



ФИЗИЧЕСКИЙ  
ФАКУЛЬТЕТ  
МГУ ИМЕНИ  
М.В. ЛОМОНОСОВА

*teach-in*  
ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

# ВВЕДЕНИЕ В КВАНТОВУЮ ФИЗИКУ. СЕМИНАРЫ

СТРАУПЕ  
СТАНИСЛАВ СЕРГЕЕВИЧ

ФИЗФАК МГУ

КОНСПЕКТ ПОДГОТОВЛЕН  
СТУДЕНТАМИ, НЕ ПРОХОДИЛ  
ПРОФ. РЕДАКТУРУ И МОЖЕТ  
СОДЕРЖАТЬ ОШИБКИ.  
СЛЕДИТЕ ЗА ОБНОВЛЕНИЯМИ  
НА [VK.COM/TEACHINMSU](https://vk.com/teachinmsu).

ЕСЛИ ВЫ ОБНАРУЖИЛИ  
ОШИБКИ ИЛИ ОПЕЧАТКИ,  
ТО СООБЩИТЕ ОБ ЭТОМ,  
НАПИСАВ СООБЩЕСТВУ  
[VK.COM/TEACHINMSU](https://vk.com/teachinmsu).



БЛАГОДАРИМ ЗА ПОДГОТОВКУ КОНСПЕКТА  
СТУДЕНТКУ ФИЗИЧЕСКОГО ФАКУЛЬТЕТА МГУ  
**АНДРЕЕВУ АННУ СЕРГЕЕВНУ**



## Содержание

### Семинар 1. Абсолютно черное тело и характерные масштабы микромира

Абсолютно черное тело .....	7
Закон Стефана-Больцмана.....	8
Формулы Вина и Рэлея-Джинса .....	9
Формула Планка, закон смещения Вина .....	9
Законы фотоэффекта.....	12

### Семинар 2. Спектры излучения и интерференция

Разбор домашнего задания .....	14
Оценка: атомный масштаб ускорения.....	14
Мощность излучения атома .....	15
Спектр излучения атома .....	16
Спектр теплового излучения.....	18
Интерферометр Майкельсона .....	19
Интерферометр Юнга .....	21
Радиус когерентности Солнца .....	23

### Семинар 3. Дифракция

Задача .....	24
Дифракция света на щели конечной ширины .....	24
Дифракция света на периодической решетке.....	26
Правило квантования Бора.....	27
Опыт Дэвиссона-Джермера.....	29
Соотношение неопределенностей Гейзенберга .....	30

### Семинар 4. Вывод формулы Планка. Эффект Казимира

Задача про глубину потенциальной ямы .....	33
--	----

Разбор домашнего задания .....	33
Вывод формулы Планка для объемной плотности энергии поля .....	34
Вакуумные флуктуации. Сила и давление Казимира .....	37

### Семинар 5. Операторы в квантовой физике

Задача на СЗ и СВ матрицы .....	40
Квантовая теория.....	41
Эрмитовы операторы .....	43
Среднее значение и дисперсия оператора .....	45
Коммутаторы. Соотношение неопределенностей Гейзенберга.....	46

### Семинар 6. Одномерное движение материальной точки

Задача на определение коммутатора .....	48
Операторы координаты, импульса и сдвига в бесконечномерном пространстве...48	
Плотность вероятности.....	49
Уравнение Шредингера .....	51
Движение материальной точки по прямой .....	51
Свободное движение материальной точки .....	52
Потенциальная ступенька.....	53
Потенциальный барьер конечной ширины.....	55

### Семинар 7. Прохождение частиц через потенциальные ямы

Задача .....	57
Дискретность спектра энергий.....	58
Борновский параметр.....	59
Потенциал в виде дельта-функции .....	60
Прямоугольная потенциальная яма.....	62

**Семинар 8. Гармонический осциллятор**

Модель гармонического осциллятора .....	66
Спектр СЗ гамильтониана .....	67
СФ гамильтониана .....	69
ВФ в координатном представлении .....	70
Поведение частицы в одномерном периодическом потенциале .....	71
Задача (гребенка Дирака) .....	72

**Семинар 9. Оператор момента импульса. Матрицы Паули**

Задача .....	75
Оператор момента импульса .....	75
СФ операторов проекций момента .....	76
Квадрат модуля оператора момента .....	77
Их коммутационное соотношение .....	77
СЗ проекций момента и квадрата момента .....	78
Опыт Штерна-Герлаха. Матрицы Паули .....	79

**Семинар 10. Атом водорода**

Задача .....	83
Задача двух тел в классической механике (атом водорода) .....	84
Задача двух тел в квантовой механике (атом водорода) .....	84
Одномерное уравнение Шредингера для кулоновского потенциала .....	86
Спектр СЗ энергий атома водорода .....	87
Вид волновых функций .....	89

**Семинар 11. Атом во внешнем поле**

Задача .....	90
Теория возмущений .....	91
Метод последовательных приближений .....	92

---

Вероятности переходов .....	93
Гармоническое возмущение.....	93
Двухуровневая система .....	94



## Семинар 1

### Абсолютно черное тело и характерные масштабы микромира

#### Абсолютно черное тело

Всем известно, что квантовая физика началась с попыток человечества описать закон излучения абсолютно черного тела. Это удалось сделать Макс Планку в начале XX века. Используемые им методы легли в основу того, что мы сейчас знаем как квантовую теорию.

Разберемся, как устроены законы поглощения и излучения света телами. Давно известно, что тела поглощают и излучают электромагнитные волны, обмениваясь при этом энергией с полем излучения. Каждое тело обладает *поглощательной способностью*  $\alpha$ :

$$\alpha = \frac{P_{\text{погл}}}{P_{\text{пад}}}, \text{ где}$$

$P_{\text{погл}}$  – поглощенная телом мощность (энергия в единицу времени),  $P_{\text{пад}}$  – падающая на тело мощность. Из эксперимента известно, что *поглощательная способность является функцией частоты излучения и температуры тела*:  $\alpha = (\omega, T)$ .

Кроме того, чтобы поглощать излучение, тело должно излучать. Иначе оно постоянно будет забирать энергию поля, то есть будет неограниченно нагреваться, чего в эксперименте не наблюдается. Так, любое тело обладает *излучательной способностью*  $\varepsilon(\omega, T)$ , которая характеризует связь мощности излучения с единицы поверхности тела в единичный спектральный интервал:

$$d P_{\text{изл}} = \varepsilon(\omega, T) d\sigma d\omega.$$

Пусть тело заключено в непроницаемую для излучения полость и находится в термодинамическом равновесии с окружающим его излучением:

$$dP_{\text{погл}} = dP_{\text{изл}} \Rightarrow$$

$$\alpha(\omega, T) dP_{\text{пад}} = \varepsilon(\omega, T) d\sigma d\omega.$$

Заменим тело в полости на другое, которое обладает той же геометрической формой, но изготовлено из другого материала. Такое тело будет обладать другими поглощательной и излучательной способностями (например, распределение излучательной способности как функции частот определяет воспринимаемые нами

цвета, разные для тел из разных материалов). Для этого тела получим аналогичную формулу:

$$\tilde{\alpha}(\omega, T) dP_{\text{пад}} = \tilde{\varepsilon}(\omega, T) d\sigma d\omega \Rightarrow$$

Получаем инвариант, не зависящий от материала, из которого изготовлено тело.

$$inv = \frac{\varepsilon(\omega, T)}{\alpha(\omega, T)} = \frac{\tilde{\varepsilon}(\omega, T)}{\tilde{\alpha}(\omega, T)} = \frac{dP_{\text{пад}}}{d\sigma d\omega}.$$

Это утверждение получил Кирхгоф в 1859 году. Утверждение иногда называют *законом Кирхгофа*.

Теперь для упрощения задачи возьмем тело, поглощающее все, падающее на него излучение, то есть  $\alpha(\omega, T) \equiv 1$ . Такое тело по определению называется *абсолютно черным (АЧТ)*. Для него  $\varepsilon_{\text{АЧТ}}(\omega, T)$  – некоторая универсальная функция. Появляется вопрос, как устроена эта функциональная зависимость. Попытки найти ответ на этот вопрос привели Макса Планка к выводам, из которых началась квантовая теория. Но попытки описать функциональную зависимость  $\varepsilon_{\text{АЧТ}}(\omega, T)$  начались задолго до Планка. Этим начал заниматься еще Вин в конце XIX века.

### Закон Стефана-Больцмана

В 1894 году Вин, пользуясь термодинамическими соображениями, установил:

$$\varepsilon(\omega, T) = \alpha \omega^3 f\left(\beta \frac{\omega}{T}\right), \text{ где}$$

$\alpha, \beta$  – постоянные, необходимые для согласования размерности. Конкретизируя вид функциональной зависимости  $f\left(\beta \frac{\omega}{T}\right)$ , можно установить ряд любопытных зависимостей.

Зависимость полной мощности излучения АЧТ от температуры:

$$\begin{aligned} J &= \int_0^{\infty} \varepsilon(\omega, T) d\omega = \int_0^{\infty} \alpha \omega^3 f\left(\beta \frac{\omega}{T}\right) d\omega = \left[\xi = \beta \frac{\omega}{T}\right] = \alpha \int_0^{\infty} \frac{T^3}{\beta^3} \left(\beta \frac{\omega}{T}\right)^3 \frac{T}{\beta} f\left(\beta \frac{\omega}{T}\right) d\left(\frac{\beta \omega}{T}\right) \\ &= \frac{\alpha}{\beta^4} T^4 \int_0^{\infty} \xi^3 f(\xi) d(\xi) = T^4 \cdot const \Rightarrow \end{aligned}$$

$$J = \sigma \cdot T^4 - \text{закон Стефана – Больцмана, где}$$

$$\sigma = 5,67 \cdot 10^{-5} \frac{\text{эрг}}{\text{см}^2 \cdot \text{с} \cdot \text{К}^4} - \text{постоянная Стефана-Больцмана.}$$



Обратим внимание на очень резкий характер зависимости полной мощности излучения от температуры. Если рассмотрим поверхность батареи при комнатной температуре  $T_K = 300\text{K}$  и поверхность солнца  $T_C = 6000\text{K}$ , то с единицы поверхности эти два тела будут излучать сильно разное количество энергии:

$$\frac{J_C}{J_K} = 1,6 \cdot 10^5.$$

### Формулы Вина и Рэлея-Джинса

Функция  $f\left(\beta \frac{\omega}{T}\right)$  должна иметь безразмерный аргумент:

$$f\left(\beta \frac{\omega}{T}\right) = f\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right), \text{ где}$$

$[\hbar] = \text{эрг} \cdot \text{с}$  – постоянная Планка. Далее необходимо конкретизировать зависимость  $f$  от аргумента. Вин получил следующее выражение:

$$\varepsilon(\omega, T) = \alpha \omega^3 \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - \text{формула Вина.}$$

Из эксперимента получалось, что выражение для излучательной способности АЧТ неплохо работало для высоких частот. Для низких частот наблюдалось сильное расхождение, зависимость  $\varepsilon(\omega, T) \sim \omega^2$ . Объяснить эту зависимость удалось Рэлею и Джинсу приблизительно в 1905 году. Они получили следующее выражение, хорошо описывающее излучательную способность при низких частотах:

$$\varepsilon(\omega, T) = \frac{\omega^2}{4\pi^2 c^2} kT - \text{формула Рэлея – Джинса.}$$

Это выражение будет получено через несколько семинаров с использованием модели гармонических осцилляторов для электромагнитного поля. Оно полностью теоретически обосновывается в рамках классической физики, где поле описывается уравнениями Максвелла, и классической термодинамики. При высоких частотах формула Рэлея-Джинса не соответствует действительности – интеграл от параболической зависимости от частоты расходится (ультрафиолетовая катастрофа). Очевидно, что формула не может быть верной во всем диапазоне частот.

### Формула Планка, закон смещения Вина

Макс Планк, решая вопрос ультрафиолетовой катастрофы пришел к своей формуле, являющейся в каком-то роде объединением формулы Вина и формулы Рэлея-Джинса. Если посмотреть на ситуацию с исторической точки зрения, то не было осознания того, что существует проблема ультрафиолетовой катастрофы, потому что

работа Планка появилась практически одновременно с работой Рэля-Джинса. Планк рассмотрел обе ситуации и попробовал каким-то образом придумать формулу, которая бы их объединяла, и посмотреть, как эта формула объясняет экспериментальные данные. Посмотрим на ситуацию с точки зрения безразмерной величины  $\xi = \frac{\hbar\omega}{kT}$ :

$$\varepsilon(\xi) = \begin{cases} \xi^2 & \text{при малых частотах, } \xi \rightarrow 0 \\ \xi^3 e^{-\xi} & \text{при больших частотах, } \xi \rightarrow \infty \end{cases}$$

Планк, внимательно посмотрев на выражение, сделал то, что сейчас мы называем сшивкой асимптотик:

$$\varepsilon(\xi) = \xi^3 \frac{1}{e^{\xi} - 1}$$

Осталось восстановить размерные постоянные:

$$\varepsilon(\omega, T) = \frac{\hbar\omega^3}{4\pi^2 c^2} \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} \quad \text{— формула Планка.}$$

Полученная формула удивительно хорошо описывает экспериментальные данные и в качестве асимптотик имеет классическую формулу Рэля-Джинса при маленьких частотах и эмпирическую формулу Вина при больших (рис. 1.1).

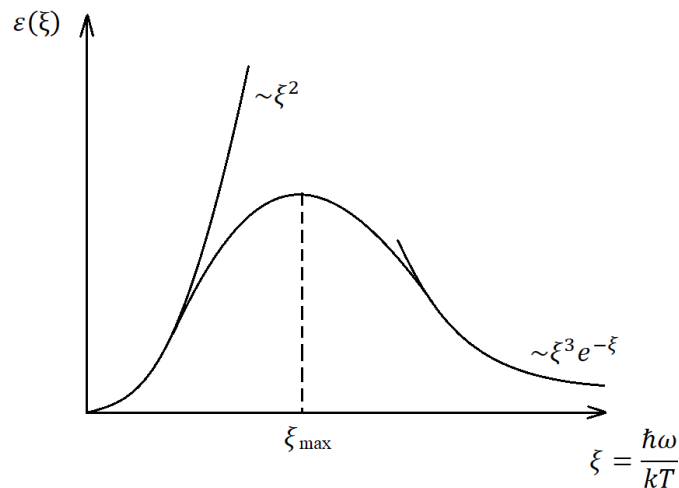


Рис.1.1. График зависимости излучательной способности от безразмерной величины  $\xi$ , иллюстрирующий формулы Вина, Планка и Рэля-Джинса.

Характерной особенностью формулы Планка является наличие максимума излучательной способности  $\xi_{max}$ . Для его определения нужно продифференцировать формулу Планка по  $\xi$ , приравнять производную к нулю. Кроме соответствующего уравнения будет  $\xi_{max}$ . На самом деле несколько проще дифференцировать формулу Вина, и, как можно убедиться, значение максимума для формулы Вина не будет сильно отстоять от значения для формулы Планка, поэтому будем работать с формулой Вина:

$$3\xi^2 e^{-\xi} - \xi^3 e^{-\xi} = 0 \Rightarrow \xi_{max} = 3.$$

Из формулы Планка:

$$(3 - \xi)e^{\xi} = 3 -$$

трансцендентное уравнение, решить его аналитически не получится. При численном решении получается  $\xi_{max} \approx 2,82$ . Это означает, что:

$$\frac{\hbar\omega_{max}}{kT} = 2.82 -$$

имеет максимум для некоторой частоты. Частота, соответствующая максимуму излучения:

$$\omega_{max} = \gamma T.$$

То есть, чем больше температура АЧТ, тем к более высоким частотам смещена кривая, соответствующая планковскому спектру (*закон смещения Вина*). Соответственно для длин волн:

$$\lambda_{max} = \frac{const}{T},$$

$\varepsilon(\lambda, T)d\lambda = \varepsilon(\omega, T)d\omega$  (т. к. имеют смысл распределений)  $\Rightarrow$

$$\varepsilon(\lambda, T)d\lambda = \varepsilon(\omega, T) \left|_{\omega = \frac{2\pi c}{\lambda}} \frac{d\omega}{d\lambda} = \frac{2\pi hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\frac{\hbar c}{\lambda kT}} - 1}.$$

Последнее замечание на счет формулы Планка это то, почему излучательная способность АЧТ является универсальной функцией, инвариантна относительно материала тела. Очевидно потому, что она связана на самом деле со свойствами излучения. Установить эту связь можно следующим образом: если мы рассмотрим величину  $u(\omega, T)$  – объемную плотность энергии излучения (объемная плотность энергии электромагнитного поля, находящегося в тепловом равновесии с АЧТ при температуре  $T$ ), то для этой величины не сложно показать:

$$u(\omega, T) = \frac{4}{c} \varepsilon(\omega, T).$$

Вывести эту формулу можно с использованием уравнений Максвелла, но проще получить эту формулу, представляя свет в качестве потока частиц, движущихся со скоростью света. Если посмотрим на то, как такой поток частиц обменивается энергией с поверхностью тела, то окажется, что величины, описывающие энергию поля в единице объема, связаны с излучательной способностью показанной зависимостью.

$$u(\omega, T) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}$$

это выражение также часто называют *формулой Планка*. Эта формула будет выведена на следующих семинарах.

### Законы фотоэффекта

Итак, для объяснения вида функциональной зависимости излучательной способности или, что тоже самое, объемной плотности энергии излучения от частоты и температуры Планку пришлось ввести понятие фотона – дискретной порции энергии, с которой излучение поглощается и излучается телами:

$$E = \hbar\omega.$$

Кроме формулы Планка есть другое свидетельство того, что излучение действительно нужно описывать с помощью квантованных порций энергии – особенности фотоэффекта, которые легко и просто объясняются исходя из представления о электромагнитном излучении как о потоке фотонов.

Законы фотоэффекта известны с конца XIX века, но удовлетворительного объяснения им не было найдено до 1905 года, когда это удалось сделать Эйнштейну, за что он и получил Нобелевскую премию. Эйнштейн пошел чуть дальше Планка и сказал, что излучение не только поглощается и излучается порциями, но и существует в виде частиц, дискретных сущностей, энергия которых связана с частотой.

Как при этом объясняются закономерности фотоэффекта? Фотоэффект – эффект выбивания электронов из поверхности металла излучением. Законы фотоэффекта:

- 1) Закон Столетова (1890 год): интенсивность фототока пропорциональна интенсивности излучения, падающего на фотокатод:

$$i_p \sim I.$$

- 2)  $E_K = \frac{mv^2}{2} \sim \omega$  и не зависит от интенсивности:

$$\hbar\omega = \frac{mv^2}{2} + A_{\text{вых}} - \text{формула Эйнштейна,}$$

где  $A_{\text{вых}}$  — работа выхода.

3) Существует красная граница фотоэффекта:

$$i_p(\omega) = 0, \omega < \omega_{\text{кр}}.$$

Понятно, что из формулы Эйнштейна выражение для красной границы определяется просто:

$$\hbar\omega_{\text{кр}} = A_{\text{вых}}.$$



## Семинар 2

### Спектры излучения и интерференция

#### Разбор домашнего задания

В качестве одной из задач предлагалось составить планковскую систему единиц (это система единиц, которая включает в себя исключительно фундаментальные константы  $\hbar, c, G$ ). Выразим основные масштабы длины, массы и времени в этой системе единиц.

Запишем размерности заданных величин:

$$[\hbar] = ML^2T^{-1}; \quad [c] = LT^{-1}; \quad [G] = M^{-1}L^3T^{-2}.$$

Комбинируя эти величины, получим длину, массу и время:

$$[\hbar c] = ML^3T^{-2} \Rightarrow \left[ \frac{\hbar c}{G} \right] = M^2 \Rightarrow M_{Pl} = \sqrt{\frac{\hbar c}{G}} \approx 2,17 \cdot 10^{-5} \text{г};$$

$$\left[ \frac{\hbar}{c} \right] = ML \Rightarrow \left[ \frac{\hbar}{c M_{Pl}} \right] = L \Rightarrow L_{Pl} = \sqrt{\frac{\hbar G}{c^3}} \approx 1,61 \cdot 10^{-33} \text{см};$$

$$T = \left[ \frac{L_{Pl}}{c} \right] \Rightarrow T_{Pl} = \sqrt{\frac{\hbar G}{c^5}} \approx 5,36 \cdot 10^{-44} \text{с}.$$

Характерная длина на много порядков меньше характерного атомного масштаба. Планковское время на много порядков меньше чем характерные для атомных систем времена. Притом масса удивительно большая. В целом, можно сказать, что планковские характерные масштабы настолько крайне далеки от атомных. На таких масштабах существенным становится, например, гравитационное взаимодействие. И еще одно следствие из этих оценок: гравитационное взаимодействие на атомных масштабах крайне мало, им можно пренебречь по сравнению с кулоновским взаимодействием.

**Оценка: атомный масштаб ускорения** (на очных семинарах предлагается решить самостоятельно)

$$[\ddot{x}_{ат}] = \frac{L}{T^2} = a_0 \omega_{ат}^2 = \frac{v_{ат}^2}{a_0};$$

$$v_{\text{ат}} = \frac{e^2}{\hbar} \Rightarrow \ddot{x}_{\text{ат}} = \frac{me^6}{\hbar^4} \approx 9 \cdot 10^{24} \frac{\text{см}}{\text{с}^2} \approx 10^{22} g.$$

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$$

Зададимся вопросом: у нас есть заряженная частица, которая движется с огромным ускорением. Согласно постулатам классической электродинамики, заряженная частица, движущаяся с ускорением должна излучать электромагнитные волны, терять энергию и замедляться. Попробуем оценить среднюю мощность излучения одиночного атома, считая, что в нем электрон движется с ускорением  $\ddot{x}_{\text{ат}} = 9 \cdot 10^{24} \frac{\text{см}}{\text{с}^2}$ .

### Мощность излучения атома

Возьмем выражение для мощности дипольного излучения из курса электродинамики:

$$P = \# \frac{e^2 \ddot{x}^2}{c^3}, \text{ где } \# \text{ — безразмерный коэффициент.}$$

Подставим формулу для ускорения  $\ddot{x} = a_0 \omega^2$  в формулу мощности. Для того, чтобы понять, насколько большая получится мощность, зададимся вопросом: а можно ли точечный объект, излучающий с такой мощностью, увидеть глазом? Рассмотрим наиболее благоприятную для глаза ситуацию, когда частота будет лежать в зеленой области спектра  $\omega = 3,7 \cdot 10^{15} \text{с}^{-1}$ , где чувствительность глаза максимальна. Подставим в формулу для мощности и получим:

$$P \approx \frac{e^2 a_0^2 \omega^4}{c^3} \approx 4,5 \cdot 10^{-5} \frac{\text{эрг}}{\text{с}}.$$

Точечный светящийся объект проще всего сравнить с другими точечными объектами, которые мы регулярно наблюдаем, например с звездами на грани (или уже за гранью) видимости. Посчитаем интенсивность излучения и сравним с тем, что мы ожидаем для звезд:

$$I = \frac{P}{4\pi R^2}, \text{ где}$$

$R$  — расстояние, с которого мы наблюдаем атом. Пусть  $R = 10 \text{ см}$ . Тогда:

$$I \approx 3,5 \cdot 10^{-8} \frac{\text{эрг}}{\text{с} \cdot \text{см}^2}.$$

Для звезды воспользуемся эмпирическими данными. Для звезд, как вы знаете, есть логарифмическая шкала интенсивности, которая называется абсолютной звездной величиной. Звезда первой величины, например, Вега, у которой интенсивность излучения на поверхности Земли  $I_0 = 2,7 \cdot 10^{-5} \frac{\text{Эрг}}{\text{с} \cdot \text{см}^2}$ . Чтобы получить абсолютную звездную величину нашего атома, нужно поделить одну интенсивность на другую и взять логарифм. Учтем, что атом по условию излучает в максимально удобном для нас спектральном диапазоне, добавим некоторый переводной коэффициент. В результате получится, что звездная величина, соответствующая  $I \approx 3,5 \cdot 10^{-8} \frac{\text{Эрг}}{\text{с} \cdot \text{см}^2}$ , будет между 5 и 6. Глаз хорошо видит звезды, начиная с шестой звездной величины. Следовательно, наблюдая атом с расстояния 10 см, мы можем увидеть его излучение невооруженным глазом.

