землей и Солнцем описывается формулой Стефана-Больцмана, а именно зависимостью T^4.

Газ фотонов имеет право на жизнь безотносительно к испустившему его абсолютно черному телу (одна из простейших термодинамических систем). Этот газ можно заставить адиабатически сжиматься или расширяться, поместив в зеркальный цилиндр, где будет ходить поршень. Если надавить на поршень, то преодолеем давление света, закачаем энергию в систему, одновременно увеличится плотность, а значит вырастет температура. Термодинамика говорит, что в итоге изменений должна остаться система с заданной температурой. Значит свойства должны будут описываться формулами Планка.

Неясно, что указывает на термодинамическое равновесие, так как фотоны не взаимодействуют друг с другом. Но если взять адиабатически расширяемый и сжимаемый газ фотонов – термодинамически равновесная система, которая меняет температуру в зависимости от объема.

Соображения про адиабатические сжатия лежали в основе рассуждений Вина при получении формулы. Поршень сдвигается, значит есть доплеровский сдвиг фотона, который об него ударился, поэтому сдвигается максимум кривой. Формула Вина показывает инвариантность кривой к изменению объема.

Известный пример системы, представляющей собой фактически адиабатически расширяемый фотонный газ – это наша Вселенная. Реликтовые излучения в скорости после большого взрыва, когда излучение отделилось от вещества, начало жить своей жизнью. Поскольку Вселенная расширяется, то реликтовое излучение остывает. На данный момент достигло 3K. В момент отделения от вещества, характерные массы фотонов были на уровне энергии покоя протона, то есть очень большие.

Спектр реликтового излучения – планковский чернотельный спектр. Минимально присутствует анизотропия, а также минимально термодинамически неравновесна. Это происходит потому, что фотоны не взаимодействуют друг с другом, нет термостата. Был «слепок» флуктуаций горячей Вселенной в тот момент, когда все произошло, так оно и осталось.

Реликтовое излучение было предсказано советским физиком Гамовым. Но было обнаружено сильно после войны.

Законы фотоэффекта:

1) существование красной границы. Фотоны с энергией ниже определенной не вызывают вылета электронов из металла.

2) пропорциональность фототока интенсивности падающего излучения, расчет количества фотонов.

3) максимальная энергия вылетевшего электрона определяется разницей между энергией фотона и работой выхода.

Максимальная скорость фотоэлектрона, выбитого фотоном с поверхности алюминия

Упражнение 1.6. *Пусть есть работа выхода (A) поверхности алюминия 3,74 эВ, ультрафиолетовый фотон с длинной волны 300 нм. Найти максимальную скорость выбитого фотоэлектрона фотоном с поверхности алюминия.*

$$h\nu = A + E$$
$$\frac{hc}{\lambda} = A + E$$
$$E = \frac{hc}{\lambda} - A$$
$$E = \frac{m\upsilon^2}{2}$$
$$\upsilon = \sqrt{\frac{2E}{m}}$$

Ответ: $5 * 10^7$ см/с

Задача реалистичная. По порядку величин работы выхода — электрон-вольты, соответствующие ультрафиолетовому диапазопу. Самые маленькие характерны для атомов из первой группы (ближе к низу) Периодической таблицы Д.И. Менделеева – Rb, Cs. Поэтому самые чувствительные фотокатоды (металлические, полупроводниковые) делают из этих элементов. Характерные энергии вылетающих электронов оказываются такими, что они являются нерелятивистскими. Характерный масштаб энергии в атоме – электрон-вольты, а масштаб скоростей $\frac{1}{137}\upsilon$ (на 2-3 порядка меньше).

Рассмотрим системы единиц. Метрологию выделяют в отдельную науку. Система единиц — малая часть метрологии, где основной частью является ультрасовременная часть «Стандарты». Способы максимально стабильно померить время, массу или другой параметр с каждым днем совершенствуются. А стандарты консервативны. Общепередовые страны, такие как США, до сих пор используют имперскую систему единиц – футы, мили, бочки и т.д. В континентальной Европе, когда произошла французская революция, она сопровождалась изменением систем мер, придумана была десятичная система. Из нее «выросла» система СИ. Но странности при измерениях встречаются. В России используется одна из самых популярных метрических систем — система СИ, за исключением атмосферного давления - мм.рт.ст. вместо Па. Если рассмотреть систему СИ, то в момент создания она была логичной. Но тогда наука об электрических и магнитных явлениях была в зачаточном состоянии и то, что касается электричества и магнитизма в СИ, является «добавленным сверху». Тогда люди начинали с законов протекания тока по цепям, заряда конденсатора.

Система единиц содержит произвольное количество исходных, эталонных величин, когда СГС — сантиметр, грамм, секунда. Значит не только метр, килограмм, секунда, но и дополнительные константы в формулах и эталоны. Например, температуру меряем не в Дж, а К или С с переводным коэффициентом $k = 273$. В электростатике введена диэлектрическая постоянная вакуума ε_0. Когда начинали заниматься электричеством, ученые не знали закона Кулона, поэтому для удобства пришли к существованию ε_0 и 4π. 4π такая, что плоский конденсатор описывается формулой Кулона без данного коэффициента. Поэтому система СГС для фундаментальной и теоретической физики становится более удобной. Будем работать именно с ней.

[заряд СГС]^2 = эрг*см, так как по закону Кулона $E = \frac{q_1 q_2}{r^2}$

эрг = г*см^2/с^2

Установим единицу измерения напряжения в системе СГС:

$E = Uq$

$U = \frac{E}{q}$ = эрг/эрг$^{\frac{1}{2}}$ / см$^{\frac{1}{2}}$ = г$^{\frac{1}{2}}$ * см$^{\frac{1}{2}}$/с

Определение единиц СГС для сопротивления и ёмкости

Упражнение 1.7. *Определить единицы СГС для сопротивления и ёмкости.*

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

Рассмотрим атомную систему единиц. В данной системе нет переводных коэффициентов в формулах. Это система единиц, в которой за единицу взяты фундаментальные константы: заряд электрона (е), масса электрона (m_e) и постоянная Планка ($\hbar$).

Переведем величины в СГС: $\hbar$ = эрг*с = г*см^2/с

m_e = г

е = $\sqrt{\text{эрг*см}}$ = $\sqrt{\text{г*см}^3/\text{с}^2}$

$\upsilon = \frac{e^2}{\hbar}$ = см/с

Рассмотрим еще одну константу - скорость света в вакууме. Можно получить безразмерную постоянную тонкой структуры:

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}$$

Она определяет форму существования нашего мира. В меру малости константы слабо взаимодействуют свет и вещество. Если бы эта константа была порядка 1, то фотоны от атомов не отделялись бы, а получалась бы смесь всего, отличная от того, где мы живем.

$$\frac{M}{m} \approx 10^5$$

где M – масса атома, m – масса электрона.

Малость отношения массы электрона к массе ядра – важная характеристика, определяющая свойство мира. Является основой адиабатического приближения, позволяющего сравнительно по отдельности говорить о движении ядер и электронов в молекулах, в твердых телах. Если бы константа была не столь велика, то материя была бы абсолютно другой.

Определим длину, энергию.

$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} = 5 * 10^{-9}$ см = 0,5 нм - радиус Бора

$E = me^4 \approx 27$ эВ $= 4 * 10^{-11}$

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

Определение времени в атомной системе единиц

Упражнение 1.8. *Определить в атомной системе единиц время.*

Сравним боровский радиус с характерным расстоянием между атомами в кристаллах, которая прямо измеряется по дифракции рентеновских лучей и косвенно измеряется химическими методами, если известна плотность и масса одного атома. Характерное расстояние между атомами в кристаллах примерно равно нескольким нм. Оно больше, чем боровский радиус. То же самое с энергиями: энергия или работа выхода равна нескольким эВ.

Речь идет о нерелятивистских задачах. В этом можно убедиться, рассматривая задачу о фотоэффекте, где характерные скорости электронов сильно не добирают до значения скорости света, на что указывает малость значения постоянной тонкой структуры. Релятивистские эффекты становятся важны для тяжелых атомов. Рассмотрим формулу:

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$$

в числителе также появится множитель заряда ядра, который численно равен номеру элемента в Периодической таблице Д.И. Менделеева. Значит для 100 элемента значение постоянной тонкой структуры становится порядка 1. Поэтому электроны нельзя будет считать нерелятивистскими.

Напряженность поля в атомной системе единиц

Упражнение 1.9. *Оценить напряженность поля в атомной системе единиц (величину электрического поля в атоме). Пересчитать в СГС и в СИ.*

Существуют другие системы единиц, которые специфичны для соответствующих областей физики. В физике ядра электрон не будет играть никакой роли, а фигурирует заряд и масса протона. Если изъять массу и добавить скорость света, то получится система единиц, хорошая для описания электромагнитных явлений. Можно ввести в рассмотрение гравитационную постоянную g и попытаться построить самую естественную систему единиц, которая не включает в себя ничего материального — система единиц, построенная на постоянной Планка, скорости света и гравитационной постоянной. Такая система называется *планковской системой единиц.* Она высоко уходит вверх по энергиям и вниз по масштабам. Но система ограничивает область понимания современной физики.

Семинар 2. Дифракция оптических лучей

Рассмотрим разность хода в случае протяженного источника. Изобразим короткий и длинный лучи.

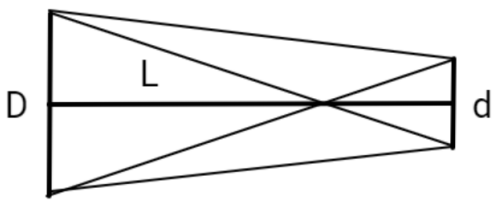

Рис. 2.1. Разность хода в случае протяженного источника

Длина их составляет

$$\sqrt{\frac{(D \pm d)^2}{4} + L^2} \approx L + \frac{1}{2L}\frac{(D \pm d)^2}{4} \tag{2.1}$$

где $\pm$ зависит от того, больший или меньший из лучей нам нужен. Если раскрыть второе слагаемое, то разница, куда входит $\pm$ – перекрестный член, поэтому разность хода:

$$\triangle\, l = \frac{1}{L}\frac{Dd}{2} \tag{2.2}$$

Соответственно, интерференция будет чувствоваться, если $\triangle\, l \approx \lambda$

Дифракция оптических лучей. Положения по углам дифракционных максимумов

Упражнение 2.1. *Пусть есть дифракционная решетка с периодом d. На нее падает волна с длинной λ под углом Θ. Требуется найти положения по углам дифракционных максимумов.*

Решение: Нужно, чтобы разность хода для лучей была кратна длине волны. В этом случае будет наблюдаться максимум интерференции. Разность хода будет складываться из разности длин, то есть перпендикуляр, опущенный на один из лучей.

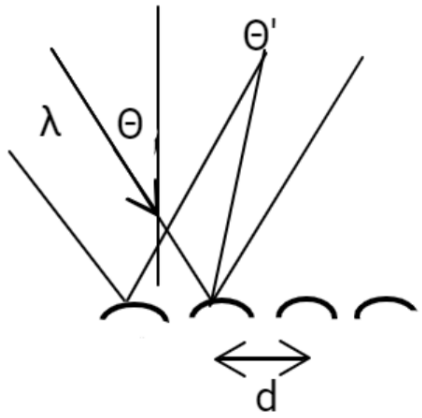

Рис. 2.2. Дифракционная решетка

Если рассмотреть прямоугольный треугольник для отраженного луча, в котором гипотенуза равна d, то катет можно найти как $dsin\Theta'$. Для падающего будет то же самое: $dsin\Theta$.

В итоге получим:

$$dsin\Theta - dsin\Theta'$$

Тогда для зеркального отражения, где $\Theta' = \Theta$, - тривиальный случай, получим 0. В нетривиальном случае:

$$dsin\Theta - dsin\Theta' = n\lambda$$

где n – целое число. Полученное условие называется *условием дифракции.*

Запишем это условие в более простом и компактном виде. Для этого введем волновое число

$$\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda}$$

Так как k - вектор, то существует параллельное k - компонента плоскости параллельной дифракционной решетке и

$$k_{||} = \frac{2\pi}{\lambda} sin\Theta$$
$$k_{||} - k'_{||} = \frac{2\pi}{d} n = qn$$

Получается, что любой решетке, а так же и дифракционной, можно приписать волновой вектор, определяющий модуляцию. Он равен

$$q = \frac{2\pi}{d}$$

Если бы была задача с плоским зеркалом — это была бы задача с трансляционной симметрией параллельной плоскости зеркала. Трансляционная симметрия — закон сохранения импульса, если рассматриваем механику. Если в оптике, то это возможность ввести $k_{||}$ в качестве сохраняющейся величины. Если есть периодическая модуляция, то импульс сохраняется с точностью до вектора обратной решетки (qn). В таких случаях обычно говорят про *квазиимпульс* — что сохраняется с точностью до кванта.

Написанное условие дифракции является более компактным и хорошо применимо для более сложных случаев. Например, если есть трехмерный кристалл, как в рентгеновской оптике или как задача о рассеянии электронов. Известно, что рентгеновское излучение проникает далеко. Для трехмерного кристалла можно обозначить вектора обратной решетки, и волновое число будет сохраняться с точностью до nq по каждому из направлений (Рис. 2.3).

Если если трехмерная кубическая решетка, то вводим:

$q_1 = \frac{2\pi}{d_x}$ на расстоянии между атомами вдоль OX,

$q_2 = \frac{2\pi}{d_y}$ на расстоянии между атомами вдоль OY,

$q_3 = \frac{2\pi}{d_z}$ на расстоянии между атомами вдоль OZ.

Записываем векторно:

$$\vec{k}_{||} - \vec{k}'_{||} = n_1\vec{q}_1 + n_2\vec{q}_2 + n_3\vec{q}_3 + ...$$

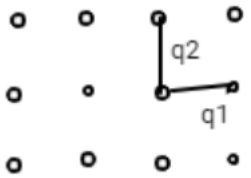

Рис. 2.3. Кристаллическая решетка

В результате, возникают картинки, содержащие множество точек дифракции рентгеновстких лучей на кристаллах. Сложности геометрических картинок и многообрзие точек связано с тем, что три вектора обратной решетки надо обыграть большим количеством целых чисел n.

Из формул видно, что не любая волна на любой решетке может дифрагировать. Если у решетки очень короткий период, тогда соответствующий вектор $\vec{Q}$, и определить k невозможно.

$$|k| = \frac{2\pi}{\lambda}$$

где λ не меняется при дифракции. Если

$$\frac{2\pi}{d} > 2\frac{2\pi}{\lambda}$$

то векторы $\vec{k}_{||}, \vec{k}'_{||}$ можно только развернуть в разные стороны. Значит дифракции в этом случае не будет.

Энергия электронного пучка при дифракции на кристалле. Дифракция волн Де Бройля

Вернемся к квантовой физике. Рассмотрим дифракцию волн Де Бройля, дифракцию электронов на кристалле. Возьмем кристалл с периодом $d = 5$ a.u. $= 2{,}5\ \overset{o}{A}$

Упражнение 2.2. *Вычислим, какой минимальной энергией должен обладать электронный пучок для того, чтобы он смог испытывать дифракцию на таком кристалле.*

Решение:

$$|k| = \frac{p}{\hbar}$$

$$E = \frac{m\upsilon^2}{2} = \frac{p\upsilon}{2} = \frac{k\hbar\upsilon}{2} = \frac{(k\hbar)^2}{2m} = \frac{(\pi\hbar)^2}{2d^2m}$$

Ответ: 4,8 эВ

Дифракция электронов на решетке в данном примере начинается примерно с 5 эВ. Для реализации нужно брать большее значение, но не достигая кэВ. При ~ 50

эВ будет около 10 дифракционных максимумов и можно будет хорошо проанализировать картинку. Если бы был пучок протонов, то нужно взять меньшую энергию, чтобы наблюдать дифракционную картину. На любом примере с частицами большей массы нужно уменьшать характеристические энергии.

Дальше возникает вопрос о дифракционной решетки, которая используется в эксперименте. Их встречается два вида: или кристаллическая решетка с периодом 1 нм, или что-то сделанное оптическими методами с периодом на уровне 100 нм. Сейчас проводят эксперименты с супер холодными атомами, когда определенные атомы (из первой группы Периодической таблицы Д.И. Менделеева) помещают в искусственно созданный потенциал, созданный оптическими методами с периодом на уровне 100 нм и производят исследования квантовые коллективные свойства ансамблей. Но такую систему нужно сильно охладить. В результате, физика будет видна на масштабе порядка мкК.

20 лет мировая наука шла экспериментально по этой дороге — лазерное охлаждение атомов (нобелевская премия). В конце 1990х — начале 2000 годов ученые научились достаточно хорошо охлаждать ансамбли атомов, чтобы добраться до нужной шкалы масштабов.

Оценки в квантовой физике

Рассмотрим простые оценки, которые в квантовой физике можно получить не используя сложных уравнений: формулы для характеристики волны Де Бройля

$$p = \hbar k \tag{2.3}$$

$$E = \hbar \omega \tag{2.4}$$

и соотношения неопределенностей, установленные для произвольной волны. Значит невозможно одновременно хорошо локализовать волновой объект и в пространстве координат, и в пространстве волновых чисел.

$$\triangle r \triangle k \geqslant 1$$

$$\triangle r \triangle p \geqslant \hbar$$

С помощью соотношения неопределеннностей оценим размер атома водорода. Вспомним, что боровские орбиты — классические орбиты, в которые укладывается целое число волн Де Бройля. Это является квазиклассикой, предположением, что

не существует классических орбит. Значит, существует некое устройство волновой функции электрона вблизи протона. Из соотношения неопределенностей видно, что электрон на ядро упасть не может. Как только электрон начнет падать на ядро, как в классической физике, излучая электромагнитные волны, он станет все более близок к ядру, более локализован вблизи ядра. Уменьшится неопределенность координаты, что должно сопровождаться увеличением неопределенности импульса. Если неопределенность импульса станет велика, то неизбежно будет велика кинетическая энергия.

$$E_{\text{кин}} = \frac{p^2}{2m}$$

Если импульс не равен 0 с хорошей точностью, то кинетическая энергия будет расти. Таким образом, вместо ожидаемого уменьшения энергии системы из-за падения на центр, получаем увеличение, чего быть не может.

Характеристики атома водорода. Соотношения неопределенностей

Упражнение 2.3. *Оценим характеристики атома водорода исходя из соотношения неопределенностей.*

Решение:

Пусть есть в системе протон и электрон со своей массой. Они находятся на неком характерном расстоянии друг от друга r.

