ФИЗИЧЕСКИЙ
ФАКУЛЬТЕТ
МГУ ИМЕНИ
М.В. ЛОМОНОСОВА

teach-in
ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ. ЧАСТЬ 1

ПАРФЁНОВ
КОНСТАНТИН ВЛАДИМИРОВИЧ

ФИЗФАК МГУ

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

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

БЛАГОДАРИМ ЗА ПОДГОТОВКУ КОНСПЕКТА
СТУДЕНТКУ ФИЗИЧЕСКОГО ФАКУЛЬТЕТА МГУ
АНДРЕЕВУ АННУ СЕРГЕЕВНУ

Содержание

Семинар 1. Математический аппарат квантовой теории

Гильбертово пространство 6
Операторы 7
Собственные значения и вектора 9
Алгебры эрмитовых операторов в гильбертовом пространстве 10

Семинар 2. Аксиоматика канонического квантования

Аксиомы канонического квантования 13
Представления 14
Стационарное уравнение Гамильтона в p- и x- представлениях 16
Гауссов волновой пакет 17
Аксиома об эволюции 18

Семинар 3. Вступление. Эволюция квантовых систем

Картина Шрёдингера 19
Картина Гейзенберга 20
Интегралы Движения 20

Семинар 3. Эволюция квантовых систем

Эволюция волновой функции в глубокой потенциальной яме 22
Гармонический осциллятор в картине Гейзенберга 23
Интегралы движения замкнутой системы взаимодействующих частиц 25

Семинар 4. Смешанные состояния и матрица плотности

Понятия о смешанном состоянии. Матрица плотности 28
Вычисление среднего и дисперсии для смешанного состояния 31
Непрерывная матрица плотности 32

Эволюционирующий оператор плотности ... 34

Семинар 5. Одномерные квантовые системы

Одномерное движение в качественном рассмотрении. Условия сшивки ... 35

Задача о дираковской яме ... 38

Эволюция одномерного смешанного состояния ... 43

Семинар 6. Гармонический осциллятор

Повышающий и понижающий операторы ... 45

Эволюция когерентной смеси состояний осциллятора ... 46

Эффект Мёссбауера ... 48

Эволюция комплексного когерентного состояния осциллятора ... 50

Семинар 7. Использование симметрии для решения задач

Симметрии динамики ... 52

Понижение размерности. Качественный анализ ... 54

Гребенка Дирака ... 56

Семинар 8. Частицы со спином

Теория спина ... 61

Прибор Штерна-Герлаха. Поляризованный пучок ... 65

Электронный резонанс ... 67

Семинар 9. Теория моментов

Сложение моментов. Коэффициенты Клебша-Гордана ... 70

Построение состояния с определенным моментом электронной оболочки гелия ... 72

Отражение тока в слабых распадах ... 76

Семинар 10. Метод Вентцеля-Крамерса-Бриллюэна

Метод Вентцеля-Крамерса-Бриллюэна 77

Холодная электронная эмиссия 80

Семинар 11. Теория возмущений

Теория возмущений 86

Потенциал произвольной формы с выраженным минимумом 88

Непертурбативные задачи 91

Поправки к энергии в случае вырождения 92

Семинар 1

Математический аппарат квантовой теории

Гильбертово пространство

Для построения квантовой теории используются операторы, определенные в гильбертовом пространстве.

Гильбертово пространство $\mathcal{H}$ - бесконечномерное сепарабельное полное евклидово линейное пространство над полем комплексных чисел.

Линейное пространство над полем комплексных чисел – набор элементов, который удовлетворяющий аксиомам гильбертова пространства над полем комплексных чисел и для которых определена операция, по которой строится их линейная комбинация: $\{\ |\psi\rangle\}: \forall|\psi_{1,2}\rangle\ \ \forall\{\alpha,\beta\}\in\mathbb{C}^1 \rightarrow\ |\psi\rangle=\alpha|\psi_1\rangle+\beta|\psi_2\rangle\in\mathcal{H}$ - для комбинации так же выполняются аксиомы гильбертова пространства.

Евклидово пространство – пространство, в котором определено скалярное произведение: $\forall\,|\psi_{1,2}\rangle: \langle\psi_1|\psi_2\rangle\in\mathbb{C}^1 \quad (\langle\psi_1|\psi_2\rangle=\langle\psi_2|\psi_1\rangle^*)$, удовлетворяет набору свойств скалярного произведения.

Среди свойств скалярного произведения есть требование: скалярный квадрат есть величина неотрицательная и равна нулю только для нулевого вектора, следовательно, есть возможность определить норму вектора: $\||\psi\rangle\|=\sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}$.

Полнота (здесь имеется в виду полнота в смысле Коши) – любая фундаментальная (в смысле введенной нормы) последовательность элементов пространства сходится к элементу этого же пространства.

Сепарабельное пространство – пространство, в котором существует всюду плотное счетное множество, то есть такой счетный набор элементов пространства, что любой другой вектор с любой наперед заданной точностью может быть приближен линейной комбинацией векторов.

Для квантовой теории важна не сепарабельность как таковая, а ее следствие.

Основное следствие сепарабельности - существование счетного полного ортонормированного базиса (ПОБ). $\{\ |\psi_n\rangle\}, n = 1, 2, \ldots,\ \langle\psi_n|\psi_{n'}\rangle = \delta_{nn'},\ \forall|\psi\rangle \in \mathcal{H}\colon |\psi\rangle = \sum_n \langle\psi_n|\psi\ \ \rangle|\psi_n\ \ \rangle$.

Во многих пространствах, в которых мы будем работать, формально будут существовать несчетные базисы наряду со счетными, то есть будет существовать набор$\{|\psi(\nu)\rangle\}$, где ν – непрерывная переменная, пробегающая несчетное количество значений, при этом: $\forall|\psi\rangle|\psi\rangle = \int_{\nu_1}^{\nu_2}\langle\psi(\nu)|\psi\rangle \cdot |\psi(\nu)\rangle$. В таких разложениях часто будет оказываться, что сам базисный вектор ψ не принадлежит гильбертову пространству, он строится как поточечный предел последовательности в нашем пространстве, но сам не принадлежит этому пространству. О статусе таких состояний необходимо поговорить особо. Условие ортонормированности в таком случае записывается через дельта-функцию Дирака: $\langle\psi(\nu)|\psi(\nu')\rangle = \delta(\nu - \nu')$.

Операторы

Оператор в пространстве – отображает пространство само в себя.

Оператор на пространстве – отображает элементы пространства в другое пространство.

Оператор $\hat{F}$определен в $\mathcal{H}$: $\forall|\psi\rangle\hat{F}|\psi\rangle = |\tilde{\psi}\rangle \in \mathcal{H}$, $|\tilde{\psi}\rangle$ *–образ* при действии оператором $|\psi\rangle$ *– прообраз*.

Линейные операторы – прообразом линейной комбинации является линейная комбинация прообразов: $\hat{F}(\alpha|\psi_1\rangle + \beta|\psi_2\rangle) = \alpha\hat{F}|\psi_1\rangle + \beta\hat{F}|\psi_2\rangle$.

Эрмитово сопряжение – любому оператору $\hat{F}$ можно поставить в соотвествие сопряженный $\hat{F}^+$: $\langle\psi_1|\hat{F}\psi_2\rangle = \langle\psi_2|\hat{F}^+\psi_1\rangle^*$.

Если в пространстве, в котором действует оператор, можно задать полный ортонормированный базис, то любой линейный оператор можно задать *матрицей в этом базисе*:

$$\hat{F} \leftrightarrow F_{nn'} = \langle\psi_n|\hat{F}\psi_{n'}\rangle$$

Скалярные произведения по нормированным на единицу векторам будем называть *матричными элементами оператора*$\hat{F}$. Если есть полный ортонормированный базис, то получается матрица. Не трудно, воспользовавшись

свойством линейности, показать, что зная матрицу оператора, мы знаем, как он действует на любой вектор, разложенный по этому базису:

$$|\psi\rangle = \sum_n \langle\psi_n|\psi\rangle|\psi_n\rangle;$$

$$\hat{F}|\psi\rangle = |\tilde{\psi}\rangle = \sum_n \langle\psi_n|\tilde{\psi}\rangle|\psi_n\rangle;$$

$$\langle\psi_n|\tilde{\psi}\rangle = \langle\psi_n|\hat{F}\sum_{n'}\langle\psi_{n'}|\psi\rangle|\psi_{n'}\rangle\rangle = \sum_{n'} F_{nn'}\cdot\langle\psi_{n'}|\psi\rangle.$$

Поскольку базисы бывают несчетными, матрицы также бывают с непрерывными индексами.

Гильбертово пространство не случайно стало полем для построения квантовой теории (отражает некоторые особенности, которые физики хотели заложить в эту теорию).