Так, электрон, движущийся с характерным атомным ускорением, должен излучать достаточно большую мощность в единицу времени, при этом он должен замедляться, терять кинетическую энергию, и в какой-то момент просто упасть на ядро. И *Нильс Бор* в своей модели атома разрешил его *постулативно*. Он сказал, что *в атоме есть стационарные орбиты, по которым электрон движется и при этом не излучает, излучение происходит только при переходах между орбитами*. С точки зрения классической механики и классической электродинамики это не возможно. Тем не менее, теория Бора смогла очень точно предсказать характерные частоты спектральных линий атома водорода.

### Спектр излучения атома

Разберемся, как устроен спектр излучения одиночного атома, считая, что один фотон излучается за ограниченное время. Время излучения одного фотона можно оценить следующим образом:

$$\hbar\omega = P\tau;$$

$$P = 4,5 \cdot 10^{-5} \frac{\text{Эрг}}{\text{с}}, \omega = 3,7 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}, \hbar = 1,05 \cdot 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{с} \Rightarrow$$

$$\tau = 10^{-7} \text{ с}.$$

То есть с одной стороны атом должен очень быстро излучить фотон, а с другой стороны если сравним эту величину с характерным периодом колебаний, то увидим, что это излучение затухает очень медленно.

Предположим, что затухание экспоненциально. Обосновать это пока мы не можем. Предположим, что от времени электрическое поле, соответствующее



одиноким фотону, будет экспоненциально затухать к нулевому значению. Причем характерное время затухания  $\tau$  на много больше периода колебаний (рис. 2.1).

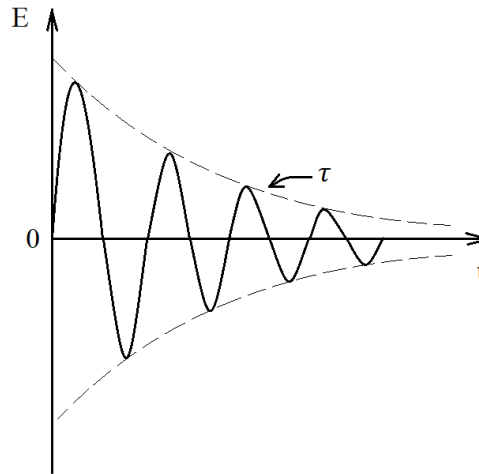


Рис. 2.1. График зависимости электрического поля, соответствующего одиночному фотону, от времени.

Как будет устроен спектр такого излучения? Вспомним, что спектр связан с преобразованием Фурье от временной формы импульса, то есть:

$$E(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} E(\omega) e^{i\omega t} d\omega - \text{формула прямого преобразования Фурье, где}$$

$E(\omega)$  – спектральная амплитуда,  $S(\omega) = |E(\omega)|^2$  – спектральная плотность мощности.

Теперь воспользуемся какой-нибудь простой моделью для излучения одиночного атома, и на основании этой модели попробуем посчитать спектр. Будем считать затухание экспоненциальным:

$$E(t) = E_0 e^{-\frac{t}{\tau}} e^{i\omega_0 t} \Rightarrow$$

$$\text{т.к. } E(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} E(t) e^{-i\omega t} dt - \text{формула обратного преобразования Фурье,}$$

$$E(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{\infty} E_0 e^{-\frac{t}{\tau}} e^{i\omega_0 t} e^{-i\omega t} dt = \frac{E_0}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{\infty} e^{-\left(\frac{1}{\tau} + i(\omega - \omega_0)\right)t} dt = \frac{1}{\frac{1}{\tau} + i(\omega - \omega_0)} \Rightarrow$$

$$S(\omega) = |E(\omega)|^2 = \frac{1}{\frac{1}{\tau^2} + (\omega - \omega_0)^2} \text{ — функция Лоренца,}$$

то есть спектральная плотность мощности в зависимости от частоты имеет лоренцеву форму (рис. 2.2) – максимум в окрестности  $\omega_0$ , затухает достаточно быстро с характерной шириной на полувысоте  $\frac{1}{\tau}$ .

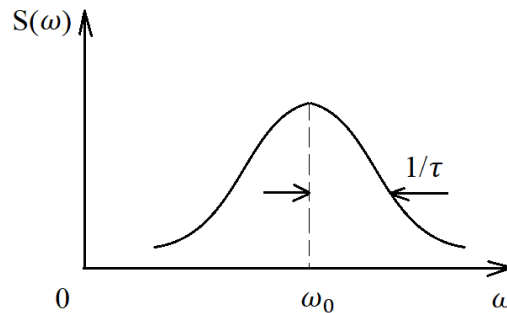


Рис. 2.2. График зависимости спектральной плотности мощности от частоты.

Так, чем больше  $\tau$ , тем более монохроматическое излучение, тем уже спектр. И если обозначим  $\frac{1}{\tau} = \Delta\omega$ , то получим соотношение:

$$\Delta\omega \cdot \tau \approx 1.$$

Оказывается, что это общее свойство Фурье-преобразования - ширина ограниченного во времени импульса связана с его длительностью записанным соотношением. С точки зрения более фундаментальной физики это первый тип соотношения неопределенности, с которым мы сталкиваемся.

### Спектр теплового излучения

Как мы только что выяснили, излучение одиночных атомов хорошо монохроматично, спектр их излучения узкий. Что будет для теплового излучения, например, для солнечного излучения на поверхности Земли?

Для солнечного излучения  $S(\omega)$  будет с хорошей точностью описываться формулой Планка. То есть спектр излучения Солнца очень похож на тепловой (рис. 2.3). Значение максимума:

$$\omega_{max} \approx \frac{3kT}{\hbar}.$$

Характерная ширина спектра:

$$\Delta\omega \approx \frac{2kT}{\hbar}.$$

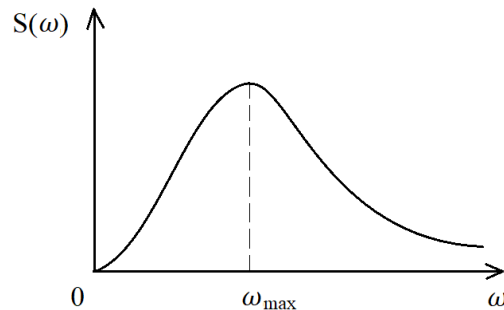


Рис. 2.3. Спектр излучения Солнца.

Соответственно, если возьмем для Солнца температуру  $T = 6000\text{K}$ , что примерно соответствует температуре поверхности звезды, то для  $\Delta\omega$  получим:

$$\Delta\omega \approx 1,6 \cdot 10^{15}\text{c}^{-1}.$$

Это значит, что характерное время  $\tau = \frac{1}{\Delta\omega} \approx 0,6 \cdot 10^{-15}\text{c}$ . То есть излучение будет сильно немонохроматическим. Ширина спектра порядка центральной частоты.

Так получается, потому что спектр АЧТ, которое находится в равновесии с веществом, представляет собой излучение большого количества атомов, которые никак не связаны между собой и складываются случайным образом. В результате получается некоторое случайное поле. Для этого случайного поля характерное время  $\tau$  имеет смысл *времени когерентности*.

### Интерферометр Майкельсона

Рассмотрим простейший эксперимент по наблюдению интерференции, а именно интерферометр Майкельсона. Пусть есть объект, излучающий свет и находящийся очень далеко. Поэтому на измерительный прибор приходит плоская волна. Измерительный прибор устроен так, как показано на рис. 2.4.

Нас интересует зависимость интенсивности от  $\Delta l$  (рис. 2.5). Когда  $\Delta l$  мало, мы увидим интерференционную картину. В зависимости от разности хода по отношению к длине волны, у нас будет либо *конструктивная интерференция* (когда удвоенная разность хода равна целому числу длин волн излучения), либо наоборот *деструктивная интерференция* (уменьшение интенсивности при разности хода, равной полуцелому числу длин волн излучения). С увеличением расстояния между зеркалами в плечах интерференционная картина будет затухать. В конце концов мы увидим

постоянную интенсивность, которая не будет зависеть от разности хода между зеркалами. Характерная длина, на которой происходит затухание называется *длиной когерентности*. Соответственно *время когерентности*:

$$\tau_{coh} = \frac{l_{coh}}{c}$$

характерный масштаб времени, при котором случайное поле ведет себя как монохроматическая волна, характерное время затухания фазы в случайной волне. С экспериментальной точки зрения эта величина измеряется в интерферометре Майкельсона.

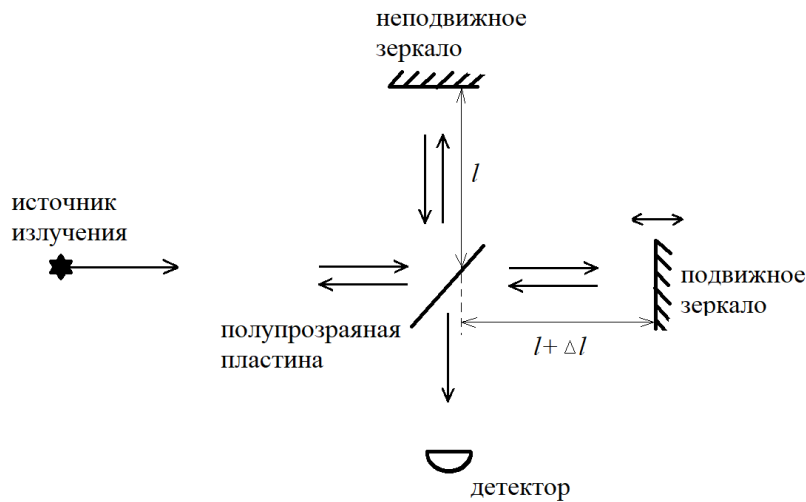


Рис. 2.4. Интерферометр Майкельсона.

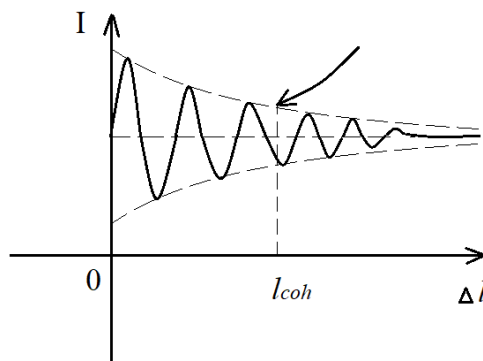


Рис. 2.5. График зависимости интенсивности от разности длин плеч.

## Интерферометр Юнга

Интерферометр Юнга представляет собой экран с двумя щелями, расстояние между которыми  $d$ . На эти щели падает свет от удаленного точечного источника. Пусть этот источник расположен симметрично относительно щели. На экране, находящемся на расстоянии  $L$  от щелей, наблюдаем интерференционную картину. Будем рассматривать дифракцию в дальней зоне, то есть  $L \gg \frac{d^2}{\lambda}$ .

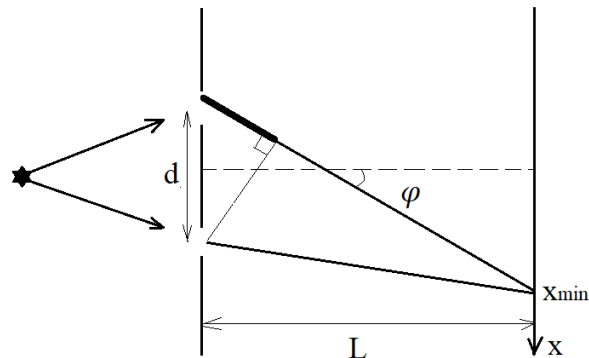


Рис. 2.6. Интерферометр Юнга.

Картина на экране будет представлять собой чередующиеся светлые и темные полосы, направление на которые не сложно найти из геометрических соображений. Разность хода между лучами от двух щелей  $d \sin \varphi$ . Минимум интерференции наблюдается при равенстве разности хода целому числу длин полуволен:

$$d \sin \varphi = \left(n + \frac{1}{2}\right) \lambda, \quad x_{min} = L \sin \varphi = \frac{\lambda L}{d} \left(n + \frac{1}{2}\right).$$

Максимум интерференции наблюдается при равенстве разности хода целому числу длин волн.

Если источник не точечный, то задача усложняется. Пусть есть два источника А и В, расположенных на небольшом расстоянии  $a$  друг относительно друга. Тогда возникает дополнительная разность хода от каждого источника до двух щелей  $O_1$  и  $O_2$ . Это приведет к тому, что интерференционная картина на экране будет смещена. Интерференционные картины источников смещены друг относительно друга, сдвинуты по фазе. Эти картины складываются. В результате зависимость будет синусоидальной, но видимость будет не 100% (рис. 2.7). Можно ввести понятие *видности интерференции*:

$$V = \frac{I_{max} - I_{min}}{I_{max} + I_{min}}$$

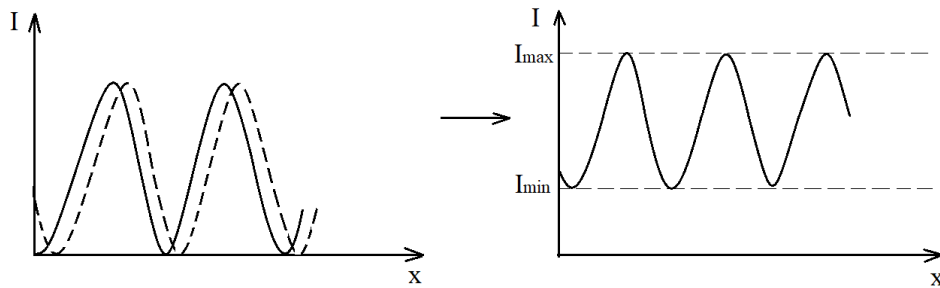


Рис. 2.7. Интерференционная картина от двух источников.

Оценим, как видность падает с увеличением источника. Пусть расстояние от источника до экрана  $z$ . Разности фаз для источников А и В:

$$\Delta\varphi_A = \frac{AO_2 - AO_1}{\lambda}; \quad \Delta\varphi_B = \frac{BO_2 - BO_1}{\lambda}, \quad V \rightarrow 0 \text{ при } |\Delta\varphi_A - \Delta\varphi_B| \sim \pi.$$

Из геометрических соображений:

$$|\Delta\varphi_A - \Delta\varphi_B| \approx \frac{2\pi}{\lambda} \cdot \frac{ad}{z},$$

то есть при увеличении  $a$  видность быстро уменьшится. Если ввести видность интерференции в зависимости от расстояния между щелями для неточечного источника, то увидим картину, изображенную на рис. 2.8. Можно ввести характерный масштаб затухания видности – *радиус когерентности*:

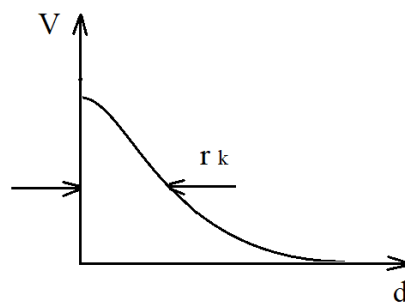


Рис. 2.8. График зависимости видность интерференции от расстояния между щелями для не точечного источника.

$$r_k = \frac{\lambda z}{a},$$

то есть чем больше угловой размер источника, тем больше радиус когерентности при наблюдении из точки на экране со щелями.

### Радиус когерентности Солнца

Радиус Солнца  $a = 1,4 \cdot 10^{11}$  см, расстояние до него  $z = 1,5 \cdot 10^{13}$  см. Следовательно, радиус когерентности:

$$r_k = 100\lambda.$$

Длина когерентности солнечного излучения порядка длины волны. Введем понятие *объема когерентности*:

$$V_k = l_k \cdot r_k^2.$$

Этому объему соответствует такая геометрическая фигура как диск. Эту форму моды поля можем представлять как форму фотона. Если мы хотим увидеть волновые свойства солнечного света, то в интерферометрах параметры нужно подбирать в соответствии с этим объемом когерентности.

Сколько фотонов в объеме когерентности солнечного излучения? Интенсивность излучения Солнца на поверхности Земли – солнечная постоянная  $I_s = 1,4 \cdot 10^6 \frac{\text{эрг}}{\text{с}\cdot\text{см}^2}$ .

Получим оценку в среднем:

$$N \cdot \hbar\omega = \rho \cdot V_k = \frac{4}{c} I_s \cdot (100\lambda)^2 \cdot \lambda \Rightarrow N = \frac{4}{c} I_s \cdot \frac{10^4 \lambda^3}{\hbar\omega} = (\text{для зеленого}) = 0,1.$$

## Семинар 3

## Дифракция

## Задача

Оценить число фотонов в объеме когерентности излучения красной лазерной указки. Длина волны  $\lambda = 650$  нм, мощность  $P = 1$  мВт, радиус пучка  $r = 1$  мм  $= r_k$ , длина когерентности  $l_{coh} = 30$  см.

## Решение:

Энергия поля в объеме когерентности:

$$N\hbar\omega = \rho V_k = \frac{4}{c} I r_k^2 l_{coh} = \frac{4}{c} \frac{P}{\pi r_k^2} r_k^2 l_{coh} \Rightarrow$$

$$N = \frac{4 P l_{coh}}{c \pi \hbar \omega} \approx \frac{P l_{coh} \lambda}{2 \pi^2 c \hbar} \approx 3 \cdot 10^6.$$

То есть в излучении даже слабой лазерной указки фотонов в  $10^7$  раз больше чем в объеме когерентности солнечного излучения.

## Дифракция света на щели конечной ширины

Дифракция заключается в отклонении законов распространения света от геометрической оптики при прохождении препятствий.

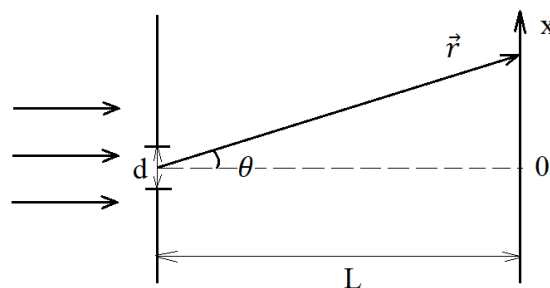


Рис. 3.1. Схема для наблюдения дифракции в дальней зоне.

Рассмотрим простейший случай – бесконечная прямоугольная щель конечной ширины  $d$  (рис. 3.1). Будем рассматривать дифракцию в дальней зоне ( $L \gg d, L \gg \lambda$ ). На щель падает плоская волна от бесконечно удаленного источника. Разность фаз между всеми точками щели одинакова. За начало координат возьмем точку на экране, расположенную симметрично относительно щели. Будем рассматривать поведение



интенсивности в точке на расстоянии  $r$  от щели. Угол между горизонталью и радиус-вектором до точки наблюдения  $\theta$ .

При дифракции в дальней зоне распределение интенсивности зависит только от  $\theta$ :

$$E(\vec{r}) \sim \frac{1}{\sqrt{r}} e^{-ikr} E(\theta), E(\theta) \sim \int_{-\infty}^{\infty} E(x) e^{ikx \sin \theta} dx, \text{ где}$$

$k$  – волновой вектор,  $x$  – координата в плоскости экрана,  $E(x)$  – распределение поля в плоскости щели. При дифракции происходит пространственное преобразование Фурье. Рассмотрим  $k \sin \theta = k_x \Rightarrow e^{ikx \sin \theta} = e^{ik_x x}$ . Введем пространственную спектральную амплитуду  $E(k_x)$  по аналогии с преобразованием Фурье в переменных частота-время:

$$E(k_x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} E(x) e^{ik_x x} dx.$$

$$E(x) = \begin{cases} E_0, & |x| \leq d \\ 0, & |x| > d \end{cases} \Rightarrow$$

$$E(k_x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} E_0 e^{ik_x x} dx = \frac{E_0}{\sqrt{2\pi}} \frac{(e^{ik_x \frac{d}{2}} - e^{-ik_x \frac{d}{2}}) \frac{d}{2}}{\frac{d}{2} i k_x} = -\frac{i}{\sqrt{2\pi}} E_0 d \operatorname{sinc} \left( \frac{k_x d}{2} \right).$$

Теперь если возьмем квадрат модуля амплитуды, получим интенсивности в дальней зоне:

$$I(\theta) = I_{max} \cdot \operatorname{sinc}^2 \left( \frac{k_x d}{2} \right).$$

Проанализируем, как ведет себя эта зависимость:

$$k_x = k \sin \theta = \frac{2\pi}{\lambda} \sin \theta \Rightarrow I(\theta) = I_{max} \cdot \operatorname{sinc}^2 \left( \frac{\pi d}{\lambda} \sin \theta \right).$$

График полученной функции изображен на рис. 3.2. Функция симметричная, затухающая. Если характеризовать масштаб дифракционной картины расстояниями между двумя максимумами, то увидим, что выполняется соотношение:

$$\Delta k_x \cdot d \approx 2\pi.$$

Чем уже щель, тем шире распределение интенсивности в дальней зоне.

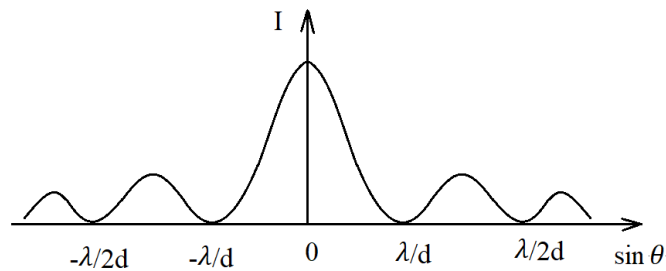


Рис. 3.2. График распределения интенсивности.

### Дифракция света на периодической решетке

Мы движемся к описанию волновых свойств частиц, которые в квантовой теории ведут себя так же, как и фотоны, даже если это частицы конечной массы покоя, например электроны. В частности хотим рассмотреть, как устроена дифракция электронов. Для этого сначала рассмотрим дифракцию света на периодических структурах, потому что дифракция электронов обычно наблюдается на периодических кристаллических решетках.

Пусть есть дифракционная решетка, представляющая собой набор щелей, находящихся на одинаковом расстоянии  $d$  друг от друга (рис. 3.3). Пусть на решетку падает плоская волна. Хотим посмотреть, что будет происходить в некотором направлении, характеризуемом углом  $\theta$ . Разность хода будет  $d \cdot \sin \theta$ . Направление на дифракционный максимум определяется формулой:

$$d \cdot \sin \theta_{max} = n\lambda.$$

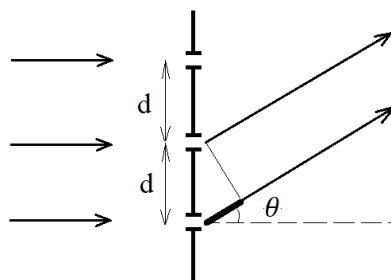


Рис. 3.3. Прохождение света через дифракционную решетку.