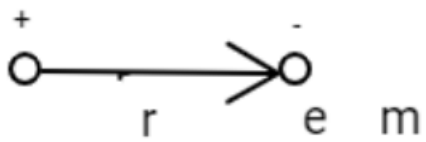

Рис. 2.4. Система протон - электрон

Запишем энергию системы, как сумму кулоновской и кинетической и попробуем найти оптимальную с точки зрения энергии величину r.

$$E_{\text{кул}} = -\frac{e^2}{r}$$

$$E_{\text{кин}} = \frac{p^2}{2m}$$

$$E_{\text{кин}} = \frac{\triangle\, p^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2 \triangle\, r^2 m}$$

$$E_{\text{кин}} + E_{\text{кул}} = \frac{\hbar^2}{2 \triangle\, r^2 m} - \frac{e^2}{r}$$

$$\frac{dE}{dt} = -\frac{2\hbar^2}{2 \triangle\, r^3 m} + \frac{e^2}{r^2} = 0$$

$$\triangle\, r = \frac{\hbar^2}{e^2 m}$$

Таким образом соотношение неопределенностей позволило получить простейшую теорию, показывающую почему атомы вообще существуют, почему электрон не падает на ядро. Получается, что достаточно знать, что электрон проявляет волновые свойства, то есть знать формулу Де Бройля.

Если рассматривать глобально, то макроскопически наш мир существует. Потому что выполняется закон Кулона ($\sim \frac{1}{r}$), а кинетическая энергия характеризуется $\sim p^2$. Поэтому у итоговой кривой наблюдается минимум ($\sim \frac{1}{r^2}$), то есть можно утверждать, что атомы существуют.

Если будет линейный закон дисперсии, а не квадратичный, то наше решение будет неверно. Закон дисперсии становится линейным только в релятивистском случае. В атомах электроны движутся со скоростью, характеризующей движение электронов. Они в постоянной тонкой структуре в несколько раз меньше, чем скорость света. Это в первую очередь относится к атому водорода. Если будем увеличивать заряд ядра, то характерные расстояния начнут уменьшаться, а характерные скорости и энергии начнут увеличиваться. И, условно говоря, на 137 атоме в Периодической таблице Д.И. Менделеева электроны станут релятивисткими. Это не является четкой границей.

Релятивистские эффекты хорошо заметны для тяжелых элементов Периодической таблицы Д.И. Менделеева. Но если решать задачу о релятивистском электроне в центральном кулоновском поле, то выясняется, что начиная с некоторого критического заряда, определеяющего центральное поле, электроны начинают падать на ядро. Этот эффект будет соответвоваться элементам с массами 150-200. Конечно, в

этой области ядра не являются стабильными. Создать еще какой-то элемент с большими электронными оболочками не возможно из-за малого времени жизни ядра. Но если бы они существовали, то Периодическая таблица Д.И. Менделеева все равно заканчивалась бы на 150-200 элементе, потому что не были бы устойчивы электронные оболочки. Электроны начали бы падать на ядро, там объединялись бы с протонами и атомы превращались бы в изотопы с меньшим зарядом.

Существуют ограничения на размер области, в которой можно локализовать электрон. Чем сильнее мы будем его сжимать, тем больше у него будет становиться энергия. В итоге энергия станет сравнима с массой покоя электрона (mc^2). Если ее увеличить в 2 раза, то такой энергии будет достаточно, чтобы родилась электрон-позитронная пара. Значит система станет нестабильной, поэтому электрон в малой области локализовать будет затруднительно.

Упражнение 2.4. *Определим размеры такой области из соотношения неопределенностей, если энергия электрона равна массе покоя электрона.*

Решение:

$$\triangle E = mc^2$$

$$mc - \triangle r \gtrsim \hbar$$

$$\triangle r \approx \frac{\hbar}{mc}$$

В итоге получаем комплоновскую длину волны с точностью до коэффициента:

$$\lambda_\xi = \frac{\hbar}{mc} = \frac{\hbar^2}{me^2}\frac{e^2}{\hbar c} \tag{2.5}$$

Для комптоновской длины волны есть ограничения снизу — область, в которой можно локализовать электрон. Если еще раз домножить на постоянную тонкой структуры, то получим меньший в 100 раз масштаб длины.

$$r_e = \frac{\hbar}{mc}\frac{e^2}{\hbar c} = \frac{e^2}{mc^2} \tag{2.6}$$

Такая величина называется *классическим радиусом электрона.* Эту величину можно понять так: если взять заряд любой природы и локализовать в области порядка r_e, то у этого заряда будет соотвествующая электростатическая энергия равная

массе покоя электрона. Значит, чем лучше локализовать заряд, тем в большей степени достигнется mc^2. Физического смысла в такой процедуре нет, так как гораздо раньше уже начинают рождаться электрон-позитронные пары.

Существуют 4 масштаба длины, отличающиеся каждый раз умножением на постоянную величину — постоянную тонкой структуры.

$$r_e \to \lambda\!\!\!^{-}_c \to a_0 \to \lambda\!\!\!^{-}_o \tag{2.7}$$

где λ_o - оценка для длины световой волны, в 137 раз больше радиуса Бора.

Длины оптических волн еще больше, чем для световой волны и данные линии не соотвествуют атомам водорода, а из атомов из середины Периодической таблицы Д.И. Менделеева. Для них характерна энергия меньше раз в 10.

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

Семинар 3. Эффект Казимира

Продолжим говорить про электромагнитное поле. Важно понимать, что электромагнитное поле в вакууме фактически представляет собой совокупность гармонических осцилляторов.

Как можно отличить гармонический осциллятор от другой ангармонической системы? Например, в классике, если не известно, что потенциал точно квадратичен по координате, но знаем какие-нибудь характеристики движения: можно следить за периодом, воздействовать силой и т.д. Возьмем реальный осциллятор, например, гиря на нитке, которую начинаем раскачивать все сильнее и сильнее. При этом период колебаний будет увеличиваться. Если случай гармонического осциллятора, то пока колебания маленькие и действует квадратичное приближение для потенциала, то для гармонического осциллятора частота колебаний и период колебаний не зависят от размаха. Получается, что резонанс будет находиться в одном и том же месте. Если взять реальный осциллятор и раскачать «как качели», то период увеличится. Это легко понять, если раскачать до верхней точки. Можно сделать большой период и маятник будет останавливаться наверху. Зависимость периода от величины размаха у нелинейных осцилляторов есть, а у линейных нет.

Электромагнитное поле

Электромагнитное поле – очень хорошо линейная система. Никакие характеристики электромагнитной волны – дисперсионные соотношения, связь частоты и волнового вектора – никак не зависят от величины поля. Это случай электромагнитных волн в вакууме. Если рассматривать среду с хорошим сильным лазером, можно увидеть нелинейность, и она будет слабая. В вакууме нелинейность увидеть нельзя.

Релятивистская квантовая электродинамика говорит, что есть предел, когда возникает нелинейность вакуума. Она связана с тем, что если у электромагнитной волны очень сильное поле, то в нем могут рождаться электрон-позитронные пары. Это очень большие величины оптических полей, до которых современная экспериментальная техника на очень много порядков не добралась.

С точки зрения любой разумной экспериментальной ситуации из астрофизики, вакуум – хорошо обусловленная линейная среда, то есть совокупность нескольких гармонических осцилляторов. Фактически, в качестве гармонического осциллятора можно рассматривать каждую моду поля. Значит при каждом $\vec{k}$ присутствует

эффективный гармонический осциллятор с частотой $\omega_k = kc$. На самом деле, таких осцилляторов существует два. У световой волны (светового поля) два состояния – поляризация в вертикальной и горизонтальной плоскости. Такая двойка имеет простую природу. Это либо проекция спина, если разговор про электроны, либо поляризация, если про свет.

Для каждой моды $\vec{k}$ есть свой эффективный гармонический осциллятор. Можно рассчитать, сколько присутствует гармонических осцилляторов.

$\vec{k}$ образует непрерывное множество. Вектор может принимать любое значение. Непрерывный ряд значений пробегает при наличии свободного пространства. Чтобы $\vec{k}$ пробегал дискретный ряд значений, необходимо электромагнитное поле заключить в резонатор. Значит ограничить в пространстве распространение фотона. Если взять достаточно большую длину ящика в одномерье, либо ребро, если это трехмерье, кубический резонатор, то физические свойства этой системы ничем не будут отличатся от свойств свободного простанства. С точки зрения расчетов будет проще, так как $\vec{k}$ из-за ограниченности ящика начнет принимать значения из какого-то дискретного ряда.

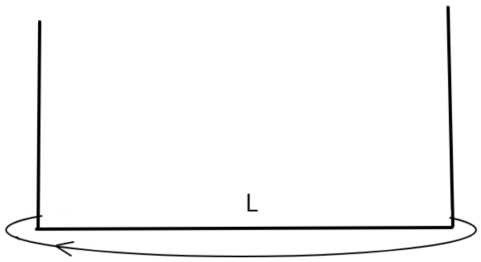

Рис. 3.1. Ящик

Нужно выяснить, что это за ящик? Рассмотрим аналогию из механики. Если есть колеблющийся стержень, то нужно ставить граничные условия. Например, привязанный конец – смещение равно 0 или свободный конец – производная смещения по координате равна 0. Обе процедуры годятся. Если с них стартовать и произвести аналогичные действия, то получится такой же ответ. Но эти процедуры довольно сложные из-за того, что возникает конец, волна начинает отражаться от конца. Проще взять гипотетический колеблющийся стержень и свернуть в колечко. При этом устанавливаются периодические граничные условия.

В случае электромагнитного поля:

$$E(0) = E(l)$$
$$H(0) = H(l)$$

В этом случае фотон, бегущий вдоль стержня, исчезает на правом краю и появляется на левом. Если это одномерная система, то образуется кольцо, если двумерная система – тор.

Плоская волна в электрическом поле. Одномерный случай

Пусть есть плоская волна в электрическом поле:

$$E(r,t) = e^{i(kr-\omega_k t)}$$

где ω_k - частота гармонического осциллятора.

Рассмотрим одномерный случай. Какие значения может принимать волновой вектор для того, чтобы выполнялись периодические граничные условия для отрезка длины L.

$$E(0,t) = E(L,t)$$
$$k = 0, \frac{2\pi}{L}, \frac{4\pi}{L}, ..., \frac{2\pi}{L}n$$

Плоская волна в электрическом поле. Трехмерный случай

Теперь рассмотрим трехмерную систему – кубик. Все будет то же самое, но напишем для каждой из проекций.

$$k_x, k_y, k_z = \frac{2\pi}{L} m_x, m_y, m_z$$

Возможны случаи, когда L является отрицательным числом, так как волна может «бежать» как налево, так и направо. Получается, что $n = 0, \pm 1, \pm 2, ...$ Такое явление работает только в трехмерье. Если разрешить только положительные значения k, то они будут рассматриваться только в восьми возможных направлениях. Если ось Z направлена вверх, X – прямо и Y – перпендикулярно X, то такие положительные k будут только в одной из восьми плоскостей, отсекаемых осями.

Под волной понимаем комплексную экспоненту. Если бы решения были для жесткой стенки, то связь была бы не через экспоненту, а через синус. Образуется вытянутая струна, где возбуждена основная мода или возбужденная. В итоге сосчитали моды электромагнитного мода.

Вспомним про формулу Планка. Все подсчеты мод связаны именно с этой формулой. Формула Планка определяет интенсивность на единицу спектрального интервала. $I(\omega)$ - количество энергии, испущенное единицей площади нагретого тела в единицу спектрального интервала.

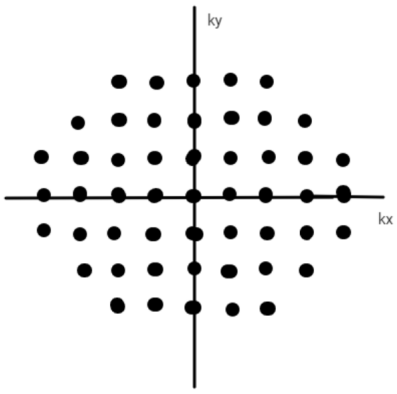

Рис. 3.2. Система точек в координатах kx/ky

Если нужно прийти к формуле Планка, то нужно посчитать, сколько есть фотонных мод в ω-пространстве. Таким образом, каждой совокупности k_x, k_y, k_z соответствует ω. Нужно узнать количество мод, помещающемся в интервале $\omega, \omega + \delta\omega$.

Плоская волна в электрическом поле. Двумерный случай

Изобразим эту задачу для двухмерной системы (см. Рис. 3.2).

Геометрическое место волновых векторов

Пусть есть система координат kX/kY. Размерность k: см$^{-1}$. Каждая точка пробегает дискретный, эквидистантный, находящийся на одном расстоянии $(\frac{2\pi}{c})$ друг от друга ряд точек. Рассмотрим, как на рисунке выглядит геометрическое место волновых векторов, если известна частота.

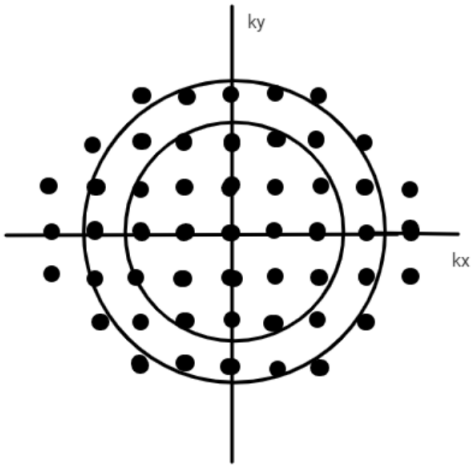

Рис. 3.3. Геометрическое место волновых векторов

Получаем окружность радиусом $\frac{\omega}{c}$. Если увеличить ω до $\omega+\delta\omega$, то радиус приобретет вид $\frac{\omega+\delta\omega}{c}$. Тогда интересующие нас моды попадут в слой между двумя окружностями. Ясно, что если точки идут достаточно часто на плоскости, то часть из них окажется в слое.

В трехмерье будет наблюдаться то же самое, только вместо области между двумя окружностями будет шаровой слой с теми же радиусами.

Выясним, сколько точек попадет в слой для двухмерной системы.

Расстояние между двумя точками - $\frac{2\pi}{L}$

$$\triangle S = \pi(R_1^2 - R_2^2) = \pi(\frac{\omega+\delta\omega}{c})^2 - \pi(\frac{\omega}{c})^2 = \pi\frac{2\omega\delta\omega}{c^2}$$

Выясним, сколько точек попадет в слой для трехмерной системы.

$$\delta V = 4\pi\frac{\omega^2}{c^3}\delta\omega$$
$$\delta V = 2*4\pi\frac{\omega^2}{c^3}\delta\omega*\frac{L^3}{(2\pi)^3}$$

Получаем, что количество мод пропорционально объему квантования.

$$\omega, \omega+\delta\omega \Rightarrow \frac{\omega^3 L^3}{\pi^2 c^3}\delta\omega$$

Знаем, как устроена совокупность мод электромагнитного поля. Нужно понять, как каждая из этих мод устроена. Если заселить классическим образом, температуру

в эрг, а в каждый гармонический осциллятор направить постоянную Больцмана, то получится классическая формула Релея-Джинса. Если правильное квантовое выражение, то получится правильная формула Планка.

Электромагнитный вакуум в состоянии нулевой температуры

Посмотрим, как устроен электромагнитный вакуум в состоянии соответствующей нулевой температуры, когда реальных фотонов в системе нет. Перед нами система гармонических осцилляторов. В основном состоянии (с наименьшей энергией) он совершает нулевые колебания. Это проверяется из соотношения неопределенностей.

$$E = \frac{p^2}{2m_e} + \frac{m\Omega^2 x^2}{2}$$

$$\triangle p \triangle x \approx \hbar \Rightarrow p \approx \frac{\hbar}{\triangle x}$$

$$E = \frac{\hbar^2}{2m_e(\triangle x)^2} + \frac{m\Omega^2(\triangle x)^2}{2}$$

$$\frac{2\hbar^2}{2m_e(\triangle x)^3} + \frac{2m\Omega^2 \triangle x}{2} = 0$$

$$\frac{\hbar^2}{m_e(\triangle x)^3} = m\Omega^2 \triangle x$$

$$(\triangle x)^4 = \frac{\hbar^2}{m_e^2\Omega^2} \Rightarrow (\triangle x)^2 = \frac{\hbar}{m_e\Omega}$$

$$E_{min} = \frac{\hbar^2 m\Omega}{2m\hbar} + \frac{m\Omega^2\hbar}{2m\Omega} = \hbar\Omega$$

В каждом гармоническом осцилляторе находится энергия нулевых флуктуаций порядка кванта колебаний этого осциллятора. На самом деле, половина кванта - $\frac{\hbar\omega}{2}$.

Вакуум полон энергии, много фотонных мод и в каждый из них зашита $\frac{\hbar\omega}{2}$. Если размер нашего квантования увеличиваем, то это еще пропорционально объему. И эта энергия тем больше, чем если даже движемся вверх по оси частот, где количество мод пропорционально ω^2. Эта энергия будет ненастоящая. Нет возможности ее извлечь оттуда, но ученые результат получают.

Возникает вопрос: как почувствовать такую энергию? Ответ дал голландский физик Казимир.

Рис. 3.4. Хендрик Казимир, голландский физик

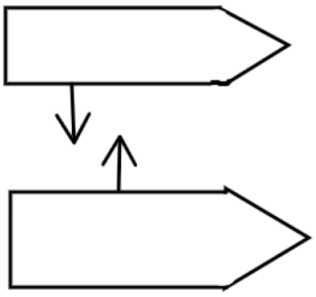

Рис. 3.5. Притягивающиеся корабли

И было удивительно то, что ответ был известен даже морякам тех времен. Если поставить рядом (достаточно близко) два судна, то надо внимательно смотреть, чтобы не поднялась волна. Если поднимается волна, суда начинает друг к другу притягивать. Суда в таком случае искажают картинку волнения на море и так это искажение выглядит, что возникает сила, притягивающая суда друг к другу.

Казимир обнаружил, что точно такой же эффект наблюдается, если поставить два зеркала или металлических пластинки рядом друг с другом на неочень большом расстоянии, порядка длины световой волны.

Картина мод электромагнитного поля будет отличная. Если это идеальные зеркала, то может возникнуть стоячая волна с узлами на зеркалах. Ясно, что δk из-за того, что конечно, совершенно другое, чем в предыдущем случае – виртуальном ящике. Также будет другая картина вакуумных флуктуаций поля и значит будет другая энергия системы, другая сумма $\frac{\hbar\omega}{2}$, взятых по всей моде.

Оценим силу из соображения размерностей:

$$\frac{F(a)}{S} = \text{эрг/см/см}^2$$

$$\hbar = \text{эрг*с}$$

$$c = \text{см/с}$$

Получаем, что

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

$$F(a) = \frac{\hbar c}{a^4}$$

Чем ближе две зеркальные пластинки друг к другу подносим, тем сильнее они притягиваются. Разумеется, такое явление имеет свое ограничение: надо чтобы пластинки, обязательно, были зеркальными и a было на уровне оптической длины волны или даже больше. Только при таких условиях формула будет работать. Такая измеримая сила была померяна Казимиром. Так же она является прямым доказательством существования нулевых флуктуаций.