Первым соображением, по которому квантовая физика отличалась от классической, было наличие *корпускулярно-волнового дуализма*. На уровне классической физики все объекты описываются как корпускулы или волны. *Объекты квантового мира (микромира) не являются ни волнами, ни частицами.* Для описания объектов микромира используется приближенный подход – описываем объект, используя и корпускулярные и волновые образы, пытаясь их синтезировать.

Корпускулярная механика типа ньютоновой или гамильтоновой механики всегда строилась на базе набора дискретных характеристик, волну считали непрерывной, распределенной в пространстве, считая, что пространство бесконечно делимо, соответственно в любой его конечной области несчетное количество точек.

Так, мы работаем со счетными или несчетными системами – два разных подхода. Если мы пытаемся их синтезировать, то необходима такая математика, в которой не будет большой разницы между дискретным и непрерывным описаниями. Этот шанс дают сепарабельные пространства, нет разницы между свойствами сумм и интегралов (пространство бесконечномерно, но в нем всегда существует счетный ортонормированный базис). Сепарабельное пространство – математическое отображение идеи корпускулярно-волнового дуализма.

Алгебраические свойства операторов

Линейные операции для линейных операторов:

$$\left(\alpha\hat{F} + \beta\hat{G}\right)|\psi\rangle \equiv \alpha\hat{F}|\psi\rangle + \beta\hat{G}|\psi\rangle.$$

Перемножение операторов:

$$(\hat{F}\cdot\hat{G})|\psi\rangle \equiv \hat{F}(\hat{G}|\psi\rangle)$$

Самое главное свойство операторов с точки зрения операции умножения – оно необязательно коммутативно.

Когда говорим об алгебраических свойствах операторов, говорим о вычислении для них всевозможных коммутаторов и антикоммутаторов:

$$[\hat{F},\hat{G}] = \hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F} - \textit{коммутатор};$$

$$\{\hat{F},\hat{G}\} = \hat{F}\hat{G} + \hat{G}\hat{F} - \textit{антикоммутатор}.$$

Если одна из скобок равна нулю, то говорят, что операторы коммутируют или антикоммутируют между собой.

Каждый оператор является объектом, описывающим процедуру измерения величины, обобщено называемую *наблюдаемым*. Коммутирующие операторы наблюдаемых обозначают, что эти наблюдаемые *совместно измеримы*.

Собственные вектора и собственные значения

Если для оператора $\hat{F}$ существуют такие числа f, что для них существуют нетривиальные решения уравнения, то эти числа называют *собственными значениями*, а вектора, являющиеся решениями, – *собственными векторами*.

$$\hat{F}|\psi_f\rangle = f|\psi_f\rangle, |\psi_f\rangle \neq 0$$

Эрмитовым оператором называют оператор, совпадающий со своим сопряженным:

$$\hat{F} = \hat{F}^{+}.$$

Свойства собственных значений и собственных векторов эрмитовых операторов:

1)все собственные значения вещественны$f \in \mathbb{R}^1$ (в силу физической интерпретации);

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА

teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

2) собственные вектора, соответствующие разным собственными значениям ортогональны: $f \neq f' => \langle \psi_f | \psi_{f'} \rangle = 0$;

3) система собственных векторов $\{|\psi_f\rangle\}$ любого эрмитова оператора полная в гильбертовом пространстве $\mathcal{H}$ =>существует полный ортонормированный базис, составленный из $|\psi_f\rangle$ в $\mathcal{H}$;

4) два эрмитовых оператора $(\hat{F}$ и $\hat{G})$имеют общую полную в $\mathcal{H}$ систему собственных векторов ⇔когда они коммутируют $[\hat{F}, \hat{G}] = 0$.

Доп. задача с оценкой 30 баллов: доказать свойство 4.

Важно различать случаи вырожденного и невырожденного спектров.

Вырожденное собственное значение – собственное значение, которому может отвечать несколько линейно-независимых собственных векторов.

Невырожденное собственное значение – собственное значение, которому соответствует один с точностью до постоянного множителя вектор.

Спектр оператора - множество его собственных значений.

Спектр оператора называется невырожденным тогда и только тогда, когда все до единого его собственные значения не вырождены.

В доказательстве свойства 4 необходимо обратить внимание на различия вырожденного и невырожденного спектров.

Алгебры эрмитовых операторов в гильбертовом пространстве

Если $f(x)$ – числовая функция, которую можно разложить в ряд Тейлора:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} x^n,$$

то будем говорить, что:

$$f(\hat{A}) \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} \hat{A}^n, \qquad (*)$$

$f(\hat{A})$ *– функция от оператора.*

Пример функции от оператора:

$$e^{\hat{A}} \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \hat{A}^n.$$

Если определить понятие обратного оператора $\hat{A}^{-1}$: $\hat{A}\hat{A}^{-1} = \hat{A}^{-1}\hat{A} = 1$, то в (*) можно включить отрицательные степени.

Пример 1:

Пусть коммутатор двух операторов отличен от нуля $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = i\hat{C} \neq 0$, (коммутатор двух эрмитовых операторов оказывается антиэрмитовым оператором (при эрмитовом сопряжении меняет знак), если выносим i, то $\hat{C}$ – эрмитов). Но $\left[\hat{A}, \hat{C}\right] = \left[\hat{B}, \hat{C}\right] = 0$.С такими операторами часто будем встречаться в задачах – с точки зрения математики это пара операторов, коммутирующая со своим коммутатором.

Поставим задачу вычислить:

$$\left[\hat{A}, f\left(\hat{B}\right)\right] = ?$$

$$\left[\hat{A}, f\left(\hat{B}\right)\right] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} \left[\hat{A}, \hat{B}^n\right]$$

$$\left[\hat{A}, \hat{B}^n\right] \equiv \hat{A}\hat{B}^n - \hat{B}^n\hat{A} = \hat{A}\hat{B}^n - \hat{B}\,\hat{A}\hat{B}^{n-1} + \hat{B}\,\hat{A}\hat{B}^{n-1} - \hat{B}^n\hat{A}$$
$$= \left(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}\right)\hat{B}^{n-1} + \hat{B}\left(\hat{A}\hat{B}^{n-1} - \hat{B}^{n-1}\hat{A}\right) = i\hat{C}\hat{B}^{n-1} + \hat{B}\left[\hat{A}, \hat{B}^{n-1}\right] \Rightarrow$$

получили рекуррентное соотношение =>

$$i\hat{C}\hat{B}^{n-1} + \hat{B}\left[\hat{A}, \hat{B}^{n-1}\right] = 2i\hat{C}\hat{B}^{n-1} + \hat{B}\left[\hat{A}, \hat{B}^{n-2}\right] = ni\hat{C}\hat{B}^{n-1} + 0 \Rightarrow$$

$$\left[\hat{A}, f\left(\hat{B}\right)\right] = i\hat{C}\sum_{n=1}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} n\hat{B}^{n-1} \quad = i\hat{C}f'\left(\hat{B}\right).$$

Например $\left[\hat{A}, cos\left(\omega\hat{B}\right)\right] = -i\omega\hat{C}\sin\left(\omega\hat{B}\right)$.

Пример 2:

Для тех же $\hat{A}$ и $\hat{B}$.

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА

teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = ?$$

Определим *операторнозначную функцию от вещественной переменной* $x \in \mathbb{R}^1$:

$$\hat{F}(x) \equiv e^{x(\hat{A}+\hat{B})}e^{-x\hat{B}}e^{-x\hat{A}}.$$

Очевидно, что $\hat{F}(0) = 1$.

Кроме того можем изучить производную этой функции:

$$\frac{d\hat{F}}{dx} = e^{x(\hat{A}+\hat{B})}\left(\hat{A}+\hat{B}\right)e^{-x\hat{B}}e^{-x\hat{A}} + e^{x(\hat{A}+\hat{B})}\left(-\hat{B}\right)e^{-x\hat{B}}e^{-x\hat{A}} + e^{x(\hat{A}+\hat{B})}e^{-x\hat{B}}\left(-\hat{A}\right)e^{-x\hat{A}} =$$

$$= e^{x(\hat{A}+\hat{B})}\left\{\left(\hat{A}+\hat{B}\right)e^{-x\hat{B}} - \hat{B}e^{-x\hat{B}} - e^{-x\hat{B}}\hat{A}\right\}e^{-x\hat{A}} = e^{x(\hat{A}+\hat{B})}\left[\hat{A}, e^{-x\hat{B}}\right]e^{-x\hat{A}} =$$

$$= e^{x(\hat{A}+\hat{B})}i\hat{C}(-x)e^{-x\hat{B}}e^{-x\hat{A}} = -ix\hat{C}e^{x(\hat{A}+\hat{B})}e^{-x\hat{B}}e^{-x\hat{A}} = -ix\hat{C}\hat{F}(x).$$

Так, наша функция вещественной переменной x подчиняется довольно простому дифференциальному уравнению 1-го порядка с простым начальным условием, что позволяет заметить следующее:

$$\hat{F}(x) \equiv e^{-i\frac{x^2}{2}\hat{C}} \Rightarrow$$

$$e^{x(\hat{A}+\hat{B})}e^{-x\hat{B}}e^{-x\hat{A}} = e^{-i\frac{x^2}{2}\hat{C}}$$

Пусть x=1, домножим выражение справа на $e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}$,получим следующее:

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

Семинар 2

Аксиоматика канонического квантования

Аксиомы канонического квантования

Аксиома 1 («о состоянии»)

Чистым состоянием (замкнутой) квантовой системы соответствуют вектора гильбертова пространства $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ с единичной нормой $\||\psi\rangle\| = 1$.