Если рассмотрим ситуацию наклонного падения (свет падает на решетку под некоторым углом  $\theta_0$ ), то будет возникать дополнительная разность хода. Получим следующее условие для максимума:

$$d \cdot \sin \theta_{max} - d \cdot \sin \theta_0 = n\lambda \Rightarrow \frac{2\pi}{\lambda} \cdot \sin \theta_{max} - \frac{2\pi}{\lambda} \cdot \sin \theta_0 = \frac{2\pi}{d} \cdot n \Rightarrow$$

$$k \cdot \sin \theta_{max} - k \cdot \sin \theta_0 = \frac{2\pi}{d} \cdot n \Rightarrow$$

Если ввести *вектор обратной решетки*  $q = \frac{2\pi}{d}$ :

$$k_{x_{max}} - k_{x_0} = q \cdot n - \text{условие дифракционного максимума.}$$

Если рассмотрим трехмерную структуру, в которой есть периодичность по всем трем направлениям (рис. 3.4), то можем написать *трехмерный аналог условия дифракционного максимума*:

$$\Delta \vec{k} = n\vec{q}_x + m\vec{q}_y + l\vec{q}_z - \text{условие Брегга - Вульфа.}$$

$\vec{q}_{x,y,z} = \frac{2\pi}{d_{x,y,z}} \{\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}\}$  – вектора обратной решетки,  $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$  – направляющие вектора соответствующих осей в декартовой системе координат.

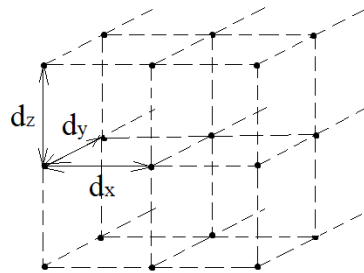


Рис. 3.4. Трехмерная периодическая структура.

### Правило квантования Бора

Предположим, что у каждой частицы есть волновые свойства, и волновой вектор связан с импульсом следующим соотношением:

$$\vec{p} = \hbar \vec{k}.$$

При дифракции электронов условию Брегга-Вульфа можно придать вид закона сохранения импульса.

Впервые выражение для импульса через волновой вектор было введено де Бройлем. Он постулировал, что у каждой частицы есть волновые свойства, которые описываются следующим образом:

$$\lambda = \frac{h}{p} - \text{длина волны де Бройля.}$$

Выражение получено при рассмотрении задачи движения электронов по замкнутым орбитам в борновском атоме. Бор постулировал, что в атоме существуют стационарные орбиты, по которым электроны движутся не излучая. Можно вычислить радиус этих орбит, соответствующие энергии. Оказывается, что разности энергий орбит в точности соответствуют эмпирическим наблюдаемым спектральным линиям атома водорода.

Вопрос о том, откуда берутся стационарные орбиты, не давал покоя многим, в том числе и де Бройлю. Он разрешил этот вопрос, придав электрону волновые свойства. *Стационарная орбита* – это та орбита, на которой укладывается целое число длин волн де Бройля. Если условно представим электрон как отрицательно заряженную частицу, движущуюся вокруг положительно заряженного ядра, то будем считать электрон не просто частицей, а волновым пакетом, который размазан по всей орбите таким образом, что целое число длин волн укладывается на длине орбиты. Так, условие конструктивной интерференции выделяет дискретные орбиты. При использовании этого условия получено правило квантования радиусов орбит:

$$2\pi r_n = n \frac{h}{p} \Rightarrow$$

$$p r_n = n\hbar - \text{правило квантования орбит.}$$

Из второго закона Ньютона:

$$\frac{mv_n^2}{r_n} = \frac{e^2}{r_n^2} \Rightarrow \frac{p^2}{mr_n} = \frac{e^2}{r_n^2} \Rightarrow \frac{p^2}{m} = \frac{e^2}{r_n}.$$

Энергия электрона на n-ой стационарной орбите:

$$E_n = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r_n} \Rightarrow E_n = -\frac{p^2}{2m}.$$

$$\frac{p}{m} = \frac{e^2}{pr_n} = \frac{e^2}{n\hbar} \Rightarrow \frac{p^2}{2m} = \frac{me^4}{2n^2\hbar^2} \Rightarrow$$

$$E_n = -\frac{me^4}{\hbar^2} \cdot \frac{1}{2n^2}.$$

Если предположим, что разности энергий при переходе электрона между разными орбитами связаны с частотами излучения соотношением:

$$E_n - E_m = \hbar\omega_{nm},$$

то получаемый дискретный набор частот очень хорошо совпадает с экспериментальными данными.

Де Бройль пошел дальше, он сказал, что электрон является волной всегда, а не только в том случае, когда находится в атоме. То есть свободный электрон также обладает волновыми свойствами. Сразу начались попытки обнаружить эти волновые свойства. В то же время в Америке два молодых экспериментатора занимались, казалось бы, не связанными с теорией де Бройля вещами. Они рассматривали рассеяние электронов на поверхности никеля, исследуя тем самым поверхность никеля. Однако в этих экспериментах Дэвиссон и Джермер наблюдали то, что сейчас принято считать подтверждением наличия волновых свойств, дифракцию электронов.

### Опыт Дэвиссона-Джермера

Экспериментальная установка устроена следующим образом: есть источник электронов, пара электродов с приложенной разностью потенциалов, которая разгоняет электроны до нужной энергии. Далее пучок электронов попадает на поверхность никеля, которую можно вращать и смотреть не то, как под разными углами рассеиваются электроны. Затем все попадает в чашку Фарадея, которая измеряет полный заряд. На основании угловой зависимости можно определять параметры поверхности никеля, чем и занимались Дэвиссон и Джермер. Вся конструкция находится в очень глубоком вакууме.

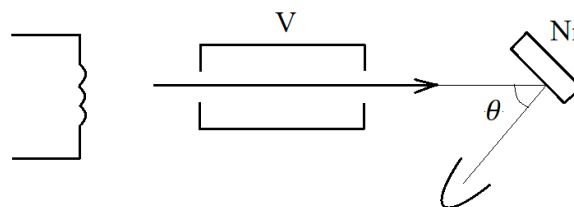


Рис. 3.5. Экспериментальная установка Дэвиссона-Джермера.

Для получения сверхвысокого вакуума систему достаточно долго отжигают при высокой температуре. В середине экспериментов у Дэвиссона и Джермера произошла проблема. Вакуумная установка потекла, пришлось заново ее откачивать и отогреть. При этом образец не убирался. После прогрева эксперименты были продолжены, но в диаграмме рассеяния возникли особенности, которых раньше не было.

Если на плоскости построить зависимость интенсивности рассеянного сигнала от угла (рис. 3.6), то обычно они получали равномерные кривые. После прогрева стали возникать максимумы. Направление на этот максимум зависело от напряжения. Лучшее всего максимум выглядел для напряжения 54 В. То есть когда энергия электронов была

54 эВ. Для этого максимума угол  $\theta$  составлял  $50^\circ$ . Девиссон и Джермер наблюдали именно дифракцию электронов. Ранее зависимости не были видны потому, что поверхность никеля была поликристаллической. После отжига образец рекристаллизовался и большой его кусок стал монокристаллом с определенной ориентацией осей.

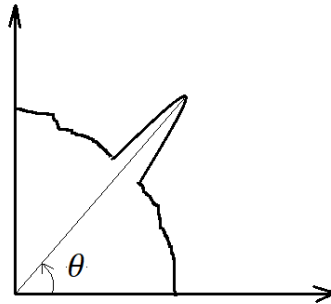


Рис. 3.6. Зависимость интенсивности рассеянного сигнала от угла.

В эксперименте наблюдалось возрастание интенсивности в направлении первого дифракционного максимума. Период кристаллической решетки хорошо известен  $d = 2,15 \text{ \AA}$ . Воспользуемся условием Брегга-Вульфа для дифракции:

$$d \sin \theta = n\lambda, \text{ где}$$

$\lambda$  — длина волны де Бройля для электронов.

$$\lambda_{\text{теор}} = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mE}}; \quad E = 54 \text{ эВ} = 54 \cdot 1,6 \cdot 10^{-12} \text{ эрг} \Rightarrow \lambda_{\text{теор}} = \frac{12,2}{\sqrt{V}} \text{ \AA} = 1,66 \text{ \AA};$$

$$\lambda_{\text{эксп}} = d \sin \theta = 2,15 \cdot \sin 50^\circ \text{ \AA} = 1,647 \text{ \AA}.$$

Полученный результат способствовал установлению теории де Бройля. После этого корпускулярно волновой дуализм стал считаться экспериментально установленным фактом.

### Соотношение неопределенностей Гейзенберга

Электроны обладают волновой природой, значит, для них соблюдаются все законы, справедливые для электромагнитных волн. То есть справедливы те соотношения неопределенностей, которые мы получали ранее.

$$\Delta k_x \Delta x \sim 2\pi \Rightarrow \Delta p_x \Delta x \sim 2\pi\hbar - \text{соотношение неопределенностей Гейзенберга.}$$

Разберемся, как можно пользоваться этим соотношением, чтобы получать различные оценки. Оценим радиус боровской орбиты, соответствующей основному

состоянию атома водорода из соотношения неопределенностей. Предположим, что основное состояние – состояние с минимальной энергией. Это значит, что и импульс, и координата принимают наименьшие значения, допустимые соотношением неопределенностей:

$$\begin{aligned} p \sim \Delta p & \Rightarrow p \sim \frac{\hbar}{r}; \\ r \sim \Delta r & \\ E = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r} & = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} - \frac{e^2}{r} \Rightarrow \end{aligned}$$

Найдем  $r$ , соответствующий минимуму энергии:

$$\frac{dE}{dr} = -\frac{\hbar^2}{mr^3} + \frac{e^2}{r^2} = 0 \Rightarrow r_{min} = \frac{\hbar^2}{me^2} = a_0 - \text{боровский радиус.}$$

Оценки из соотношения неопределенностей позволяют получить, например, пространственные масштабы, на которых сама по себе квантовая механика становится приближенным описанием. Дело в том, что на фундаментальном уровне частицы вторичны (элементарные частицы являются возбуждениями некоторых полей). Приближение, в котором можно пользоваться механикой как теорией систем частиц с конечным числом степеней свободы, на малых пространственных масштабах не всегда возможно. Например, если попробовать локализовать электрон в очень маленькой области пространства, то за счет соотношения неопределенностей у него будет возрастать кинетическая энергия. Если эта часть энергии становится порядка массы покоя электрона:

$$E_k \sim mc^2, \quad p \sim mc,$$

то такую систему уже нельзя описывать как просто электрон. Возникает возможность образования электрон-позитронных пар, число частиц нельзя считать фиксированным.

$$p \sim mc \Rightarrow \Delta x \sim \frac{\hbar}{mc} = \lambda_k - \text{комптоновская длина волны} -$$

Эта комбинация констант возникает при описании эффекта Комптона рассеяния фотонов на электроне со сдвигом частоты излучения. Но эта же комбинация имеет смысл некоторого фундаментального масштаба, в котором можно все еще говорить о том, что электрон один.

Можно заметить:

$$\lambda_c = a a_0,$$

где  $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \cong \frac{1}{137}$  – постоянная тонкой структуры. С ней связана целая иерархия масштабов величин, которые так или иначе связаны с электромагнитным взаимодействием частиц друг с другом:

$$\alpha a_0 = \lambda_c;$$

$$\alpha^2 a_0 = \frac{e^2}{mc^2} = r_{кл} - \text{классический радиус электрона} -$$

в классике эта величина получается из тех соображений, что кулоновская энергия заряженного шара с радиусом  $r_{кл}$  становится равна энергии покоя электрона:

$$\frac{e^2}{r_{кл}} = mc^2.$$

$$\alpha^{-1} a_0 \rightarrow \lambda_{изл} -$$

длина волны излучения, которое производит электрон, вращаясь по боровской орбите.



## Семинар 4

### Вывод формулы Планка. Эффект Казимира

#### Задача про глубину потенциальной ямы

Пусть есть прямоугольная потенциальная яма глубиной  $U_0$ , шириной  $d$ . Какой должна быть минимальная глубина при фиксированной ширине, чтобы квантовая частица массой  $m$  могла находиться в этой яме не выскакивая?

**Решение:**

Импульс порядка своей квантовой неопределенности:

$$p \sim \Delta p = \frac{\hbar}{\Delta x} = \frac{\hbar}{d} \Rightarrow$$

Кинетическая энергия:

$$T = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2md^2} \Rightarrow$$

Условие на глубину ямы:

$$U_0 > T \Rightarrow U_0 > \frac{\hbar^2}{2md^2}.$$

#### Разбор домашнего задания

Необходимо оценить с помощью соотношения неопределенностей минимальную энергию гармонического осциллятора.

**Решение:**

Полная энергия системы:

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{kx^2}{2}.$$

Координата и импульс порядка своих неопределенностей:

$$\begin{aligned} p \sim \Delta p &\Rightarrow x = \frac{\hbar}{p} \Rightarrow \\ x \sim \Delta x & \end{aligned}$$

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

$$\frac{\partial E}{\partial p} = 0 \Rightarrow \frac{p}{m} - \frac{k\hbar^2}{p^3} = 0 \Rightarrow p^4 = mk\hbar^2 \Rightarrow p^2 = \hbar\sqrt{km} \Rightarrow$$

$$E_{\min} = \frac{1}{2} \left( \hbar \sqrt{\frac{k}{m}} + \hbar \sqrt{\frac{k}{m}} \right) = \hbar\omega, \text{ т. к. } \sqrt{\frac{k}{m}} = \omega.$$

Строгая квантовая теория дает выражение, отличающееся множителем  $\frac{1}{2}$ :

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}.$$

В любом случае получаем, что в гармоническом осцилляторе колебания даже в основном состоянии имеют не нулевую энергию. Частица не может покоиться на дне параболического потенциала, а должна иметь конечную энергию  $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$ , что будет показано через несколько семинаров.

### Вывод формулы Планка для объемной плотности энергии поля

Представим электромагнитное поле как набор осцилляторов. Для этого вспомним, как описываются электромагнитные колебания в вакууме. Запишем уравнения Максвелла:

$$\begin{aligned} \text{rot } \vec{H} &= \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \\ \text{rot } \vec{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} \end{aligned} \Rightarrow$$

$$\text{rot rot } \vec{H} = \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \text{rot } \vec{E} = -\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \vec{H}.$$

$$\text{grad div } \vec{H} - \Delta \vec{H} = -\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \vec{H}, \quad \Delta \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2},$$

$$\text{div } \vec{H} = 0 \Rightarrow \Delta \vec{H} = -\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{H}}{\partial t^2} = 0 \text{ — волновое уравнение,}$$

описывает распространение электромагнитных волн в свободном пространстве. Аналогично получим для  $\vec{E}$  из второго уравнения:

$$\Delta \vec{E} = -\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = 0.$$

Рассмотрим электромагнитное поле на фиксированной длине волны, рассмотрим одномерный случай:

$$E \sim E_0 e^{ikx}.$$

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 E_0(t) e^{ikx}}{\partial t^2} - (ik)^2 E_0 e^{ikx} = 0 \Rightarrow \ddot{E}_0 + \omega^2 E_0 = 0, \text{ где } \omega = kc.$$

То есть для зависимости поля от времени на фиксированной длине волны получаем уравнение обычного гармонического осциллятора. Частота осциллятора связана с волновым вектором соотношением  $\omega = kc$  – закон дисперсии.

Рассмотрим такие гармонические осцилляторы в единице объема пространства и рассчитаем их энергию, считая, что они находятся в состоянии термодинамического равновесия при температуре  $T$ . Упростим задачу, дискретизируем спектр мод поля.

Рассмотрим одномерный резонатор – два идеальных плоских зеркала (рис. 4.1). При образовании стоячей волны на зеркалах образуется узел, то есть поле должно обращаться в ноль. То есть полуцелое число длин волн должно укладываться на расстоянии  $L$  между зеркалами:

$$L = \frac{n\lambda}{2}, \quad n \in Z \Rightarrow$$

Спектр дискретный:  $\lambda_n = \frac{2L}{n}$ .

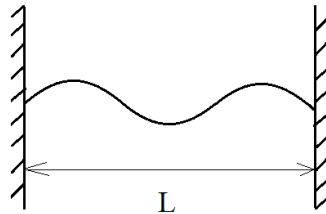


Рис. 4.1. Одномерный резонатор.

Если рассмотрим трехмерный случай (кубический резонатор со стороной  $L$ ), то получим набор индексов  $\{n, m, l\} \rightarrow \lambda_{n,m,l}$ . Все решения в этом резонаторе – плоские волны, которые характеризуются тремя целыми числами. Из закона дисперсии:  $k = |\vec{k}| = \frac{\omega}{c}$ ,

$$k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2} = \left[ k_x = \frac{2\pi}{\lambda_n} = \frac{\pi}{L} n \right] = \frac{\pi}{L} \sqrt{n^2 + m^2 + l^2} = \frac{\omega}{c} \Rightarrow$$

$$n^2 + m^2 + l^2 = \left(\frac{L\omega}{\pi c}\right)^2 = R^2 - \text{уравнение сферы в } k - \text{пространстве.}$$

Сфера в  $k$ -пространстве (рис. 4.2) заполнена дискретной сеткой, размер которой определяется длиной резонатора  $L$ .

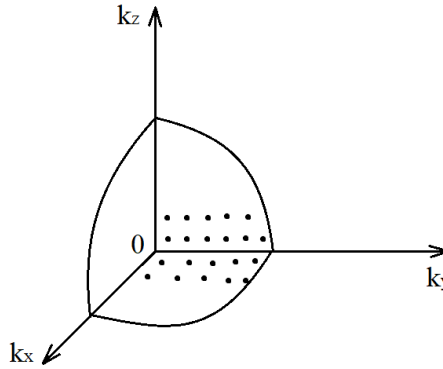


Рис. 4.2. Сфера в  $k$ -пространстве.

Наша задача пересчитать количество мод в окрестности частоты  $\omega$  в интервале  $(\omega, \omega + d\omega)$ , то есть число мод в  $1/8$  шарового слоя ( $n, m, l > 0$ ). Будем считать, что  $L$  большое, забудем про дискретность:  $dndm dl$  - число мод в  $1/8$  шарового слоя.

$$N(\omega)d\omega = dndm dl = 2 \frac{4\pi R^2 dR}{8} = \pi R^2 dR = \frac{\pi L^2 \omega^2 L}{\pi^2 c^2 \pi c} d\omega \Rightarrow$$

$$N(\omega) = \frac{L^3 \omega^2}{\pi^3 c^3} \Rightarrow$$

В единице объема:

$$n(\omega) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3}.$$

Полученное выражение есть как множитель и в формуле Рэлея-Джинса, и в формуле Планка. Действительно, если будем считать, что каждая мода поля – классический гармонический осциллятор в термодинамическом равновесии при температуре  $T$ , то среднее значение энергии по правилам классической механики:

$$\langle E \rangle = kT.$$

Тогда объемная плотность энергии поля:

$$\rho(\omega) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} kT - \text{формула Рэлея – Джинса.}$$

То есть с точки зрения классической механики получаем абсурдный результат – объемная плотность энергии поля расходится. Чтобы получить отсюда формулу Планка, нужно заменить выражение для средней энергии на следующее:

$$\langle E \rangle = \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}$$

средняя энергия гармонических осцилляторов в предположении что фотоны (частицы электромагнитного поля) не подчиняются классической статистике Максвелла-Больцмана, а подчиняются квантовой статистике Бозе-Эйнштейна:

$$\rho(\omega) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} \text{ — формула Планка для объемной плотности энергии поля.}$$

### Вакуумные флуктуации. Сила и давление Казимира

Есть нюанс. Мы помним о полученной в начале семинара ненулевой энергии нулевых колебаний. Есть энергия нулевых флуктуаций. Состояние поля с наименьшей энергией называют вакуумным, поэтому энергию еще иногда называют энергией вакуумных флуктуаций:  $\frac{\hbar\omega}{2}$ . Если проинтегрируем по всем частотам, то снова получим бесконечность. В теории поля эта проблема имеет решение, но выходит за рамки курса.

Однако, вакуумные флуктуации реальны, их наличие приводит к наблюдаемым физическим эффектам. Попробуем на простом примере разобрать, как наличие вакуумных флуктуаций приводит к возникновению силы Казимира. Если рассмотрим резонатор, то на зеркалах этого резонатора будет действовать небольшая сила притяжения, вызванная структурой вакуума внутри и вне резонатора.

Пусть есть две бесконечные пластины, являющиеся идеальными зеркалами. Внутри спектр поля дискретный, частоты могут иметь только дискретный набор значений:

$$\omega_n = \frac{\pi c}{L} n = \omega_0 L.$$

Снаружи спектр непрерывен, никаких граничных условий на бесконечности нет. Посчитаем энергию поля в основном состоянии. Внутри резонатора:

$$W_R = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\hbar\omega_n}{2} = \frac{\hbar\omega_0}{2} \sum_{n=1}^{\infty} n -$$

расходящийся ряд. Теперь предположим, что рассматриваем систему без зеркал. Тогда спектр всюду непрерывный, энергия того же объема, но без зеркал:

$$W_V = \frac{\hbar\omega_0}{2} \int_0^\infty n dn -$$

расходящийся интеграл. Однако не сложно понять, что энергия дискретного набора мод меньше энергии в непрерывном случае. Сравним эти энергии, разность назовем энергией Казимира:

$$E_C = W_V - W_R = \frac{\hbar\omega_0}{2} \left[ \int_0^\infty n dn - \sum_{n=1}^\infty n \right].$$

Если  $\int_0^\infty n dn - \sum_{n=1}^\infty n$  будет положительна, как мы ожидаем, то полю выгоднее для уменьшения полной энергии сжимать резонатор – чем меньше расстояние между зеркалами, тем меньше мод внутри, соответственно меньше полная энергия. Поэтому между зеркалами возникает сила притяжения, то есть они испытывают силу давления – давление Казимира. Для определения порядка величины давления воспользуемся методом размерностей:

$$\begin{aligned} [\hbar] &= ML^2T^{-1} \\ [c] &= LT^{-1} \\ [P] &= ML^{-1}T^{-2} \end{aligned} \Rightarrow P_C \approx \# \frac{\hbar c}{L^4}.$$

Определим константу #:

$$n \rightarrow ne^{-\alpha n} \xrightarrow{\alpha \rightarrow 0} n \Rightarrow$$

$$\sum_{n=1}^\infty ne^{-\alpha n} = -\frac{\partial}{\partial \alpha} \sum_{n=1}^\infty e^{-\alpha n} = -\frac{\partial}{\partial \alpha} \frac{e^{-\alpha}}{1 - e^{-\alpha}} = \frac{e^{-\alpha}}{(1 - e^{-\alpha})^2};$$

$$\int_0^\infty ne^{-\alpha n} dn = -\frac{\partial}{\partial \alpha} \int_0^\infty e^{-\alpha n} dn = -\frac{\partial}{\partial \alpha} \frac{1}{\alpha} = \frac{1}{\alpha^2};$$

$$\int_0^\infty n dn - \sum_{n=1}^\infty n = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \left( \frac{1}{\alpha^2} - \frac{e^{-\alpha}}{(1 - e^{-\alpha})^2} \right) = \frac{1}{12}.$$

$$E_C = \frac{\hbar\omega_0}{24} = \frac{\pi\hbar c}{L} \frac{1}{24} - \text{энергия Казимира.}$$

$$P_C = \frac{1}{L^2} \frac{\partial E_C}{\partial L} = \frac{\pi\hbar c}{24L^4} - \text{давление Казимира} \Rightarrow \# = \frac{\pi}{24}.$$

Так, мы получаем удивительный физический факт: наличие энергии нулевых флуктуаций проявляется в том, что для достаточно маленького расстояния между зеркалами в резонаторе зеркала начинают испытывать силу притяжения, то есть на зеркала действует давление, связанное с расстоянием как  $1/L^4$ . Вычисленная физическая величина хорошо подтверждается экспериментом.