Семинар 4. Матрицы Паули

Линейные пространства. Линейные операторы

С точки зрения математики квантовая механика похожа на линейную алгебру. Волновые функции образуют линейное пространство, на котором действуют те или иные операторы, соответствующие по большей части измерению тех или иных величин. Но в линейной алгебре изучаются конечномерные линейные простанства, а размерность пространства волновых функций – бесконечность. Множество всех функций даже одной переменной X содержит бесконечное количество элементов.

Вспомним определение. Если есть элемент линейного пространства Ψ_1 и Ψ_2, то на них умеют действовать операторы так:

$$\hat{A}|\Psi_1>$$
$$\hat{B}|\Psi_2>$$

Результатом действия будет элемент того же пространства. Действуют стандартные правила операторной алгебры:

$$(A+B)|\Psi>=A|\Psi>+B|\Psi>$$

Волновые функции можно умножать на обычные числа, которые принято называть с-числами. Можно у волновых функций вычислять скалярное произведение $<\Psi_1|\Psi_2>$. В математике – это произведение ковариантного и коинвариантного. В квантовой механике $<\Psi_1|$ - bra-оператор, а $|\Psi_2>$ - ket-оператор.

Рассмотрим вопрос: какие бывают операторы? Существуют эрмитовы операторы (самосопряженный, то есть $A=A^+$) и сопряженные операторы

$$<\Psi_1|A\Psi_2>=<(A^+\Psi_1)|\Psi_2>$$

Самое главное свойство эрмитовых операторов – действительность собственных значений. Из этого следует, что

$$A=A^+ \Rightarrow <\Psi|A|\Psi> \varepsilon \Re$$

Для доказательства можно перейти к базис-диагоналям и в итоге получим

$$\sum \Psi_i^* \Psi_i A_{ii}$$
$$< \Psi_1 | \Psi_2 >= \sum \Psi_{ij}^* \Psi_{ij}$$

Получаем, что для самосопряженного оператора среднее значение по любой волновой функции действительно. В квантовой механике операторам наблюдаемых в эксперименте величин соответствуют эрмитовы операторы. При вычислении среднего значения соответствующих операторов получаются всегда действительные числа.

Унитарные операторы. Некоммутативность

Операторы бывают унитарные. Такие операторы сохраняют норму, операторы вращения пространства. Рассмотрим понятие о некоммутативности, говоря о вращении и отражении. Рассмотрим на плоскости два оператора поворота на угол ϕ (см. Рис. 4.1).

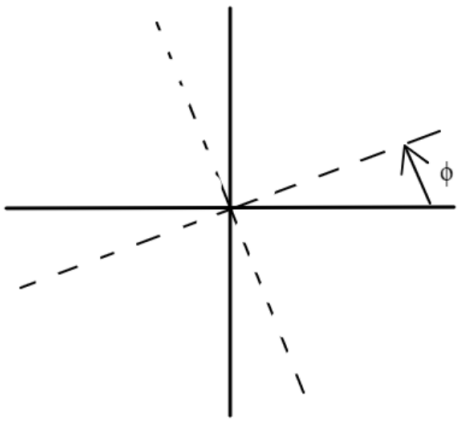

Рис. 4.1. Поворот на угол

Соответствующие преобразования задаются матрицей (первый оператор) вида:

$$R_\phi = \begin{pmatrix} cos\phi & -sin\phi \\ sin\phi & cos\phi \end{pmatrix}$$

Второй оператор задается оператором отражения:

$$I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

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

Заметим, что не получится одинаковый ответ, если сначала произвести поворот, а потом инверсию и наоборот. Для того, чтобы в этом убедиться, вычислим

$$R_\phi I - IR_\phi = \begin{pmatrix} 0 & 2sin\phi \\ 2sin\phi & 0 \end{pmatrix}$$

Знаем, что и физически существует разница. Расмотрим стрелочку, которая смотрела бы вдоль оси OX. Сначала перевернем ее, потом повернем ее на 90 градусов. Стрелочка будет смотреть вверх. Если совершить действия наоборот (сначала повернут, потом перевернуть), то стрелочка будет смотреть вниз.

Показано понятие антикоммутации. Минимальное, чтобы проходила нетривиально коммутация, нужна матрица, хотя бы 2 на 2. Если использовать просто числа, то они будут коммутировать друг с другом.

Существует такой объект – грасмановые переменные. Грасманова алгебра – совокупность переменных, которые антикоммутируют. Значит

$$(a,b) = -(b,a)$$

Вспомним оператор координат импульса.

$$\hat{x} = x$$
$$\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$
$$[x,p] = i\hbar$$

Рассмотрим, имеют ли отношение данные записи к линейной алгебре. В квантовой механике, в исходной формулировке, операторы действуют на бесконечномерном пространстве. Пространство конечной размерности – это приближение. Значит по физическим причинам остаются несколько состояний бесконечномерного пространства и ограничиваемся только ими.

Пусть есть потенциал с уровнями энергии. Знаем, что не слишком далеко от нижнего состояния наша система отходит. Поэтому можно взять в качестве базиса группу состояний, которые низко по энергии лежат, а остальные отбросить. В таком случае, вместо алгебраических операторов, действующих на функции, в конечномерном пространстве возникают матрицы. Они образуются из соответствующих средних. Значит, пусть есть первые четые уровня энергии (0, 1, 2, 3). Тогда оператор будет задаваться следующим образом:

$$\begin{pmatrix} x_{00} & x_{01} & x_{02} & x_{03} \\ x_{10} & x_{11} & x_{12} & x_{13} \\ x_{20} & x_{21} & x_{22} & x_{23} \\ x_{30} & x_{31} & x_{32} & x_{33} \end{pmatrix}$$

где каждый матричный элемент - соответствующий интеграл

$$x_{01} =< 0|x|1 >= \int \Psi_0^*(x) x \Psi_1(x) dx$$

Сопоставляем каждому оператору организованную матрицу в заданном базисе и в итоге этим базисом будем ограничиваться.

Пусть есть конечномерный базис, два оператора A и B. Вычислим их коммутатор:

$$([A,B])_{ij} = \sum (A_{ij'} B_{i'j} - B_{ij'} A_{i'j})$$

Определим след такой матрицы:

$$Tr([A,B]) = \sum (A_{ii'} B_{i'i} - B_{ii'} A_{i'i}) = 0$$

Получаем, что след любой конечномерной матрицы равен 0. Это является ощутимой разницей конечномерного и бесконечномерного пространства.

Введем в рассмотрение три матрицы Паули.

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

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

Это хорошие симметричные объекты, все три эрмитовы. На языке матриц эрмитов означает, что сопряженная на транспонированную матрицы равна самой матрице. Существует четвертая матрица - единичная σ_0.

Вычисление коммутаторов и степеней операторов

Рассмотрим вычисление коммутаторов и степеней операторов. Пусть есть два оператора A и B.

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

$$\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A} + \lambda$$

$$[\hat{A}^2,\hat{B}^2] = \hat{A}\hat{A}\hat{B}\hat{B} - \hat{B}\hat{B}\hat{A}\hat{A} = \hat{A}(\hat{B}\hat{A}+\lambda)\hat{B} - \hat{B}\hat{B}\hat{A}\hat{A} = \hat{A}\hat{B}\hat{A}\hat{B} + \hat{A}\lambda\hat{B} - \hat{B}\hat{B}\hat{A}\hat{A} =$$

$$= (\hat{B}\hat{A}+\lambda)(\hat{B}\hat{A}+\lambda) + \lambda\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{B}\hat{A}\hat{A} = \hat{B}\hat{A}\hat{B}\hat{A} + \lambda\hat{B}\hat{A} + \lambda\hat{B}\hat{A} + \lambda^2 + \lambda\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{B}\hat{A}\hat{A} =$$

$$= \hat{B}\hat{B}\hat{A}\hat{A} + \lambda\hat{B}\hat{A} + 2\lambda\hat{B}\hat{A} + \lambda^2 + \lambda\hat{B}\hat{A} + \lambda^2 - \hat{B}\hat{B}\hat{A}\hat{A} = 4\lambda\hat{B}\hat{A} + 2\lambda^2$$

Выведем соотношение неопределенностей. Рассмомтрим два оператора: X и Y. Для них существует коммутатор $[\hat{X},\hat{Y}] = i\hat{Z}$. Для простоты будем считать, что среднее значение X и Y равно 0:

$$<\Psi|X|\Psi>= 0$$
$$<\Psi|Y|\Psi>= 0$$

В данном случае интересует произведение средних квадратов операторов X и Y. Чтобы получить соотношение неопределенностей, надо стартовать с тривиального утверждения: норма любого вектора положительна, то есть скалярное произведение вектора на сого себя всегда будет больше 0. Возьмем вектор вида:

$$<((\hat{X}+i\lambda\hat{Y})\Psi)|(\hat{X}+i\lambda\hat{Y})|\Psi)>\geqslant 0$$

По определению сопряженного оператора переписываем:

$$<\Psi|(\hat{X}-i\lambda\hat{Y})(\hat{X}+i\lambda\hat{Y})|\Psi)>\geqslant 0$$

$$<\Psi|(\hat{X}\hat{X}+\lambda^2\hat{Y}\hat{Y}+\lambda\hat{X}\hat{Y}-\lambda i\hat{Y}\hat{X})|\Psi)>=$$

$$=<\Psi|\hat{X}^2|\Psi> +\lambda^2 <\Psi|\hat{Y}^2|\Psi> +\lambda <\Psi|\hat{Z}|\Psi>$$

$$D =<\Psi|\hat{Z}|\Psi>^2= \lambda <\Psi|\hat{Y}^2|\Psi><\Psi|\hat{X}^2|\Psi><0$$

Если бы средние значения не были бы равны 0, то вводим новый оператор

$$\triangle\hat{X} = \hat{X} - \bar{X}$$

$$D =<\Psi|\hat{Z}|\Psi>^2= \lambda <\Psi|(\hat{\triangle}Y)^2|\Psi><\Psi|(\hat{\triangle}X)^2|\Psi><0$$

В итоге получаем, что среднее по любому состоянию

$$<\Psi|\triangle Y^2|\Psi><\Psi|\triangle X^2|\Psi>\geqslant \frac{<\Psi|\hat{Z}|\Psi>^2}{4}$$

$$<\triangle\hat{x}^2><\triangle\hat{p}^2>\geqslant \frac{\hbar^2}{4}$$

Последнее выражение – соотношение неопределенности Гейзенберга.

Стационарное уравнение Шредингера

$$A|\Psi>=\lambda|\Psi>$$

Это – стационарное уравнение Шредингера. Ψ – собственный вектор, а λ – собственное значение. Требование того, что волновая функция стационарного состояния есть собственная функция гамильтониана системы. Собственные знаения – это энергия. Для эрмитовых операторов они действительны, поэтому и энергия получается действительной.

Оператор проектирования на заданный собственный вектор Ψ обозначается, как внешнее произведение:

$$P_{|\Psi>} = \Psi><\Psi$$

Соответствует матрица:

$$(P_{|\Psi>})_{ij} = \Psi_i^*\Psi_j$$

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

Вычислим квадрат оператора проектирования. Если есть вектор, то из него можно сделать скаляр – норму.

$$< \Psi_1 | \Psi_2 >= \sum \Psi_{1i}^* \Psi_{2j}$$

$$(\Psi_1 >< \Psi_2)_{ij} = \Psi_{2i}^* \Psi_{1j}$$

Пусть есть плоскость 2 на 2 (двумерная).

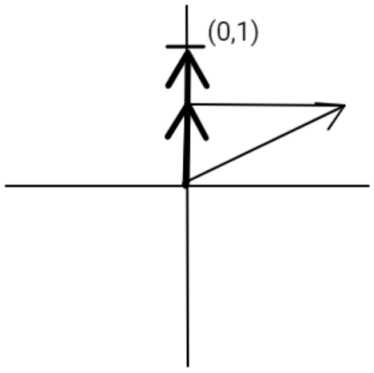

Рис. 4.2. Двумерная плоскость с вектором на оси OY

Вектор единичной длины выходит из начала вдоль оси OY. Также есть другой вектор, которй нужно спроектировать. Проекцией одного вектора на другой - перпендикуляр на ось OY. Если такой вектор имеет координаты (X,Y), то проекцией будут кординаты $(0,Y)$.

Пусть есть плоскость и вектор лежащий в этой плоскости.

Спроектируем другой вектор на вектор n. Опустим перпендикуляр на него и получим проекцию. Как найти эту проекцию? Проекция будет направлена вдоль вектора n. Тогда, можно предположить, что длина вектора равна какому-то числу умноженному на длину вектора n.

$$\vec{n}(\vec{n}x)$$

Оператор проекции:

$$P_{\vec{n}} = \vec{n}\vec{n}$$

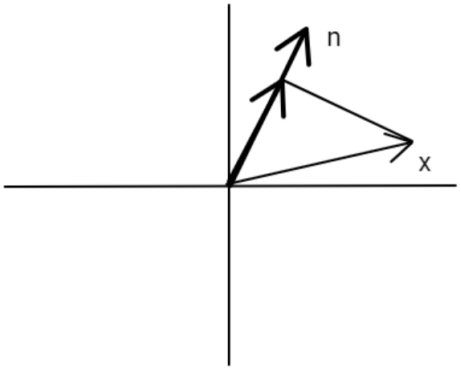

Рис. 4.3. Двумерная плоскость с вектором в плоскости

Получаем произведение ковариантного и коинвариантного векторов.

$$(P_{\vec{n}}x)_i = n_i \sum n_j x_j$$

Если один раз спроектировать вектор на заданное направление и второй раз спроектировать то, что получилось, туда же, то ничего не изменится.

$$\hat{p}^2 = \hat{p}$$

Получаем

$$P^2_{|\Psi>} = |\Psi >< \Psi|\Psi >< \Psi|$$
$$< \Psi|\Psi >= 1$$
$$P^2_{|\Psi>} = |\Psi >< \Psi| = p$$

Установим, какие у оператора пректирования собственные значения. По определению $\lambda X = pX$. В итоге получим значения 0, 1.

$$\lambda\Psi = p\Psi$$
$$\hat{p}^2 = \hat{p}$$
$$\lambda^2 = \lambda$$
$$\lambda = 0, 1$$

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

Геометрический смысл итогового значения – есть один вектор, на который мы проектируем, то есть переходит сам в себя $\lambda = 1$ и есть вектора, в количестве размерность пространства $n-1$, которые будут ортогональны вектору, на который мы проектируем. Результат проекции будет равен 0, поэтому и собственное значение будет равно 0.

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

Семинар 5. Одномерное движение

Пусть есть матрица

$$A = \begin{pmatrix} e_0 & V \\ V^* & e_1 \end{pmatrix},$$

где e_0, e_1 - действительные числа, а V - комплексное число. Требуется найти собственные векторы и собственные значения. Решения на собственные значения будут находится из

$$A\vec{x} = \lambda\vec{x}$$

Нетривиальное решение однородной системы имеет, если детерминант $A - \lambda = 0$.

$$(e_0 - \lambda)(e_1 - \lambda) - VV^* = 0$$

$$\lambda^2 - (e_0 + e_1)\lambda + e_0 e_1 - VV^* = 0$$

$$D = (e_0 + e_1)^2 + 4VV^* - 4e_0 e_1 = (e_0 - e_1)^2 + 4VV^* \geqslant 0$$

$$\lambda_{0,1} = \frac{1}{2}(e_0 + e_1 \pm \sqrt{(e_0 - e_1)^2 + 4VV^*}$$

Если рассмотреть зависимость собственных значений от $|V|$, то начинаются они с e_0 и e_1. Если $V = 0$, то матрица диагональна - есть собственные значения. После этого начинается квадратичная зависимость. Если V мало, то корень надо раскладывать и первая поправка будет пропорциональна

$$\frac{|V|^2}{(e_0 - e_1)^2}$$

При больших значениях V второе слагаемое будет большим и в итоге будет $\pm V$.

Это очень физический график, который часто возникает в жизни. Если есть два уровня, которые определяют физику системы по тем или иным причинам, и есть некое возмущение V, которое эти состояния смешивает, то есть не делает их чистыми

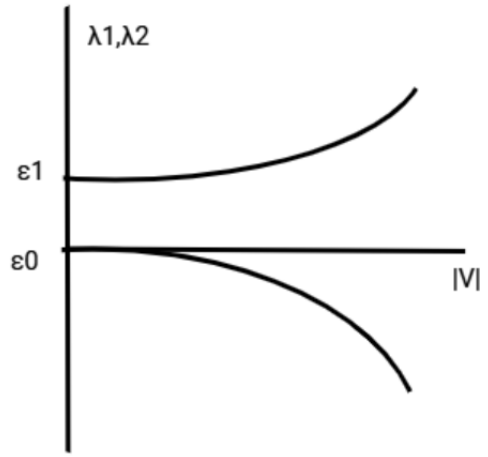

Рис. 5.1. Зависимость собственных значений от $|V|$

состояниями с энергиями e_0 и e_1. Именно в этом случае возникает такая картинка – расталкивание уровней.

Для того, чтобы найти собственные векторы, надо взять полученное значение λ и подставить в уравнение $A\vec{x} = \lambda\vec{x}$.

Одномерное движение

Рассмотрим одномерное движение. Пусть есть кусочно-постоянный потенциал.

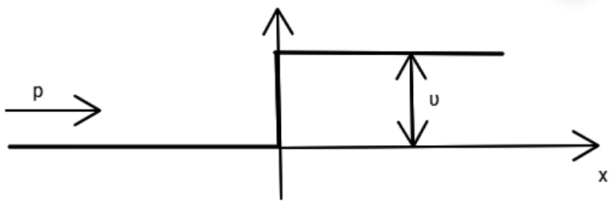

Рис. 5.2. Кусочно-постоянный потенциал

При $x < 0$ потенциал будет равен 0, а при $x > 0$ потенциал будет равен U. Из минус бесконечности вылетает частица с импульсом p и с энергией $\frac{p^2}{2m}$.

Выполняется стационарное уравнение Шредингера

$$E\Psi(x) = H\Psi(x)$$

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

В каком виде будем искать волновую функцию? В области слева

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

$$\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

$$\Psi_L = e^{\frac{ipx}{\hbar}}$$

Получаем уравнение для бегущей плоской волны. Но, физически, частица налетает на стенку. Стенка очень высокая. Частица в таком случае отразиться от стенки. Математически отраженная частица задается уравнением вида:

$$\Psi_L = e^{\frac{ipx}{\hbar}} + be^{-\frac{ipx}{\hbar}}$$

В области справа

$$\Psi_R = e^{\frac{iqx}{\hbar}}$$
$$\frac{q^2}{2m} + U = \frac{p^2}{2m}$$
$$q = \sqrt{(E-U)2m}$$

Обратной волны в этой области нет, так как нет источников в плюс бесконечности.