Замкнутая система – можно пренебречь ее взаимодействием с остальным миром (с точки зрения микромира не хорошо, потому что эмпирические данные показывают, что системы частиц микромира очень редко бывают замкнутыми, чувствительны к внешним воздействиям).

Чистое состояние – полную информацию о системе можно получить, проводя измерения только над самой системой.

Аксиома 2 («о измерениях»)

Наблюдаемым соответствуют эрмитовы операторы в гильбертовом пространстве $\mathcal{H}$. При измерении наблюдаемой $\hat{F}$ в состоянии $|\psi\rangle$ могут быть получены только собственные значения $\left(\hat{F}\left|\psi_f\right\rangle = f\left|\psi_f\right\rangle\right)$f с вероятностями $\left|\left|\psi_f\right\rangle\right|^2$.

Аксиома 3 («соответствия»)

Наблюдаемой, имеющей классический аналог $F_{\text{кл}} = F\left(x_i, p_j, t\right)$, отвечает оператор $\hat{F} = F\left(\hat{x}_i, \hat{p}_j, t\right)$, где $\hat{x}_i, \hat{p}_j$ – линейные эрмитовы операторы в $\mathcal{H}$, удовлетворяющие каноническим коммутационным соотношениям:

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}.$$

Коммутатор, деленный на $i\hbar$, называется *квантовыми скобками Пуассона*.

Представления

Пусть есть некоторая квантовая система,$\hat{F}$ – наблюдаемая с невырожденным спектром. Тогда существует полный ортонормированный базис в $\mathcal{H}$ $\{|\psi_f\rangle\}$, $\forall\ |\psi\ \rangle = \sum_f \langle\psi_f|\psi\ \rangle |\psi_f\rangle$.

Поскольку в определение гильбертова пространства включена сепарабельность, которая гарантирует существование счетного полного ортонормированного базиса, а свойства сумм и интегралов (дискретных и непрерывных конструкций) оказываются одинаковыми, то далее при записи $\sum_f$ будем подразумевать суммирование в обобщенном смысле – *обобщенное суммирование*.

Запись $|\psi\ \rangle = \sum_f \langle\psi_f|\psi\ \rangle |\psi_f\rangle$ организует взаимооднозначное соответствие – каждый вектор взаимооднозначно соответствует набору своих координат в заданном базисе, $\langle\psi_f|\psi\ \rangle = \psi(f),\ \psi \in \mathbb{C}^1, f \in \{\text{спектр } \hat{F}\}$.

$\psi(f) -$ *волновая функция (ВФ)* состояния $|\psi\ \rangle$ в F-представлении.

Пример:

Пусть есть одномерная квантовая система – материальная точка, совершающая движение вдоль оси x, то оператор координаты $\hat{x}$ – оператор с невырожденным спектром $x \in \mathbb{R}^1$. Определив собственные вектора оператора $\hat{x}$, отвечающие каждому собственному значению (оператор с непрерывным спектром): $\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle$, можем определить, что координатная ВФ есть скалярное произведение: $\psi(x) \equiv \langle x|\psi\ \rangle$.

По аксиоме об измерениях квадрат модуля ВФ имеет вероятностный смысл. Для наблюдаемых с дискретным спектром такой квадрат модуля – *вероятность*, для операторов с непрерывным спектром – *плотность вероятности*.

Если вместо абстрактного гильбертова пространства решили использовать пространство волновых функций $\psi(x)$, то необходимо научиться определять в нем операторы. По аксиоме 3 достаточно уметь определять операторы координаты и импульса.

Оператор $\hat{x}$ в гильбертовом пространстве:

$$\hat{x}|\psi\rangle = |\tilde{\psi}\rangle\ =>$$

$$\tilde{\psi}(x) = \langle x|\tilde{\psi}\rangle = \langle x|\hat{x}|\psi\rangle = x\langle x|\psi\rangle = x\psi(x) \;=>$$

В координатном представлении:

$$x\langle x|\psi\rangle = x\psi(x) \qquad \mapsto \qquad \hat{x} = x\cdot$$

Оператор импульса в координатном представлении можно получить из канонического коммутационного соотношения.

$$\hat{p}_x\colon\ (\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x})\psi(x) = i\hbar\psi(x).$$

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

В p-представлении: $\tilde{\psi}(p) = \langle p|\tilde{\psi}\ \rangle\ -$

$$\hat{p}_x\tilde{\psi}(p) = p\tilde{\psi}(p);$$

$$\hat{x}\tilde{\psi}(p) = i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\tilde{\psi}(p).$$

Распишем переход между ВФ в координатном представлении и ВФ в импульсном представлении.

$$\tilde{\psi}(p) \equiv \langle p|\psi\rangle = \left[1 = \int dx|x\rangle\langle x|\right] = \int dx\langle p|x\rangle\psi(x),$$

$$\langle p|x\rangle \equiv \psi_x(p), \qquad i\hbar\frac{\partial\psi_x}{\partial p} = p\psi_x \;\; => \psi_x(p) = Ne^{-\frac{i}{\hbar}px}$$

Полученная функция не нормируема на единицу. Все ВФ непрерывных спектров не нормируемы на единицу. Аксиома 1 утверждает, что такие функции не описывают физически реализуемые состояния. ВФ непрерывных спектров не физичны, но являются удобным базисом для разложения. Нормировка:

$$\int dp\psi_x^+\psi_x(p) = \delta(x - x').$$

В данном случае $N = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$.

$$\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dxe^{-\frac{i}{\hbar}px}\psi(x) -$$

Переход между ВФ – преобразование Фурье =>

$$\tilde{\psi}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp e^{\frac{i}{\hbar}px} \psi(p).$$

Стационарное уравнение Гамильтона в p- и x- представлениях

Записать уравнения $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ в $x-$ и $p-$ представлениях для гамильтониана:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + U_0 \cos\left(\frac{\hat{x}}{a}\right) -$$

задача об одномерном движении нерелятивистской материальной точки в потенциале косинуса.

x-представление:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U_0 \cos\left(\frac{x}{a}\right),$$

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - U_0 \cos\left(\frac{x}{a}\right)\right]\psi = 0.$$

p-представление:

$$\cos\left(\frac{\hat{x}}{a}\right) = \cos\left(\frac{i\hbar}{a}\frac{\partial}{\partial p}\right) = \frac{1}{2}\left\{e^{\frac{\hbar}{a}\frac{\partial}{\partial p}} + e^{-\frac{\hbar}{a}\frac{\partial}{\partial p}}\right\},$$

$$e^{\frac{\hbar}{a}\frac{\partial}{\partial p}} \cdot \tilde{\psi}(p) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\frac{\partial^n \psi}{\partial p^n}\left(\frac{\hbar}{a}\right)^n = \tilde{\psi}\left(p + \frac{\hbar}{a}\right).$$

$\hat{T}_p(q) \equiv e^{-\frac{i}{\hbar}q\hat{x}}$ –оператор сдвига по импульсу на q;

$\hat{T}_x(a) \equiv e^{\frac{i}{\hbar}a\hat{p}_x}$ –оператор сдвига по координате =>$\hat{T}_x(a)\psi(x) = \psi(x + a)$.

$$\cos\left(\frac{\hat{x}}{a}\right)\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{2}\tilde{\psi}\left(p + \frac{\hbar}{a}\right) + \frac{1}{2}\tilde{\psi}\left(p - \frac{\hbar}{a}\right) =>$$

$$\frac{U_0}{2}\tilde{\psi}\left(p + \frac{\hbar}{a}\right) + \frac{U_0}{2}\tilde{\psi}\left(p - \frac{\hbar}{a}\right) + \left[\frac{p^2}{2m} - E\right]\tilde{\psi}(p) = 0 -$$

квазилокальное уравнение (уравнение относительно разных точек).

Гауссов волновой пакет

Координатная ВФ некого состояния точечной частицы, совершающей одномерное движение:

$$\psi_{pD}(x) \equiv \frac{1}{(2\pi D)^{\frac{1}{4}}} e^{-\frac{x^2}{4D}+\frac{i}{\hbar}px}, \quad p \in \mathbb{R}^1, \ D > 0 -$$

Гауссов волновой пакет.