На этом знакомство с той частью квантовой теории, которая описывает излучение, находящееся в тепловом равновесии со спектром АЧТ, подошло к концу. Мы вернулись к формуле Планка, получив некоторое обоснование того, откуда берется формула Рэлея-Джинса и сама формула Планка. Мы поняли, что в этих формулах есть два существенно разных куска: один – плотность мод электромагнитного поля, которая получается из классического уравнения Максвелла, второй – средняя энергия одной моды, которая получается разной в зависимости от того, какой подход используется – классический или квантово-механический. Правильное выражение получается для квантово-механического расчета. Пришло время познакомиться с квантовой теорией в том виде, в котором она есть, начать решать задачи, пользуясь современным математическим аппаратом квантовой механики.

## Семинар 5

### Операторы в квантовой физике

#### Задача на СВ и СЗ матрицы

Пусть есть матрица:  $H = \begin{pmatrix} E_1 & V \\ V & E_2 \end{pmatrix}$ . Найти ее собственные вектора и собственные значения.

#### Решение:

Вектор  $\psi$  называется собственным вектором оператора  $H$ , если выполняется условие:

$$H\psi = \lambda\psi, \text{ где } \lambda - \text{некоторое число.}$$

Это уравнение можно записать в эквивалентном виде:  $(H - \lambda I)\psi = 0 \Rightarrow$  для того, чтобы уравнение имело нетривиальное решение, необходимо чтобы определитель этого оператора был равен нулю:

$$\det(H - \lambda I) = 0 - \text{уравнение на собственные значения.}$$

$$\begin{vmatrix} E_1 - \lambda & V \\ V & E_2 - \lambda \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow$$

$$(E_1 - \lambda)(E_2 - \lambda) - V^2 = 0 \Rightarrow \lambda^2 - (E_1 + E_2)\lambda + E_1E_2 - V^2 = 0 \Rightarrow$$

$$\lambda_{1,2} = \frac{E_1 + E_2}{2} \pm \frac{1}{2}\sqrt{(E_1 + E_2)^2 - 4E_1E_2 - 4V^2} = \frac{E_1 + E_2}{2} \pm \frac{1}{2}\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4V^2}.$$

На рис. 5.1 приведен график зависимости  $\lambda$  от  $V$ . При больших  $V$  асимптоты – прямые  $\lambda = \pm V$ .

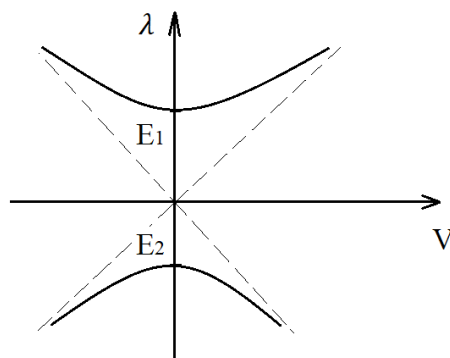


Рис. 5.1. график зависимости  $\lambda$  от  $V$ .



## Квантовая теория

На первый взгляд формализм квантовой механики может показаться несколько странным, но на самом деле это наиболее общее описание стандартного физического эксперимента.

Любой физический эксперимент условно можно разделить на три стадии:

- 1) Приготовление физической системы в заданном начальном состоянии (для многократного повторения эксперимента и получения статистических данных необходимо уметь неоднократно устанавливать систему в заданном состоянии);
- 2) Эволюция системы;
- 3) Измерения;

Задача теории – описать результаты измерений, зная, в каком состоянии мы готовим систему, и как она эволюционирует. В классической механике и теории поля ситуация проще, потому что состояния системы и значения измеряемых параметров отождествляются. Система задается значениями некоторых наблюдаемых.

Например, если рассмотрим маятник, то у него будет некоторая начальная координата  $x(0)$ , начальный импульс  $p(0)$ . Хотим узнать, как координата и импульс меняются со временем. Для этого можем решить уравнения движения, которые в общем случае для любой механической системы имеют вид:

$$\left. \begin{aligned} \dot{x} &= f(x, p) \\ \dot{p} &= g(x, p) \end{aligned} \right| \Rightarrow \begin{aligned} x(t) \\ p(t) \end{aligned}$$

На этом решение задачи фактически заканчивается. Поскольку и координату, и импульс мы можем теоретически знать сколь угодно точно, мы можем сколь угодно точно предсказать эволюцию. Нужно только знать, какими дифференциальными уравнениями описывается наша физическая система.

В случае квантовой механики сложнее. Как мы выяснили на предыдущих семинарах, координату и импульс мы не можем знать сколь угодно точно, потому что существует соотношение неопределенностей Гейзенберга. Оно справедливо и в общем случае, как мы выясним к концу семинара. Поэтому в квантовой теории состояние системы и наблюдаемые обладают разной природой и описываются разными математическими объектами. *Состояние системы описывается вектором в гильбертовом пространстве или волновой функцией:*

$$\text{состояние} \rightarrow |\psi\rangle \in \mathcal{H}.$$

Первая часть нашего абстрактного эксперимента (приготовление системы) соответствует заданию определенного начального состояния  $|\psi(0)\rangle$ . Описание эволюции сводится к отображению начального состояния на состояние в последующий момент:

$$\hat{U} |\psi(0)\rangle \rightarrow |\psi(t)\rangle.$$

Эволюция описывается некоторым оператором  $\hat{U}$ . Этот оператор должен быть унитарным, отображение линейно, потому что есть принцип суперпозиции, который является обобщением эмпирических данных и одним из постулатов квантовой теории.

Зная состояние в произвольный момент времени, хотим понять, как получить наблюдаемые величины. Измерения в квантовой теории имеют принципиально вероятностную природу, то есть мы можем знать только распределение вероятностей. Для иллюстрации рассмотрим эксперимент с одиночными фотонами. Фотоны обладают поляризацией (электромагнитные волны имеют два ортогональных состояния поляризации). Логично предположить, что в случае с одиночным фотоном поляризационное состояние будет описываться двумерным вектором в гильбертовом пространстве:

$$\mathcal{H} \equiv \mathbb{C}^2, \quad |\psi\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix},$$

$$|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1 - \text{условие нормировки.}$$

Рассмотрим фотон в некотором поляризационном состоянии. Запустим его на простейший поляризационный прибор (должен отличать два состояния). В качестве такого устройства можем взять поляризационный светоделитель (рис. 5.2). После него поставим два счетчика одиночных фотонов. Так, система работает в дискретном режиме. Задача теории предсказать вероятности, с которыми будут срабатывать детекторы.

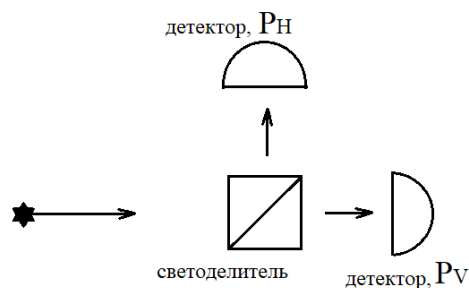


Рис. 5.2. Схема эксперимента.

Пусть начальное состояние – фотон, поляризованный горизонтально. Выберем в пространстве базис из горизонтального и вертикального состояний:

$$|H\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |V\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \Rightarrow$$

Вероятность срабатывания счетчика в горизонтальном канале:  $P_H = 1$ . Вероятность срабатывания счетчика в вертикальном канале:  $P_V = 0$ .

Если теперь рассмотрим фотон в состоянии  $|V\rangle$ , то детектор в горизонтальном канале срабатывать не будет:  $P_H = 0, P_V = 1$ .

Рассмотрим суперпозицию состояний. Пусть фотон поляризован под  $45^\circ$  к условным вертикали и горизонтали:

$$|45^\circ\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}.$$

Если возьмем большое количество таких фотонов, то в среднем половина окажется на горизонтальном детекторе, половина на вертикальном (из классической поляризационной оптики). Повторяем тот же эксперимент и повторяем его со светом, который ослаблен до состояния одиночных фотонов. Эксперимент показывает равновероятное срабатывание детекторов:

$$P_H = \frac{1}{2}, \quad P_V = \frac{1}{2}.$$

Еще один любопытный эффект заключается в том, что распределение вероятностей зависит не только от состояния, но и от того, как устроен измерительный прибор. Например, при повороте светоделителя на  $45^\circ$  в плоскости доски и начальном состоянии  $|45^\circ\rangle$ , то ситуация будет эквивалентна первому рассмотренному эксперименту. Мы изменили *базис измерения*.

### Эрмитовы операторы

Обобщим эксперимент и составим некоторую математическую картину, позволяющую предсказывать результаты всех такого рода измерений.

Наблюдаемым в соответствие ставятся эрмитовы операторы:  $\hat{A}^+ = \hat{A}$ .

Используются эрмитовы операторы, потому что, во-первых, у эрмитова оператора действительные собственные значения, во-вторых, у них всегда есть базис из собственных векторов (число собственных векторов равно размерности пространства, собственные вектора образуют ортонормированный базис):

$$\hat{A}|\varphi_n\rangle = a_n|\varphi_n\rangle, \quad \langle\varphi_n|\varphi_m\rangle = \delta_{nm}.$$

То есть любому эрмитову оператору мы можем поставить в соответствие базис собственных векторов в гильбертовом пространстве. Этот базис собственных векторов описывает возможные исходы и их вероятности.

Напишем эрмитов оператор, собственными векторами которого будут состояния  $|H\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ ,  $|V\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ :

$$\hat{Z} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$\lambda_1 = 1, \lambda_2 = -1$  – собственные значения,  $\lambda_1$  соответствует собственный вектор  $|H\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ ,  $\lambda_2$  соответствует  $|V\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ . Вероятность получения исхода измерения  $H$  для заданного состояния  $\psi$  – модуль скалярного произведения в квадрате:

$$P_H = |\langle\psi|H\rangle|^2.$$

Аналогично для получения исхода  $V$ :

$$P_V = |\langle\psi|V\rangle|^2.$$

Напомним, что для произвольных векторов скалярное произведение считается по следующим правилам:

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}; |\varphi\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix};$$

$$\langle\psi|\varphi\rangle = (c_1^*, c_2^*) \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} = c_1^*\alpha_1 + c_2^*\alpha_2.$$

В дираковских обозначениях удобно ввести дополнительную сущность:

$$\langle\psi| = (c_1^*, c_2^*) - \text{бра-вектор}, |\varphi\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} - \text{кет-вектор}.$$

Обратимся к последнему эксперименту, в котором наблюдаемая меняется:  $\hat{X} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ . Собственные вектора:  $|45^\circ\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ ,  $|-45^\circ\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ . Собственные

значения:  $\lambda_1 = 1, \lambda_2 = -1$ . Соответственно в описании вероятностей поменяется только базис:

$$P_{45^\circ} = |\langle \psi | 45^\circ \rangle|^2, \quad P_{-45^\circ} = |\langle \psi | -45^\circ \rangle|^2.$$

Так, легко получить исходы измерений в новом базисе. В общем случае исходы измерений соответствуют собственным значениям оператора наблюдаемой. Вероятности этих исходов определяются проекцией вектора состояния на собственный вектор, соответствующий заданному собственному значению.

Обобщим то, что мы получили при анализе эксперимента с поляризациями одиночных фотонов:

- Наблюдаемые описываются эрмитовыми операторами в гильбертовом пространстве:  $\hat{A}^+ = \hat{A}$ ;
- Состояния – вектора в гильбертовом пространстве:  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$
- Исходы измерений соответствуют собственным значениям наблюдаемых, у каждой наблюдаемой есть полный базис из собственных векторов:  $\hat{A}|\varphi_n\rangle = a_n|\varphi_n\rangle$ ;
- Вероятности, с которыми мы получаем собственные значения в качестве исходов измерений определяются проекциями вектора состояния на соответствующие собственные вектора:  $P_n = |\langle \psi | \varphi_n \rangle|^2$ ;
- Сумма всех вероятностей равна 1:  $\sum_n P_n = 1$  – *условие нормировки вероятностей*;
- Любой вектор состояния можно разложить по базису собственных векторов:  $|\psi\rangle = \sum_n c_n |\varphi_n\rangle \Rightarrow P_n = |c_n|^2 \Rightarrow$  условие нормировки вероятностей трансформируется в *условие нормировки вектора состояния*:  $\sum_n |c_n|^2 = 1$  – *правило Борна*.

### Среднее значение наблюдаемой и дисперсия оператора

Среднее значение наблюдаемой вычисляется по простому правилу – это *матричный элемент*, усреднение по некоторому квантовому состоянию:

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle. \quad (*)$$

Почему это именно так, не сложно понять, если взять разложение для вектора по собственным векторам наблюдаемой и подставить его в уравнение (\*):

$$\begin{aligned} \langle \hat{A} \rangle &= \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \left( \sum_n c_n^* \langle \varphi_n | \right) \hat{A} \left( \sum_m c_m | \varphi_m \rangle \right) = \sum_{n,m} c_n^* c_m \langle \varphi_n | \hat{A} | \varphi_m \rangle \\ &= \sum_{n,m} c_n^* c_m \langle \varphi_n | \varphi_m \rangle a_m = \sum_{n,m} c_n^* c_m \delta_{nm} a_m = \sum_n |c_n|^2 a_n = \sum_n p_n a_n \end{aligned}$$

среднее по распределению вероятностей от возможных значений наблюдаемой величины. То есть:

$$\langle A \rangle \equiv \sum_n p_n a_n = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle - \text{матричный элемент оператора } A \text{ по состоянию } \psi.$$

Аналогично можно определять и более старшие моменты распределения. Например, можно определить *дисперсию*:

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle = \langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \rangle = \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2.$$

### Коммутаторы. Соотношение неопределенностей Гейзенберга

Теперь, пользуясь выражением для дисперсии наблюдаемых, попробуем получить соотношения неопределенностей Гейзенберга. Ранее мы их получали как эмпирическое следствие преобразования Фурье. Более строгий вывод дается из определения неопределенностей как дисперсии соответствующих наблюдаемых и алгебраического свойства для некоммутирующих операторов.

Вообще говоря, разные операторы не всегда составляют коммутативную алгебру:

$$\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \neq 0.$$

Величина  $[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$  по определению называется *коммутатором*.

Некоммутативность приводит в частности к тому, что для дисперсий некоммутирующих наблюдаемых можно получить некоторые неравенства, которым операторы должны удовлетворять.

Рассмотрим две некоммутирующих наблюдаемых:  $[\hat{x}, \hat{y}] = iz$ . Покажем, что на дисперсии этих наблюдаемых накладывается некоторое ограничение:

$$\langle (\Delta \hat{x})^2 \rangle \langle (\Delta \hat{y})^2 \rangle \geq ?$$

Для произвольного оператора заметим:  $\langle \hat{A}^+ \hat{A} \rangle \geq 0 \quad \forall \hat{A}$ :

$$\langle \psi | \hat{A}^+ \hat{A} | \psi \rangle = \langle \hat{A} | \psi \rangle = |\varphi\rangle \Rightarrow \langle \psi | \hat{A}^+ = \langle \varphi | \Rightarrow \langle \varphi | \varphi \rangle \geq 0 \Rightarrow$$

$$\langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^+ (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) \rangle \geq 0.$$

Пусть  $\hat{A} = \hat{x} + i\alpha\hat{y}$ ,  $\alpha$  - действительное число. Тогда:

$$\langle ((\hat{x} + i\alpha\hat{y}) - \langle \hat{x} \rangle - i\alpha\langle \hat{y} \rangle)^+ ((\hat{x} + i\alpha\hat{y}) - \langle \hat{x} \rangle - i\alpha\langle \hat{y} \rangle) \rangle \geq 0 \Rightarrow$$

$$\begin{aligned}
 & \langle ((\hat{x} - \langle \hat{x} \rangle) + i\alpha(\hat{y} - \langle \hat{y} \rangle))^+ ((\hat{x} - \langle \hat{x} \rangle) + i\alpha(\hat{y} - \langle \hat{y} \rangle)) \rangle = \\
 & = \langle ((\hat{x} - \langle \hat{x} \rangle) - i\alpha(\hat{y} - \langle \hat{y} \rangle))((\hat{x} - \langle \hat{x} \rangle) + i\alpha(\hat{y} - \langle \hat{y} \rangle)) \rangle = \\
 & = \langle (\hat{x} - \langle \hat{x} \rangle)^2 + \alpha^2(\hat{y} - \langle \hat{y} \rangle)^2 + i\alpha(\hat{x} - \langle \hat{x} \rangle)(\hat{y} - \langle \hat{y} \rangle) - i\alpha(\hat{y} - \langle \hat{y} \rangle)(\hat{x} - \langle \hat{x} \rangle) \rangle = \\
 & = \langle (\hat{x} - \langle \hat{x} \rangle)^2 + \alpha^2(\hat{y} - \langle \hat{y} \rangle)^2 + i\alpha(\hat{x}\hat{y} - \hat{y}\hat{x}) \rangle \geq 0 \Rightarrow \\
 & \langle (\Delta\hat{x})^2 \rangle + \alpha^2 \langle (\Delta\hat{y})^2 \rangle + i\alpha \langle [\hat{x}, \hat{y}] \rangle \geq 0 -
 \end{aligned}$$

должно выполняться для любого значения  $\alpha$ , то есть дискриминант полученного выражения должен быть положительным:

$$\begin{aligned}
 4\langle (\Delta\hat{x})^2 \rangle \langle (\Delta\hat{y})^2 \rangle - \langle i[\hat{x}, \hat{y}] \rangle & \geq 0 \Rightarrow \\
 \langle (\Delta\hat{x})^2 \rangle \langle (\Delta\hat{y})^2 \rangle & \geq \frac{\langle i[\hat{x}, \hat{y}] \rangle^2}{4} -
 \end{aligned}$$

соотношение неопределенностей Гейзенберга для произвольных наблюдаемых. То есть если наблюдаемые не коммутируют, то для их дисперсий выполняется это соотношение. Заметим, что в правой части стоит *среднее по квантовому состоянию*:

$$\langle i[\hat{x}, \hat{y}] \rangle \equiv \langle \hat{Z} \rangle = \langle \psi | \hat{Z} | \psi \rangle -$$

в зависимости от того, в каком состоянии находится система, можем получить как ноль, так и что-то не нулевое.

Есть такие операторы, для которых коммутатор не зависит от квантового состояния. Это происходит в том случае, если их коммутатор – константа. Например, операторы импульса и координаты удовлетворяют каноническому квантовому соотношению:

$$\begin{aligned}
 [\hat{x}, \hat{p}] & = i\hbar \Rightarrow \\
 \langle (\Delta\hat{x})^2 \rangle \langle (\Delta\hat{p})^2 \rangle & \geq \frac{\hbar^2}{4} \quad \text{или} \quad \langle \Delta x \rangle \langle p \rangle \geq \frac{\hbar}{2} -
 \end{aligned}$$

*стандартное соотношение неопределенностей Гейзенберга.*

## Семинар 6

### Одномерное движение материальной точки

#### Задача на определение коммутатора

Пусть есть два оператора в двумерном гильбертовом пространстве:

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix}.$$

Может ли коммутатор быть равен единичной матрице?

**Ответ:** нет.

**Решение:**

След матрицы:  $Tr A \equiv \sum_n a_n$ . Свойство следа:  $Tr (AB) = Tr (BA)$ .

$$(AB)_{ik} = \sum_j A_{ij} B_{jk}, \quad Tr (AB) = \sum_{ij} A_{ij} B_{ji} = Tr (BA).$$

$$Tr [A, B] = Tr (AB - BA) = Tr (AB) - Tr (BA) = Tr (AB) - Tr (AB) = 0.$$

$$Tr I = d - \text{размерность пространства} \Rightarrow$$

ни в каком пространстве конечной размерности равенство  $[A, B] = I$  выполняться не может. След коммутатора в конечномерном гильбертовом пространстве всегда должен быть равен нулю:  $Tr [A, B] = 0$ .

#### Операторы координаты, импульса и сдвига в бесконечномерном пространстве

На прошлом семинаре было приведено коммутационное соотношение между операторами координаты и импульса  $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ . То есть при делении на константу  $i\hbar$  получим единичный оператор. Дело в том, что операторы координаты и импульса не помещаются в конечномерное гильбертово пространство, поэтому в квантовой теории приходится иметь дело с бесконечномерными пространствами.

Так, при рассмотрении простейшей механической задачи (движение материальной точки с одной степенью свободы, м.т. описывается двумя переменными - координатой и импульсом) уже имеем дело с бесконечномерным пространством.

Необходимым условием равенства следа нулю является конечное значение следов операторов, ряды должны сходиться. В случае бесконечномерного пространства



ряды не обязаны сходиться. И можно представить ситуацию, в которой ряды расходятся, но их разность дает конечную величину.

Попробуем реализовать операторы координаты и импульса в бесконечномерном пространстве. В качестве бесконечномерного пространства возьмем пространство  $L^2$  квадратично интегрируемых функций. Будем рассматривать комплекснозначные функции от действительных переменных:

$$\psi(x): \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1.$$

Рассмотрим оператор координаты  $\hat{x}$ , который действует следующим образом:

$$\hat{x}\psi(x) = x\psi(x).$$

Оператор дифференцирования:

$$\frac{d}{dx}(\psi(x)) = \psi'(x).$$

Вычислим коммутатор этих операторов:

$$\begin{aligned} \left[ \hat{x}, \frac{d}{dx} \right] \psi(x) &= \hat{x} \frac{d}{dx}(\psi(x)) - \frac{d}{dx}(\hat{x}\psi(x)) = x \frac{d\psi}{dx} - \frac{d}{dx}(x\psi(x)) = \\ &= x \frac{d\psi}{dx} - \psi(x) - x \frac{d\psi}{dx} = -\psi(x) \Rightarrow \left[ \hat{x}, \frac{d}{dx} \right] = -1 \Rightarrow \end{aligned}$$

оператор импульса можно реализовать, используя оператор дифференцирования.

Второе рассуждение, позволяющее заключить, что оператор импульса связан с оператором дифференцирования по координате, можно провести следующим образом: из классической механики мы знаем, что импульс – сохраняющаяся величина, связанная с трансляционной инвариантностью системы. Понятно, что оператор импульса должен быть каким-то образом связан с пространством сдвига. Рассмотрим функцию  $\psi(x)$ , сдвинутую по аргументу на некоторую константу  $x_0$ :

$$\begin{aligned} \psi(x + x_0) &= \psi(x) + \frac{d\psi}{dx} x_0 + \frac{1}{2} \frac{d^2\psi}{dx^2} x_0^2 + \dots + \frac{1}{n!} \frac{d^n\psi}{dx^n} (x_0)^n = \\ &= \left( 1 + x_0 \frac{d}{dx} + \frac{x_0^2}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \dots + \frac{x_0^n}{n!} \frac{d^n}{dx^n} + \dots \right) \psi(x) = \exp\left(x_0 \frac{d}{dx}\right) \psi(x), \end{aligned}$$

то есть дифференцирование по координате каким-то образом должно реализовывать оператор импульса.