В итоге получаем две неизвестных b, c. Чтобы найти их, вспомним условие сшивки в точке скачка потенциала.

$$\Psi_L(0) = \Psi_R(0)$$

$$\frac{\partial}{\partial x}\Psi_L(0) = \frac{\partial}{\partial x}\Psi_R(0)$$

$$\frac{\partial}{\partial x}\Psi_R = \frac{iq}{\hbar}ce^{\frac{iqx}{\hbar}}$$

$$\frac{\partial}{\partial x}\Psi_L = \frac{ip}{\hbar}e^{\frac{ipx}{\hbar}} - b\frac{ip}{\hbar}e^{-\frac{ip}{\hbar}}$$

$$c = 1 + b$$

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

$$c\frac{iq}{\hbar} = \frac{ip}{\hbar} - b\frac{ip}{\hbar}$$

$$cq = p - bp$$

$$q(1+b) = p - bp$$

$$q + qb = p - bp$$

$$b(q+p) = p - q$$

$$b = \frac{p-q}{p+q}$$

$$c = \frac{p+p}{p+q} = \frac{2p}{p+q}$$

Оценим величину коэффициента отражения $|b|^2$. Это квадрат модуля амплитуды отраженной волны.

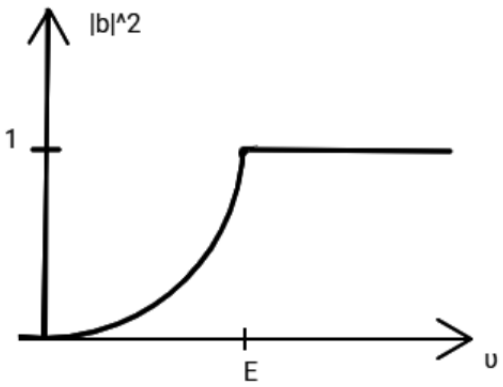

Рис. 5.3. Зависимость квадрата модуля амплитуды от энергии

Если значение U велико, то есть больше, чем значение E, то под барьер частица в квантовой механике может проникнуть, но волновая функция оказывается экспоненциально спадающей, q – чисто мнимое, отрицательная величина под корнем. Соответственно, значение $|b|$ – в числителе действительное число минус мнимое, а в знаменателе их сумма. В итоге получаем 1.

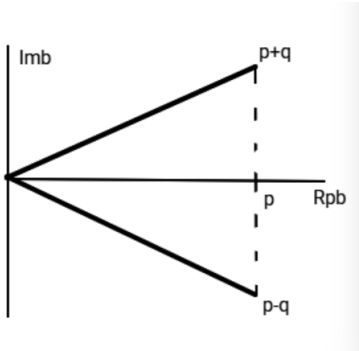

Рис. 5.4. Два вектора на комплексной плоскости

Это два одинаковых по модулю вектора на комплексной плоскости. Значит $|b|$ - отношение равных чисел или модулей - единица. Частица с вероятностью 1 отражается от стенки.

Далее q становится действительной величиной и по мере того, как U уменьшается отходя от значения E, q будет становиться все больше и больше. Таким образом, числитель будет уменьшаться, а знаменатель увеличиваться. Изменение происходит корневым образом. В конце концов, в точке $U = 0$ барьер должен пропасть и отражение от него должно пропасть.

В области при $U < 0$. Частица летит и вместо барьера встречает падающую ступеньку.

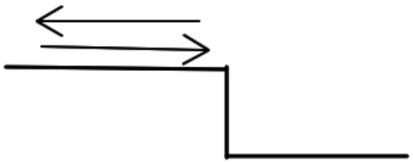

Рис. 5.5. Падающая ступенька

Формулы будут показывать, что для значения q под корнем находится величина большая, чем значение E. Таким образом числитель будет менять знак в точке 0, но 0 равен не будет. Знаменатель тоже остается конечным. Значит, на уровне квадрата смена знака ничего не значит. Неожиданным образом вероятность отразиться от антистенки, ступеньки, с которой частица падает тоже не равна 0. Это особенность волновой природы частиц. Даже в ситуации, когда классическая частица просто свалилась с единичной вероятностью, квантовая частица может вернуться. Даже если взять большую величину ступени, то вероятность все равно в 0 не будет обращаться.

Если же U устремить к минус бесконечности, q тогда окажется много больше p и вероятность отразиться опять будет единичная. В итоге получаем некий парадокс (см. Рис. 5.6).

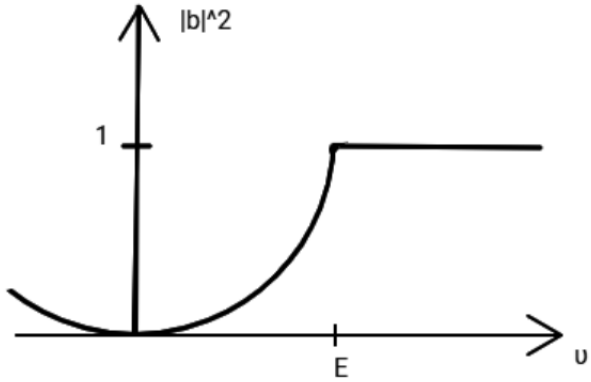

Рис. 5.6. Полная зависимость квадрата модуля амплитуды от энергии

В жизни идеально прямоугольных барьеров не существует. Если его немного скруглить, сделать плавным, то единичная вероятность отразиться от антибарьера, антистенки, на минус бесконечности пропадет. Чем глаже его будем делать, тем меньше будут квантовые эффекты. Если по сравнению с характерной длиной волны Де Бройля ширина барьера будет большая, то будет классика. Пропадет отражение от стенки.

Задача о потенциальной яме конечной глубины

Следующая задача для рассмотрения – о потенциальной яме конечной глубины.

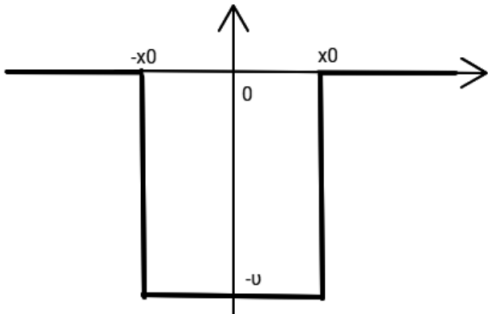

Рис. 5.7. Потенциальная яма конечной глубины

Помним, что решение в этой задаче обладают определенной четностью. Потенциал четный, а решения будут либо четные, либо нечетные. Это условие на много упрощает.

Волновую функцию на интервале с неизменным потенциалом можно записать, как стоячую волну. Запись математическая четности – косинус, нечетности – синус.

Тогда для четных волновая функция в середине промежутка от $-x_0$ до x_0

$$\Psi(-x_0 < x < x_0) = coskx$$

Если знаем энергию состояния, которая в наших условиях отрицательная и равна $-E$

$$-U < E < 0 \Rightarrow \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E + U = E_{\text{кин}}$$

При

$$\Psi(x > x_0) = ae^{-qx}$$
$$\frac{\hbar^2 q^2}{2m} = -E$$

Если

$$\Psi(x < x_0) = ae^{qx}$$
$$\frac{\hbar^2 q^2}{2m} = -E$$

Тогда для нечетных волновая функция в середине промежутка от $-x_0$ до x_0

$$\Psi(-x_0 < x < x_0) = sinkx$$
$$\Psi(x > x_0) = ae^{-qx}$$
$$\Psi(x < x_0) = -ae^{qx}$$

Задача состоит в том, чтобы в точке x_0 написать условие непрерывности волновой функции и ее производной. Достаточно использовать только одну точку, на $-x_0$ будет аналогичное решение. Тогда получится система уравнений, которую надо анализировать.

$$ae^{-qx_0} = coskx_0$$

$$-qae^{-qx_0} = -ksinkx_0$$

Так как интересует в первую очередь спектр, а не конкретный вид волновых функций, нужно избавиться от коэффициента a. Поделим второе уравнение на первое:

$$q = ktgkx_0$$

Знаем, что обе переменные q и k выражаются через энергию. Поэтому получили уравнение, определяющее энергии четных состояний. Для нечетных состояний:

$$ae^{-qx_0} = sinkx_0$$

$$-qae^{-qx_0} = -kcoskx_0$$

$$q = -kctgkx_0$$

В итоге получаются транцендентные уравнения. Поймем, как выглядит спектр решений.

$$\frac{q}{k} = tgkx_0$$

$$\frac{q}{k} = -ctgkx_0$$

$$\frac{\hbar^2 q^2}{2m} = -E$$

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E + U$$

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = U - \frac{\hbar^2 q^2}{2m}$$

$$q = \frac{\sqrt{2m(-\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + U)}}{\hbar}$$

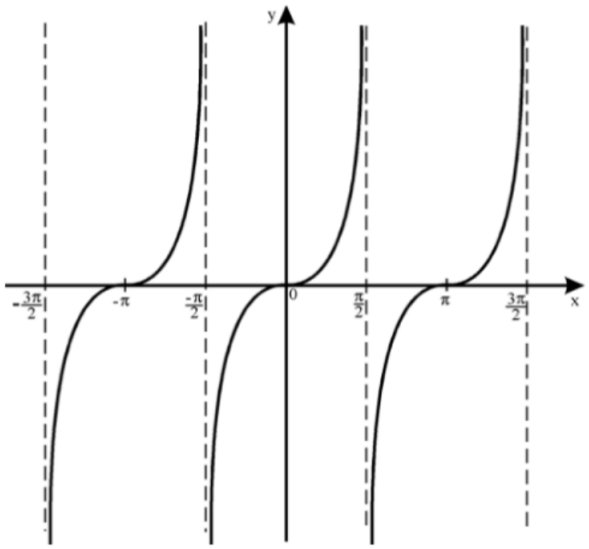

Рис. 5.8. График тангенса

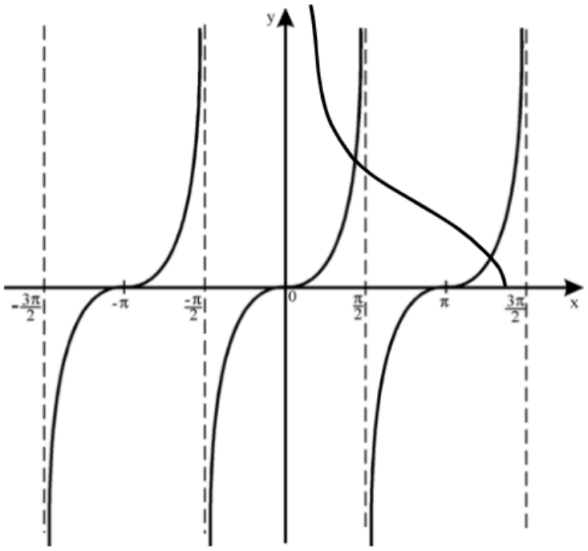

Рис. 5.9. Вид кривой, перекающей график тангенса

Посмотрим, как при изменении k будет меняться значение q. При $k = 0$ $q = \text{const}$. Если увеличим k, то корень будет уменьшаться. В итоге вид кривой:

Полученная кривая будет обрываться в какой-то точке. Обязательно пересечет по крайней мере хотя бы одну, первую, ветвь тангенса. Значит она будет расти из плюс бесконечности к 0 по оси тангенса. Может бы такая кривая будет пересекать следующую ветвь.

Если добавить котангенс, то частота увеличится вдвое (см. Рис. 5.10).

Какой сделаем вывод? Существует конечное количество уровней, определяемое тем, куда кривая добирается. Один уровень есть всегда. Этот уровень булет определяться величиной U. Чем глубже яма, тем кривая шире, тем больше уровней она пересечет.

Итак, выяснили, что в прямоугольной яме конечной глубины всегда есть хотя бы один уровень и возможно есть еще конечное число каких-то уровней. Вопрос: можно ли написать аналитически при каком значении U появляется следующий уровень.

$$m, x_0 \to ?U$$

Рассмотрим первый уровень, который есть всегда. На самом деле, если вспомнить оценку из соотношения непределенностей, то утверждение, что всегда есть уровень находится в кажущемся противоречии с этой оценкой. Если энергия у частицы маленькая, она ограничена величиной $-U$. Эта частица так же влезает в яму конечного размера. Энергия маленькая – неопределенность по импульсу. Определяется это энергией: чем меньше энергия, тем больше должна становиться волновая функция.

Установлено, что волновая функция не будет влезать в эту яму конечной глубины. Значит она будет очень сильно вылезать за пределы этой ямы. Соответствующее решение в области малых U имеет вид маленького кусочка косинуса и двух очень длинных хвостов. Медленно, экспоненциально, кусочки с очень маленьким значением

Рис. 5.10. Вид кривой, пересекающей графики тангенса и котангенса

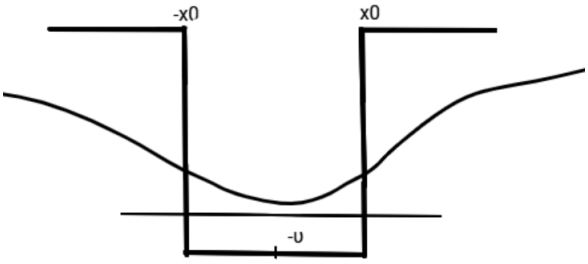

Рис. 5.11. Энергия, находящаяся в потенциальной яме

q спадают так, что основная вероятность найти эту частицу сосредоточена в областях вне ямы. А сама яма на фоне очень сильно делокализованной волновой функции маленькая. В пределе очень мелкой ямы, ширина ямы оказывается много меньшей по ставнению с характерным размером состояния, по сравнению с неопределенностью координаты.

$$U \to 0 \Rightarrow <\triangle x^2 >>> x_0$$

Нарисуем яму в масштабе.

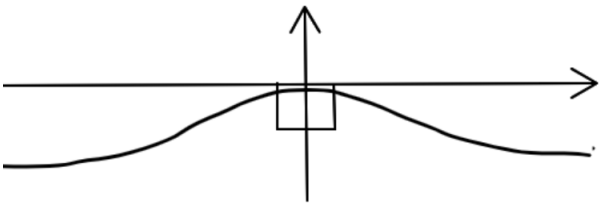

Рис. 5.12. Энергия, находящаяся в мелкой отенциальной яме

Представим последовательность таких систем. При этом все больше уменьшаем глубину ямы. Волновая функция будет все больше расширяться и есть каждый раз рисовать ее в масштабе, то волновая функция в яме будет сужаться. Таким образом, если за естественный масштаб выбрать масштаб, в которм меняется волновая функция, то в пределе мелкой ямы - яма очень узкая. Самая узкая функция, которую знаем, - это дельта-функция. Математичеки - ядро единичного оператора, физически - высокий, узкий пик, который не имеет ширины.

$$\delta(x - x_0) \to 0, x \neq x_0$$
$$\int \delta(x - x_0) dx = 1$$

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

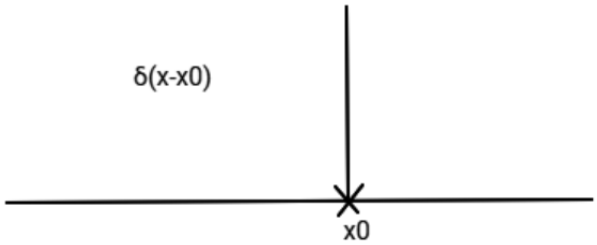

Рис. 5.13. Узкой пик, не имеющий ширины

В пределе мелкой ямы на масштабе волновой функции - это дельта-яма.

$$U(x) = -W\delta(x)$$

Как только написали дельта-функцию, фактически забываем про все внутреннее устройство ямы, о ее прямоугольности, конкретные длину и ширину. В данном случае интересует то, что интеграл по x от потенциала будет равен $-W$ и тот факт, что при удалении от 0 потенциал быстро оказывается равным 0. В середине будет все, что угодно. Нам не нужно занимать сшивкой область внутри прямоугольника. Поэтому зададим новые условия сшивки.

$$E\Psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x) - W\delta(x)\Psi(x)$$

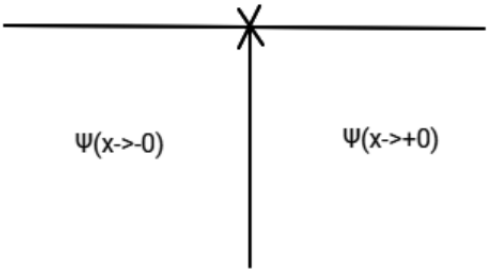

Рис. 5.14. Узкая яма с заданными волновыми функциями

Выберем две точки: одна чуть слева от ямы, другая чуть справа. Между ними заданное уравнение Шредингера проинтегрируем.

$$-\delta(x)...\delta(x)$$

$$-W\int\delta(x)\Psi(x)dx=-W\Psi(0)$$

$$E\int\Psi(x)dx\to 0$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x)dx=\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x)\Big|_{-\delta(x)}^{\delta(x)}$$

$$\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x)(x\to+0)=\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x)(x\to-0)-\frac{2mW}{\hbar^2}\Psi(0)$$

При этом получаем новый тип сшивки — скачок производной пропорционален значению функции в этой точке умноженной на коэффициент, величину дельта-ямы.

$$E\Psi(x)=\frac{\hat{p}^2}{2m}\Psi(x)-W\delta(x)\Psi(x)$$

Слева и справа от дельта-функции волна имеет вид экспоненты:

$$\Psi(x<0)=e^{qx}$$
$$\Psi(x>0)=e^{-qx}$$

Скачок производной можно записать

$$-q=q-\frac{2mW}{\hbar^2}$$
$$q=\frac{mW}{\hbar^2}$$

Получили уровень энергии в мелкой яме.

Существует различие мелкой ямы и дельта-функции. Это разные вещи. Дельта-функция — это нечто высокое или глубокое, по сравнению с энергией состояния, и узкое по сравнению с тем состоянием, которое получается. Энергия основного состояния стремится к 0 быстрее, чем глубина этой ямы.

Семинар 6. Прохождение частиц через барьеры

Задача о прохождении частицы через один барьер

Поговорим о прохождении частиц через барьеры. Если вспомнить про тунельный эффект квазиклассической экспоненты. Когда частица пролетает через барьер, который является достаточно широким по сравнению с длиной волны Де Бройля частицы.

Рис. 6.1. Барьер для частицы

Тогда экспоненту можно записать в виде:

$$e^{-\int \frac{\sqrt{2m(U(x)-E)}dx}{\hbar}}$$

Рассмотрим противоположный предел. Частица движется и пролетает очень узкий, но высокий барьер (дельта-функциональный барьер).