Для проверки справедливости утверждения необходимо проверить нормировку:

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx\, |\psi(x)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi D}} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx\, e^{-\frac{x^2}{2D}} = \left[t = \frac{x}{\sqrt{2D}}\right] = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dt\, e^{-t^2} = 1.$$

Спрашивается, чему в этом состоянии равны средние и дисперсии координаты и импульса $\left(\bar{x}_\psi, \bar{p}_{x\,\psi}, D_\psi x, D_\psi p\right)$.

$$\bar{x}_\psi = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi^* x\, \psi = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx\, x\, |\psi(x)|^2 = 0;$$

$$D_\psi x = \overline{x_\psi^2} = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx\, x^2 \frac{1}{\sqrt{2\pi D}} e^{-\frac{x^2}{2D}} = \left[t = \frac{x}{\sqrt{2D}}\right] = \frac{2D}{\sqrt{\pi}} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dt\, t^2 e^{-t^2}$$

$$= -\frac{D}{\sqrt{\pi}} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} t\, d\left(e^{-t^2}\right) = \frac{D}{\sqrt{\pi}} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dt\, e^{-t^2} = D;$$

$$\bar{p}_{x\,\psi} = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi^* (-i\hbar) \frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{\hbar}{\sqrt{2\pi D}} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx\, e^{-\frac{x^2}{2D}} (-i) \left(-\frac{x}{2D} + \frac{i}{\hbar} p\right) = p;$$

$$\overline{p_{x\,\psi}^2} = -\hbar^2 \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \hbar^2 \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx\, \left|\frac{\partial \psi}{\partial x}\right|^2 = \frac{\hbar^2}{\sqrt{2\pi D}} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx\, e^{-\frac{x^2}{2D}} \left(\frac{x^2}{4D^2} + \frac{p^2}{\hbar^2}\right)$$

$$= p^2 + \frac{\hbar^2}{4D^2} D;$$

$$D_\psi p = \overline{p_{x\,\psi}^2} - \bar{p}_{x\,\psi}^2 = \frac{\hbar^2}{4D};$$

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА

teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

$$! \qquad D_\psi x \cdot D_\psi p = \frac{\hbar^2}{4} \qquad !$$

Произведение дисперсии координаты и дисперсии импульса равно минимальному из возможных. Гауссов волновой пакет минимизирует соотношение неопределенностей координата-импульс.

Так, Гауссов пакет описывает те состояния, в которых частица ведет себя на столько близко к классической, на сколько это возможно.

Аксиома об эволюции

Аксиома 4 (об эволюции)

Эволюция квантовой системы описывается соотношениями картины Шрёдингера (Гейзенберга, Дирака…).

Описание эволюции квантовых систем – тема следующего семинара. После описания эволюции в системе аксиом останется один дефект, связанный с идеализацией понятия состояния в первой аксиоме. Определение состояния применимо только к идеализированным замкнутым системам, свободным от внешних влияний.

Главная проблема квантовой механики – реальная физика начинается там, где описываются результаты измерений. Когда производим измерение над квантовой системой, то заставляем квантовую систему провзаимодействовать с макроскопическим измерительным прибором, система перестает быть замкнутой. В квантовой механике нет невозмущающих измерений.

Семинар 3. Вступление

Эволюция квантовых систем

Есть 2 типа величин, описывающих квантовую систему – волновые функции или операторы и матрицы плотности, которые описывают состояние квантовой системы. ВФ принадлежат гильбертову пространству чистых состояний. И есть определенные в этом пространстве операторы, которые описывают наблюдаемые величины (процедуру измерения). С течением времени результаты измерений меняются из-за эволюции системы или изменения самой измеряемой величины. Описать наблюдаемое изменение можно двумя способами:

1) Эволюционирует состояние, операторы наблюдаемых определены и не изменяются;
2) Эволюционируют операторы, состояние неизменно.

Кроме этих двух способов есть бесконечный набор возможностей их комбинаций.

Картина Шредингера

Предполагается, что эволюционирует вектор состояния.

Для чистых состояний:

$$\left\{\begin{array}{l} \left.\begin{array}{l} i\hbar\dfrac{\partial|\psi\rangle}{\partial t} = \hat{H}|\psi\rangle \\ |\psi\rangle\Big|_{t=t_0} = |\psi^{(0)}\rangle \end{array}\right\} => |\psi_{Ш}(t)\rangle \\ \hat{F}_{Ш} = F(\hat{x}_{Ш}, \hat{p}_{Ш}, t) \\ \hat{x}_{Ш}, \hat{p}_{Ш} - const \end{array}\right.$$

Решаем эволюционное уравнение. При вычислении любого среднего и любой дисперсии используем эволюционирующий вектор состояния с одинаково во все моменты времени определенным оператором наблюдаемой.

Если состояние смешанное, то в этом случае эволюционирует оператор плотности. Закон его эволюции можно вывести из уравнения эволюции вектора состояния, если вспомнить, что частным случаем оператора плотности является проектор на заданное чистое состояние:

$$\left.\begin{matrix} i\hbar\dfrac{\partial\hat{\rho}_{Ш}}{\partial t} = \left[\hat{H},\hat{\rho}_{Ш}\right] \\ \hat{\rho}(t_0) = \hat{\rho}^{(0)} \end{matrix}\right\} => \hat{\rho}_{Ш}(t)$$

Картина Гейзенберга

Эволюция связана с переопределением операторов наблюдаемых:

$$\begin{cases} \left.\begin{matrix} \dfrac{d\hat{F}}{dt} = \dfrac{\partial\hat{F}}{\partial t} + \dfrac{i}{\hbar}\left[\hat{H},\hat{F}\right] \\ \hat{F}(t_0) = \hat{F}^{(0)} \end{matrix}\right\} => \hat{F}_{Г}(t) \\ |\psi_{Ш}(t)\rangle \equiv |\psi^{(0)}\rangle = const \\ \left(\hat{\rho}_{Г}(t) \equiv \hat{\rho}^{(0)} = const\right) \end{cases}$$

В общем случае гейзенбергов оператор тоже представляется как функция координат, импульсов и времени. Для операторов, имеющих классический аналог, это может быть та же функция, что в картине Шредингера, только теперь будут гейзенберговы операторы координаты и импульса – зависящие от времени.

Как уже было сказано ранее, существует бесчисленное множество других картин, где часть эволюции связана с эволюцией вектора состояния или вектора плотности, а часть эволюции связана с переопределением оператора наблюдаемой. Выбор картины – вопрос удобства. Подходы эквивалентны.

Интегралы движения

Те, кто занимаются исследованием конкретных задач, чаще всего предпочитают картину Шрёдингера как более физичную. Те, кто занимаются общими свойствами квантовой теории, как правило, предпочитают картину Гейзенберга как более однородную. Единственное исключение – вопрос об интегралах движения. Есть некоторая наблюдаемая, относящаяся к квантовой системе с заданным гамильтонианом. Спрашивается, может ли эта наблюдаемая быть интегралом движения для этой системы (применяется картина Гейзенберга).

В классической физике если величина является интегралом движения, то при эволюции системы измерения этой величины дают один и тот же результат.

В квантовой теории даже измерения в одном и том же состоянии замкнутой системы одной и той же наблюдаемой могут приводить к разным результатам, если состояние не является собственным вектором оператора наблюдаемой. ***В квантовом случае считаем величину интегралом движения, если у нее неизменная статистика измерений (в любой момент времени могут выпасть одни и те же значения с одними и теми же вероятностями).***

Как следствие должны быть неизменны средние значения, дисперсии, центральные моменты любого порядка. В случае картины Шредингера исследование сложно. В картине Гейзенберга все значительно проще –вектор состояния не меняется, для того, чтобы не менялось любое среднее от вектора от любой степени оператора, необходимо и достаточно, чтобы сам оператор не изменялся.

Критерий:

$\hat{F}$ *– интеграл движения системы* с гамильтонианом $\hat{H} <=> \frac{d\hat{F}_\text{г}}{dt} = 0 \ <=> \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}, \hat{F}\right] \equiv 0.$

Распространенное заблуждение – интегралы движения и их операторы не зависят от времени и коммутируют с гамильтонианом – частный случай. Существует ряд интегралов движения, которые явно зависят от времени и не коммутируют с гамильтонианом.

<u>Пример:</u>

Для любой замкнутой системы галилеев момент для нерелятивистских систем:

$$\hat{\bar{K}} = m_1\hat{\bar{r}}_1 + m_2\hat{\bar{r}}_2 - t(\hat{\bar{p}}_1 + \hat{\bar{p}}_2) -$$

Для замкнутой системы двух частиц.

$\hat{\bar{K}} -$ интеграл движения. Легко догадаться, что это так, посмотрев на определение величины. Заметим, что выражение $\hat{\bar{K}} = const$, если разделить его на суммарную массу системы, превращается в утверждение о том, что координата центра масс меняется по линейному закону с течением времени – центр масс замкнутой системы движется равномерно и прямолинейно.