Возвращаясь к каноническому коммутационному соотношению, видим, что оно будет выполняться, если домножить оператор дифференцирования на соответствующую константу:

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx} - \text{оператор импульса.}$$

Теперь видно, что *оператор сдвига* по координате реализуется в качестве экспоненты от оператора импульса:

$$U(x_0)\hbar(x) = \psi(x + x_0) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{p}x_0\right).$$

В домашнем задании вы покажете, что экспонента от антиэрмитового оператора всегда является *унитарным оператором*:  $U^+U = UU^+ = I$ . С точки зрения смысла – это оператор поворота базиса в гильбертовом пространстве. Оказывается, если есть произвольный эрмитов оператор, то:  $A^+ = A \Rightarrow U = \exp(iA)$ .

### Плотность вероятности

Рассмотрим собственные состояния координаты:  $\hat{x}|x_0\rangle = x_0|x_0\rangle$ .

Физическая интерпретация таких состояний будет в том, что частица находится в состоянии с точно определенной координатой. Произвольное состояние можно разложить по собственным векторам координаты:

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) |x\rangle dx.$$

Среднее значение оператора координаты по определению:

$$\langle x \rangle \equiv \langle \psi | \hat{x} | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x') \langle x' | \hat{x} | \psi(x) \rangle dx dx' = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x') \psi(x) x \langle x' | x \rangle dx dx' =$$

$= [\langle x' | x \rangle = \delta(x - x')] - \text{условие нормировки состояний с определенной}$

$\text{координатой в бесконечномерном пространстве}] = \int_{-\infty}^{\infty} x |\psi(x)|^2 dx.$

По правилам теории вероятностей:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x p(x) dx \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} x |\psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} x p(x) dx \Rightarrow p(x) = |\psi(x)|^2 -$$

квадрат модуля волновой функции дает *плотность вероятности обнаружения частицы в состоянии с заданной координатой  $x$* . Так получилось, потому что мы изначально раскладываем волновую функцию по собственным состояниям оператора координаты. *Коэффициенты разложения – волновая функция в координатном представлении*. Можно было взять другую наблюдаемую, например импульс, и раскладывать волновую функцию по собственным векторам оператора импульса. Тогда бы мы получили *импульсное представление*, в котором волновая функция была бы связана с плотностью распределения вероятностей по импульсу. Далее почти всегда будем работать в координатном представлении.

### Уравнение Шредингера

Динамика в квантовой теории описывается *уравнением Шредингера*:

$$i\hbar \frac{d|\psi\rangle}{dt} = \hat{H}|\psi\rangle,$$

$\hat{H}$  – *гамильтониан*, физическая величина, соответствующая этому оператору – полная энергия системы. В случае если гамильтониан не зависит от времени, то не сложно получить формальное решение уравнения:

$$\frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} |\psi(t)\rangle \Rightarrow$$

Общее решение:

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t\right) |\psi(0)\rangle \Rightarrow |\psi(t)\rangle = \hat{U}(t) |\psi(0)\rangle, \quad \hat{U}(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t\right).$$

В случае, когда оператор  $\hat{H}$  зависит от времени, все будет сложнее.

### Движение материальной точки по прямой

Начнем с простейших механических задач. Например, с движения материальной точки по прямой. В этом случае разумно записать уравнение в координатном представлении:

$$|\psi(t)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x, t) |x\rangle dx \Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \hat{H} \psi(x, t).$$

Для случая движения материальной точки по прямой гамильтониан принимает следующий вид по аналогии с механикой:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\hat{x}) \Rightarrow$$

$$\text{В координатном представлении: } \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \hat{x} = x \Rightarrow \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x).$$

Уравнение Шредингера для одномерного движения материальной точки в координатном представлении:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) + U(x)\psi(x, t).$$

Полученное уравнение – уравнение в частных производных. Необходимо разделение переменных. Удобнее всего рассматривать ситуацию в базисе из собственных функций гамильтониана. Если волновая функция – собственная функция гамильтониана, то:

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle, \text{ где}$$

$E$  – число, соответствующее некоторому собственному значению оператора полной энергии. Тогда уравнение Шредингера решается элементарно:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \Rightarrow |\psi(t)\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right) |\psi(0)\rangle \Rightarrow$$

при эволюции изменяется только фазовый множитель. Для произвольного состояния можем найти его разложение по собственным функциям координаты, и для каждого коэффициента разложения будет свой фазовый множитель.

Запишем уравнение на собственные функции в координатном представлении:

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x) - \text{стационарное уравнение Шредингера.}$$

В нашем случае одномерного движения материальной точки стационарное уравнение Шредингера выглядит следующим образом:

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

### Свободное движение материальной точки

Рассмотрим случай свободного движения:  $U(x) \equiv 0 \Rightarrow$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) - E\psi(x) = 0 \text{ или } \psi''(x) + k^2\psi(x) = 0, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

уравнение гармонического осциллятора, общее решение которого известно:

$$\psi(x) = c_1 e^{ikx} + c_2 e^{-ikx}, \quad |c_1|^2 + |c_2|^2 = 1 - \text{условие нормировки.}$$

Экспонента  $e^{ikx}$  интерпретируется как плоская бегущая волна, движущаяся в направлении оси  $x$ ,  $e^{-ikx}$  – в отрицательном направлении. Почему это так, не сложно показать – эти же волновые функции являются собственными функциями оператора импульса:

$$\hat{p}\psi(x) = -i\hbar \frac{d}{dx} (c_1 e^{ikx} + c_2 e^{-ikx}) = \hbar k (c_1 e^{ikx} - c_2 e^{-ikx}) \Rightarrow$$

$$\text{при } c_2 = 0 \Rightarrow \text{собственное значение } p = \hbar k,$$

$$\text{при } c_1 = 0 \Rightarrow \text{собственное значение } p = -\hbar k,$$

в других случаях это будут не собственные функции.

### Потенциальная ступенька

Усложним ситуацию и добавим кусочно-постоянный потенциал (рис. 6.1):

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ U_0, & x \geq 0 \end{cases}$$

При  $x < 0$  (область I):  $\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ .

При  $x \geq 0$  (область II):  $\frac{d^2\psi}{dx^2} + \alpha^2\psi = 0, \quad \alpha = \frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar}$ .

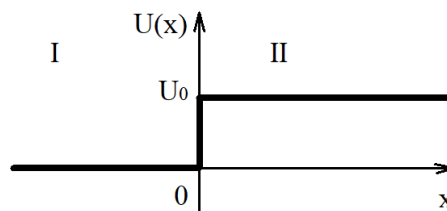


Рис. 6.1. Потенциальная ступенька.

$$\psi_I = A e^{ikx} + B e^{-ikx}, \quad \psi_{II} = C e^{i\alpha x} + D e^{-i\alpha x} -$$

физической интерпретацией обычно дается одномерная задача рассеяния: предположим, есть поток частиц, летящих из бесконечности с левой стороны. При этом частица может пройти вправо или отразиться от барьера. Волновая функция – суперпозиция двух волн: бегущих вправо и бегущих влево. В правой области бегущая влево волна отсутствует, потому что по начальному условию все частицы налетают слева, в  $+\infty$  источников нет. Таким образом,  $D = 0$ .

Физически наблюдаемыми, интересующими нас вещами, будут вероятности обнаружения частицы в области II и области I.

Коэффициент прохождения:  $T = \frac{|C|^2}{|A|^2}$ . Коэффициент отражения:  $R = \frac{|B|^2}{|A|^2}$ .

Найдем коэффициент отражения как функцию полной энергии частицы  $E$ . Для этого необходимо записать граничные условия для уравнения Шредингера в точке разрыва потенциала. В этой точке должно выполняться условия непрерывности для волновой функции и ее производной:

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0)$$

$$\frac{d\psi_I}{dx}(0) = \frac{d\psi_{II}}{dx}(0) \Rightarrow$$

$$\begin{cases} A + B = C \\ ik(A - B) = i\alpha C \end{cases} \Rightarrow ik(A - B) = i\alpha(A + B) \Rightarrow B = \frac{k - \alpha}{k + \alpha} A \Rightarrow R = \left| \frac{k - \alpha}{k + \alpha} \right|^2.$$

Проанализируем, как будет вести себя коэффициент отражения для различных значений энергии. При  $E < U_0$ :

$$R = \frac{|k - i|\alpha||^2}{|k + i|\alpha||^2} = \frac{k^2 + |\alpha|^2}{k^2 + |\alpha|^2} = 1 \Rightarrow T = 0, \text{ так как } T + R = 1.$$

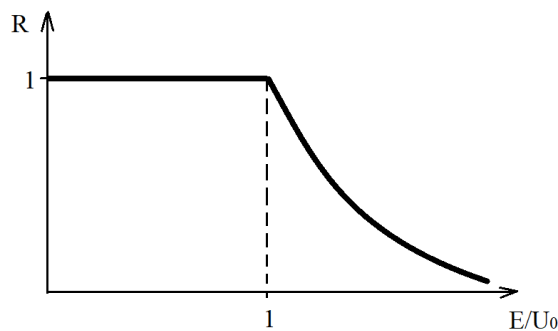


Рис. 6.2. График зависимости коэффициента отражения от отношения энергии частицы к высоте потенциальной ступени.

То есть, пока частица имеет энергию ниже высоты потенциальной стенки, она отражается. Далее  $\alpha$  становится действительным, и чем больше энергия по сравнению с высотой барьера, тем ближе  $\alpha$  к  $k$ . При  $E \gg U_0$   $R \rightarrow 0$  (рис. 6.2). Здесь нет ничего неожиданного кроме ненулевого значения коэффициента отражения после  $\frac{E}{U_0} = 1$ . В квантовом случае есть отраженная волна – проявление волновых свойств частицы.

Любопытно посмотреть на то, как ведет себя волновая функция в области II, особенно при  $E < U_0$ :  $\psi_{II} \sim e^{-|\alpha|x}$  – экспоненциальное затухание.

### Потенциальный барьер конечной ширины

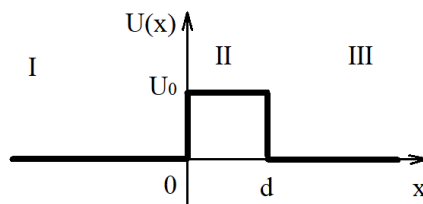


Рис. 6.3. Потенциальный барьер конечной ширины.

Рассмотрим барьер конечной ширины (рис. 6.3):

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, x \geq d \\ U_0, & 0 \leq x < d \end{cases}$$

$$\psi_I = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar};$$

$$\psi_{II} = Ce^{i\alpha x} + De^{-i\alpha x}, \quad \alpha = \frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar};$$

$$\psi_{III} = Fe^{ikx}.$$

Коэффициент прохождения:  $T = \frac{|F|^2}{|A|^2}$ .

Условия непрерывности:

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \Rightarrow A + B = C + D$$

$$\psi'_I(0) = \psi'_{II}(0) \Rightarrow ik(A - B) = i\alpha(C - D)$$

$$\psi_{II}(d) = \psi_{III}(d) \Rightarrow Ce^{i\alpha d} + De^{-i\alpha d} = Fe^{ikd}$$

$$\psi'_{II}(d) = \psi'_{III}(d) \Rightarrow i\alpha(Ce^{i\alpha d} - De^{-i\alpha d}) = ikFe^{ikd}$$

Нехитрые, но трудоемкие преобразования предлагается проделать дома. Запишем ответ, получающийся в результате решения системы:

$$T = |t|^2 = \begin{cases} \left(1 + \frac{k^2 - \alpha^2 \sin^2 \alpha d}{4k^2} \frac{1}{\alpha^2}\right)^{-1}, & E > U_0 \\ \left(1 + \frac{k^2 + q^2 \operatorname{sh}^2 qd}{4k^2} \frac{1}{q^2}\right)^{-1}, q = i\alpha, & E < U_0 \end{cases}$$

Соответствующий график представлен на рис.6.4. При  $\alpha d = \pi n$  синус обращается в ноль, соответственно коэффициент пропускания обращается в единицу, при  $E > U_0$  коэффициент пропускания – осциллирующая функция.

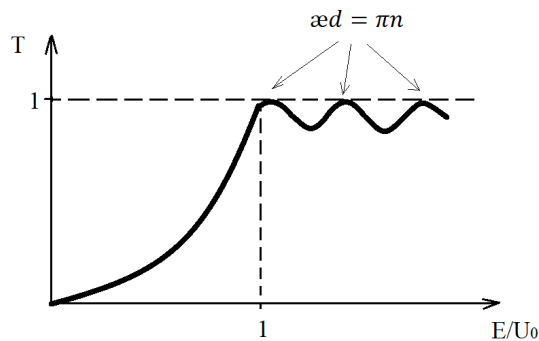


Рис. 6.4. Коэффициент пропускания через потенциальный барьер.

Таким образом, коэффициент пропускания не равен нулю даже для случая, когда энергия частицы меньше высоты барьера. Волновая функция под барьером затухает экспоненциально, но если барьер конечной ширины, то есть вероятность *туннелирования* – обнаружения частицы с другой стороны барьера. Аналог в классической оптике – полное внутреннее отражение. Явление обращения в единицу коэффициента пропускания в классической оптике тоже известно. На этом принципе основаны антиотражающие или просветляющие покрытия.



## Семинар 7

### Прохождение частиц через потенциальные ямы

#### Задача

Пусть есть свободная частица в состоянии, описываемом волновой функцией:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left( \frac{e^{ik_1x}}{\sqrt{2}} + \frac{e^{ik_2x}}{\sqrt{2}} \right).$$

Найти среднюю энергию и ее дисперсию состояния, описываемого заданной волновой функцией.

#### Решение:

Проще всего решить эту задачу используя разложение по собственным функциям оператора импульса. Частица свободная, следовательно, ее гамильтониан:

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

Тогда собственные функции гамильтониана, то есть полные энергии, совпадают с собственными функциями импульса. Поэтому задача проста: квадраты модулей коэффициентов перед частями волновой функции дают вероятности измерения собственных значений энергий:

$$E_1 = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m}, \quad E_2 = \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} \Rightarrow \langle E \rangle = \frac{1}{2} E_1 + \frac{1}{2} E_2 = \frac{\hbar^2}{4m} (k_1^2 + k_2^2).$$

Для того, чтобы посчитать дисперсию, проще всего воспользоваться известным соотношением:

$$\langle (\Delta E)^2 \rangle = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2.$$

$$\langle E^2 \rangle = \frac{1}{2} E_1^2 + \frac{1}{2} E_2^2 = \frac{\hbar^4}{8m^2} (k_1^4 + k_2^4) \Rightarrow$$

$$\langle (\Delta E)^2 \rangle = \frac{\hbar^4}{16m^2} (k_1^2 - k_2^2).$$

Так, если  $k_1$  и  $k_2$  совпадают, то  $\langle (\Delta E)^2 \rangle = 0$ , потому что в этом случае волновая функция будет собственной функцией гамильтониана с определенным значением энергии. В другом случае энергия не определена, эта неопределенность задает конечным значением дисперсии.

## Дискретность спектра энергий

Рассмотрим ситуацию, когда спектр энергий у состояний частицы в одномерных потенциалах дискретный. Такая ситуация возможна в потенциальных ямах.

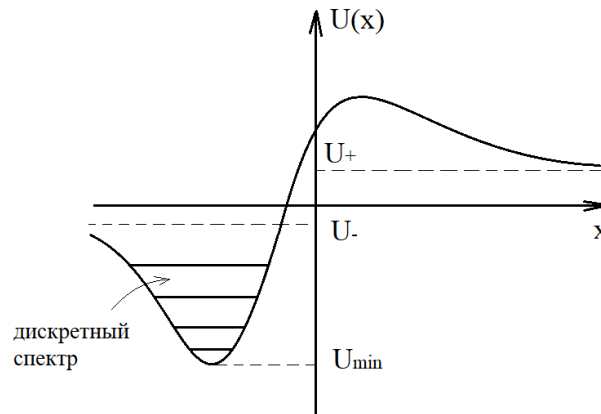


Рис.7.1. Одномерный потенциал.

Изобразим некоторую зависимость одномерного потенциала от координаты (рис. 7.1) и зададимся вопросом, в каком случае возможен дискретный спектр. Для этого надо рассмотреть предельные значения потенциала на бесконечности  $U_-$  ( $x \rightarrow -\infty$ ) и  $U_+$  ( $x \rightarrow +\infty$ ). Если дополнительно глобальный минимум потенциала обозначим как  $U_{min}$ , то необходимым условием существования дискретного спектра будет:

$$U_{min} < \min\{U_-, U_+\}.$$

Для состояний выше  $\min\{U_-, U_+\}$  возможно туннелирование за пределы потенциальной ямы. Понятно, что поскольку кинетическая энергия – положительно определенный оператор, то искать собственные значения гамильтониана нужно в области большей минимального значения потенциала.

Рассмотрим бесконечно глубокую потенциальную яму или потенциальный ящик (рис. 7.2):

$$U(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < d \\ +\infty, & x \leq 0, x \geq d \end{cases}$$

Граничное условие на волновую функцию в точках разрыва потенциала:

$$\psi(0) = \psi(d) = 0$$

$$0 < x < d: \psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \Rightarrow$$

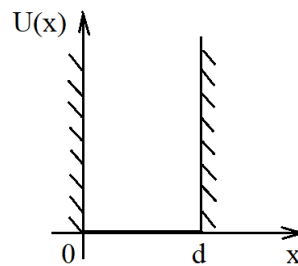


Рис. 7.2. Потенциальный ящик.

$$A + B = 0 \Rightarrow Ae^{ikd} + Be^{-ikd} = 0 \Rightarrow e^{ikd} - e^{-ikd} = 0 \Rightarrow \sin kd = 0 \Rightarrow$$

решение последнего уравнения определяет возможные значения волнового вектора, а значит и возможные значения энергии. Как мы видим, уравнение обладает дискретным набором возможных решений:

$$kd = \pi n, \quad n \in \mathbb{Z}.$$

Для энергетического спектра получим:

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2md^2}, \quad n \in \mathbb{Z},$$

расстояние между уровнями увеличивается с увеличением номера возбужденного состояния.

### Борновский параметр

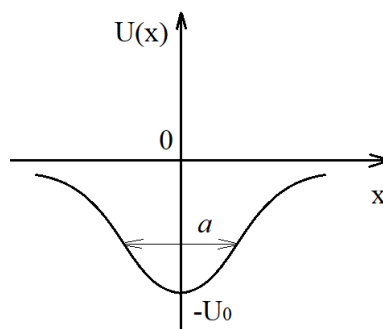


Рис. 7.3. Одномерная потенциальная яма произвольной формы.

Проанализируем в общем виде, от каких параметров в общем виде зависят свойства дискретного спектра в одномерном случае. Рассмотрим потенциальную яму общего вида (рис. 7.3). Глубина потенциальной ямы –  $U_0$ , характерная ширина  $a$ :

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

Уравнение движения для одномерного движения материальной точки:

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

Преобразуем уравнение Шредингера к безразмерному виду:

$$\xi = \frac{x}{a}, \quad \varepsilon = \frac{E}{U_0} \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2} + U_0 f(\xi)\psi(\xi) = E\psi(\xi) \Rightarrow$$

$$-\frac{1}{B} \frac{d^2\psi}{d\xi^2} + f(\xi)\psi = \varepsilon\psi, \text{ где}$$

$B = \frac{2mU_0a^2}{\hbar^2}$  – борновский параметр, характеризует относительную силу потенциала, единственный параметр, который определяет все свойства решений уравнения Шредингера. Полезно заметить, что глубина и ширина потенциала входят не независимо, а через комбинацию  $U_0a^2$ . Это значит, что решения в глубокой, но узкой яме будут подобны решениям в мелкой, но широкой яме. Рассмотрим разные типы потенциалов. Аналитические решения можно получить в крайне редких случаях (с ними и будем работать), в общем случае необходимо численно решать безразмерное уравнение для конкретного борновского параметра.

### Потенциал в виде дельта-функции

Рассмотрим случай, когда  $B \rightarrow 0$ . Простейший способ реализации:  $U_0 \rightarrow \infty$ ,  $a \rightarrow 0$ ,  $U_0a = \text{const} \Rightarrow$

$$\int_{-\infty}^{\infty} U(x)dx = -U_0 a \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi)d\xi = -CU_0a = -W -$$

такой предельный переход описывает переход потенциала в дельта-функцию (рис. 7.4).

Уравнение Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} - W\delta(x)\psi = E\psi.$$

Поскольку потенциал сильно сингулярный, то условие на непрерывность производной в окрестности нуля не выполняется. Проинтегрируем уравнение в малой окрестности  $(-\varepsilon, \varepsilon)$ :

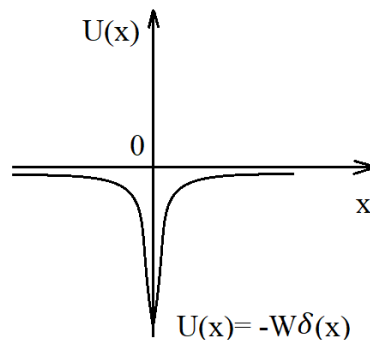


Рис. 7.4. Потенциал в виде дельта-функции.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} dx - W \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \delta(x)\psi(x)dx = E \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \psi(x)dx \Rightarrow$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (\psi'(+\varepsilon) - \psi'(-\varepsilon)) - W\psi(0) = E\psi(0)2\varepsilon \Rightarrow \text{при } \varepsilon \rightarrow 0:$$

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

условие на разрыв производной в нуле. Используя это условие, найдем спектр возможных значений энергии для потенциала в виде дельта-функции.

Поскольку нас интересуют состояния дискретного спектра, будем рассматривать ситуацию, когда  $E < 0$ . Для таких значений энергии волновая функция описывается уравнением:

$$\psi(x) = Ae^{-\alpha x},$$

причем для того, чтобы волновая функция была нормируемой, необходимо, чтобы она убывала и при  $x \rightarrow +\infty$ , и при  $x \rightarrow -\infty$  (рис. 7.5).

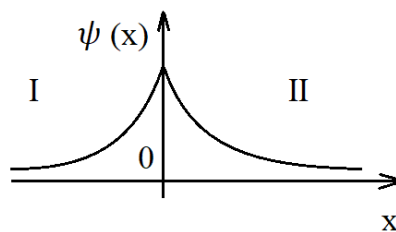


Рис. 7.5. Волновая функция при E<0.

Запишем волновую функцию в правой и левой частях:

$$\begin{aligned}\psi_I(x) &= Ae^{\alpha x} \\ \psi_{II}(x) &= Ae^{-\alpha x} \Rightarrow \psi(x) = Ae^{-\alpha|x|}.\end{aligned}$$

Условие на скачек производной:

$$\psi'_{II}(x) - \psi'_I(x) = -\frac{2mW}{\hbar^2}\psi_I(0) = -\frac{2mW}{\hbar^2}A \Rightarrow$$

$$-A\alpha - A\alpha = -\frac{2mW}{\hbar^2}A \Rightarrow \alpha = \frac{mW}{\hbar^2}$$

уравнение, определяющее возможные значения энергии, поскольку при  $E < 0$ :

$$\alpha = \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}.$$

Так, энергия может принимать *единственное значение*:

$$E = -\frac{\hbar^2\alpha^2}{2m} \Rightarrow E = -\frac{mW^2}{2\hbar^2}.$$

Далее следует заметить, что ширина волновой функции обратно пропорциональна  $\alpha$ .

Так, мы рассмотрели случай малого значения борновского параметра. Случай большого значения борновского параметра обычно сводится к задаче о гармоническом осцилляторе, ей будет посвящен следующий семинар.