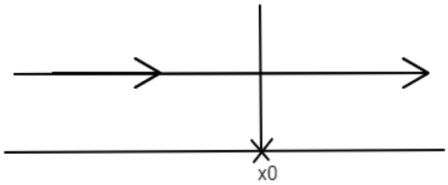

Рис. 6.2. Высокий барьер для частицы

$$U(x) = W\delta(x)$$

Барьер сидит в координате 0. Технически известно, что происходит. Первая производная волновой функции ломается. Если проходим через дельта-функцию, то скачок происходит во второй производной:

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

$$\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x=+0)-\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x=-0)=\frac{2mW\Psi(x=0)}{\hbar^2}$$

Если W отрицательная, то волновая функция будет себя вести:

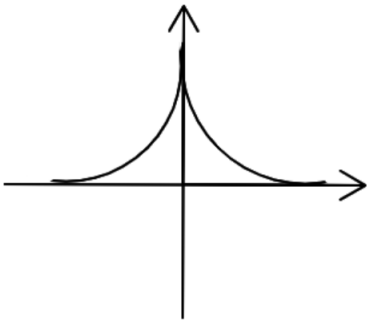

Рис. 6.3. Волновая функция

При положительных x значение $\frac{\partial}{\partial x}\Psi$ будет отрицательным, а при отрицательных x, наоборот. Значит, раность будет отрицательная и W тоже.

На дельта-яме (дельта-барьере) уравнение от знака W зависеть не может. Физически будем рассматривать другую задачу.

Пусть есть частица с массой m и энергией E, которая налетает из минус бесконечности. Она частично отражается и частично пролетает. Таким образом, получаем три волны: с единичной амплитудой, бегущей из минус бесконечности, отраженная с какой-то амплитудой и прошедшая с какой-то амплитудой. Соотношения между такими амплитудами можно найти из уравнения

$$\Psi(x=+0)=\Psi(x=-0)\equiv\Psi(x=0)$$
$$E=\frac{p^2}{2m}$$
$$E=\frac{q^2}{2m}+W\delta(x)$$
$$p=q$$

$$\Psi_L=e^{\frac{ipx}{\hbar}}+be^{\frac{-ipx}{\hbar}}$$
$$\Psi_R=ce^{\frac{iqx}{\hbar}}=ce^{\frac{ipx}{\hbar}}$$

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

$$1+b=c$$
$$-(\frac{ip}{\hbar}-b\frac{ip}{\hbar})+c\frac{ip}{\hbar}=$$
$$=-\frac{ip}{\hbar}+(c-1)\frac{ip}{\hbar}+c\frac{ip}{\hbar}-2m\frac{W}{\hbar^2}c$$
$$-\frac{ip}{\hbar}+c\frac{ip}{\hbar}-\frac{ip}{\hbar}+c\frac{ip}{\hbar}=\frac{2mWc}{\hbar^2}$$
$$cip-\frac{mWc}{\hbar}=ip$$
$$c(ip-\frac{mW}{\hbar})=ip$$
$$c=\frac{ip\hbar}{ip\hbar-mW}$$
$$|c|=\frac{|ip\hbar|^2}{|ip\hbar-mW|^2}=\frac{p^2\hbar^2}{m^2W^2+p^2\hbar^2}=\frac{1}{1+\frac{m^2W^2}{p^2\hbar^2}}$$

Увидели, что частица даже от очень высокого потенциального барьера отражается не 100%, есть коэффициент прохождения. Если же это достаточно узкий барьер, то возможно стремление к 100%. Если рассмотреть предел очень узкого барьера, такого, что волновая функция под ним меняется не существенно. Тогда коэффициент отражения имеет гауссовый вид. Не важно барьер это или яма с W, входящей, как квадрат. Такая формула позволяет увидеть тунельную экспоненту, которая является экспонентой в пределе для достаточно широкого барьера. Если он не значимый, то экспоненты никакой не будет. В 99% случаев коэффициент тунеллирования мал. Приближение работает хорошо и получаем экспоненциальную зависимость от ширины барьера.

Задачи о прохождении частицы через несколько барьеров

Рассмотрим задачи с несколькими барьерами, находящимися на заданном расстоянии друг от друга.

Это предельный случай — гребенка с бесконечным количеством барьеров, находящимся на одном и том же расстоянии d друг от друга. В такой структуре, хоть и нужно преодолеть большое количество барьеров, частица может свободно «путешествовать».

$$U=\sum_n W\delta(x-nd)$$

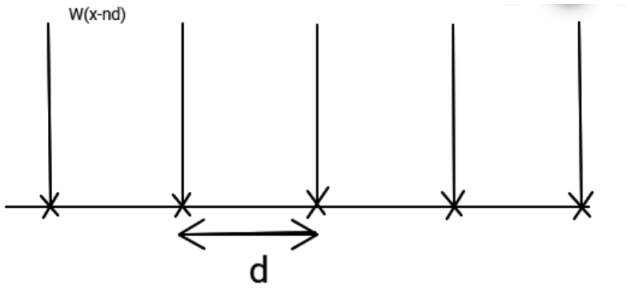

Рис. 6.4. Несколько барьеров для частицы

Подумаем, как могут выглядеть волновые функции стационарных состояний в такой системе. Выберем конкретный промежуток — между двумя соседними барьерами. То для него волновая функция будет выглядеть

$$x_n = nd \ldots x_{n+1} = (n+1)d$$
$$\Psi(x_n < x < x_{n+1}) = ae^{\frac{ipx}{\hbar}} + be^{\frac{-ipx}{\hbar}}$$

Рассматриваем систему с периодическим потенциалом. Значит волновая функция в основных состояниях устроена так, физические свойства n и $n-1$ интервалов не отличаются. В этом случае волновые функции отличаются только на фазовый множитель, по модулю равный единице.

$$\Psi(x) = e^{i\kappa}\Psi(x-d)$$

Волновая функция в окрестности x_n скачка (дельта-барьера)

Рассмотрим, как ведет себя волновая функция в окрестности x_n скачка (дельта-барьера). Волновая функция справа

$$\Psi(x_n) = ae^{\frac{ipnd}{\hbar}} + be^{\frac{-ipnd}{\hbar}} = (ae^{\frac{ip(n+1)d}{\hbar}} + be^{\frac{-ip(n+1)d}{\hbar}})e^{i\kappa}$$

С другой стороны:

$$a\frac{ip}{\hbar}e^{\frac{ipnd}{\hbar}} - b\frac{ip}{\hbar}e^{\frac{-ipnd}{\hbar}} - (a\frac{ip}{\hbar}e^{\frac{ip(n+1)d}{\hbar}} - b\frac{ip}{\hbar}e^{\frac{-ip(n+1)d}{\hbar}})e^{i\kappa} = \frac{2mW}{\hbar^2} = \Psi(x_n)$$

Для упрощения введем замену:

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

$$a_n = ae^{\frac{ipnd}{\hbar}}$$
$$b_n = ae^{-\frac{ipnd}{\hbar}}$$

Получаем систему из двух уравнений с друмя однородными неизвестными. Условие существования нетривиальных решений - это обращение в 0 детерминанта соответсвующей матрицы.

$$\lambda \equiv \frac{pd}{\hbar}$$
$$(e^{-i\kappa} - e^{(}i\lambda))(-e^{-i\kappa} + e^{(} - i\lambda) - \frac{2mW}{i\hbar p}e^{-i\kappa}) = (e^{-i\kappa} - e^{(} - i\lambda))(e^{-i\kappa} - e^{(}i\lambda) - \frac{2mW}{i\hbar p}e^{-i\kappa})$$
$$-e^{-2i\kappa}(1 + \frac{2mW}{ip\hbar}) - 1 + e^{i(-\kappa-\lambda)} + e^{i(\lambda-\kappa)}(1 + \frac{2mW}{ip\hbar}) =$$
$$= e^{-2i\kappa}(1 - \frac{2mW}{ip\hbar}) + 1 - e^{i(-\kappa+\lambda)} + e^{-i(\kappa+\lambda)}(1 - \frac{2mW}{ip\hbar})$$
$$-e^{-2i\kappa} - 1 + e^{i(-\kappa-\lambda)} + e^{i(\lambda-\kappa)}(1 + \frac{2mW}{ip\hbar}) = e^{-2i\kappa} + 1 - e^{i(-\kappa+\lambda)} - e^{-i(\kappa+\lambda)}(1 - \frac{2mW}{ip\hbar})$$

Домножим все уравнение на $e^{i\kappa}$

$$-4cos\kappa + e^{-i\lambda} + e^{i\lambda}(1 + \frac{2mW}{ip\hbar}) = -e^{i\lambda} - e^{-i\lambda}(1 - \frac{2mW}{ip\hbar})$$
$$-4cos\kappa + 4cos\lambda = -\frac{4mW}{\hbar p}sin\lambda$$
$$cos\kappa = cos\lambda + \frac{mW}{\hbar p}sin\lambda$$

Как найти κ, если задано значение λ?

$$\lambda \equiv \frac{pd}{\hbar}$$

Нарисуем график, как ведет себя правая часть уравнения.

В итоге получаем график синуса с произвольной фазой. Амплитуда синуса по сравнению с единицей будет больше.

Знаем, что косинус – функция, меняющая значение от -1 до 1. κ по определению действительное число, так как определяет вращение фазы. Таким образом, корни уравнения будут существовать в тех областях, где функция лежит между -1 и 1 и

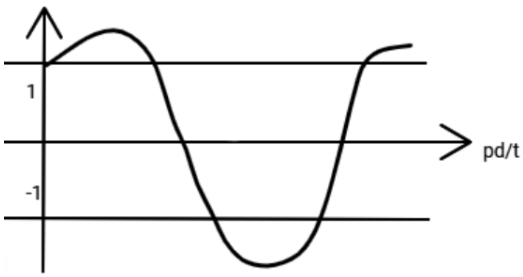

Рис. 6.5. График поведения правой части уравнения

отсутствует в областях, где правая часть по модулю больше, чем 1. Получаем новый тип спектра. Он вроде бы непрерывный, но не на всей области $E > 0$, как рассматривали ранее для частицы в свободном пространстве. В данном случае образуются зоны, интервалы, в которых функция будет вести себя непрерывно. Приходим к важному выводу: для частицы движущейся в периодическом потенциале существуют разрешенные (состояния есть) и запрещенные (состояний нет) зоны энергии. Такое представление о перемежающихся на энергетической шкале разрешенных и запрещенных зонах - краеугольный камень в одноэлектронной теории твердого тела (зонной теории).

Физический смысл запрещенных зон известен в оптике: через слоистую структуру волна может распространяться, если половина длины волны не подходит близко к периоду слоистой структуры (условие Брегга).

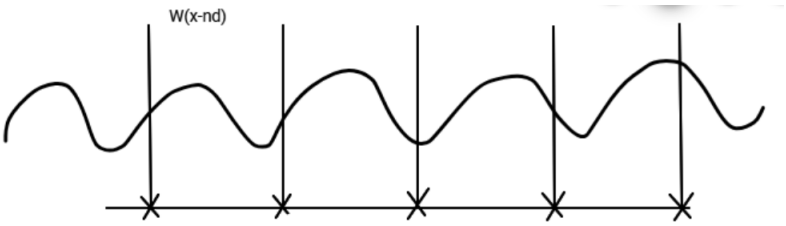

Рис. 6.6. Период слоистой структуры

Пусть есть небольшие дельта-барьеры такие, что от каждого из них отражаются немного частиц. Отразившись от последнего, волна скрадывается с предпоследней и т.д. до самого начала отражения. Совершенно ясно, что если целый период волны укладывается на удвоенный период, волна набирает 2π, то отраженные волны будут складываться конструктивно. Таким образом, амплитуда вероятности (интенсивности) бегущей направо волны будет некогерентно складываться, то есть сильно растет отраженная волна. Если сложение действительно когерентно, то столь глубого в сло-

истую структуру падающая волна пройти не может. Это является вербальным объяснением появления запрешенных зон. Появляются они вблизи точек, определяемых условием Брегга (удвоенный период длины волны).

Семинар 7. Движение в центральном поле

Физика атома водорода

Рассмотрим физику атома водорода – движение в центральном поле оператора момента. Запишем оператор момента через простейшие функции:

$$\hbar\hat{l} = [r \times p]$$

$$\hbar l_x = yp_z - zp_y$$

Посчитаем коммутаторы $[l_z, p_x]$ и $[l_z, p_y]$

$$\begin{vmatrix} i & j & k \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix}$$

$$l_z = xp_y - yp_x$$

$$[p_x, x] = -i\hbar$$

$$p_x x = xp_x - i\hbar$$

$$[l_z, p_x] = \hat{l}_z\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{l}_z = (xp_y - yp_x)p_x - p_x(xp_y - yp_x) = xp_yp_x - p_xxp_y =$$

$$= xp_yp_x - xp_xp_y + i\hbar p_y = i\hbar p_y$$

Аналогично получить можно следующий коммутатор:

$$[l_z, p_y] = -i\hbar p_x$$

Для определения важно так же помнить, что

$$\hat{l}_z = -i\frac{\partial}{\partial p}$$

Соответственно собственные функции оператора убывает с углового момента на ось Z и выглядит:

$$\Psi_m = e^{im\varphi},$$

где m - целое число.

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

Следующий важный шаг - выяснить, что $\hat{l}^2$ коммутирует с каждой проекцией для l_z

$$[\hat{l}^2, \hat{l}_z] = 0$$

Поэтому эти операторы имеют общую систему собственных функций.

Можно определить спектр оператора $\hat{l}^2$ и выяснить, что собственные значения:

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

При этом для заданного l m пробегает значения в промежутке $-l...l$. Значит суммарно получается $2l+1$ значение.

Классификация угловой части волновой функции. p, s-орбитали

Возникает классификация угловой части волновой функции. То что связано с вращательным движением и не связано с конкретным видом потенциала. Состояния классифицируются по величине квадрата момента и проекции этого момента на любую ось. В химии существует стандартная классификация:

$$l = 0 - s$$

$$l = 1 - p$$

$$l = 2 - d$$

$$l = 3 - f$$

Выпишем явно угловую зависимость для s- и p-орбиталей.

Пусть есть

$$\Psi_s(\varphi, \Theta) = Y_0(\varphi, \Theta)$$

Мы не записываем значение проекции углового момента, так как по условию для s-орбитали $l = 0$ и ему соответствует единственное значение $m = 0$. Соответственно, зависимость от φ отсутствует, экспонента в нулевой степени. Зависимости от Θ нет тоже. Получаем самую простую функцию:

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

$$Y_0(\varphi, \Theta) = \text{const}$$

В зависимости от выбранной нормировки - это единица или $\frac{1}{2\pi}$ и т.д.

Таким образом, s-орбиталь – это, условно, шарик.

Рис. 7.1. s-орбиталь

Пусть есть

$$m = 0$$

$$\Psi_p(\varphi, \Theta) = Y_{10}(\varphi, \Theta)$$

Так как $m = 0$ зависимости от φ нет.

$$l = 1$$

$$Y_{10}(\varphi, \Theta) = cos\Theta$$

Графиком функции будет гантелька.

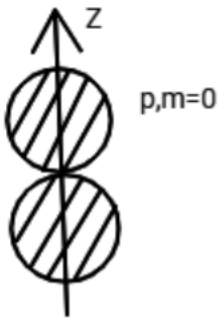

Рис. 7.2. p-орбиталь

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

$$m = \pm 1$$

$$Y_{0,\pm 1}(\varphi, \Theta) = e^{\pm i\varphi} sin\Theta$$

Можно пожертвовать орбитальным моментом в пользу наглядности. Можно взять полусумму и полуразность этих функций в качестве новых. В итоге получим:

$$cos\varphi sin\Theta$$

$$sin\varphi sin\Theta$$

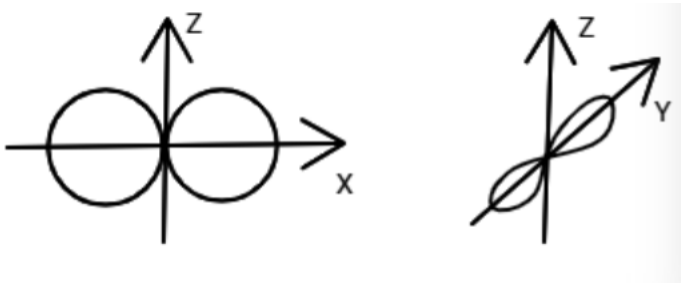

Рис. 7.3. Проекции p-орбитали

Если взять в явном виде уравнение Шредингера, подставить в него получившиеся выражения и вычислить ту часть, соответствующую угловому моменту, то получим нужное выражение. Ограничимся и посчитаем один вид орбиталей.

$$\Psi = cos\Theta = \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}$$

$$\hat{l}^2\Psi = 2\frac{z}{r}$$

$$kl = [r \times p]$$

$$\begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix} =$$

$$= \vec{i}(yp_z - zp_y) + \vec{j}(zp_x - xp_z) + \vec{k}(xp_y - yp_x)$$

$$\hat{l}^2\Psi = \frac{1}{r}\hat{l}_x^2 z = \frac{1}{r} l_x l_x z = \frac{1}{r\hbar}(y + k\frac{\partial}{\partial z} - zi\hbar\frac{\partial}{\partial y})z = \frac{1}{r\hbar} l_x(yi\hbar - zi\hbar * 0) =$$

$$= \frac{1}{r\hbar}\frac{1}{\hbar}(yi\hbar\frac{\partial}{\partial z} - zi\hbar\frac{\partial}{\partial y})yi\hbar = \frac{1}{r\hbar^2}(-zi^2\hbar^2) = \frac{z}{r}$$

$$\hat{l}^2\Psi = \frac{1}{r}\hat{l}_y^2 z = \frac{z}{r}$$
$$\hat{l}^2\Psi = 2\frac{z}{r}$$

Производной по z нет, поэтому на переменной z получаем 0. Почему коэффициент в итоге 2? Так как учитываем две оси x и y, а следовательно $(1+1)$. Если пожертвовать определенной проекцией, то получить можно в итоге $\frac{x}{r}$ и $\frac{y}{r}$.

Радиальная часть уравнения Шредингера

Рассмотрим радиальную часть уравнения Шредингера.

$$E\Psi_R = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}\Psi_R + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\Psi_R - \frac{ze^2}{r}\Psi_R$$

Первое слагаемое - радиальная часть Лапласа, второе - центробежный потенциал, третье - кулоновский потенциал. Волновая функция Ψ_R должна быть нормирована условием полной вероятности - интегрирование по координате пространства:

$$\int_0^\infty |\Psi_R(r)|^2 r^2 dr = 1$$

Пространство чем больше, тем дальше отходим от r^2.