Семинар 3

Эволюция квантовых систем

Эволюция волновой функции в глубокой потенциальной яме

Пример 1:

Точечная частица в одномерном ящике с непроницаемыми стенками: частица массы mсовершает одномерное движение по оси хна отрезке от 0 до L, за пределами отрезка волновая функция обращается в ноль, так как стенка непроницаемая.

Пусть в момент времени t=0 координатная волновая функция частицы имеет следующий вид:

$$\psi^{(0)}(x) = \frac{4}{\sqrt{5L}} \times \sin^3\left(\frac{\pi x}{2}\right)$$

Найти координатную волновую функцию состояния в момент t: $\psi \ \ (x,t) =?$

Для начала необходимо решить задачу:

$$\widehat{H}\psi = E\psi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi, \ \ k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \ \ =>$$

уравнение гармонических колебаний. Система фундаментальных решений – синус и косинус kx.

Граничные условия:$\psi(0) = \psi(L) \equiv 0 \ \ =>$

Косинусы не являются решениями, так как не удовлетворяют граничным условиям $\ => \psi(x) = N \cdot \sin(kx)$.

Из требования $\psi(L) \equiv 0$: $k = \frac{\pi}{L}n, \ \ n = 1, 2, \ldots$

Нормировка:

$$\int_0^L |\psi|^2 dx = 1 \ => \ \ N = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

Таким образом, получаем решение стационарного уравнения:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{\pi n}{L}x\right), \quad E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2nL^2}n^2.$$

Для решения нестационарной задачи необходимо вычислить коэффициенты разложения начальной функции.

$$\sin^3\alpha = \frac{3}{4}\sin\alpha - \frac{1}{4}\sin 3\alpha \ =>$$

$$\psi^{(0)}(x) = \frac{3}{\sqrt{10}}\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) - \frac{1}{\sqrt{10}}\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{3\pi x}{L}\right) = \frac{3}{\sqrt{10}}\psi_1 - \frac{1}{\sqrt{10}}\psi_3$$

$$\frac{3}{\sqrt{10}} = \langle\psi_1|\psi^{(0)}\rangle, -\frac{1}{\sqrt{10}} = \langle\psi_3|\psi^{(0)}\rangle \ =>$$

$$\psi(x,t) = \frac{3}{\sqrt{10}}e^{-i\frac{\pi^2\hbar}{2mL^2}t}\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) - \frac{1}{\sqrt{10}}e^{-i\frac{9\pi^2\hbar}{2mL^2}t}\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{3\pi x}{L}\right) =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{5L}}\left\{3e^{-i\frac{\pi^2\hbar}{2mL^2}t}\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) - e^{-i\frac{9\pi^2\hbar}{2mL^2}t}\sin\left(\frac{3\pi x}{L}\right)\right\} -$$

Общий вид волновой функции в момент времени t.

Теперь если необходимо найти средние значения или дисперсии в любой момент времени, то можем получить их через стандартный интеграл

Гармонический осциллятор в картине Гейзенберга

Пример 2:

Рассмотрим систему с гамильтонианом вида:

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

Пусть в момент времени t=0 волновой функции координатного представления системы определили:

$$\hat{x}^{(0)}\psi(x) \equiv x\psi(x);$$

$$\hat{p}_x^{(0)}\psi(x) \equiv -i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}.$$

Нас интересуют гейзенберговы операторы координаты $\hat{x}_\Gamma(t)$ и импульса$\hat{p}_{x_\Gamma}(t)$ для линейного гармонического осциллятора. Далее индексы «Г» опускаем.

Эти операторы естественны по определению, не зависят от времени.

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}, \hat{x}\right] = \frac{i}{\hbar}\left[\frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2}, \hat{x}\right] = \frac{i}{\hbar}\frac{1}{2m}[\hat{p}_x^2, \hat{x}] =$$

$$= \frac{i}{\hbar}\frac{1}{2m}2\hat{p}_x\left[\hat{p}_x, \hat{x}\right] = \frac{i}{\hbar}\frac{1}{2m}\left(-2i\hbar\hat{p}_x\right) = \frac{\hat{p}_x}{m}.$$

$$\frac{d\hat{p}_x}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}, \hat{p}_x\right] = \frac{i}{\hbar}\left[\frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2}, \hat{p}_x\right] = \frac{i}{\hbar}\left[\frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2}, \hat{p}_x\right] = \frac{i}{\hbar}\frac{m\omega^2}{2}\left[\hat{x}^2, \hat{p}_x\right]$$
$$= -m\omega^2\hat{x}.$$

Отметим, что уравнения Гейзенберга для операторов координаты и импульса никогда не содержат частной производной. Их часто называют *фундаментальными уравнениями Гейзенберга*. Во-первых, они практически совпадают с классическими уравнениями движения в гамильтоновой формулировке. Во-вторых, понятно, что они носят фундаментальный характер. В том смысле, что если решена задача для $\hat{p}_x, \hat{x}$, то можно догадаться, что для любой другой наблюдаемой, являющейся функцией координат, импульсов и времени:

$$\hat{F}_\Gamma(t) = F_{\text{кл}}(\hat{x}_\Gamma, \hat{p}_\Gamma, t)$$

уравнение Гейзенберга решать не нужно. Достаточно решить фундаментальное уравнение.

$$\hat{p}_x = m\frac{d\hat{x}}{dt} = \frac{d^2\hat{x}}{dt^2} + \omega^2\hat{x} = 0 -$$

Стандартное уравнение гармонических колебаний. Решение:

$$\hat{x}(t) = \hat{A}\cos\omega t + \hat{B}\sin\omega t.$$

Подставим полученное решение в формулу, связывающую $\hat{p}_x$ и $\hat{x}$:

$$\hat{p}_x(t) = -m\omega\hat{A}\sin\omega t + m\omega\hat{B}\cos\omega t.$$

$\hat{A}, \hat{B}$ находим из начальных условий:

$$\dot{\hat{x}}(0) \equiv \hat{x} = \hat{A};$$

$$\hat{p}_x(0) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} = m\omega\hat{B} \;\; => \hat{B} = -\frac{i\hbar}{m\omega}\frac{\partial}{\partial x}.$$

Так, мы нашли явный вид гейзенберговых уравнений координат и импульсов линейного гармонического осциллятора в произвольный момент времени:

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

Интегралы движения замкнутой системы взаимодействующих частиц

Пример 3:

Пусть есть система с гамильтонианом:

$$\widehat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} + U(\hat{x}_1 - \hat{x}_2) -$$

гамильтониан замкнутой системы двух взаимодействующих между собой потенциальным образом точечных частиц.

Рассмотрим наблюдаемую $\hat{P}$: $\hat{P} \equiv \hat{p}_1 + \hat{p}_2$.

Чтобы проверить, является ли $\hat{P}$ интегралом движения, необходимо продифференцировать ее по времени и посчитать коммутатор с гамильтонианом.

С дифференцированием все очевидно, величина от времени явно не зависит:

$$\frac{\partial\hat{P}}{\partial t} \equiv 0.$$

Коммутатор с гамильтонианом:

$$\left[\widehat{H},\hat{P}\right] = \left[\frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} + U(\hat{x}_1 - \hat{x}_2), \hat{p}_1 + \hat{p}_2\right] = [U(\hat{x}_1 - \hat{x}_2), \hat{p}_1] + [U(\hat{x}_1 - \hat{x}_2) + \hat{p}_2] =$$

$$= U'(\hat{x}_1 - \hat{x}_2)(+1)(-i\hbar) + U'(\hat{x}_1 - \hat{x}_2)(-1)(-i\hbar) = 0 \;\; =>$$

Полный импульс является интегралом движения замкнутой системы. Очевидно, что результат не изменится, если рассматривать больше частиц или трехмерный случай.

Пример 4:

Является ли интегралом движения системы с гамильтонианом

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} \frac{\hat{\vec{p}}_i^2}{2m_i} + \sum_{i<j} U(\hat{\vec{r}}_i - \hat{\vec{r}}_j)$$

Наблюдаемая

$$\hat{\vec{K}} \equiv -\left(\sum_{i=1}^{N} \hat{\vec{p}}_i\right) t + \sum_{i=1}^{N} m_i \hat{\vec{r}}_i.$$

$$\frac{\partial \hat{\vec{K}}}{\partial t} = -\sum_{i=1}^{N} \hat{\vec{p}}_i = -\hat{\vec{P}}.$$

$$\left[\hat{H}, \hat{\vec{K}}\right] = \left[\hat{H}, -\hat{\vec{P}}t + \sum_{i=1}^{N} m_i \hat{\vec{r}}_i\right] = \left[\hat{H}, \sum_{i=1}^{N} m_i \hat{\vec{r}}_i\right] = \left[\sum_{i'=1}^{N} \frac{\hat{\vec{p}}_{i'}^2}{2m_{i'}}, \sum_{i=1}^{N} m_i \hat{\vec{r}}_i\right] =$$

$$= (\text{остаются только } i' = i) = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{2m_i} m_i \left[\hat{\vec{p}}_i^2, \hat{\vec{r}}_i\right] = -i\hbar \sum_{i=1}^{N} \hat{\vec{p}}_i = -i\hbar \hat{\vec{P}}.$$

$$\frac{d\hat{\vec{K}}}{dt} = -\hat{\vec{P}} + \frac{i}{\hbar}(-i\hbar)\hat{\vec{P}} = 0 \quad =>$$

$\hat{\vec{K}}$ является интегралом движения, *«галилеев момент»*. С точки зрения теоремы Нётер, связывающей симметрии динамики с интегралами движения, сохранение этой величины есть следствие галилеевой инвариантности, то есть инвариантности динамики относительно перехода между двумя инерциальными системами отчета.