### Прямоугольная потенциальная яма

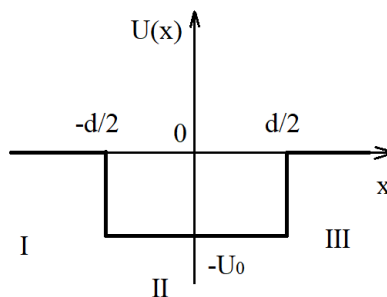


Рис. 7.6. Прямоугольная потенциальная яма.

Рассмотрим простую, точно решаемую аналитически задачу, которая позволяет понять, что будет в промежуточных значениях борновского параметра. Рассмотрим

прямоугольную потенциальную яму конечной глубины (рис. 7.6). Найдем дискретный возможный спектр энергий в этом потенциале при  $E < 0$ .

$$\begin{aligned}
 x < -\frac{d}{2}: \psi_I(x) &= Ae^{kx}, & k &= \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}; \\
 -\frac{d}{2} \leq x \leq \frac{d}{2}: \psi_{II}(x) &= Ce^{i\alpha x} + De^{-i\alpha x}, & \alpha &= \frac{\sqrt{2m(U_0 - |E|)}}{\hbar}; \\
 x > \frac{d}{2}: \psi_{III}(x) &= Fe^{-kx}.
 \end{aligned}$$

Любую прямоугольную потенциальную яму сдвигом координат, от которого никак не изменится спектр энергий, можно поместить симметрично относительно начала координат, сделав потенциал четным. В четном потенциале из симметричных соображений, очевидно, что квадрат модуля волновой функции должен быть четной функцией:

$$|\psi(x)|^2 - \text{четная} \Rightarrow \psi(x) - \text{четная или нечетная.}$$

Рассмотрим две ветки по отдельности.

1) пусть  $\psi(x)$  – четная функция:

$$A = F, C = D \Rightarrow \psi_{II}(x) = \tilde{C} \cos \alpha x \Rightarrow$$

условие непрерывности функции и ее производной в точке  $\frac{d}{2}$  (в силу четности функции в точке  $-\frac{d}{2}$  выполняются автоматически):

$$\begin{aligned}
 \tilde{C} \cos \frac{\alpha d}{2} &= F e^{-\frac{kd}{2}} \\
 -\tilde{C} \alpha \sin \frac{\alpha d}{2} &= -F k e^{-\frac{kd}{2}} \Rightarrow \operatorname{tg} \frac{\alpha d}{2} = \frac{k}{\alpha}.
 \end{aligned}$$

2) пусть  $\psi(x)$  – нечетная функция:

$$A = -F, C = -D \Rightarrow \psi_{II}(x) = \tilde{C} \sin \alpha x \Rightarrow$$

$$\begin{aligned}
 \tilde{C} \sin \frac{\alpha d}{2} &= F e^{-\frac{kd}{2}} \\
 \tilde{C} \alpha \cos \frac{\alpha d}{2} &= -F k e^{-\frac{kd}{2}} \Rightarrow \operatorname{tg} \frac{\alpha d}{2} = -\frac{\alpha}{k}.
 \end{aligned}$$

Полученные уравнения содержат в себе возможные значения энергии, но являются трансцендентными - решить их аналитически невозможно. Свойства решений проанализируем качественно графически.

Перейдем к удобным безразмерным переменным для энергии:

$$\frac{k}{\alpha} = \sqrt{\frac{|E|}{U_0 - |E|}} = \sqrt{\frac{\varepsilon}{1 - \varepsilon}}$$

$$\frac{\alpha d}{2} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2mU_0 d^2(1 - \varepsilon)}{\hbar^2}} = \frac{1}{2} \sqrt{B(1 - \varepsilon)} \quad \Rightarrow$$

$$\operatorname{tg} \frac{1}{2} \sqrt{B(1 - \varepsilon)} = \sqrt{\frac{\varepsilon}{1 - \varepsilon}} \quad \text{— для четной ветки решений;}$$

$$\operatorname{tg} \frac{1}{2} \sqrt{B(1 - \varepsilon)} = -\sqrt{\frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon}} \quad \text{— для нечетной ветки решений.}$$

Пусть  $f(\varepsilon) = \sqrt{\frac{\varepsilon}{1 - \varepsilon}}$ ,  $g(\varepsilon) = -\sqrt{\frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon}}$  (рис. 7.7). Поведение тангенса существенно определяется значением борновского параметра. Чем больше борновский параметр, тем больше ветвей тангенса попадает на участок  $\varepsilon \in (0, 1)$ . Если борновский параметр очень мал, то первая асимптота тангенса лежит левее начала координат и есть единственное решение – пересечение с веткой  $f(\varepsilon)$ . Для промежуточного значения борновского параметра есть несколько ветвей тангенса. На рис. 7.7 нарисована ситуация, в которой есть 4 решения. Замети, что основное состояние всегда будет определяться пересечением тангенса с функцией  $f(\varepsilon)$ , будет соответствовать четной волновой функции. Далее четность решений чередуется.

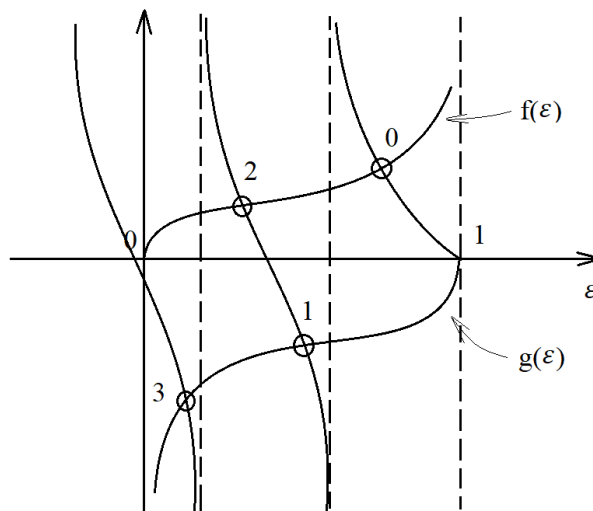


Рис. 7.7. Графическое решение задачи для прямоугольной потенциальной ямы с промежуточным борновским параметром.



При малом борновском параметре получим график, изображенный на рис. 7.8. Решение всегда есть и соответствует четной волновой функции. Можно найти это решение приближенно, разложив левую и правую часть в окрестности нуля по малому параметру.

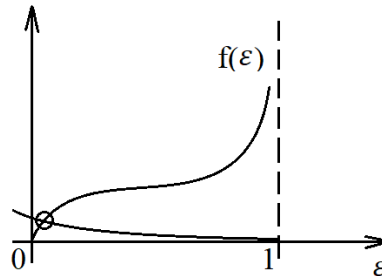


Рис. 7.8. Графическое решение задачи для прямоугольной потенциальной ямы с малым борновским параметром.

$$\frac{1}{2}\sqrt{B(1-\varepsilon)} = \sqrt{\varepsilon} \Rightarrow \frac{1}{4}B(1-\varepsilon) = \varepsilon \Rightarrow \varepsilon \approx \frac{B}{4}.$$

Полезно проанализировать, когда появляется второй уровень энергии. Он появляется тогда, когда асимптота ветки тангенса сместится к  $\varepsilon = 0$ . Тогда при больших значениях борновского параметра будет два решения, второе будет соответствовать нечетной ветви, что выполняется при следующем условии:

$$\begin{aligned} \cos \frac{1}{2}\sqrt{B(1-\varepsilon)} &= 0 \text{ при } \varepsilon = 0 \Rightarrow \\ \cos \frac{1}{2}\sqrt{B} &= 0 \Rightarrow \frac{1}{2}\sqrt{B} = \frac{\pi}{2} \Rightarrow B = \pi^2. \end{aligned}$$

Обратимся к решению задачи о прямоугольной потенциальной яме, которое ранее получили из соотношения неопределенности. Там мы получили, что существует некоторая минимальная глубина ямы при фиксированной ширине, при которой в яме может находиться связанное состояние. Теперь точное решение уравнения Шредингера говорит, что у одно такое состояние есть всегда. Ошибка кроется в решении с использованием соотношения неопределенностей. Мы считали, что для потенциальной ямы с фиксированной шириной  $d$  и глубиной  $U_0$  локализация частицы порядка  $d$ :  $\Delta x \sim d$ . Однако теперь ясно, что это предположение неверно. Волновая функция для малых значений борновского параметра будет гораздо шире  $d$ , ее ширина определяется  $1/k$ , то есть при  $B \rightarrow 0$  возможно  $\Delta x \gg d$ , оценка перестает быть справедливой.

## Семинар 8

### Гармонический осциллятор

#### Модель гармонического осциллятора

*Гармонический осциллятор* – некоторый приближенный способ описания движения частицы в глубоких потенциалах. Как мы помним из классической механики, модель гармонического осциллятора хорошо применима для описания движения вблизи минимума потенциальной энергии, то есть для малых колебаний.

Рассмотрим квантово-механический аналог. Предположим, зависимость потенциальной энергии от координаты – потенциальная яма произвольной формы. Глубина  $U_0$ , точка минимума  $x_0$  (рис. 8.1). Задача – приближенно описать этот потенциал моделью гармонического осциллятора. Разложим функцию зависимости потенциальной энергии от координаты в ряд до второго порядка, приблизим параболой в окрестности минимума, рассмотрим, как устроено движение в таком параболической потенциале.

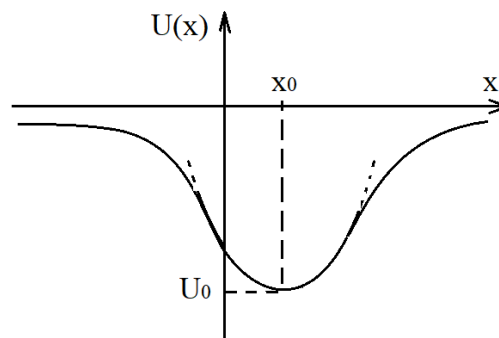


Рис. 8.1. Потенциальная яма произвольной формы, глубина  $U_0$ , точка минимума  $x_0$ .

$$U(x) \cong -U_0 + \frac{U''(x_0)}{2}(x - x_0)^2.$$

Гамильтониан, соответствующий квантовому гармоническому осциллятору:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2.$$

Введем естественные координаты или осцилляторную систему единиц, обезразмерим координату и импульс. Все единицы будем выражать через  $\hbar$ ,  $m$ ,  $\omega$ :

$$\begin{aligned} [\hbar] &= ML^2T^{-1} \\ [m] &= M \quad \Rightarrow \\ [\omega] &= T^{-1} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} x_0 &= \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} - \text{осцилляторный масштаб длины} \\ p_0 &= \sqrt{\hbar m\omega} - \text{осцилляторный масштаб импульса} \\ E_0 &= \hbar\omega - \text{характерная энергия} \end{aligned} \Rightarrow$$

$$\hat{p} := \frac{\hat{p}}{p_0}, \quad \hat{x} := \frac{\hat{x}}{x_0} \Rightarrow$$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2} + \frac{\hat{x}^2}{2} -$$

гамильтониан симметричен относительно координаты и импульса, что позволяет проводить канонические преобразования и упрощать решение задачи.

### Спектр СЗ гамильтониана

Введем операторы:

$$\begin{aligned} a &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x} + i\hat{p}) \\ a^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x} - i\hat{p}) \end{aligned}, \quad [a, a^+] = 1.$$

Выразим гамильтониан в этих новых переменных:

$$\begin{aligned} \hat{x} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^+) \\ \hat{p} &= \frac{i}{\sqrt{2}}(a^+ - a) \end{aligned} \Rightarrow$$

$$\begin{aligned} \hat{H} &= -\frac{1}{4}(a^+ - a)^2 + \frac{1}{4}(a + a^+)^2 = \\ &= -\frac{1}{4}((a^+)^2 + a^2 - a^+a - aa^+) + \frac{1}{4}(a^2 + (a^+)^2 + aa^+ + a^+a) = \\ &= \frac{1}{2}(a^+a + aa^+) = a^+a + \frac{1}{2} \Rightarrow \end{aligned}$$

$$\hat{H} = a^+a + \frac{1}{2}.$$

Рассмотрим волновые функции, соответствующие стационарным состояниям, то есть собственные функции гамильтониана:

$$H\psi_\varepsilon = \varepsilon\psi_\varepsilon.$$

Выясним, как на собственные вектора гамильтониана действует оператор  $a^+$ :

$$\begin{aligned} a^+H\psi_\varepsilon &= a^+ \left( a^+a + \frac{1}{2} \right) \psi_\varepsilon \Rightarrow a^+ \left( aa^+ - \frac{1}{2} \right) \psi_\varepsilon = \left( (a^+a)a^+ - \frac{1}{2}a^+ \right) \psi_\varepsilon \\ &= \left( a^+a - \frac{1}{2} \right) a^+ \psi_\varepsilon \end{aligned}$$

$$a^+H\psi_\varepsilon = a^+\varepsilon\psi_\varepsilon = \varepsilon a^+\psi_\varepsilon \Rightarrow$$

$$\varepsilon(a^+\psi_\varepsilon) = (\hat{H} - 1)(a^+\psi_\varepsilon) \Rightarrow (a^+\psi_\varepsilon) - \text{тоже СФ гамильтониана} \Rightarrow$$

$$\hat{H}(a^+\psi_\varepsilon) = (\varepsilon + 1)(a^+\psi_\varepsilon).$$

Аналогичное выражение можно получить для оператора  $a$ :

$$\hat{H}(a\psi_\varepsilon) = (\varepsilon - 1)(a\psi_\varepsilon).$$

Последнее равенство любопытно, потому что из квадратичного вида гамильтониана понятно, что это оператор с неотрицательным спектром:

$$\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle \geq 0.$$

Спектр гамильтониана должен быть ограничен снизу. Наименьшее собственное значение должно быть неотрицательным. В то же время, действуя на собственные вектора оператором  $a$ , мы постоянно уменьшаем на единицу собственные значения. Это значит, что процесс должен когда-то остановиться, иначе получим сколь угодно малые собственные значения. Следовательно:

$$\exists \psi_0: a\psi_0 = 0,$$

$\psi_0$  соответствует наименьшему собственному значению:

$$H_0\psi_0 = \varepsilon_0\psi_0,$$

$\varepsilon_0$  — минимальное собственное значение, которое не сложно определить:

$$\left( a^+a + \frac{1}{2} \right) \psi_0 = \varepsilon_0\psi_0 \Rightarrow \varepsilon_0 = \frac{1}{2}.$$

Все остальные собственные значения отличаются на единицу, соответственно спектр гамильтониана:

$$\varepsilon_n = n + \frac{1}{2} \text{ или } E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad n \in Z_+.$$

Итак, в гармоническом осцилляторе спектр дискретный, эквидистантный, то есть разница энергий между соседними уровнями не зависит от  $n$ :

$$E_n - E_{n-1} = \hbar\omega.$$

Эта принципиальная особенность позволяет трактовать возбуждение гармонического осциллятора как некие квазичастицы с определенной энергией. То есть, переходя от возбуждения с собственным значением  $E_n$  к состоянию с  $E_{n+1}$ , мы добавляем квант энергии  $\hbar\omega$  в систему, что можно интерпретировать как добавление некоторой частицы с энергией  $\hbar\omega$  в систему. Поэтому операторы  $a, a^+$  часто называют операторами *рождения* и *уничтожения*. Если рассматриваем механические колебания, то возбуждения называют *фононами*.

### СФ гамильтониана

Посмотрим, как устроены собственные функции рассматриваемого гамильтониана. Мы видим, что  $a^+ \psi_{\varepsilon_n}$  пропорционален собственной функции с собственным значением  $(n + \frac{1}{2})$ , но коэффициент пропорциональности не обязательно равен единице (волновая функция может быть ненормированной). Рассмотрим, как устроена норма:

$$a^+ |\psi_n\rangle = \# |\psi_n\rangle,$$

$$|\#|^2 = \langle \psi_n | a a^+ | \psi_n \rangle = \langle \psi_n | a^+ a + 1 | \psi_n \rangle = \langle \psi_n | \left( H + \frac{1}{2} \right) | \psi_n \rangle = (n + 1) \langle \psi_n | \psi_n \rangle = n + 1.$$

$$\begin{aligned} a^+ |\psi_n\rangle &= \sqrt{n+1} |\psi_{n+1}\rangle \\ a |\psi_n\rangle &= \sqrt{n} |\psi_{n-1}\rangle \end{aligned}$$

с помощью этих выражений можно вычислять различные средние значения в потенциале гармонического осциллятора. Например, если нужно посчитать значение координаты в некотором стационарном состоянии гармонического осциллятора, то можно воспользоваться выражением для координаты через операторы рождения и уничтожения:

$$\langle \psi_n | \hat{x} | \psi_n \rangle = \langle \psi_n | \frac{a+a^+}{\sqrt{2}} | \psi_n \rangle = \langle \psi_n | \frac{1}{\sqrt{2}} (\sqrt{n}) | \psi_{n-1} \rangle + \langle \psi_n | \frac{1}{\sqrt{2}} (\sqrt{n+1}) | \psi_{n+1} \rangle = 0 \Rightarrow$$

среднее значение координаты в стационарном состоянии гармонического осциллятора равно нулю.

### ВФ в координатном представлении

Рассмотрим, как устроена зависимость волновых функций от координат. Для этого воспользуемся условием для волновой функции основного состояния:

$$a\psi_0 = 0 \Rightarrow \left(x + \frac{d}{dx}\right)\psi_0 = 0 \Rightarrow$$

$$-x\psi_0(x) = \frac{d\psi_0(x)}{dx} \Rightarrow \frac{d\psi_0}{\psi_0} = -x dx \Rightarrow$$

$$\psi_0(x) = C e^{-\frac{x^2}{2}}.$$

Итак, волновая функция основного состояния – функция Гаусса, симметричная относительно нуля и не имеющая нулей. Нормировочная постоянная:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_0(x)|^2 dx = 1 \Rightarrow |C|^{-2} = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = \pm\sqrt{\pi} \Rightarrow$$

$$\psi_0(x) = \pi^{-\frac{1}{4}} e^{-\frac{x^2}{2}}.$$

Полезно представлять, как устроены волновые функции для нескольких возбужденных состояний:

$$\psi_n(x) = \frac{(a^+)^n}{\sqrt{n!}} \psi_0(x), \quad a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(x - \frac{d}{dx}\right) \Rightarrow$$

$$\psi_n(x) = (2^n n! \sqrt{\pi})^{\frac{1}{2}} \left(x - \frac{d}{dx}\right)^n e^{-\frac{x^2}{2}}.$$

При дифференцировании всегда будет оставаться функция Гаусса, умноженная на некоторый полином n-ой степени. Эти полиномы носят название *полиномов Эрмита*:

$$\psi_n(x) = (2^n n! \sqrt{\pi})^{\frac{1}{2}} H_n(x) e^{-\frac{x^2}{2}}.$$

Полезно понять, как устроены графики первых из этих функций.

Для основного состояния график представляет собой колоколообразную функцию Гаусса (рис.8.2 (а)). Характерная ширина (масштаб локализации функции

основного состояния) задается характерным масштабом длины в осцилляторной системе единиц.

Для первого возбужденного состояния функция нечетна и имеет один ноль (рис.8.2 (б)). Мы помним, что число нулей волновой функции в одномерном потенциале соответствует номеру волновой функции, если основное состояние отсчитывается от нуля. Полином Эрмита первого порядка пропорционален  $x$  в окрестности нуля.

Для второго возбужденного состояния волновая функция должна быть четной и иметь два нуля (рис.8.2 (в)).

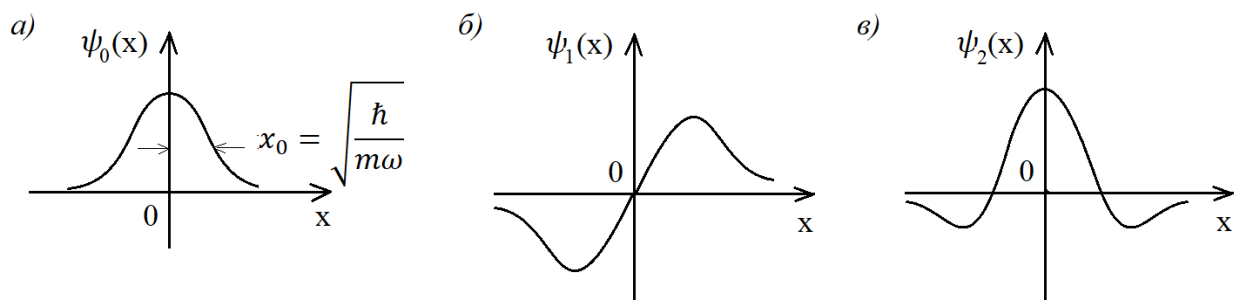


Рис. 8.2. Графики зависимости волновой функции от координаты для а) основного состояния; б) первого возбужденного; в) второго возбужденного.

### Поведение частицы в одномерном периодическом потенциале

Периодический потенциал подразумевает инвариантность гамильтониана относительно сдвига на некоторую постоянную  $a$ :

$$H(x + a) = H(x).$$

Разберемся, как будут устроены волновые функции. Рассмотрим, как будет действовать  $H(x + a)$  на волновую функцию:

$$H(x + a)\psi(x + a) = E\psi(x + a) \Rightarrow H(x)\psi(x + a) = E\psi(x + a) \Rightarrow$$

$$\psi(x + a) = e^{i\varphi}\psi(x), \quad \varphi = Ka \Rightarrow$$

$$\psi(x + a) = \psi(x)e^{iKa} \Rightarrow$$

$$\psi(x) = \varphi(x)e^{iKx} - \text{теорема Блоха.}$$

Так, волновая функция представляется в виде некоторой периодической части  $\varphi(x + a) = \varphi(x)$  и дополнительного фазового множителя  $e^{iKx}$ . Также можно рассматривать

волновую функцию в периодическом потенциале как волновую функцию, похожую на функцию свободного движения, но с некоторой дополнительной модуляцией. В таком случае  $K$  называют квазиволновым вектором, а  $P = \hbar K$  – квазиволновым импульсом.

### Задача (гребенка Дирака)

Рассмотрим простейшую задачу о периодическом потенциале. Пусть есть бесконечная периодическая гребенка из дельта-функций (рис. 8.3):

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

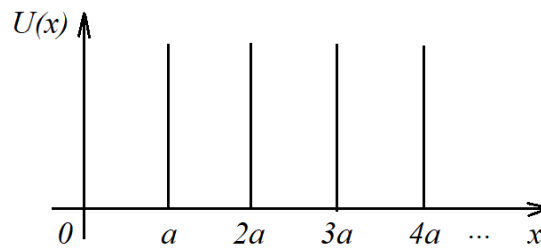


Рис. 8.3. Гребенка Дирака.

$$0 < x < a: \psi_I(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx};$$

$$a < x < 2a: \psi_{II}(x) = e^{iKa}(Ae^{ik(x-a)} + Be^{-ik(x-a)});$$

Граничные условия при  $x = a$ :

$$\begin{aligned} \psi_I(a) &= \psi_{II}(a) \\ \psi'_{II}(a) - \psi'_I(a) &= \frac{2mq}{\hbar^2} \psi_I(a) \Rightarrow \\ Ae^{ika} + Be^{-ika} &= e^{iKa}(A + B) \\ e^{iKa}(ik(A - B)) - ik(Ae^{ika} - Be^{-ika}) &= \frac{2mq}{\hbar^2} e^{iKa}(A + B) \Rightarrow \end{aligned}$$

мы получили систему двух уравнений для двух неизвестных. Чтобы система была совместна, определитель матрицы коэффициентов при  $A$  и  $B$  должен быть равен нулю.