Непривычно записана угловая часть оператора Лапласа. Легче иметь привычное уравнение Шредингера со второй производной. Можно к нему привести первое слагаемое. Для этого надо сделать замену переменных

$$\Psi_R = \frac{\chi(r)}{r}$$

В таком случае условие нормировки принимает вид:

$$\int_0^\infty |\chi|^2 dr = 1$$
$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}\frac{\chi}{r} = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r\chi^2 - \chi) = \frac{1}{r^2}(\chi' + r\chi >> -\chi') = \frac{\chi >>}{r}$$

В итоге получаем:

$$E\chi = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2}\chi + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\chi - \frac{ze^2}{r}\chi$$

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

Условие нормировки на χ в частности означает понятное поведение этой функции вблизи 0 и на бесконечности. Вблизи бесконечности она должна спадать, вблизи 0 должна оставаться хотя бы конечной, то есть предел не уходит в бесконечность.

Выясним, как ведет себя функция χ в этих двух пределах. В первую очередь рассмотрим вблизи нуля. В левой части уравнения при не равном 0 значении l во втором слагаемом получается $\frac{1}{r^2}$ – быстрорастущая при приближении к 0 функция. Слева ничего такого быстрорастущего нет. Для того, чтобы уравнение выполнялось, нужно чтобы что-то этот быстрый рост компенсировало. Такое условие помогает осуществить вторая производная по χ - первое слагаемое.

$$\chi(r \to 0) \sim r^s$$

где s - какая-то величина.

$$\frac{r^s}{r^2}$$

Возьмем вторую производную

$$E\chi = \frac{-\hbar^2}{2m} r^{s-2} s(s-1) + \frac{r^s}{r^2} \frac{l(l+1)\hbar^2}{2m} - \frac{ze^2}{r}\chi$$

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

$$s = l + 1$$

Степенное спадание вблизи нуля тем более быстрое, чем больше l.

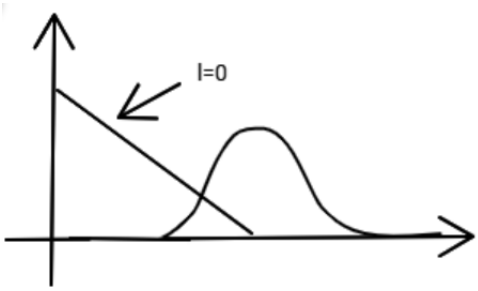

Рис. 7.4. Степенное спадение

Центробежная сила от ядра пытается электрон отогнать, не позволяет ему близко приблизиться. На бесконечности же, если знаем энергию E, то по примеру с одномерным движением можем ожидать, что характер зависимости волновой функции от координаты там, где потенциал уже спадает и становится на много меньше, чем энергия. Именно в этом промежутке волновая функция будет иметь вид спадающей экспоненты.

$$\chi(r \to \infty) \sim e^{\frac{-qr}{\hbar}}$$
$$\frac{q^2}{2m} = |E|$$

Кулоновский потенциал простой и допускающий точное решение уравнения Шредингера и в действительности имеет вид некого многочлена в общем виде:

$$\chi(r) = p_{en_r}(r)e^{\frac{-qr}{\hbar}}$$

Воспользуемся знаниями о спектре атома водорода. Для упрощени возьмем $z = 1$. Для основного состояния:

$$|E| = \frac{me^4}{2\hbar^2}$$

Подставим это значение и убедимся, что для $l = 0$ решение в виде экспоненты с простейшим полиномом равным 1 удовлетворяет уравнению Шредингера.

Пусть

$$\chi = e^{\frac{-qr}{\hbar}} r$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(e^{\frac{-qr}{\hbar}} r) = \frac{q^2}{2m}e^{\frac{-qr}{\hbar}} - 2\frac{\hbar^2}{2m}e^{\frac{-qr}{\hbar}}(\frac{q}{\hbar}) = -\frac{q^2}{2m}(re^{\frac{-qr}{\hbar}}) + \frac{2}{r}\frac{\hbar q}{2m}(re^{\frac{-qr}{\hbar}})$$

$$E(re^{\frac{-qr}{\hbar}})$$
$$\frac{e^2}{r}(re^{\frac{-qr}{\hbar}})$$

Таким образом, уравнение Шредингера будет выполняться, если правильно подобрать коэфиициенты.

$$\frac{\hbar q}{m} = e^2$$

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

$$E = -\frac{q^2}{2m}$$

И получаем:

$$q = \frac{e^2 m}{\hbar}$$
$$E = \frac{me^4}{2\hbar^2}$$

Как обещал анализ ассимптотики при малом значении r, χ ведет себя как r^{l+1}. Получается, что выражение получили верное при $l = 0$.

Для $1S$

$$\Psi_R = e^{\frac{-qr}{\hbar}}$$

Для $2S$ выполняется тоже уравнение, только для второго уровня, а для $2P$ состояния - при $l \neq 0$, то есть с центробежным членом.

Для $2S$ состояния волновую функцию нужно искать в виде полинома первого порядка

$$\Psi = (1 + ar)e^{\frac{-q_1 r}{\hbar}}$$

Величина a должна быть отрицательной. Это происходит потому, что вторая собственная функция должна иметь один импульс. Есть теорема, что в заданном потенциале с ростом номера числа состояний растет число нулей у него. Первое состояние, как известно, не содержит нулей. Второе - один раз пересекает, пример прямоугольной ямы (функция синуса). Следующая - два нуля и т.д. При этом величины a и q_1 можно найти таким же способом, что делали выше.

Для $2S$ состояния величина l становится на 1 больше. Значит степень многочлена будет на 1 больше. Должен начинаться многочлен перед экспонентой стоящий с первой степени, так как должно присутствовать простейшее состояние.

$$\Psi_R = re^{\frac{-q_1 r}{\hbar}}$$
$$\frac{q_1^2}{2m} = \frac{me^4}{8\hbar^2}$$

Проанализируем среднее значение r, r^2 и понимания того, что максимум функции и первого момента - это не одно и тоже.

$$|\Psi|^2 = r^2 e^{\frac{-2q_1 r}{\hbar}}$$

Рис. 7.5. Зависимость волновой функции от r

Возникает вопрос: где находится максимум на этой кривой?

$$q_1 = \frac{me^2}{2\hbar}$$

Максимум будет назодится при

$$r = \frac{\hbar}{q_1} = \frac{2\hbar^2}{me^2}$$

Следующий вопрос: на каком расстоянии максимально вероятно найти частицу от ядра?

Для этого нужно найти максимум функции

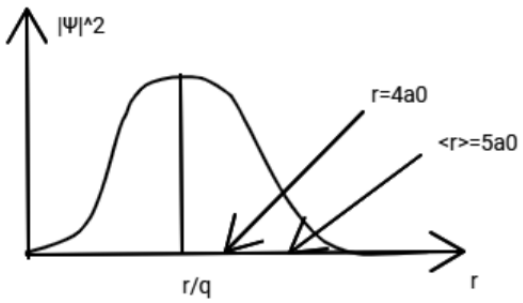

Рис. 7.6. Расположение расстояния

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

$$|\Psi_R|^2 = r^2 e^{\frac{-2q_1 r}{\hbar}}$$

Вероятность найти на заданном расстоянии от ядра, плотность вероятности - $|\Psi_R|^2 r^2$, то есть переводим в сферические координаты.

$$\max\ p : r^4 e^{\frac{r}{a_0}}$$

$$r = 4a_0$$

Далее вопрос: как найти среднее расстояние от ядра?

В этом случае нужно интегрировать:

$$< r >= \frac{\int r^s e^{\frac{-r}{a_0}} dr}{\int r^4 e^{\frac{-r}{a_0}} dr}$$

Такой интеграл можно взять по частям: загоняем экспоненту под дифференциал, поменяли местами, получили dr^5, а значит $5r^4$. Ответом интегрирования будет:

$$< r >= 5a_0$$

В итоге расположение расстояний на графике примет вид:

Таким образом, тоже самое можно написать для любой функции описывающей любой уровень, в частности и для основного. Для него, так как q отличается в 2 раза, будет меньшее количество a_0.

Семинар 8. Теория возмущений

Уровни в прямоугольной потенциальной яме

Рассмотрим появление уровней в прямоугольной потенциальной яме. Первый уровень есть всегда. Второй, который похож на синус, имеет один корень. Он находится в середине ямы.

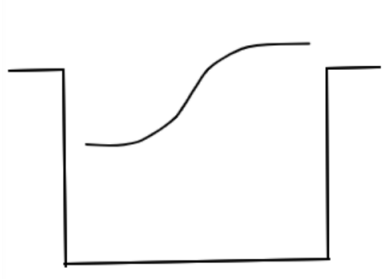

Рис. 8.1. Яма с уровнем в виде синуса

Нужно понять, что происходит на границах действия функции при пересечении с потенциальной ямой. Ниже границы происходит спад. Справа - это экспонента с волновым вектором, определяемым энергию уровня в связанном состоянии

$$\frac{\hbar^2 q^2}{2m} = -E$$

Как только он появляется, энергия маленькая, стремится к нулю. В пределе экспонента совсем пологая. Поэтому нужно потребовать, чтобы в пределе производная

$$\Psi'(\frac{l}{2}) = 0$$

Это условие зарождения нового уровня. Если говорить про первый уровень, то это соответствует тому, что синус успевает пробежать половину периода. То, что спрашивали в задаче, это тоже самое, только следующий уровень - косинус.

Получаем функцию с двумя нулями, а далее опять медленно спадающую экспоненту. В момент рождения она практически константа. Умещается один период. Таким образом, период можно записать, как $\frac{2\pi}{k} = l$, есть функция задается $y = coskx$. И также известна энергия относительно дна ямы - U.

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = U$$

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

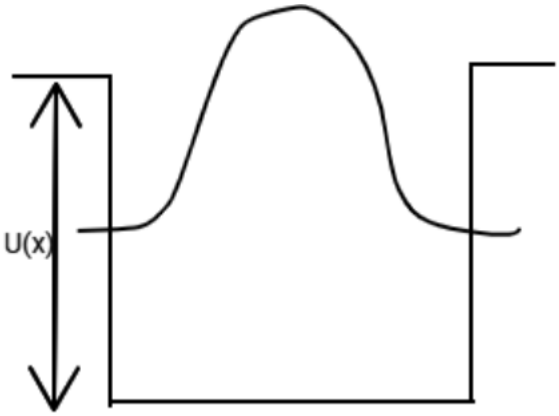

Рис. 8.2. Яма с уровнем в виде косинуса

$$U = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{(2\pi)^2}{l^2}$$

В среднем получаем простой ансамбль по свойствам.

Квантовая электроника, атом во внешнем поле

Рассмотрим вопросы о квантовой электронике, атоме во внешнем поле. Подойдем к вопросам несколько формально. Поставим задачу об изменении во времени свойств системы, находящихся под действием внешнего поля. Физически, это задача об индуцированном внешнем поле перехода из основного в возбужденное состояние атома.

Можно записать гамильтониан:

$$H = H_0 + eExe^{-i\omega t} + eE^* xe^{i\omega t}$$

где H_0 - гамильтониан атома, второе и третье слагаемое - взаимодействие с внешним полем.

$$\hat{V}(t) = eExe^{-i\omega t} + eE^* xe^{i\omega t}$$

- оператор взаимодействия с внешним полем.

Будем думать, что знаем свойства одинокого отсоединенного внешнего поля атома. Значит для гамильтониана H_0 будем знать энергии.

Введем: E_j и соответствующие им функции в стационарных состояниях $\varphi_j(x)$. В начальный момент времени система находится в основном состоянии $j = 0$, включается внешнее поле и интересует эволюция системы во времени. Естественно считать внешнее поле слабым, можно прикинуть отношение характерного лазерного поля к характерному полю, действующему, например, в атоме водорода на электрон со стороны протона. Окажется, что даже для самых сильных лазеров, величина будет намного меньше единицы. Для привычных лазеров, типа указки, многими порядками до единицы не достает. Таким образом, значение $\hat{V}$ можно считать маленьким. В итоге, идея состоит в том, чтобы построить теорию возмущений, чтобы выразить волновую функцию зависящую от времени атома под воздействием поля в терминах известного решения задачи для уединенного атома.

Попробуем такую идею формулизовать:

$$\Psi(t) = \sum a_j e^{-i\omega_j t} \varphi_j(x)$$
$$E_j = \hbar\omega_j$$

$\varphi(x)$ - волновые функции стационарного состояния.

Если бы внешнего поля не было, то при любых постоянных a_j это было бы решением уравнения Шредингера. Действительно, если каждую из волновых функций на стационарного состояния умножить на соответствующую экспоненту, то получим решение уравнения Шредингера. Такое решение является линейным. Получаем, что композиция - тоже решение. Теперь есть V, которое приведет к тому, что коэффициенты разложения окажутся функциями времени. Разложить всегда можно и собственные функции H_0 образуют ортонормированную систему.

Считая оператор V малым, можно организовать теорию возмущений. Значит разложить в ряд интересующие вещи. Запишем, как будет выглядеть уравнение Шредингера:

$$i\hbar(a_j' - i\omega_j a_j)e^{-i\omega_j t}\varphi_j(x) = \sum \hbar\omega_j a_j e^{-i\omega_j t}\varphi_j(x) + \sum a_j e^{-i\omega_j t}\hat{V}\varphi_j(x) \tag{8.1}$$

Результат действия гамильтониана сокращается с содержащим ω_j слагаемым в левой части. Это математическое выражение того факта, что если бы взаимодействия не было, то при любых не зависящих от времени коэффициентах a_j, у нас волновая функция удовлетворяла бы уравнению Шредингера.

Разложим коэффициенты a_j в ряд Тейлора:

$$a_j(t) = a_j(0) + a_j(1)(\sim V) + ...$$
$$a_{j=0}(0) = 1$$
$$a_{j\neq 0}(0) = 0$$
$$i\hbar \sum a_j(1) e^{-i\omega_j t} \varphi_j(x) = e^{-i\omega_0 t} \hat{V} \varphi_0(x)$$

Чтобы определить единственный коэффициент a_j, нужно скалярно умножить на $\varphi_l^*(x)$ и проинтегрировать по d^3x. Слева остается один член, соответствующий $j = l$ и получается единица.

$$i\hbar a_l'(t) = e^{-i(\omega_0 - \omega_l)t} \int \varphi_l^* V \varphi_0 d^3x$$

Получившийся интеграл называют матричным элементом оператора V и обозначают V_{l0}. В базисе собственных функций, в которых работаем, если V представить в виде матрицы, то соответствующие элементы этой матрицы будут выглядеть как интегралы. Получили даже не дифференциальное уравнение. И решение получается:

$$a_l(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t e^{-i(\omega_0 - \omega_l)t'} V_{l0}(t) dt' =$$
$$\hat{V}(t) = eExe^{-i\omega t} + eE^* xe^{i\omega t}$$
$$= \frac{1}{\hbar} \frac{e^{-i(\omega_0 - \omega_l + \omega)t} - 1}{\omega_0 - \omega_l + \omega} eEX_{l0} + \frac{1}{\hbar} \frac{e^{-i(\omega_0 - \omega_l - \omega)t} - 1}{\omega_0 - \omega_l - \omega} eE^* X_{0l}$$

Важнее учитывать именно первое слагаемое в сумме. Это связано с тем, что в нем знаменатель может быть резонансным. Это происходит потому, что $\omega_0 < \omega_l$, а значит при сумме положительного и отрицательного чисел может получится 0. Такие процессы близки к резонансным, что соответствует случаю, когда частота внешнего поля близка к частоте перехода между состояниями 0 и l. Попадая в резонанс, система сильно откликается на действующие в нем внешнее поле. В числителях стоит экспонента от мнимого аргумента, приблизительно она очень мала. Тогда получаем, что второе слагаемое «крутится» быстрее, чем первое.

Во втором слагаемом фигурирует комплексное сопряженное, так как на атом действует действительное поле. Если гармоническое поле с произвольной фазой, то получим

$$eEX + eE^* X$$

Запишем резонансные члены:

$$a_l = \frac{1}{\hbar}\frac{e^{-i(\omega_0-\omega_l+\omega)t}-1}{\omega_0-\omega_l+\omega}eEX_{l0}$$

Если есть зависящий от времени коэффициент при соответствующей волновой функции основного невозмущенного гамильтониана, то это возможность найти вероятность обнаружения системы на данном уровне в заданный момент времени. Значит нужно возвести величину a_l в квадрат по модулю - это и будет вероятностью.

$$p_l(t) = \frac{1}{\hbar^2}\frac{(e^{-i(\omega_0-\omega_l+\omega)t}-1)^2}{(\omega_0-\omega_l+\omega)^2}e^2|E|^2|X_{l0}|^2$$

Если нарисовать график зависимости этой величины от ω:

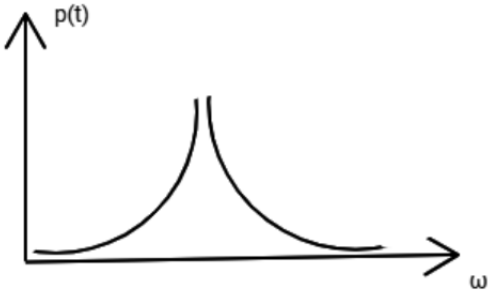

Рис. 8.3. Зависимость от ω

В заданный момент времени увидим некий резонансный пик. График является условным. Числитель величина не очень большая, за исключением начального времени. Если время мало

$$(\omega_0-\omega_l+\omega)t << 1$$

то экспоненту нужно разможить в ряд Тейлора и в этом случае получим, что

$$p \sim t^2$$

В таком случае не наблюдается резонанса вообще. Числитель и знаменатель сократятся. Получаем, что если время не очень большое, то даже если говорить о классическом осцилляторе, понять в резонансе он находится или нет не удается. Нужно подождать достаточно долго, чтобы он раскачался. Если

$$(\omega_0-\omega_l+\omega)t >> 1$$

то получаем график представленный выше.

Глядя на график, с формальной точки зрения можно усомниться. Вероятность заведомо много меньше 1. Получаем, что случай точного резонанса или близок к нему выходит за рамки рассмотрения того, что проделано выше. Это связано с тем, что разложение по степеням подразумевает, что a_1 на много меньше, чем a_0. Если у нас V сравнимо с 1, то разложение не будет работать. Значит в какой-то момент такое приближение перестает работать.

Резонансный случай. Блоковская волна и Брегговское отражение

Рассмотрим резонансный случай. Из-за того, что энергия падающих фотонов очень близка к энергии перехода, вероятность обнаружить систему на возбужденном уровне не может считаться малой и теория возбуждения, которую рассмотрели, не работает. На самом деле, если внешнее поле является резонансным для перехода между двумя определенными состояниями, значит вся физика дела этими двумя состояниями и определяется, а про остальные можно забыть.