Возникает вопрос, почему мы не используем этот интеграл при решении задач о замкнутых системах? Мы используем это обстоятельство, но в гамильтоновой механике его воспринимают в несколько другом виде:

$$-\hat{\vec{P}}t + \sum_{i=1}^{N} m_i \hat{\vec{r_i}} = \hat{\vec{K}}_0 = const \ \Big| : \frac{1}{M}, \text{где } M = \sum_{i=1}^{N} m_i \ =>$$

$$\overrightarrow{r_{\text{цм}}} = \frac{\hat{\vec{K}}_0}{M} + \frac{\hat{\vec{P}}}{M} t -$$

центр масс системы движется прямолинейно равномерно.

Аналогичный интеграл движения («лоренцов момент») есть в релятивистской механике.

Таким образом, мы разобрали важный пример: наблюдаемая может явно зависеть от времени и не коммутировать с гамильтонианом, но при этом быть интегралом движения квантовой системы.

Отличные от галилеева или лоренцева момента подобные интегралы движения существуют, но как правило специфичны для каждой конкретной системы и есть не у каждой системы.

Те задачи, которые можно решать более нетривиально, требуют более творческого подхода и более аккуратной математики. Для реалистичных систем редко получаются решения в элементарных функциях.

Мы почти готовы начать исследовать квантовые системы. Напомним, что есть дефект в первой аксиоме (она посвящена идеализированным замкнутым квантовым системам).

Необходим переход от понятия чистого состояния (описывает состояние квантовой системы, описываемое нормированным на единицу вектором состояния) к смешанному состоянию. Дело в том, что для каждого вектора состояния можно подобрать набор попарно коммутирующих между собой операторов (полный набор наблюдаемых, функционально независимых и попарно не коммутирующих), так чтобы их количество в точности соответствовало количеству степеней свободы системы. Тогда можно его выбрать так, что этот вектор состояния будет единственным (с точностью до фазового множителя) их общим, нормированным на единицу фазовым вектором. Этот математический факт с точки зрения нашей аксиоматики означает, что если мы проведем измерения этих наблюдаемых, то измерения оказываются совместными, а значит, мы можем однозначно идентифицировать состояние – чистое состояние.

Семинар 4

Смешанные состояния и матрица плотности

Понятие о смешанном состоянии. Матрица плотности

В литературе наиболее часто встречаются три определения матрицы плотности.

Определение 1 («в духе Ландау-Лифшица»)

Большинство квантовых систем, над которыми проводится измерения, не замкнуты. Есть только какие-то большие замкнутые системы, над которыми мы не можем производить измерения. В предельном подходе можно сформулировать так: единственной по-настоящему замкнутой системой является физическая вселенная в целом. Описывается чистым состоянием, соответственно ее можно описать волновой функцией.

Чтобы выбрать переменные, производим разделение на подсистемы, над которыми возможно произведение измерений, вводим набор координат системы, с которой работаем - $x_1, x_2, \dots, x_S$, S – число степеней свободы изучаемой системы. Введем переменные $q_1, q_2, \dots, q_N$ – координаты, с помощью измерения которых можно зафиксировать состояние всей остальной вселенной. То есть $N + S$ – полное число степеней свободы всей физической вселенной.

Итак, *волновая функция, описывающая чистое состояние вселенной*:

$$\psi(x_1, x_2, \dots, x_S, q_1, q_2, \dots, q_N).$$

Чтобы описать состояние изучаемой подсистемы, предлагается провести усреднение по всем воздействиям остальной части вселенной. Математически надо сконструировать из волновой функции функцию, которая имеет вероятностный смысл, но зависит только от координат изучаемой подсистемы. В качестве таковой можно выбрать некий *оператор плотности и его матрицу* в базисе из соответствующих координат:

$$\rho(x_1, x_2, \dots, x_S, x_1', x_2', \dots, x_S')$$
$$\equiv \int dq_1 \dots dq_N \psi(x_1, x_2, \dots, x_S, q_1, q_2, \dots, q_N)$$
$$\times \psi^*(x_1', x_2', \dots, x_S', q_1, q_2, \dots, q_N)$$

Учитывая, что квадрат модуля волновой функции – вероятность, то видно, что операция действительно имеет смысл усреднения по всем остальным координатам.

Мы не сможем определить волновую функцию вселенной. Полученная формула является конструктивным определением. Далее нужно выяснить, какими свойствами обладает введенный оператор, как выделить такие операторы среди всех возможных, после чего можно сказать, что любой такой оператор может быть записан в подобном виде, соответственно описывает какое-то смешанное состояние системы.

Так, матрица плотности определена явно через волновую функцию внешней замкнутой системы(всей вселенной в предельном выражении).

Отличие смешанного и чистого состояния с точки зрения первого определения:

Смешанное состояние – состояние изучаемой незамкнутой подсистемы, усредненное по всем влияниям остального мира.

Чистое состояние – состояние изолированной квантовой системы, на которое отсутствует влияние остального мира.

Определение 2 («в духе Фока»)

Чистые состояния - состояния, отвечающие когерентным волнам вероятности (для них можем наблюдать квантово-механическую когерентность).

Влияние внешнего мира может разрушить когерентность, оно вносит неконтролируемые для нас смещения, фазовые сдвиги.

Смешанное состояние - некогерентная смесь базисных состояний.

Оператор плотности:

$$\hat{\rho} = \sum_n \omega_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| -$$

Сумма проекторов на базисные состояния с *весами* ω_n, где

$$\sum_n \omega_n = 1, \qquad \omega_n \geq 0.$$

ω_n – вероятность того, что результаты измерений в состоянии ρ совпадут с результатами измерений в чистом состоянии $|\psi_n\rangle$, то есть система в смешанном состоянии будет вести себя как система в чистом состоянии.

Прослеживается логическая связь между первым и вторым определениями – здесь мы тоже говорим о внешних воздействиях как о причине разрушения квантово-механической когерентности.

С позиции такого определения удобно описывать метод Юнга.

Определение 3 («рационалистическое»)

Предыдущие 2 определения – попытки сформировать качественное представление о происходящем, которые в квантовой теории не очень нужны для решения конкретных задач.

Тогда сформулируем к оператору список требований, который приведет к тому, что этот оператор может рассматриваться как оператор плотности некоторого смешанного состояния. После чего объявить, что *все операторы с удовлетворяющими этому списку свойствами описывают смешанные состояния*.

Список требований:

1) $\hat{\rho}^+ = \hat{\rho}$;
2) $Tr\,(\hat{\rho}) = 1$;
3) $\hat{\rho}$ – неотрицательно определен;
4) $Tr(\hat{\rho}^2) < \infty$.

Любой оператор в пространстве чистых состояний изучаемой подсистемы, удовлетворяющий списку требований – некий *оператор плотности*.

Результат рассмотрений – изменение системы аксиом.

Аксиома 1 → Аксиома $\mathbf{1'}$

Состоянием квантовой системы отвечают операторы плотности $\hat{\rho}$, определенные (далее одно из трех введенных выше определений).

Аксиома 2 → Аксиома 2′

При измерении наблюдаемой $\hat{F}$ в состоянии $\hat{\rho}$ могут быть получены только собственные значения f $\hat{F}$с вероятностями $\omega_f = \langle f|\hat{\rho}|f\rangle$.

Доп. задание: Обосновать эквивалентность аксиоматик, в которых в аксиоме 1 используется одно из трех определений оператора плотности (нельзя провести четко математически).

Критерий чистоты состояний:

$$\hat{\rho} = |\psi_n\rangle\langle\psi_n|,$$

то есть $\hat{\rho}$ является проектором, что можно проверить чисто алгебраически (если спроектировать вектор на некоторое направление, то последующее проектирование его не изменит):

$$\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}.$$

Если $\hat{\rho}^2 \neq \hat{\rho}$, то состояние смешанное.