При решении получим неявную зависимость  $E(K) = \frac{\hbar^2 k^2(K)}{2m}$ :

$$\cos Ka = \frac{mqa}{\hbar^2} \frac{\sin ka}{ka} + \cos ka.$$



Проанализируем, когда полученное уравнение имеет решения. Не сложно заметить, что левая часть должна по модулю быть меньше либо равна единицы. Поэтому решения у системы есть только тогда, когда правая часть меньше либо равна единице. Изобразим зависимость правой части от параметра  $ka$  (рис. 8.4). Это  $\text{sinc}$  с добавкой косинуса, с ростом  $ka$  быстро затухает. Заштрихованные области – области в которых решения быть не может. Ширины интервалов, в которых решений нет с увеличением  $ka$  уменьшаются.

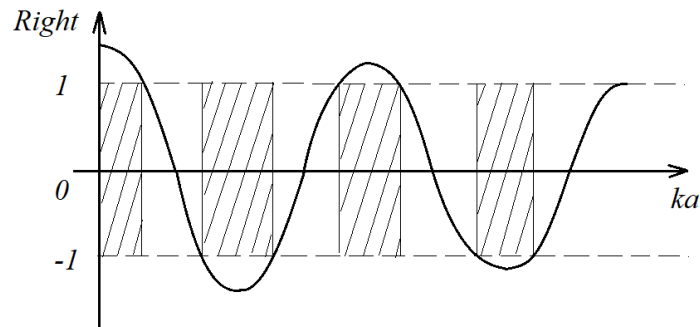


Рис. 8.4. Зависимость правой части от параметра  $ka$ .

Так, мы видим, что спектр непрерывный,  $k$  может принимать континуум значений, однако это не вся ось, а лишь определенные разрешенные значения волновых векторов, а соответственно и значения энергий, которые укладываются в *разрешенные зоны*.

Изобразим зависимость энергии от квазиволнового вектора. Заметим, что квазиволновой вектор определен неоднозначно:

$$\psi(x) = \varphi(x)e^{iKx}, \quad \varphi(x+a) = \varphi(x) \Rightarrow$$

$$\text{при } K + \frac{2\pi n}{a} = \tilde{K} \text{ получим то же самое,}$$

поэтому физически осмысленные значения квазиволнового вектора:  $K \in \left(-\frac{\pi}{a}; \frac{\pi}{a}\right)$ . Далее все повторяется. То есть зависимость энергии от квазиволнового вектора – периодическая функция с периодом  $\frac{2\pi}{a}$ . Область физически допустимых различных значений квазиимпульса называют *зоной Бриллюэна*. Мы рассматриваем первую зону.

Сначала идет запрещенная зона энергий (рис. 8.5), далее зависимость вблизи нуля примерно квадратичная, как и для свободного движения, ближе к концам зоны Бриллюэна загибается. Далее идет запрещенная зона с шириной меньшей первой. Затем следующая разрешенная зона, вблизи нуля закон дисперсии так же квадратичный, но

парабола перевернутая (будто имеем дело с частицей отрицательной массы). На самом деле вторая производная зависимости энергии от квазиимпульса определяет некую эффективную массу, определяющую поведение частиц в периодическом потенциале в слабых внешних полях.

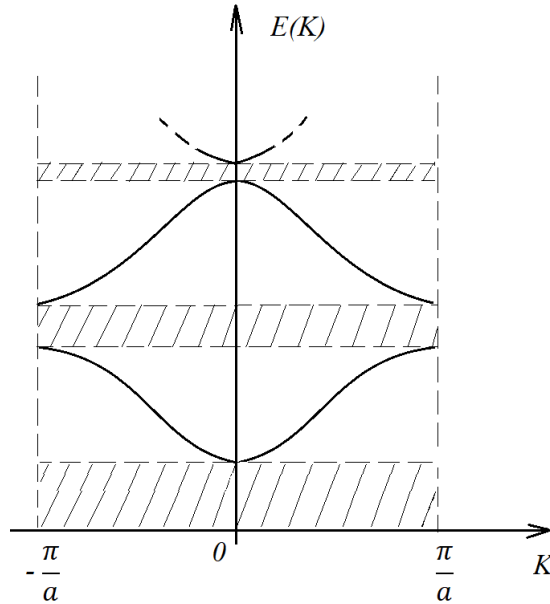


Рис. 8.5. Зависимость энергетического спектра от квазиволнового вектора.

## Семинар 9

## Оператор момента импульса. Матрицы Паули

## Задача

Как будет выглядеть оператор  $\hat{l}_z$  в полярной системе координат?

$$\hat{l}_z = -i \left( \hat{x} \frac{\partial}{\partial y} - \hat{y} \frac{\partial}{\partial x} \right).$$

## Решение:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} &= \frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial}{\partial y} &= \frac{\partial r}{\partial y} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \varphi}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad \Rightarrow \\ r &= \sqrt{x^2 + y^2}, \quad \varphi = \arctg \frac{y}{x} \end{aligned}$$

=&gt;

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}} = \frac{x}{r} = \cos \varphi, \quad \frac{\partial r}{\partial y} = \frac{y}{\sqrt{x^2 + y^2}} = \frac{y}{r} = \sin \varphi;$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x} = -\frac{\frac{y}{x^2}}{1 + \frac{y^2}{x^2}} = -\frac{y}{x^2 + y^2} = -\frac{\sin \varphi}{r}, \quad \frac{\partial \varphi}{\partial y} = \frac{\cos \varphi}{r};$$

$$\begin{aligned} \hat{l}_z &= -i \left( r \cos \varphi \left( \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) - r \sin \varphi \left( \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right) \\ &= -i (\cos^2 \varphi + \sin^2 \varphi) \frac{\partial}{\partial \varphi} = -i \frac{\partial}{\partial \varphi}. \end{aligned}$$

Полученное выражение должно напомнить оператор импульса в декартовой системе координат.  $\hat{l}_z$  - компонента вектора момента импульса вдоль оси z.

## Оператор момента импульса

Будем рассматривать оператор момента, который аналогично определению импульса в классической механике является векторным произведением:

$$\widehat{\mathbf{M}} = [\widehat{\mathbf{r}} \times \widehat{\mathbf{p}}], \quad \widehat{\mathbf{r}} = \{\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}\}, \quad \widehat{\mathbf{p}} = \{\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z\},$$

компоненты векторов – операторы, удовлетворяющие таким же каноническим соотношениям, как в случае одной координаты:

$$[x, \hat{p}_x] = i\hbar, \quad [x, \hat{p}_y] = 0.$$

Разберемся, как устроены операторы проекции момента. Распишем по правилам векторного произведения определитель:

$$\widehat{\vec{M}} = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ \hat{p}_x & \hat{p}_y & \hat{p}_z \end{vmatrix} \Rightarrow \begin{aligned} \widehat{M}_x &= \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y \\ \widehat{M}_y &= \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z \\ \widehat{M}_z &= \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x \end{aligned}$$

Любопытным отличием от классики является то, что поскольку компоненты вектора являются операторами, причем в этих операторах встречаются некоммутирующие компоненты, то коммутационные соотношения между ними могут быть нетривиальными. Выясним, как коммутируют между собой разноименные компоненты оператора момента.

$$[\widehat{M}_x, \widehat{M}_y] = [\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z] = \hat{y}[\hat{p}_z, \hat{z}]\hat{p}_x + \hat{p}_y[\hat{z}, \hat{p}_z]\hat{x} = (\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x)[\hat{z}, \hat{p}_z] \Rightarrow$$

$$[\widehat{M}_x, \widehat{M}_y] = i\hbar\widehat{M}_z;$$

$$[\widehat{M}_z, \widehat{M}_x] = i\hbar\widehat{M}_y;$$

$$[\widehat{M}_y, \widehat{M}_z] = i\hbar\widehat{M}_x.$$

Полученный результат должен показаться удивительным, потому что есть соотношения неопределенностей для различных компонент одного и того же вектора. В квантовой теории в некотором смысле не в любом состоянии мы можем сказать, что у вектора момента импульса есть определенное направление.

### СФ операторов проекций моментов

Выясним, как ведут себя собственные функции операторов проекций моментов. Рассмотрим проекцию на ось z. Введем безразмерный оператор момента:

$$\hat{l}_z \equiv \frac{\widehat{M}_z}{\hbar} \Rightarrow$$

в сферической системе координат:

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

Волновая функция в координатном представлении, выраженная через сферические координаты будет простым образом зависеть от  $\varphi$ :

$$\hat{l}_z \psi(\varphi) = m\psi(\varphi) \Rightarrow$$

$$-i \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi(\varphi) = m\psi(\varphi) \Rightarrow \psi(\varphi) = e^{im\varphi}.$$

Поскольку  $\varphi$  – угол в сферической системе координат, то полученная волновая функция обязательно должна быть  $2\pi$ -периодической:

$$\psi(2\pi) = \psi(0) \Rightarrow m \in Z.$$

Итак, мы получили важный вывод: Собственные значения момента являются целыми числами. То есть в исходных единицах проекции момента могут принимать значения, целочисленно кратные постоянной Планка, момент – квантуемая величина. Целочисленные значения получаются для *орбитального момента* – момент импульса, который связан с зависимостью волновой функции от координаты.

### Квадрат модуля оператора момента

Кроме проекций момента важной величиной является квадрат модуля оператора момента:

$$\hat{l}^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2,$$

в сферической системе координат:

$$\hat{l}^2 = - \left[ \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right].$$

### Их коммутационные соотношения

Разберемся, как устроены коммутационные соотношения между квадратом модуля оператора момента и компонентой его проекции:

$$\begin{aligned} [\hat{l}_x, \hat{l}^2] &= [\hat{l}_x, \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2] = \hat{l}_x(\hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2) - (\hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2)\hat{l}_x = \hat{l}_x\hat{l}_y\hat{l}_y + \hat{l}_x\hat{l}_z\hat{l}_z - \hat{l}_y\hat{l}_y\hat{l}_x - \hat{l}_z\hat{l}_z\hat{l}_x = \\ &= (i\hat{l}_z + \hat{l}_y\hat{l}_x)\hat{l}_y + (\hat{l}_z\hat{l}_x - i\hat{l}_y)\hat{l}_z - \hat{l}_y(\hat{l}_x\hat{l}_y - i\hat{l}_z) - \hat{l}_z(\hat{l}_x\hat{l}_z + i\hat{l}_y) = \\ &= i\hat{l}_z\hat{l}_y + \hat{l}_y\hat{l}_x\hat{l}_y + \hat{l}_z\hat{l}_x\hat{l}_z - i\hat{l}_y\hat{l}_z - i\hat{l}_y\hat{l}_x\hat{l}_y + i\hat{l}_y\hat{l}_z - \hat{l}_z\hat{l}_x\hat{l}_z - i\hat{l}_z\hat{l}_y = 0 \Rightarrow \end{aligned}$$

$$[\hat{l}_x, \hat{l}^2] = 0 \Rightarrow \text{коммутируют.}$$

Можно убедиться, что квадрат оператора момента коммутирует со всеми проекциями момента, которые в свою очередь между собой не коммутируют. Это

значит, что у вектора момента не определено направление, зато известна длина и одна из проекций.

Поскольку операторы коммутируют, то по общим правилам линейной алгебры у них должен быть полный совместный набор собственных векторов. Их можно были бы найти, решая дифференциальное уравнение в частных производных, но это не самая простая задача, поэтому попробуем сделать это алгебраически, пользуясь только коммутационными соотношениями.

### СЗ проекций момента и квадрата момента

Для того, чтобы определить спектр собственных значений, введем два новых оператора:

$$l_{\pm} = l_x \pm il_y: \quad [l_{\pm}, l_{\mp}] = \mp l_{\pm}, \quad [l_{+}, l_{-}] = 2l_z, \quad l_{+}l_{-} = l_x^2 + l_y^2 + l_z.$$

Предположим, есть некоторая собственная функция  $l_z$ :

$$l_z \psi_m = m \psi_m.$$

Рассмотрим, как на нее действуют операторы  $l_{+}, l_{-}$ :

$$l_z l_{\pm} \psi_m = (l_{\pm} l_z \pm l_{\pm}) \psi_m = l_{\pm} (l_z \pm 1) \psi_m = l_{\pm} (m \pm 1) \psi_m \Rightarrow$$

$$l_z (l_{\pm} \psi_m) = (m \pm 1) (l_{\pm} \psi_m) \Rightarrow$$

$l_{\pm} \psi_m$  – собственная функция оператора  $l_z$  с собственным значением  $m \pm 1$ , то есть  $l_{\pm}$  действуют как повышающий и понижающий операторы в пространстве собственных функций операторов проекций моментов.

Обратимся к оператору квадрата момента:

$$l^2 = l_x^2 + l_y^2 + l_z^2 = l_{+}l_{-} + l_z^2 - l_z = l_{-}l_{+} + l_z^2 + l_z.$$

Рассмотрим собственную функцию проекции момента с максимальным собственным значением:

$$l_{+} \psi_M = 0 \Rightarrow$$

$$l^2 \psi_M = \gamma \psi_M \text{ и } l^2 \psi_M l_{-} l_{+} \psi_M + (l_z^2 + l_z) \psi_M = \gamma \psi_M \Rightarrow$$

$$\psi_M (M^2 + M) = \gamma \psi_M \Rightarrow$$

$$\gamma - M^2 - M = 0.$$

Аналогично для наименьшего собственного значения:

$$l_- \psi_\mu = 0 \Rightarrow \gamma - \mu^2 + \mu = 0.$$

Из полученных уравнений следует:

$$\begin{aligned} M &= -\mu \\ \gamma &= M(M + 1) \Rightarrow \end{aligned}$$

собственное значение квадрата момента равно  $M(M + 1)$ , где  $M$  – наибольшее собственное значение оператора проекции на ось  $z$ . А сами проекции меняются от  $M$  до  $-M$ . Важно, что собственное значение квадрата момента не  $M^2$ , как следовало ожидать, а  $M(M + 1)$ .

Так, для момента можно представлять следующую картину, изображенную на рис. 9.1. Пусть  $M = 2$ , значения проекции меняются от  $+2$  до  $-2$  через единицу. Важно, что если значения момента – целые числа, то меняются они всегда на единицу.

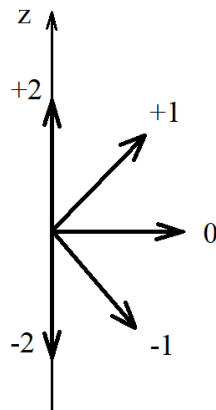


Рис. 9.1. Проекция момента импульса при  $M=2$ .

### Опыт Штерна-Герлаха. Матрицы Паули

Если значение момента единица, то его проекция может принимать три значения:  $1, 0, -1$ . Но существует экспериментальный факт, что это не единственные значения момента, которые встречаются в природе.

Для того, чтобы увидеть квантование момента на целочисленные значения, Штерн и Герлах провели эксперимент, в котором они пропускали атомы серебра через магнитное поле с большим градиентом (рис. 9.2). Серебро было устроено таким образом, что электрон в нем находился в состоянии, в котором нет орбитального углового момента. Штерн и Герлах этого не осознавали и ожидали увидеть расщепление по моменту на нечетное число пучков.

Потенциальная энергия магнитного момента при движении электрона по орбите:

$$U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}, \quad B - \text{напряженность поля.}$$

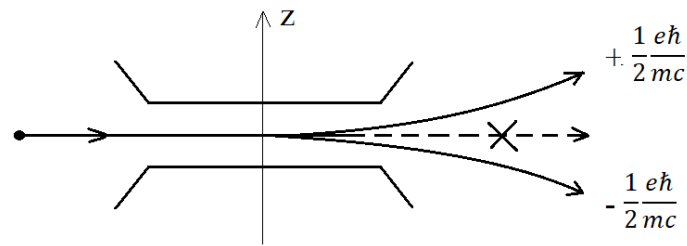


Рис. 9.2. Опыт Штерна-Герлаха.

Если мы теперь создадим градиент напряженности поля, например, вдоль оси  $z$ , то сила, которая будет действовать на атом в направлении оси  $z$ :

$$F_z = -\frac{\partial U}{\partial z} = -\mu_z \frac{\partial B}{\partial z}.$$

Если градиент будет большим, то при пролете через аппарат, в котором создается градиент поля, частицы будут отклоняться, испытывая силу, действующую в направлении оси  $z$ , пропорциональную проекции момента на ось  $z$ . Соответственно, если момент равен единице, то ожидаем увидеть 3 компоненты, если нулю, то расщепления не будет. Штерн и Герлах увидели расщепление на две компоненты. Как мы понимаем, если проделать опыт с одиночными электронами, то мы тоже увидим расщепление на две компоненты.

Оказывается, что у электрона есть *внутренний момент*, такой, что он создает магнитный момент, равный  $\pm \frac{1}{2} \frac{e\hbar}{mc}$ . Этот момент не может быть орбитальным, не может быть связан с зависимостью волновой функции электрона от координат. Этот внутренний момент назвали *спином*, помимо целых значений может принимать полуцелые значения, минимальное значение  $\frac{1}{2}$ .

Операторы проекций спина удовлетворяют таким же коммутационным соотношениям, как и проекции момента:

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hat{S}_z.$$

Поскольку для спина  $\frac{1}{2}$  всего две возможные проекции, то значит, у оператора, например  $\hat{S}_z$  два собственных значения, и пространство состояний спина  $\frac{1}{2}$  двумерно. Это значит, что есть два вектора:



$$\hat{S}_z |\uparrow\rangle = +\frac{1}{2} |\uparrow\rangle$$

$$\hat{S}_z |\downarrow\rangle = -\frac{1}{2} |\downarrow\rangle$$

Эти два состояния в опыте Штерна и Герлаха соответствуют двум полученным отклонениям. Не сложно написать оператор, имеющий такие собственные значения. Выберем в качестве базиса состояния  $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ , и в этом базисе напишем матрицу оператора  $\hat{S}_z$ :

$$\hat{S}_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Остальные проекции можно восстановить по коммутационным соотношениям:

$$\hat{S}_x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\hat{S}_y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} -$$

*матрицы Паули*. Их физический смысл в том, что это операторы, соответствующие проекциям момента  $\frac{1}{2}$  на оси декартовой системы координат.

Произвольное состояние спина  $\frac{1}{2}$  может быть записано в виде:

$$|\psi\rangle = c_1 |\uparrow\rangle + c_2 |\downarrow\rangle, \quad |c_1|^2 + |c_2|^2 = 1.$$

Удобно записать коэффициенты через два действительных параметра:

$$|\psi\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |\uparrow\rangle + e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} |\downarrow\rangle,$$

тогда условие нормировки будет выполняться автоматически.

Если рассмотреть средние значения для операторов проекций спина, то окажется, что в трехмерном пространстве средних значений проекций спина для состояния  $|\psi\rangle$  получится точка на сфере.  $\theta$  – полярный угол в сферической системе координат,  $\varphi$  – азимутальный (рис. 9.3). Эта сфера носит название *сферы Блоха*, представляет собой наглядную визуализацию спина  $\frac{1}{2}$ . Заметим, что двум ортогональным состояниям будут соответствовать диаметрально противоположные точки на сфере:  $|\uparrow\rangle$  – северный полюс,  $|\downarrow\rangle$  – южный,  $|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle)$ ,  $|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle)$  – точки на экваторе.

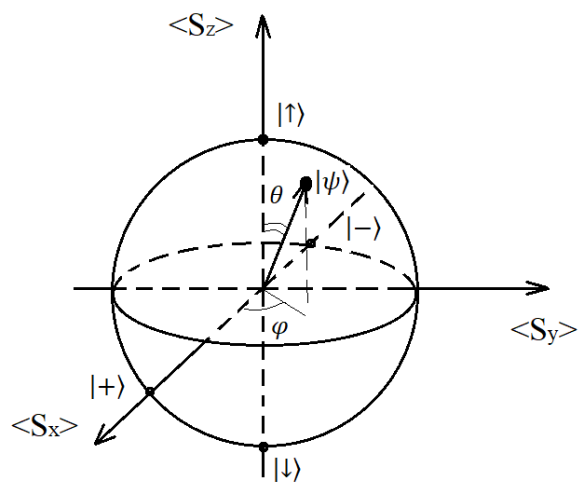


Рис. 9.3. Сфера Блоха.

## Семинар 10

### Атом водорода

#### Задача

Рассмотрим плоский ротатор: система, у которой есть единственная степень свободы, и она описывается углом поворота (меняется от 0 до  $\pi$ ). Волновая функция такой системы:

$$\psi(\varphi) = A(1 + \cos \varphi + \cos 2\varphi),$$

$A$  – нормировочная постоянная.

Найти  $\langle l_z \rangle$  – проекцию момента на ось, вокруг которой происходит вращение, и дисперсию момента  $\langle (\Delta l_z) \rangle$  в такой системе.

#### Решение:

Можно заметить, что собственные функции оператора момента имеют вид:

$$\psi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}.$$

Необходимо представить  $\psi(\varphi)$  как разложение по собственным функциям оператора момента, тогда коэффициенты разложения дадут вероятности обнаружения частицы в состоянии с моментом  $m\hbar$ :

$$\begin{aligned} \psi(\varphi) &= \sum_n C_n \psi_n(\varphi), \\ \psi(\varphi) &= A \left( e^{i0\varphi} + \frac{e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}}{2} + \frac{e^{i2\varphi} + e^{-i2\varphi}}{2} \right) \\ &= \sqrt{2\pi} A \left( \psi_0 + \frac{1}{2} \psi_1 + \frac{1}{2} \psi_{-1} + \frac{1}{2} \psi_2 + \frac{1}{2} \psi_{-2} \right) \Rightarrow \\ 2\pi A^2 \left( 1 + 4 \frac{1}{4} \right) &= 1 \Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \text{ - нормировка } \Rightarrow \\ \psi(\varphi) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \psi_0 + \frac{1}{2} \psi_1 + \frac{1}{2} \psi_{-1} + \frac{1}{2} \psi_2 + \frac{1}{2} \psi_{-2} \right). \end{aligned}$$

Итак, в безразмерных единицах получим:

$$\langle l_z \rangle = \sum_k |C_k|^2 l_k = \frac{1}{2} \cdot 0 + \frac{1}{8} (1 - 1) + \frac{1}{8} (2 - 2) = 0;$$

$$\langle (\Delta l_z) \rangle = \langle l_z^2 \rangle - \langle l_z \rangle^2 = \langle l_z^2 \rangle = \frac{1}{8} (1 + 1) + \frac{1}{8} (4 + 4) = \frac{5}{4}.$$

### Задача двух тел в классической механике (атом водорода)

Основная задача семинара – рассмотреть атом водорода. Это, как вы понимаете, задача движения двух тел – протона и электрона. Вспомним, как такие задачи решаются в классической механике.

Полная энергия системы:

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

Для решения задачи в классике ее сводят к задаче о движении одной частицы в центральном поле. Для этого вводятся новые координаты:

$$\vec{R} = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2} - \text{радиус - вектор центра масс};$$

$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2 - \text{радиус - вектор относительного движения}.$$

Если выразим  $\vec{r}_1, \vec{r}_2$  и подставим в функцию Гамильтона, то она примет простой вид:

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2M} + \frac{\vec{p}^2}{2\mu} + U(r),$$

$$M = m_1 + m_2 - \text{суммарная масса системы},$$

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} - \text{приведенная масса}.$$

$\frac{\vec{p}^2}{2M}$  – движение системы как целого, движение центра масс.