Вспомним про Блоковскую волну и Брегговское отражение. Запишем уравнение Шредингера, оставив только два коэффициента разложения:

$$\Psi(t) = a_0 e^{-i\omega_0 t}\varphi_0(x) + a_1 e^{-i\omega_1 t}\varphi_1(x)$$

Подставляем значение волновой функции в уравнение Шредингера.

$$i\hbar((a_0' - i\omega_0 a_0)\varphi_0 e^{-i\omega_0 t} + (a_1' - i\omega_1 a_1)\varphi_1 e^{-i\omega_1 t}) =$$
$$= (\hbar\omega_0 a_0 e^{-i\omega_0 t}\varphi_0 + \hbar\omega_1 a_1 e^{-i\omega_1 t}\varphi_1) + a_0 e^{-i\omega_0 t}V'(t)\varphi_0 + a_1 e^{-i\omega_1 t}V'(t)\varphi_1$$

Результат действия невозмущенного гамильтониана уничтожает действие дифференцирования по времени экспоненты. Вспомним, что V состоит из двух слагаемых: одно содержит экспоненту с отрицательным показателем $e^{-i\omega t}$, а другая с положительным $e^{i\omega t}$. Знаем, что поле слабое, а значит зависимость a' от времени будет медленная. Условно говоря, имеем дело с осциллятором под действием внешней резонансной силы. Если она хоть и резонансная, но и маленькая, то амплитуда колебаний меняется медленно. Осциллятор колеблется и со временем наростает размах таких колебаний.

$$i\hbar(a_0'\varphi_0 e^{-i\omega_0 t} + a_1'\varphi_1 e^{-i\omega_1 t}) = a_0 e^{-i(\omega_0+\omega)t} eEX\varphi_0 + a_1 e^{-i(\omega_1+\omega)t} eE^* X\varphi_1$$

В правой части прибавляется или вычитается частота внешней силы. Нужно попасть в резонанс, то есть получить что-то похожее на выражение слева. Поэтому воспользовались заменой $\omega_1 - \omega_0 \approx \omega$.

Получаем два дифференциальных уравнения:

$$i\hbar a_0' = a_1 e^{-i(\omega_1-\omega-\omega_0)t} eE^* X_{01}$$
$$i\hbar a_1' = a_0 e^{-i(\omega_0+\omega-\omega_1)t} eEX_{10}$$

Частный случай точного резонанса

Рассмотрим частный случай точного резонанса

$$\omega_1 - \omega_0 = \omega$$
$$i\hbar a_0' = a_1 eE^* X_{01}$$
$$i\hbar a_1' = a_0 eEX_{10}$$

Берем производную по времени от первого уравнения по a_1 и подставляем в него второе:

$$\hbar^2 a >>_1 + |eE|^2 X_{10} X_{01} a_1 = 0$$
$$a_1 = a_1^+ e^{i\Omega t} + a_1^- e^{-i\Omega t}$$
$$\Omega^2 = \frac{|eE|^2}{\hbar^2} X_{10} X_{01}$$

– это частота, с которой меняется населенность верхнего и нижнего уровней, выражается через квадрат матричного элемента. Она определеят силу связи данного перехода с полем и величину, характеризующую поле. Но при этом отношения к частотам переходов, которые идут рядом, эта величина не имеет. Такую частоту называют частотой Раби.

Если нарисовать как выглядит на возбужденном уровне атом от времени:

$$p(t) = |a_1|^2$$

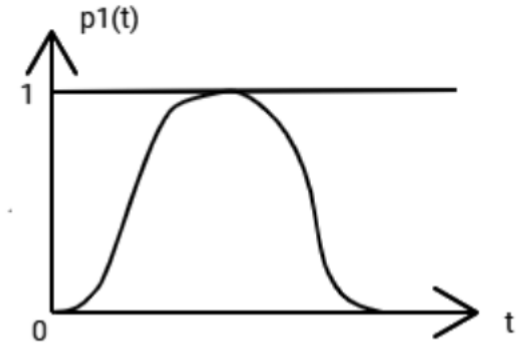

Рис. 8.4. Атом во времени в возбужденном состоянии

Это график синуса, меняющийся от 0 до 1. Период определяется частотой Раби. Оно не имеет отношения к периоду внешнего поля. Такой период гораздо меньше частоты Раби, так как поле резонансное, потихоньку перекачивает атом на возбужденный уровень. Через определенное известное время атом с вероятностью 1 внешним полем переводится в основное состояние в возбужденное. Это называется $\pi-$импульс – такой импульс, переводящий систему из основного состояния в возбужденное. Это модная в экспериментальной физике тенденция – манипуляция в квантовом состоянии тех или иных простейших объектов атомов, простейший элемент квантовой логики. Импульс переводит из основного состояния в возбужденное, а из возбужденного в основное.

Если внешнее поле точно резонансно, то приближение, основанное на разложении по V быстро теряет силу. Вместо этого есть двухуровневое приближение и появляются возможности, которые позволяют контролируемым образом менять состояния с одного на другой квантовой системы.

Все, что ранее обсудили подходит только для того случая, когда есть уровень, на который резонансным образом переходит система, уединенный. Можно модифицировать теорию на случай, когда таких уровней несколько. Например, если два, то нужно связывать не две, а три амплитуды. Если же таких уровней очень много - атом из основного состояния переходит в состояние непрерывного спектра. Тогда электрон под действием внешнего света отрывается от атома.

Какие-то уровни окажутся точно резонансными в непрерывном спектре. Формально, как работать с формулой для a_l неясно. Однако выясняется, что для перехода в непрерывный спектр она годится. Для того, чтобы увидеть, что происходит, перепишем тождественным образом выражение для вероятности перехода:

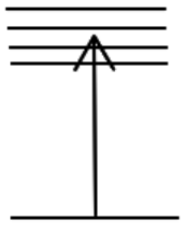

Рис. 8.5. Отрыв электрона под действием внешнего света

$$p_l(t) = |eEX_{01}|^2 t \frac{|e^{-i(\omega_0-\omega_l+\omega)t} - 1|^2}{\hbar^2(\omega_0 - \omega_l + \omega)^2 t}$$

Физически кажется, что вероятность ионизации внешним полем должна быть пропорциональна времени действия этого поля. Чем дольше светит, тем больше вероятность, что есть ионизация. Полученние выражение - математическая запись пропорциональности времени.

Выясним: какую энергию в пределе больших времен будет иметь этот оторванный электрон? Определяется законом сохранения энергии. Если светить монохроматическим полем, энергия каждого фотона находится, как $\hbar\omega$, значит энергия оторванного электрона будет однозначно определяться. Поэтому в правой части должна стоять дельта-функция - то, что определяет тот факт, что переходы происходят только на резонансные уровни. Иначе будет нарушен закон сохранения энергии в пределе.

Проверим, что

$$\frac{|e^{-i(\omega_0-\omega_l+\omega)t} - 1|^2}{\hbar^2(\omega_0 - \omega_l + \omega)^2 t}$$

является дельта-функцией. Нужно знать, что она должна спадать до 0 во всех точках, где аргумент не равен 0 и ее интеграл на бесконечности оставался константой.

$$\int \frac{|e^{-i(\omega_0-\omega_l+\omega)t} - 1|^2}{\hbar^2(\omega_0 - \omega_l + \omega)^2 t} d\omega =$$

Обозначим $(\omega_0 - \omega_l + \omega)t = R$

$$= \int \frac{|e^{-iR} - 1|^2}{\hbar^2 R^2} dR = \frac{1}{\hbar^2}\text{const}$$

Таким образом в пределе больших времен:

$$p_l(t) = \frac{2\pi}{\hbar^2}|eEX_{01}|^2 t\delta(\omega_0 - \omega_l + \omega)$$

Эта формула определяет вероятность перехода за заданный большой интервал времени состояния непрерывного спектра под действием внешнего периодического поля. Впервые ее вывел Ферми и в литературе называется как *«золотое правило Ферми»*.

Семинар 9. Конденсат Бозе-Эйнштейна

Ранее получили возможность «переключать» квантовые состояния атомов, если на атом действует резонансное поле.

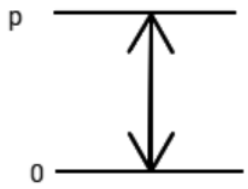

Рис. 9.1. Квантовые состояния в поле

Получаем резонансный переход между состояниями: основным и возбужденным. Тогда населенность можно изобразить

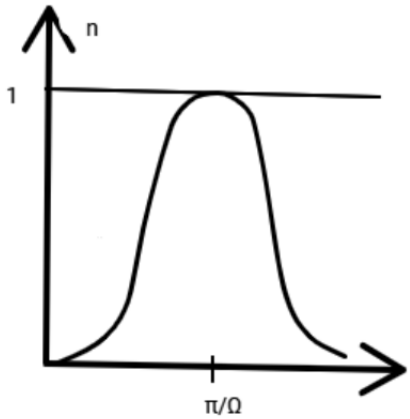

Рис. 9.2. Населенность

Возбужденное состояние начинает осциллировать между 0 и 1. Частота осцилляций – частота Раби - величина, определяемая дипольным элементом перехода между состоянием 10 и величиной действующего поля.

$$\hbar\Omega_R = d_{10}E$$

В правой части получаем энергию, где дипольный момент – произведение заряда на координату. Частота Раби отличается от частоты перехода, то есть частоты действующего поля. Поле предполагаем небольшим. Частота Раби намного меньше, чем

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

ω. Таким образом, имеем дело с нестандартной в оптике ситуацией: действие ведется не на частоте поля, а сосредоточен в двух линиях $\omega_{10} - \Omega_R$ и $\omega_{10} + \Omega_R$.

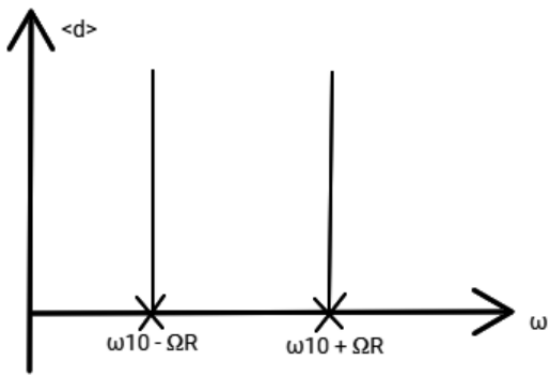

Рис. 9.3. Частота Раби в двух линиях

Спектральное поведение атома при воздействии резонансного поля

Рассмотрим, как меняется спектральное поведение атома, на которое действует резонансное поле. Если начнем этот резонанс отстраивать, то между двумя линиями появится третья, ровно на частоте действующего поля.

Чем дальше будет отходить от резонанса, тем менее $-\Omega_R$ и $+\Omega_R$ будут заметны. Как только отстроятся на расстоянии намного больше рабийской частоты, изменение пропадет. Рабийские частоты в норме являются небольшими, поэтому нужны специальные экспериментальные условия для того, чтобы их наблюдать.

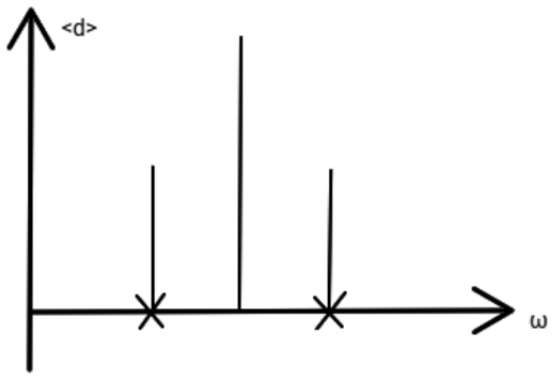

Рис. 9.4. Появление третьей линии

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

Времена поменялись. В нынешнее время первичной является картинка населенности (см. Рис. 9.2) с временной зависимостью.

Кубит

Рассмотрим кубит – элементарный носитель квантовой информации. Кубит – это система, включающая в себя два состояния (уровня) и элемент квантовой информации – состояние этой системы относительно заселенности фаз. Действуя резонансным импульсом, имеем возможность осуществлять логические операции над этим элементом квантовой информации. В частности, наблюдаем, что если приготовили систему в начальном состоянии невозбужденном, подействовав $\frac{\pi}{\Omega_R}$-импульсом, можно перевести систему в противоположное возбужденное состояние. В $\frac{\pi}{2}$-импульса легко проверить, что окажемся в суперпозиции основного возбужденного состояния.

Действительно возможность манипуляции квантовым состоянием системы, в простейшем случае одно- и двухуровневой, на которой действуют контроллируемые с хорошим временным разрешением внешние поля. Можно прикинуть с чем имеем дело.

Пусть линейный размер нашего атома, в молекуле или искусственно созданном материале равен $d = 1$нм. Подействуем на него лазерным полем, привычным, тем, что выходит, например, из лазерной указки. У такой указки мощность составляет, примерно, 10 млВт (10^{-2} Вт). Площадь пятна при этом - 1 мм^2. На самом деле лазерная указка для данного опыта не годится. Нужен источник с высокой степенью когерентности. Оценим время π-импульса в случае, когда на переход из возбужденного состояния в основное действует свет такого источника.

Поток энергии в заданном направлении можно найти, как

$$\frac{C}{2\pi}[H \times E]$$
$$\frac{C}{2\pi}E^2 = \frac{p}{S}$$
$$E = \sqrt{\frac{8\pi p}{CS}}$$
$$\hbar\Omega_R = ed_{10}E$$
$$\Omega_R = \frac{ed_{10}}{\hbar}\sqrt{\frac{8\pi p}{CS}}$$

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

Ответ: $\Omega_R = 10^9$, соответственно характерное время - на уровне наносекунды. Характерные же времена атомные находятся на уровне фемтосекунд.

Нужно, чтобы за это большое время по атомной шкале времени ничего бы, кроме лазера, не провзаимодействовало: никакой сосед в газе не стукнул, никакой фотон не пробежал и т.д. Поэтому атом должен быть изолирован от окружающего мира и по возможности исключены всевозможные источники декогеренции.

Отдельная большая область современной науки посвящена созданию и поиску в природе систем, для которых декогеренция действительно мала. Обычно это какие-то атомы подвешены в одиночных магнитных ловушках или наоборот в твердотельных системах не взаимодействующие ни с чем уровни в атомах - V-центры. Например, в алмазе примеси азота характеризуются такими уровнями. Они обычно имеют величину матричного элемента перехода еще меньше. Поэтому характерные времена переключения получаются довольно большими. Но экспериментально такое реализовано сравнительно давно, ученые умеют переключать состояния элементарных квантовых систем. Этот процесс очень сложен. В лабораториях манипуляции с изолированными квантовыми состояниями систем сейчас осуществляют легко и на продвинутом уровне. Основные ограничения связаны с масштабированием: можно поменять свойства одного перехода, можно двух, а 30 кубитов обработать и заставить работать как одно целое уже будет затруднительно. Чем больше в системе кубитов, тем декогеренция становится более критичной и тем сложнее с этим работать. Основное, с чем борются квантовые технологи, говоря о хранении и преобразовании квантовой информации – это декогеренция.

Бозе-Эйнштейновское распределение и конденсация

Рассмотрим Бозе-Эйнштейновскую конденсацию, а именно Бозе-Эйнштейновское распределение.

$$< n >= \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{\Theta}} - 1}$$

Экспонента не должна быть меньше 1, а значит показатель не должен быть отрицательным. Поэтому есть система с неким набором уровней, у которых химический потенциал не может быть выше, чем один из них. Иначе для соответствующего уровня получится заведомо неправильное поле.

Рассуждения Эйнштейна сводились к следующему. Пусть есть система фотонов или фононов с неким спектром:

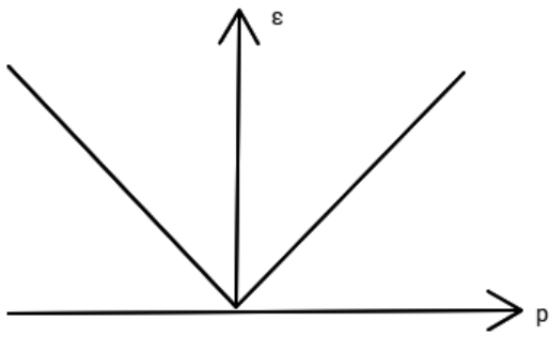

Рис. 9.5. Спектр фотонов или фононов

Допустим химический потенциал в точке (0,0) равен нулю. Тогда можем посчитать сколько частиц находится во всех состояниях, кроме состояния $p = 0$ и $E = 0$. Будем уменьшать температуру. Число частиц, которое нулевому химическому потенциалу, будет тоже уменьшаться. Если же химический потенциал не нулевой, а отрицательный, то число частиц еще меньше. Если общее число частиц переменная, как число фотонов, тогда просто будет уменьшаться число частиц.

Если имеем дело с атомами, которые являются базонами, их число фиксировано. Число частиц в состояниях с $p \neq 0$ уменьшается и в какой-то момент предельное значение окажется меньше, чем реальное в системе атомов есть. В результате определенная часть атомов окажется в состоянии с $p = 0$.

Пусть есть число атомов

$$N_{p\neq 0} = \sum \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{\Theta}} - 1} = \frac{L^3}{(2\pi)^3\hbar^3} \int d^3p \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{\Theta}} - 1} =$$

Будем считать, что закон дисперсии изотропный и зависить только от модуля .

$$= \frac{L^3}{(2\pi)^3\hbar^3} \int_0^\infty dp \frac{4\pi p^2}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{\Theta}} - 1}$$

Если $\mu < 0$, то эта функция будет работать на уменьшение числа частиц

$$N \leqslant \frac{L^3}{2(\pi)^2\hbar^3} \int_0^\infty dp \frac{p^2}{e^{\frac{\varepsilon}{\Theta}} - 1}$$

Критерием сверхпроводимости по Эйнштейну будет: если оценка меньше, чем число частиц, которые есть в системе, то остальные частицы находятся в конденсате. Если же с системой произошла кристаллизация и т.д., то не работает получившаяся оценка.

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

Фотоны и фононы не годятся. У них линейный закон дисперсии. Возьмем квадратичный закон дисперсии, который есть у настоящих частиц.

$$\frac{1}{L^3}N_{p\neq 0} \leqslant \frac{1}{2\pi^2\hbar^3}\int_0^\infty \frac{p^2dp}{e^{\frac{p^2}{2m\Theta}}-1}$$

Обезразмериваем интеграл. Тогда получим

$$\frac{p^2}{2m\Theta} \to x^2$$

$$\frac{1}{L^3}N_{p\neq 0} \leqslant \frac{(2m\Theta)^{\frac{3}{2}}}{2\pi\hbar^3}\int_0^\infty \frac{x^2dx}{e^{x^2}-1}$$

По мере уменьшения температуры общее число атомов возбужденных состояний уменьшается, как и температура в степени $\frac{3}{2}$. Если число частиц в системе фиксировано, должен возникнуть конденсат.