Вычисление среднего и дисперсии для смешанного состояния

Задача 9 (из списка обязательных задач):

$\{|n\rangle\}-$ полный ортонормированный базис из собственных векторов некоторой наблюдаемой $\hat{F}$с дискретным спектром (собственное значения $f_n, n = 1, 2, 3, ...$). Найти среднее значение и дисперсию наблюдаемой $\hat{F}$ в состоянии $\hat{\rho}$:

$$\hat{\rho} = \frac{3}{4}|1\rangle\langle 1| + \frac{i}{8}|1\rangle\langle 2| - \frac{i}{8}|2\rangle\langle 1| + \frac{1}{4}|2\rangle\langle 2|.$$

$$\rho_{nn'} = \langle n|\hat{\rho}|n'\rangle = \begin{pmatrix} \frac{3}{4} & \frac{i}{8} & 0 \\ -\frac{i}{8} & \frac{1}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} - \text{ бесконечномерная матрица;}$$

$$F_{nn'} = \langle n|\hat{F}|n'\rangle = \begin{pmatrix} f_1 & 0 & 0 \\ 0 & f_2 & 0 \\ 0 & 0 & f_3 \end{pmatrix} - \text{ бесконечномерная матрица;}$$

$$\bar{F}_\rho = Tr\left[\begin{pmatrix} \frac{3}{4} & \frac{i}{8} & 0 \\ -\frac{i}{8} & \frac{1}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} f_1 & 0 & 0 \\ 0 & f_2 & 0 \\ 0 & 0 & f_3 \end{pmatrix}\right] = \frac{3}{4}f_1 + \frac{1}{4}f_2 + 0 + \cdots = \frac{3}{4}f_1 + \frac{1}{4}f_2.$$

$$\overline{F_\rho^2} = Tr\left[\begin{pmatrix} \frac{3}{4} & \frac{i}{8} & 0 \\ -\frac{i}{8} & \frac{1}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} f_1^2 & 0 & 0 \\ 0 & f_2^2 & 0 \\ 0 & 0 & f_3^2 \end{pmatrix}\right] = \frac{3}{4}f_1^2 + \frac{1}{4}f_2^2 =>$$

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

Непрерывная матрица плотности

Задача 10 (из списка обязательных задач):

Матрица плотности:

$$\rho(x, x') = \frac{1}{\sqrt{8\pi D}}\left(1 + \frac{xx'}{D}\right)e^{-\frac{x^2+x'^2}{4D}}.$$

Найти среднее значение и дисперсию координаты. Чистое состояние или смешанное?

$$\bar{x}_\rho = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \cdot x \cdot \rho(x, x) = 0.$$

$$\overline{x_\rho^2} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \cdot x^2 \cdot \rho(x, x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \cdot x^2 \cdot \frac{1}{2\sqrt{2\pi D}}\left(1 + \frac{x^2}{D}\right)e^{-\frac{x^2}{2D}} =$$

$$= \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{+\infty} dx \cdot x^2 \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi D}}e^{-\frac{x^2}{2D}} + \frac{1}{2}\frac{1}{D}\int_{-\infty}^{+\infty} dx \cdot x^4 \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi D}}e^{-\frac{x^2}{2D}} = \frac{1}{2}D + \frac{1}{2}\cdot 3D = 2D =>$$

$$D_\rho x = 2D.$$

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА

teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

Для ответа на вопрос о чистоте состояния воспользуемся критерием чистоты состояний. Вычислим $\hat{\rho}^2$.

$$\hat{\rho}^2(x,x') = \int_{-\infty}^{+\infty} dx''\rho(x,x'')\cdot\rho(x'',x') =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{8\pi D}}\frac{1}{2\sqrt{2\pi D}}\int_{-\infty}^{+\infty} dx''\left(1+\frac{xx''}{D}\right)e^{-\frac{x^2+x''^2}{4D}}\left(1+\frac{x''x'}{D}\right)e^{-\frac{x'^2+x''^2}{4D}} =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{8\pi D}}e^{-\frac{x^2+x''^2}{4D}}\frac{1}{2\sqrt{2\pi D}}\int_{-\infty}^{+\infty} dx''e^{-\frac{x''^2}{4D}}\left(1+\frac{xx''}{D}+\frac{x'x''}{D}+\frac{xx'}{D}\frac{x''^2}{D}\right) =$$

$$= \frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt{8\pi D}}\left(1+\frac{xx'}{D}\right)e^{-\frac{x^2+x''^2}{4D}} = \frac{1}{2}\hat{\rho}(x,x') \neq \hat{\rho}(x,x') \Rightarrow$$

это смешанное состояние.

Отличие всего на один множитель. То есть наверняка существуют дискретные базисы. Не трудно заметить, что таким свойством обладает диагональная матрица:

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \hat{\rho}^2 = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\hat{\rho},$$

то есть существует дискретный базис, в котором матрица плотностиρ_{nn}, приобретает такой вид.

Можно проверить, что это базис из присоединенных функций Эрмита:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{(2\pi D)^{\frac{1}{4}}}\cdot e^{-\frac{x^2}{D}}\cdot H_n\left(\frac{x}{\sqrt{2D}}\right) -$$

Полный ортонормированный базис, $n = 0, 1, 2, \ldots$

Эволюционирующий оператор плотности

Есть по крайней мере 2 широкоупотребимых картины - картина Шредингера и картина Гейзенберга.

В картине Гейзенберга состояние не эволюционирует, поэтому $\hat{\rho} = const.$

В картине Шредингера должна наблюдаться эволюция оператора плотности:

$$\hat{\rho} = \hat{\rho}(t),$$

И надо писать эволюционное уравнение. Его довольно легко получить, если сначала рассмотреть случай, когда $\hat{\rho}$ является проектором, ясно, что вид уравнения не должен зависеть от этого факта, тогда дифференцирование $\psi \cdot \psi^*$для вектора сводится к дифференцированию ψ и ψ^* (используем уравнение Шредингера и сопряженное уравнение). Тогда легко доказывается:

$$\left\{ \begin{array}{l} i\hbar \dfrac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = \left[\hat{H}, \hat{\rho}\right] \\ \hat{\rho}\Big|_{t = t_0} = \hat{\rho}^{(0)} \end{array} \right\} \Rightarrow \hat{\rho}_{\text{Ш}}(t).$$

Семинар 5

Одномерные квантовые системы

Одномерное движение в качественном рассмотрении. Условия сшивки

Рассмотрим систему с гамильтонианом:

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

Стационарный гамильтониан, явно не зависящий от времени. Из материалов семинара, посвященного эволюции, мы знаем, что в картине Шредингера анализ поведения таких систем сводится к решению стационарного уравнения Шредингера:

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

уравнение для стационарных волновых функций системы и уровня энергии E (задача Штурма-Лиувилля для одномерной функции на собственные значения и собственные функции).

Как видно, для всех $U(x)$ уравнения одинаковы, различается только поведение коэффициентной функции. При решении конкретных задач с разными $U(x)$ можно заметить общие свойства – первый источник общих представлений о свойствах решений подобных задач.

Второй источник качественного анализа – квазиклассические приемы квантования (например, условие квантования Бора).

Дискретный и непрерывный спектры

Условие квантования Бора – условие нахождения однозначного дискретного спектра уровней энергии в потенциальной яме. Спектр дискретен, когда классическое движение финитно, то есть когда частица локализована с двух сторон. Финитное движение характерно для энергий между минимальным значением потенциальной энергии U_{min} и нулем (рис. 5.1, область (I)). В случае, когда яма неглубокая и узкая, в ней может не оказаться ни одного уровня. Если движение инфинитно, то спектр непрерывный (рис. 5.1, область (II)).

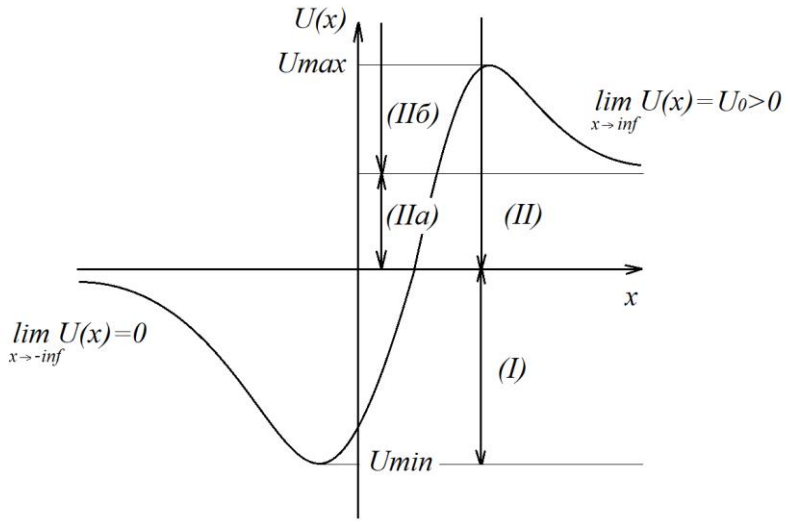

Рис. 5.1. График функции потенциальной энергии

Кратность вырождения

Довольно легко доказать, что все уровни дискретного спектра в одномерном случае не вырождены. Из квазиклассического анализа это можно понять из простого соображения, что при заданной энергии движение частицы однозначно определено в классическом случае.