$\frac{\vec{p}^2}{2\mu} + U(r)$  – относительное движение, движение частицы с приведенной массой в центральном поле.

### Задача двух тел в квантовой механике (атом водорода)

Разумеется, в квантовой механике получим то же самое, только для операторов:

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2M} + \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + U(r).$$

Поскольку гамильтониан представляется в виде суммы движения системы как целого и частицы с приведенной массой, то волновая функция может быть представлена в виде произведения:

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varphi(\vec{R})\psi(\vec{r}).$$

Забудем, про движение центра масс, будем считать, что атом покоится. Интересоваться будем только волновыми функциями относительного движения. Движение атома как целого во внешних полях можно позже рассмотреть отдельно. Сейчас нас интересует структура уровней энергии для волновой функции, описывающей относительное движение электрона и протона.

Поскольку масса протона во много раз больше массы электрона, то приведенная масса будет примерно равна массе электрона, но не совпадает с ней.

Запишем уравнение Шредингера для относительного движения в трехмерном виде:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r})U(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \Rightarrow$$

$$\Delta\psi(\vec{r}) - \frac{2m}{\hbar^2}(E - U(\vec{r}))\psi(\vec{r}) = 0.$$

Поскольку задача обладает явной центральной симметрией, то потенциал – только функция расстояния до центра масс, которая не зависит от углов. Разумно перейти в сферическую систему координат и рассчитывать, что в ней будет проще разделить переменные и рассматривать отдельно движение по угловым и радиальным переменным:

$$\psi(x, y, z) \rightarrow \psi(r, \theta, \varphi)$$

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \rightarrow \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left( \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \Rightarrow$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} \psi + \frac{1}{r^2} \left( \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(r))\psi = 0$$

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} = -\hat{l}^2 \psi \Rightarrow$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} \psi + \left( \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(r)) - \frac{\hat{l}^2}{r^2} \right) \psi = 0.$$

Поскольку вся часть, связанная с угловыми переменными, свернулась в оператор квадрата момента, то естественно искать решение в виде произведения радиальной и азимутальной части, причем азимутальная часть должна быть собственной функцией оператора квадрата момента:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) Y_{lm}(\theta, \varphi),$$

$$\hat{l}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = l(l+1) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad l \in Z, \quad Y_{lm}(\theta, \varphi) - \text{шаровые функции.}$$

Кроме того, как мы выяснили на прошлом семинаре, оператор квадрата момента коммутирует с оператором проекции момента, поэтому шаровые функции являются и собственными функциями оператора  $\hat{l}_z$ :

$$\hat{l}_z Y_{lm}(\theta, \varphi) = m Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad m \in Z, \quad m = -l, \dots, +l.$$

Теперь если подставим  $\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$  в уравнение Шредингера, то переменные разделяются, можно получить два отдельных уравнения: одно на собственные функции  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ , второе для радиальной части  $R(r)$ :

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial R}{\partial r} + \left( \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R = 0.$$

Итак, мы видим, что получается уравнение, в котором к потенциалу добавлено некоторое слагаемое, зависящее от момента (возникает и в классической теории в задаче о движении в центральном поле), называется *центральный потенциалом*.

### Одномерное уравнение Шредингера для кулоновского потенциала

Для того, чтобы привести полученное уравнение к уравнению Шредингера необходимо сделать замену:

$$\chi(r) = rR(r) \Rightarrow \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \rightarrow \frac{1}{r} \frac{\partial^2 \chi}{\partial r^2} \Rightarrow$$

$$\frac{d^2 \chi}{dr^2} + \left( \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \chi = 0.$$

Есть важный нюанс, поскольку волновая функция должна быть нормируема, то  $\chi(r) \rightarrow 0$  при  $r = 0$ , иначе интеграл по радиальной переменной от  $R$  разойдется. Поэтому уравнение для радиальной части обладает граничным условием:

$$\chi(0) = 0.$$

Будем решать полученное уравнение Шредингера для кулоновского потенциала:

$$U(r) = -\frac{e^2}{r}.$$

$r \rightarrow 0$ :

$$U(r)r^2 \xrightarrow{r \rightarrow 0} 0 \Rightarrow$$

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} + -\frac{l(l+1)}{r^2}\chi = 0 -$$

решение уместно искать в виде:  $\chi = r^k \Rightarrow$

$$k(k-1)r^{k-2} - l(l+1)r^{k-2} = 0 \Rightarrow$$

$$k(k-1) = l(l+1) \Rightarrow \begin{cases} k = -l \\ k = l+1 \end{cases}$$

$k = -l$  — не подходит, потому что  $\chi \xrightarrow{r \rightarrow 0} 0 \Rightarrow \chi \xrightarrow{r \rightarrow 0} r^{l+1}$ .

$r \rightarrow \infty$ :

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\chi = 0, \quad E < 0 - \text{интересуют состояния дискретного спектра} \Rightarrow$$

$$\chi \sim e^{-kr}; \quad k = \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}.$$

### Спектр СЗ энергий атома водорода

Будем искать решение уравнения в общем случае:

$$\chi(r) = f(r)e^{-kr}.$$

Для функции  $f(r)$  получим уравнение:

$$\frac{d^2}{dr^2}f(r) - 2k\frac{df(r)}{dr} + \left(\frac{2me^2}{\hbar^2}\frac{1}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)f(r) = 0,$$

решение будем искать в виде ряда:

$$f(r) = \sum_n b_n r^n \Rightarrow$$

$$\sum_n \left( b_n n(n-1) r^{n-2} - 2k b_n n r^{n-1} + \frac{2me^2}{\hbar^2} b_n r^{n-1} - l(l+1) b_n r^{n-2} \right) = 0 \Rightarrow$$

$$\sum_n (b_n n(n-1) - l(l+1) b_n) r^{n-2} = \sum_n b_n \left( 2kn - \frac{2me^2}{\hbar^2} \right) r^{n-1} -$$

должно выполняться для любых  $n \Rightarrow$  должны быть равны коэффициенты при равных степенях  $r$ :

$$b_{n+1}(n(n+1) - l(l+1)) = \left( 2kn - \frac{2me^2}{\hbar^2} \right) b_n - \text{рекуррентное соотношение.}$$

Заметим, что при  $n \rightarrow \infty$ :

$$\frac{b_{n+1}}{b_n} \sim \frac{n}{2k} \Rightarrow f(r) \cong e^{2kr} \Rightarrow$$

ряд не может быть бесконечным. То есть:

$$\exists N: f(r) = \sum_n^N b_n r^n \text{ и } 2kN - \frac{2me^2}{\hbar^2} = 0 \Rightarrow$$

$$k_n = \frac{me^2}{\hbar^2} \frac{1}{n} - \text{ может принимать только дискретные значения.}$$

$$k = \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar} \Rightarrow E = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow$$

$$E_n = -\frac{me^2}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -E_{am} \frac{1}{n^2},$$

$n \in \mathbb{Z}$  – главное квантовое число.

Итак, мы показали, что в кулоновском потенциале возможные значения собственной энергии могут принимать только дискретные значения. Результат в точности совпадает с результатом, полученным Бором из соображений о круговых орбитах фиксированного радиуса.



### Вид волновых функций

Волновые функции состоят из радиальной части, которая зависит от главного квантового числа и значения момента, и азимутальной части, являющейся собственной функцией оператора квадрата момента.

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi),$$

$$R_{nl}(r) = \left(\frac{2r}{na_0}\right)^l e^{-\frac{r}{na_0}} L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right), \quad L(r) - \text{полиномы Лежандра.}$$

Для решения задач понадобятся только первые несколько волновых функций. Для состояния с нулевым значением оператора момента, s-состояния:

$$l = 0 \rightarrow s: \quad \psi_{1s}(\rho, \theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-\rho},$$

$$\rho = \frac{r}{a_0}, \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} - \text{боровский радиус.}$$

Для получения правильной асимптотики необходимо, чтобы  $l = 0, \dots, n - 1$ . Для  $n = 2$  возможны состояния  $2s$  и  $2p$ :

$$l = 0 \rightarrow s: \quad \psi_{2s}(\rho, \theta, \varphi) = \# \left(1 - \frac{\rho}{2}\right) e^{-\frac{\rho}{2}},$$

$$l = 1 \rightarrow p: \quad \psi_{2p}(\rho, \theta, \varphi) = \begin{cases} \frac{\rho}{2} e^{-\frac{\rho}{2}} \cos \theta, & m = 0 \\ \frac{\rho}{2} e^{-\frac{\rho}{2}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}, & m = \pm 1 \end{cases},$$

для  $m$  выполняется условие при  $l \neq 0$ :  $m = -l, -l + 1, \dots, l - 1, l$ .

Важно понимать, что полученная конструкция является только радиальной частью. Когда считаем интеграл, нужно считать трехмерный. Например, если хотим посчитать среднее значение:

$$\langle \rho \rangle_{1s} = \frac{\int \rho^2 |\psi_{1s}(\rho)|^2 \rho^2 \sin \theta \, d\theta \, d\varphi \, d\rho}{\int |\psi_{1s}(\rho)|^2 \rho^2 \sin \theta \, d\theta \, d\varphi \, d\rho}.$$

В случае  $1s$  волновая функция от углов не зависит, тогда интеграл по углам берется очень просто и дает  $4\pi$ . Полученное значение для  $\langle \rho \rangle_{1s}$  будет близко к единице. Это значит, что расстояние между электроном и ядром в атоме водорода по порядку величины совпадает с боровским радиусом.

## Семинар 11

### Атом во внешнем поле

#### Задача

У атома водорода есть несколько изотопов, один из которых дейтерий – ядро является связанным состоянием протона и нейтрона. Считая, что протон и нейтрон имеют примерно одинаковые массы, оценить соотношение энергий основного состояния электрона водорода и дейтерия:

$$\frac{E_0^{(2H)}}{E_0^{(1H)}} = ?$$

#### Решение:

Приведенная масса:

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2},$$

$$m_1 = m - \text{масса электрона}, m_2 = \begin{cases} M - \text{для водорода} \\ 2M - \text{для дейтерия} \end{cases}$$

Приведенная масса для водорода и дейтерия:

$$\mu_{1H} = \frac{mM}{m+M}, \quad \mu_{2H} = \frac{2mM}{m+2M}$$

Энергия для электрона в атоме водорода и дейтерия:

$$E_n^{(1H)} = -\frac{\mu_{1H} e^4}{\hbar^2} \frac{1}{2n} \Rightarrow$$

$$E_n^{(2H)} = -\frac{\mu_{2H} e^4}{\hbar^2} \frac{1}{2n}$$

$$\frac{E_0^{(2H)}}{E_0^{(1H)}} = \frac{\mu_{2H}}{\mu_{1H}} = \frac{2mM}{m+2M} \cdot \frac{m+M}{mM} = \frac{2m+2M}{m+2M} = 1 + \frac{m}{m+2M} \cong 1 + \frac{m}{2M} \cong 1,001.$$

Единица в третьем знаке хорошо чувствуется современными спектральными приборами. Проявляется в сдвиге спектральных линий – *изотопический сдвиг*. Эффект максимален для водорода и дейтерия, для более тяжелых ядер отношение между массами ядер изотопов меньше.

## Теория возмущений

Обратимся к спектрам поглощения и излучения, которые являются дискретными. До сих пор мы решали стационарное уравнение Шредингера, находили энергии стационарных состояний. Переходов между состояниями нет. Как тогда возникают спектральные линии?

Атом переходит из одного состояния в другое под воздействием внешнего, меняющегося во времени, поля. Будем рассматривать простейшую модель, в которой будем считать поле классическим. То есть внешнее возмущение – функция времени, которая модифицирует потенциал.

Гамильтониан представим в виде суммы гамильтониана невозмущенной системы и возмущения:

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{V}(t).$$

Возмущение  $\hat{V}(t)$  мало по сравнению с невозмущенной частью.

Задача будет заключаться в нахождении приближенного решения нестационарного уравнения Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle.$$

Будем искать  $\psi(t)$  в виде разложения по волновым функциям стационарных состояний невозмущенного гамильтониана  $\hat{H}_0$ . Пусть у  $\hat{H}_0$  есть набор стационарных состояний:

$$\hat{H}_0 |\varphi_k\rangle = E_k |\varphi_k\rangle \Rightarrow$$

$$|\psi(t)\rangle = \sum_k C_k(t) |\varphi_k\rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_k t} \Rightarrow$$

$$\begin{aligned}
 i\hbar \left( \sum_k \dot{C}_k(t) |\varphi_k\rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_k t} + \sum_k C_k(t) |\varphi_k\rangle \left( -\frac{i}{\hbar} E_k \right) e^{-\frac{i}{\hbar} E_k t} \right) = \\
 = (\hat{H}_0 + \hat{V}(t)) \sum_k C_k(t) |\varphi_k\rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_k t} \Rightarrow
 \end{aligned}$$

$$i\hbar \sum_k \dot{C}_k(t) |\varphi_k\rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_k t} = \sum_k (H_0 - E_k) C_k(t) |\varphi_k\rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_k t} + \hat{V}(t) C_k(t) |\varphi_k\rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_k t} \quad (*)$$

$$\sum_k (H_0 - E_k) C_k(t) |\varphi_k\rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_k t} = 0.$$

Домножим уравнение (\*) справа на  $\langle \varphi_n |$ , учтем, что  $\langle \varphi_n | \varphi_k \rangle = \delta_{nk}$ . В результате получим:

$$i\hbar \dot{C}_n = \sum_k \langle \varphi_n | \hat{V}(t) | \varphi_k \rangle C_k e^{\frac{i}{\hbar} (E_n - E_k) t}$$

$$V_{nk} = \langle \varphi_n | \hat{V}(t) | \varphi_k \rangle - \text{матричный элемент,}$$

$$\frac{1}{\hbar} (E_n - E_k) = \omega_{nk} - \text{частота перехода} \Rightarrow$$

Запишем коэффициенты разложения в следующем виде:

$$i\hbar \dot{C}_n = \sum_k V_{nk}(t) C_k e^{i\omega_{nk} t}. \quad (**)$$

Таким образом, исходное дифференциальное уравнение в частных производных эквивалентно системе обыкновенных дифференциальных уравнений.

### Метод последовательных приближений

В предположении о малости  $V_{nk}(t)$  будем решать задачу методом последовательных приближений.

Начальное условие:

$$C_k(0) = \delta_{mk},$$

то есть в начале система находится на  $m$ -ом уровне энергии. Остальные уровни не заселены.

$$i\hbar \dot{C}_n(t) = \sum_k V_{nk}(t) \delta_{mk} e^{i\omega_{nk} t} \Rightarrow$$

$$i\hbar \dot{C}_n(t) = V_{nm}(t) e^{i\omega_{nm} t} - \text{первое приближение.} \quad (***)$$

Если хотим получить решение второго приближения, то решение уравнения (\*\*\*) снова необходимо подставить в (\*\*). Такая процедура называется *нестационарной теорией возмущений*.

В первом порядке теории возмущений получаем:

$$C_n(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t V_{nm}(\tau) e^{i\omega_{nm}\tau} d\tau - \text{решение первого приближения.}$$

Ограничимся первым порядком. Проанализируем полученное решение.

### Вероятность перехода

Вероятности переходов:

$$W_{nm}(t) = |C_n(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t V_{nm}(\tau) e^{i\omega_{nm}\tau} d\tau \right|^2.$$

Если  $t$  становится большим, то величина  $\int_0^t V_{nm}(\tau) e^{i\omega_{nm}\tau} d\tau$  становится похожа на Фурье-образ матричного элемента оператора возмущения на частоте перехода. То есть, если в спектре есть компонента на частоте перехода, то переходы идут, если нет, то вероятности малы. В случае конечного по времени возмущения (ограниченный импульс) получим спектр, обладающий всеми частотами.

### Гармоническое возмущение

Рассмотрим простой случай, например, когда возмущение гармоническое, представляет собой монохроматическую синусоиду. Рассматриваем возмущение вида:

$$\hat{V}(t) = \hat{V} \cos \omega t = V \left( \frac{e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}}{2} \right) \Rightarrow$$

$$C_n(t) = -\frac{i}{\hbar} \frac{V_{nm}}{2} \int_0^t (e^{i(\omega_{nm}+\omega)\tau} + e^{i(\omega_{nm}-\omega)\tau}) d\tau.$$

При вычислении интеграла заметим, что для больших  $t$  первое слагаемое быстро осциллирует и в среднем по времени даст ноль. Будем рассматривать ситуацию, близкую к резонансной:

$$\omega_{nm} \approx \omega \Rightarrow$$

$$\begin{aligned} C_n(t) &= -\frac{1}{\hbar} \frac{V_{nm}}{2} (e^{i(\omega_{nm}-\omega)t} - 1) \frac{1}{\omega_{nm} - \omega} = -\frac{1}{\hbar} \frac{V_{nm}}{2} \frac{\left( e^{\frac{i(\omega_{nm}-\omega)t}{2}} - e^{-\frac{i(\omega_{nm}-\omega)t}{2}} \right)}{\omega_{nm} - \omega} = \\ &= i \frac{V_{nm}}{\hbar} t \frac{\sin \frac{(\omega_{nm}-\omega)t}{2}}{\frac{i(\omega_{nm}-\omega)t}{2}} \Rightarrow \end{aligned}$$

$$C_n(t) = i \frac{V_{nm}}{\hbar} t \operatorname{sinc} \frac{(\omega_{nm} - \omega)t}{2}.$$

Выражение для вероятности перехода:

$$W_{nm}(t) = \frac{|V_{nm}|^2}{\hbar^2} t^2 \operatorname{sinc}^2 \frac{(\omega_{nm} - \omega)t}{2}.$$

Можно заметить, что для больших  $t$  полученное выражение для вероятности перехода не справедливо – квадратичная зависимость от  $t$ , но, как известно, вероятность должна быть ограничена единицей. Полученное несоответствие является следствием использования первого приближения.  $\operatorname{sinc}^2$  имеет пик в окрестности нулевого аргумента, то есть при  $\omega_{nm} \approx \omega$ . При этом условии вероятности существенно отличны от нуля. Чем более монохроматическое воздействие, тем пик уже. В пределе получаем боровское правило, по которому переходы есть только тогда, когда частота внешнего поля  $\omega$  совпадает с частотой перехода  $\omega_{nm}$ .

### Двухуровневая система

Для того, чтобы определить, насколько приближенное значение соответствует точному решению, рассмотрим задачу, для которой можно получить точное решение. Рассмотрим двухуровневую систему. То есть из всех уровней энергии стационарного состояния выделим два, которые близки к резонансу с внешним полем (рис. 11.1).

$$\omega_{nm} - \omega = \Delta \ll \omega.$$

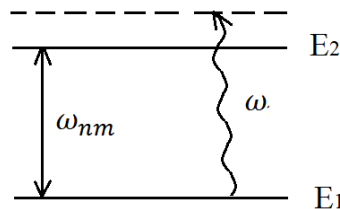


Рис. 11.1. Двухуровневая система.

В таком приближенном рассмотрении в системе из бесконечного числа уравнений можем оставить только два, соответствующие переходам между двумя стационарными состояниями с энергиями  $E_1$  и  $E_2$ .

Запишем систему уравнений и решим ее:

$$|\psi\rangle = C_1 e^{-\frac{i}{\hbar} E_1 t} |\varphi_1\rangle + C_2 e^{-\frac{i}{\hbar} E_2 t} |\varphi_2\rangle$$

$$i\hbar\dot{C}_1 = \frac{C_2}{2} [V_{12}e^{-i(\omega_{21}-\omega)t} + V_{12}^*e^{-i(\omega_{21}+\omega)t}]$$

$$i\hbar\dot{C}_2 = \frac{C_1}{2} [V_{12}e^{i(\omega_{21}+\omega)t} + V_{12}^*e^{i(\omega_{21}-\omega)t}] ,$$

$$\frac{V_{12}}{\hbar} = \Omega - \text{частота Раби} \Rightarrow$$

$$i\dot{C}_1 = \frac{C_2}{2}\Omega e^{-i\Delta t}$$

$$i\dot{C}_2 = \frac{C_1}{2}\Omega^* e^{i\Delta t} \Rightarrow$$

$$\ddot{C}_2 - i\Delta\dot{C}_2 + \frac{|\Omega|^2}{4}C_2 = 0 -$$

обыкновенное дифференциальное уравнение второго порядка, решение можно искать в виде экспонент. Корни характеристического уравнения будут чисто мнимыми, поэтому решение представляется в виде:

$$C_2(t) = A \exp\left(i \frac{\Delta + \sqrt{|\Omega|^2 + \Delta^2}}{2} t\right) + B \exp\left(i \frac{\Delta - \sqrt{|\Omega|^2 + \Delta^2}}{2} t\right).$$

Коэффициенты А и В нужно искать из начальных условий. Предположим, что в начальный момент условия таковы, что в начальный момент времени система находится в основном состоянии:

$$C_2(0) = 0 \Rightarrow A + B = 0;$$

$$C_1(0) = 1 \Rightarrow \dot{C}_2(0) = -i \frac{\Omega^*}{2}.$$

В результате решения получим следующие решение:

$$C_2(t) = i \frac{\Omega^*}{\tilde{\Omega}} e^{i\Delta t} \sin \frac{\tilde{\Omega}}{2} t, \quad \text{где}$$

$$\tilde{\Omega} = \sqrt{|\Omega|^2 + \Delta^2}.$$

Вероятность перехода:

$$W_{21}(t) = \frac{|\Omega|^2}{|\tilde{\Omega}|^2} \sin^2 \frac{\tilde{\Omega}}{2} t.$$

То есть, действительно, при малых  $t$  вероятность растет квадратично (синус можно приблизить его аргументом), а далее начинается отклонение (рис. 11.2). Мы видим, что атом периодически переходит из основного состояния в возбужденное. Вероятность перехода оказывается единичной в момент времени

$$T_{\pi} = \frac{\pi}{\tilde{\Omega}}$$

Поэтому, если мы пошлем на систему импульс с длительностью  $T_{\pi}$ , то мы с единичной вероятностью переведем атом из основного состояния в возбужденное. Такой импульс называется  $\pi$ -импульсом. Вышесказанное справедливо для отстройки  $\Delta = 0$ . Если отстройка не нулевая, то вероятность никогда не достигает единицы, кроме того частота осцилляций больше (рис. 11.2).

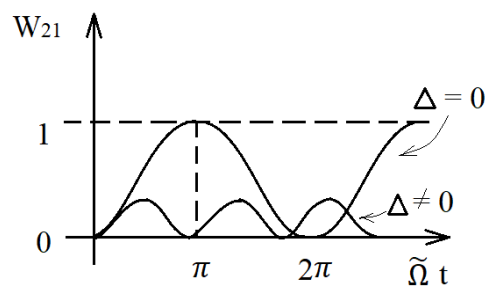


Рис. 11.2. Зависимость вероятности перехода из основного состояния в возбужденное от времени для нулевой и ненулевой отстройки.

Так, нестационарная теория возмущений дает хорошее приближение при малых временах. Чтобы уточнить решение на больших временах необходимо искать решения более высоких порядков. При точном решении для двухуровневой системы получаем осцилляции вероятности обнаружить систему в основном состоянии и возбужденном. Эти осцилляции – *осцилляции Раби*. Они прекрасно наблюдаются экспериментально.





ФИЗИЧЕСКИЙ  
ФАКУЛЬТЕТ  
МГУ ИМЕНИ  
М.В. ЛОМОНОСОВА

*teach-in*  
ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