В таком случае подразумеваются частицы не взаимодействующие с квадратичным законом дисперсии и это является неверным суждением. В жизни невзаимодействующих базонов с массой не сущетсвует. Поэтому взаимодействие есть. Обычно, когда говорят о Бозе-Эйнштейновской конденсации имеют ввиду, конечно, именно взаимодействующие частицы. Если взаимодействия нет даже в теоретических моделях, то скорее всего это лазер, чем конденсат. Тот факт, что есть взаимодействия, приводит к тому, что эффективный закон дисперсии не меняется. Внизу появляется небольшой линейный участок, а не квадратичный. Оценка, которую привели выше годится так же для еще одного рассуждения.

Представим, что есть двумерная система.

$$N_{p\neq 0} = \frac{L^2}{(2\pi)^2\hbar^2}\int_0^\infty dp\frac{2\pi p}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{\Theta}}-1} \leqslant \frac{L^2}{2\pi\hbar^2}\int_0^\infty dp\frac{p}{e^{\frac{\varepsilon}{\Theta}}-1}$$

$$\frac{1}{L^2}N_{p\neq 0} \leqslant \frac{1}{2\pi\hbar^2}\int_0^\infty \frac{pdp}{e^{\frac{p^2}{2m\Theta}}-1}$$

$$\frac{1}{L^2}N_{p\neq 0} \leqslant \frac{2m\Theta}{2\pi\hbar^2}\int_0^\infty \frac{xdx}{e^{x^2}-1}$$

Есть принципиальная разница между интегралами в двумерной и трехмерной системах. Для двумерной системы интеграл равен бесконечности, расходится на нижнем пределе.

$$x \to 0$$
$$\int \frac{dx}{x} = \infty$$

Получается, что все рассуждения в двумерном пространстве будут неработающими. Поэтому Бозе-Эйнштейновской конденсации там быть не может.

Хотя рассуждения сами по себе очень грубые, не учитывают важнейшего фактора взаимодействия между частицами, но вывод правильный - конденсация в двумерье невозможна. Этот факт получили очень давно. Что значит, что если нет конденсации, значит нет сверхпроводимости и сверхтекучести в двумерных пленках. Но оказалось на самом деле не так. Кондексации действительно нет, а сверхтекучесть и сверхпроводимость присутствуют. Есть фазовый переход в экосвоеобразное состояние. На это указал Березинский, а потом дополнили Костерлиц и Таулес. Соответствующий переход без конденсации и с формированием порядка так и называется в литературе - *переход Березинского-Костерлица-Таулеса*. Тот факт, что нет конденсата, как раз и основан на расходимости интеграла.

Физически Бозе-конденсация – это гелий, базоны. Объяснение состоит в эксперименте Капицы и теории Ландау. Сейчас же используют Бозе-кондексаты ультрахолодных атомов в оптических ловушках.

Семинар 10. Перепутанные состояния

Перепутанные состояния. Парадокс Эйнштейна — Подольского — Розена. Неравенство Белла

Рассмотрим перепутанные состояния, парадокс Эйнштейна — Подольского — Розена и неравенство Белла. Они послужили в каком-то смысле доказательством вероятности природы нашего мира.

Перепутанные состояния — это состояния двух частиц, у которых волновая функция это не произведение частичных волновых функций.

$$\Phi(r_1, r_2) \neq \varphi(r_1)\varphi(r_2)$$

Если вспомнить, как выглядит уравнение Шредингера, то становится ясно, что перепутывание – это общее свойство нашего мира. Волновые функции любых двух частиц перепутаны, так как эти две частицы так или иначе друг с другом взаимодействуют. Напишем уравнение Шредингера для члена ответственного за взаимодействия:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = \frac{\hat{p}_1^2}{2m_1}\Psi + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2}\Psi + U(r_1 - r_2)\Psi$$

Сразу ясно, что последнее слагаемое «портит» факторизацию волновых функций на произведение двух одночастичных. Если же взять в нулевой момент времени Ψ, то производная – это более сложная математически формула.

Интересно, что даже если взаимодействие между частицами существовало в какой-то момент времени, а потом действовать перестало, волновая функция не вернется к факторизованному состоянию. Она останется перепутанной.

Такие состояния называются *связанными*. Есть множество процессов, в которых частицы взаимодействуют друг с другом в течении короткого момента времени, а потом из области взаимодействия просто улетают. Например, просто столкновения двух частиц: столкнулись и разлетелись в разные стороны, взаимодействие кончилось. Или ядерная реакция. Ядро распадается с появлением нескольких осколков, эти осколки, пока процесс распада происходил, друг с другом взаимодействовали. Потом они полетели в разные стороны. Либо нелинейный оптический процесс, который важен с точки зрения лабораторной реализации. Во всех случаях речь идет о

нескольких частицах, которые когда-то взаимодействовали. Значит волновая функция перепутана. Потом же закончили взаимодействовать и вроде бы движутся в противоположные или разные стороны в пространстве. При этом перепутанность никуда не девается.

В частности, с экспериментальной и понятийной точки зрения, важно смотреть на законы сохранения, квантовые числа, которые есть для пары частиц в целом, но отсутствуют для каждой частицы по отдельности. Например, если у нас распадалось что-то имеющее нулевой импульс и полетели два осколка, то суммарный импульс этих двух осколков равен нулю. Это знаем совершенно точно. В то время импульс каждого из осколков нельзя определить чему равен, так как нет информации какая реакция происходила в системе.

Такое знание про систему в целом, когда система уже не взаимодействует, а осколки разлетелись далеко, является причиной трудный для понимания мест интерпретации квантовой теории.

Первый из них – парадокс Эйнштейна — Подольского — Розена.

В оригинальной формулировке – это мысленный эксперимент, предназначенный для «нападения» на принцип неопределенности. Рассмотрим ситуацию, когда ядро распадалось и осколки полетели в разные стороны

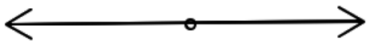

Рис. 10.1. Распад ядра

Для кадой частицы можно записать соотношение неопределенности:

$$(\triangle x)^2(\triangle p)^2 \geqslant \frac{\hbar^2}{4}$$

Мы не можем одновременно хорошо померить у данной частицы и координату и импульс. Однако, указывают Эйнштейн, Подольский, Розен, что есть способ косвенно определить с хорошей точностью эти параметры. Можно померить у частицы, например, координату, «испортим» ее импульс, но потом обратиться к другому каналу и померить там импульс по закону сохранения. Таким образом, узнаем одновременно и координату и импульс.

Никакого парадокса на самом деле не существует. Все, что запрещается соотношением неопределенностей – это для одной частицы по мере измерений. В данном случае присутствуют скрытые знания: суммарный импульс двух частиц равен нулю. Если мы его использовали, то никакого противоречия не получим.

Однако, эксперимент к парадоксу Эйнштейна — Подольского — Розена отношения никакого не имел. Ученые пришли к выводу, что неудобно мерить и координату, и импульс, а удобнее мерить направление спина.

Образование электрон-позитронной пары

Рассмотрим другой эксперимент, в котором рождается электрон-позитронная пара.

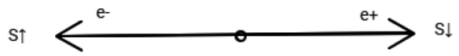

Рис. 10.2. Образование электрон-позитронной пары

Существуют такие ядерные процессы, про которые известно, что суммарный спин родившейся электрон-позитронной пары равен нулю. Таким образом, если мы померили спин электрона и обнаружили, что он направлен, например, вверх, то сразу же знаем, что спин позитрона противоположный.

Разлететься эти две чатицы могут, как было сказано, как угодно далеко. Существует несколько уровней понимания. Первый уровень – пока не измерили спин для электрона, у позитрона он может быть произвольный. Когда измерили, мгновенно уже знаем, что у позитрона спин противоположен. В таком понимании нет ничего квантового, есть некая скрытая информация о том, что спин направлен куда-то.

Это утверждение является правдой наполовину и называется *теорией скрытых параметров* и то, на что пытался заменить квантовую механику Эйнштейн. Ученый выступал против представления о взаимных корреляциях, взаимных перепутанностей состояний, находящихся на большом расстоянии друг от друга. Пытался ввести теорию, в которой говорил, что с каждой частицей существует пока неизвестная классическая переменная – стрелка, которая произвольно смотрит. Если стрелка смотрит вниз, то спин направлен вниз и наоборот. Даже в такой постановке тут есть немного больше, так как спин можно мерить не только вверх-вниз, но и вдаль - вперед (Z-координаты). Операторы $[s,Z]$ и $[s,X]$ не коммутируют и одновременно измерить их

невозможно. Но можно объяснить так же, как и в теории Эйнштейна — Подольского — Розена: давайте у позитрона измерим $[s,Z]$, а у электрона измерим $[s,X]$. Тем самым смогли померить две проекции спина, операторы, которые не коммутируют друг с другом. Но опять же, измерили только одну величину, а другую взяли из косвенной информации.

Рассмотрим экспериментальную реализацию. Она стала возможной в первую очередь в оптике. В нелинейной оптике есть процессы распада фотона на два кусочка.

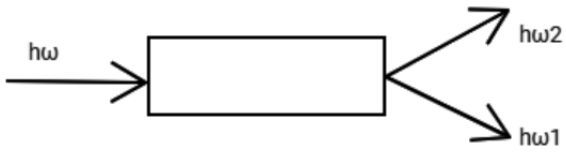

Рис. 10.3. Распад фотона

$$\omega = \omega_1 + \omega_2$$

Несложно понять, что эти два фотона друг с другом коррелируют. Это не два отдельных фотона, а два осколка одной частицы. Они находятся друг с другом в перепутанном состоянии, таков процесс спонтанного развала фотонов на две половинки. Этот эффект предсказал Клышко Давид Николаевич в 60-х годах и тут же обнаружил.

Два фотона связанны друг с другом в зависимости от того, как мы расположим. Не будем в технические, оптические детали вдаваться, и с какого типа нелинейности возьмем кристалл, на котором такие бифотоны рождаем. Возможно различные поляризационные состояния этих бифотонов. В том числе возможен прямой аналог пары электрон-позитрон. Значит ситуация, когда это всё в пространстве полиризации происходит, когда, если у одного из этих двух половинок бифотона поляризация горизонтальная, то у другого она точно вертикальная. Если у первого вертикальная, то у второго точно горизонтальная.

Запишем волновую функцию

$$\Psi = \frac{1}{E}(|HV> - |VH>)$$

Ситуация точно такая же, как со спином. Условно написаны горизонтальная и вертикальная, выбрав какую-то систему координат. Это свойство сохранится при любом повороте системы координат. Если у одной из половинок бифотона поляризация будет измерена и окажется направленной вдоль определённого направления, то это будет означать, что у второго поляризация «смотрит» перпендикулярно. То, что выходит, принято называть в определённой области ЭПР-состояниями.

Измерять поляризацию и считать фотоны ученые умеют хорошо. Поляризацию мерить умели всегда, а считать фотоны - сложность была с тем, чтобы сделать детекторы, которые не шумят срабатывают с вероятностью, близкой к 100%, когда фотон на них падает. Такие детекторы с высоким квантовым выходом уже есть.

Неравенство Белла

Рассмотрим неравенство Белла – это достаточно простые по формулировкам, но такие неприятные для понимания условия, которые в математике называются «теорема о том, чего не может быть». Если неравенства Белла нарушаются, это означает отсутствие возможности построить теорию со скрытыми параметрами.

Нарисуем конкретную экспериментальную схему.

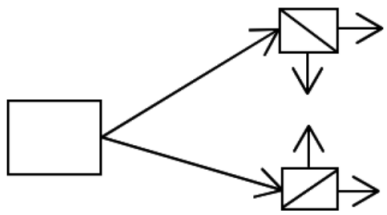

Рис. 10.4. Экспериментальная схема

Возьмём источник бифотонов и два канала. Бифотон летит и в один канал, и во второй. На концах поставим измерители поляризации. Они будут устроены следующим образом: это оптическая система, специальная призма, которая одну поляризацию отражает, направляя в сторону от себя, а другую поляризацию пропускает через себя. С другой стороны поставим детекторы.

Если приходит фотон, в зависимости от того, поляризация у него горизонтальная или вертикальная, «щёлкает» один детектор или второй. Два детектора в одном

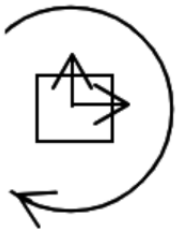

Рис. 10.5. Схема в плоскости

плече не «щёлкают» никогда. Нарисуем, как это всё выглядит в полоскости, если смотреть непосредственно на луч.

Есть точка, куда луч приходит и есть схема, которая крутится вокруг оси, проходящей через луч. Значит,срабатывает один детектор, если поляризация вертикальная, и срабатывает другой детектор, если поляризация горизонтальная.

Давайте поворачивать детектор на угол φ. Выясним зависимость вероятности срабатывания одного детектора и другого от угла поворота: если исходная поляризация горизонтальная, то вероятность срабатывания от угла поворота для детекторов:

$$H \Rightarrow sin^2\varphi, cos^2\varphi$$
$$V \Rightarrow cos^2\varphi, sin^2\varphi$$

Можно писать эти выражения более простой функцией. Введем величину для верхнего детектора A, которая равняется 1, если сработал первый канал, либо -1, если сработал второй. Если ввести вращение детектора. То для первого канала будет

$$A(\alpha) = cos\alpha$$

Это тригонометрическая функция, которая меняется от -1 до 1. Тоже самое для вторго канала.

$$B(\beta) = sin\beta$$

Забудем на время квантовую механику и вооружимся теорией скрытых параметров. Пусть каждый фотон уже знает какой поляризацией он обладает в тот момент, как вылетел. В соответствии с постулатами квантовой механики он узнаёт об этом и выбор происходит в момент измерения. Теория скрытых параметров говорит, что

это не так, что он уже несёт на себе некую перменную и она содержит информацию. Значит несут оба.

Составим сложную функцию четырёх углов: двух возможных углов, на которые повёрнут первый детектор и двух возможных углов, на которые повёрнут второй детектор.

$$S(\alpha,\alpha',\beta,\beta') =< A(\alpha)B(\beta) - A(\alpha')B(\beta) + A(\alpha)B(\beta') + A(\alpha')B(\beta') >=$$
$$=< B(\beta)(A(\alpha) - A(\alpha')) + B(\beta')(A(\alpha) + A(\alpha')) >$$
$$|S| \leqslant 2$$

Напишем квантово-механически, что получилось. Увидим, что может получаться величина больше, чем 2. Это и будет неравенство Белла, означающее, что что-то не то с этим рассмотрением. Важно понимать, мы предположили, что в каждом эксперименте, в каждой реализации фотон знает уже куда распространяется. При этом есть по отдельности распределение величины A -1 или 1 и по отдельности величины B - 1 или -1. Это утверждение неверно. Нет никакого вероятного распределения по отдельности для величины A и B, потому что состояния перепутаны. Но если это предположить, то совершенно неважно с какими свойствами связано.

Рассмотрим их произведение в целом $< AB >$. Если каждая из величин A и B может принимать два значения 1 и -1, то произведение может принимать четыре значения:

$$< AB >= P_{\uparrow,\uparrow} - P_{\uparrow,\downarrow} - P_{\downarrow,\uparrow} + P_{\downarrow,\downarrow} =$$
$$\alpha = \beta$$

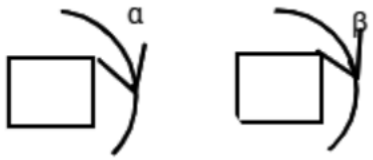

Рис. 10.6. Поворот схемы на углы

$$= \frac{1}{2}(sin^2(\alpha-\beta) - cos^2(\alpha-\beta) - cos^2(\alpha-\beta) + sin^2(\alpha-\beta)) = -2cos2(\alpha-\beta)$$

$$S(\alpha,\alpha',\beta,\beta') = cos2(\alpha-\beta) - cos2(\alpha'-\beta) + cos2(\alpha-\beta') + cos2(\alpha'-\beta') =$$

Пусть есть большая свобода, а так же четыре угла: один из них общий, три независимых переменных. Сузим эту свободу, сказав что совпадают аргументы всех косинусов, которые с плюсом. Значит:

$$\alpha-\beta = \alpha-\beta' = \alpha'-\beta' = \frac{\gamma}{2}$$
$$= 3cos\gamma - cos3\gamma = 2\sqrt{2}$$
$$\frac{3\gamma}{2} = \alpha'-\beta = (\alpha'-\beta') + (-\alpha+\beta') + (\alpha-\beta)$$
$$3\gamma = \gamma+\gamma+\gamma$$

Ищем максимум функции:

$$sin\gamma = sin3\gamma$$

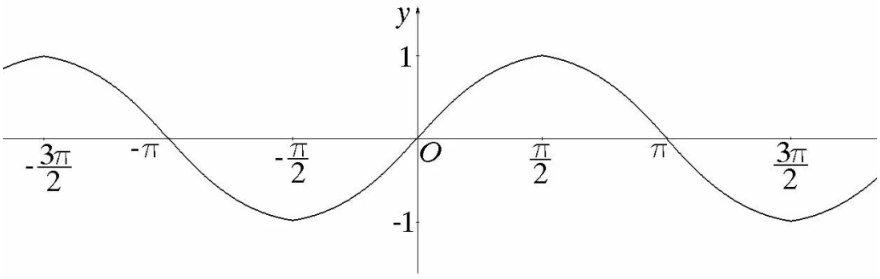

Рис. 10.7. График синуса

$$\gamma = \frac{\pi}{4}$$
$$cos\frac{\pi}{4} = \frac{\sqrt{2}}{2}$$
$$cos\frac{3\pi}{4} = -\frac{\sqrt{2}}{2}$$

Дальше дело за экспериментаторами. Сделать хорошие детекторы, хорошую оптику. Достоверно увидеть, что функция Белла превышает 2.

Таким образом, из предположения о наличии неких скрытых параметров, которые несёт каждый из фотонов, получилось строгое равенство. Более строгое, чем величина, даваемая квантовым механическим расчётом при правильном повороте элементов установки. Значит неравенства Белла показывают, что теории со скрытыми параметрами, которые, как частный случай, дают имеющуюся квантовую теорию, быть не может. Это определённый класс таких теорий, более естественных – *локальные теории скрытых параметров*.

Практическое значение полученных результатов очень велико. Если действительно скрытых параметров нет, значит действительно и точно выполняются неравенства Гейзенберга, и действительно не работают теоремы о запрете клонирования и тому подобных. Действительно невозможно произвести измерения, не испортив состояния системы. С точки зрения современной индустрии действительно невозможно прослушать правильно организованную квантово-шифрованную передачу данных.

ФИЗИЧЕСКИЙ
ФАКУЛЬТЕТ
МГУ ИМЕНИ
М.В. ЛОМОНОСОВА

teach-in
ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