В случае непрерывного спектра различают две подобласти.

В подобласти (рис. 5.1, подобласть (IIa)) движение частицы инфинитно только в одну сторону => одно независимое движение, кратности вырождения $S = 1$ – невырожденный спектр.

В подобласти (рис. 5.1, подобласть (IIб)) возможны 2 инфинитных движения (слева на право и справа налево), соответственно $S = 2$ –двукратно вырожденный непрерывный спектр.

Это можно понять из математических соображений. У нас есть уравнение второго порядка, поэтому при заданном значении энергии у него может быть максимум 2 линейно-независимые функции решения – образуют фундаментальную систему решений при заданном E. Максимальная кратность вырождения в этом случае $S = 2$.

На бесконечностях на уравнение накладываются граничные условия и условия нормировки. Таким образом, для дискретного спектра 2 граничных условия на бесконечности и 1 условие нормировки – 3 условия, наложенные на 2 константы

интегрирования. Очевидно, что обе константы определятся однозначно, вырождения не будет, и останется лишнее уравнение, которое может быть только уравнением на последний параметр - энергию E.

В области (IIа) одно граничное условие справа, одно условие нормировки на дельта-функцию (движение инфинитно) => 2 уравнения, 2 неизвестных => константы определятся, но уравнений на E не появится.

В области (IIб) одно условие нормировки на 2 константы => константы не будут определены однозначно =>вырождение (максимальная кратность 2) непрерывного спектра.

Условия сшивки

Уравнения сшивки берутся из самого уравнения. В любой точке можно выразить вторую производную через саму функцию:

$$\psi'' = \frac{2m}{\hbar^2}[U(x) - E]\psi.$$

Если есть любая выделенная точка x_0,и рассматриваем точки $x_0 - \varepsilon, x_0 + \varepsilon$,где $\varepsilon -$ маленький сдвиг, который позже устремляем к нулю для получения значений справа и слева, то можем получить следующее соотношение:

$$\psi'(x_0 + \varepsilon) - \psi'(x_0 - \varepsilon) = \frac{2m}{\hbar^2}\int\limits_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} dx[U(x) - E]\psi(x) \Rightarrow$$

Если в $U(x)$ нет сингулярности, то предел этого интеграла при $\varepsilon \to 0$ ноль. Значит, в любой точке, где $U(x)$ остается конечным – первая производная непрерывна:

$$\psi'(x_0 + 0) = \psi'(x_0 - 0) \Rightarrow \psi\,(x_0 + 0) = \psi\,(x_0 - 0).$$

В случае, когда есть сингулярность, непрерывность первой производной не гарантируется, наблюдается скачок конечной величины:

$$\psi'(x_0 + \varepsilon) - \psi'(x_0 - \varepsilon) = \frac{2m}{\hbar^2}\lim_{\varepsilon\to 0}\int\limits_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon}\left[V_0\delta(x - x_0) + U_{\text{per}}(x) - E\right]\psi(x)dx =$$

$$= \frac{2mV_0}{\hbar^2}\,\psi(x_0).$$

Если у первой производной наблюдается скачок конечной величины, то сама функция (интеграл от производной конструкции) будет непрерывна:

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

Если сингулярность не интегрируема, то под интегралом стоит неинтегрируемая функция. В таком случае решение с непрерывной плотностью $|\psi(x)|$ существует только при $\psi(x_0) = 0$. То есть в точке x_0 непроницаемая стенка – частица никогда не пройдет через точку неинтегрируемой сингулярности.

Задача о дираковской яме

Пусть точечная частица массы m движется в потенциале $U(x) = V_0\delta(x)$. Речь идет о бесконечно малой окрестности точки $x = 0$ есть бесконечно глубокая, бесконечно узкая яма, площадь которой V_0 (рис. 5.2). Необходимо определить спектр энергий, соответствующий собственным функциям.

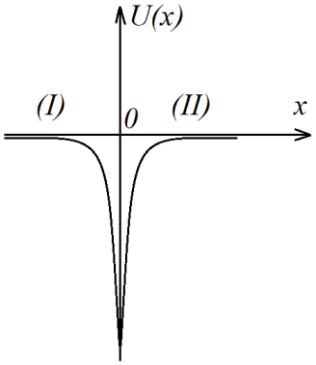

Рис. 5.2. График потенциальной функции дельта-ямы

Как видно, сингулярность в точке ноль, поэтому всю область определения логично разбить на две подобласти $(x < 0 - (I), x > 0 - (II) -$ рис. 4.2). Область энергий нужно разбить на $E < 0,\ E > 0$. Из общего анализа следует, что в области $E < 0$ могут существовать уровни дискретного спектра, в области $E > 0$ – двукратно невырожденный непрерывный спектр.

E<0 (дискретный спектр)

Исследуем состояния дискретного спектра.

(I) (x<0):

$$\psi'' + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0, \qquad \frac{2mE}{\hbar^2} \equiv -æ^2 < 0, \qquad æ \equiv \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} > 0.$$

Фундаментальную систему решений уравнения образуют экспоненты:

$$\psi_I = A_I e^{æx} + B_I e^{-æx}.$$

Так как это волновые функции дискретного спектра, отвечающие инфинитому движению, то на $-\infty$ и $+\infty$ функции должны обращаться в ноль.

$$\psi \underset{x \to -\infty}{\to} 0 \Rightarrow B_I = 0.$$

(II) (x>0):

Уравнение: $\psi'' - æ^2\psi = 0$.
Решение: $\psi_{II} = A_{II} e^{æx} + B_{II} e^{-æx}$.
Из граничного условия:

$$\psi \underset{x \to +\infty}{\to} 0 \Rightarrow A_{II} = 0.$$

Благодаря граничным условиям получили две константы интегрирования вместо четырех. Остались два условия сшивки и условие нормировки решения на единицу.

Условие сшивки в точке $x = 0$:

$$\psi(+0) = \psi(-0) \Rightarrow A_I = B_{II} \equiv N.$$

Значение константы – общий множитель в решении. Второе условие сшивки линейное => из него общая константа не может быть определена, значит, определится из квадратичного условия нормировки – нормировочная константа.

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

$$-æN - æN = -\frac{2mV_0}{\hbar^2}N \Rightarrow N \neq 0 \Rightarrow$$

$$æ = \frac{mV_0}{\hbar^2} \Rightarrow \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} = \frac{mV_0}{\hbar^2} \Rightarrow E_0 = -\frac{mV_0^2}{2\hbar^2} -$$

так, мы получили единственный дискретный уровень, единственное разрешенное значение энергии.

Собственная функция:

$$\psi_0(x) = \begin{cases} Ne^{\frac{mV_0}{\hbar^2}x}, & x < 0 \\ Ne^{-\frac{mV_0}{\hbar^2}x}, & x \geq 0 \end{cases} \equiv Ne^{-\frac{mV_0}{\hbar^2}|x|}.$$

Условие нормировки:

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx = |N|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{2mV_0}{\hbar^2}|x|} dx = 2|N|^2 \int_0^{+\infty} e^{-\frac{2mV_0}{\hbar^2}x} dx = 2|N|^2 \frac{\hbar^2}{mV_0} \Rightarrow$$

$$N = \frac{\sqrt{mV_0}}{\hbar} e^{i\alpha}, \qquad \alpha \in \mathbb{R}^1 \quad -$$

собственная функция определена с точностью до фазового множителя. Выбор фазы стационарного состояния неважен. Традиционно α выбирается так, чтобы нормировочный коэффициент основного состояния был вещественным положительным числом, например:

$$\alpha = 0 \Rightarrow$$

$$\psi_0(x) = \frac{\sqrt{mV_0}}{\hbar} e^{-\frac{mV_0}{\hbar^2}|x|} -$$

собственная функция.

E* ≥ 0 *(двукратно вырожденный непрерывный спектр)

В этой области решение существует при любом E и будет неоднозначно определено.

(I, II)

$$\psi'' + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0, \;\; k \equiv \frac{2mE}{\hbar^2}. \geq 0.$$

Фундаментальную систему решений образуют синусы и косинусы или осциллирующие экспоненты. Традиционно для непрерывного спектра используют осциллирующие экспоненты, потому что при описании эволюции получим две стационарные бегущие волны.

$$\psi_{I,II} = A_{I,II}e^{ikx} + B_{I,II}e^{-ikx}.$$

Четыре неизвестные и три уравнения. Необходимо построить систему из двух линейно независимых решений. Определим, какие решения будем выбирать (наложим на коэффициенты четвертое недостающее требование). Выберем пары линейно независимых решений следующим образом:

$$\text{решение } \psi^{(+)} \rightarrow \ B_{II} = 0,$$

$$\text{решение } \psi^{(-)} \rightarrow \ A_I = 0.$$

Условия выбраны из физических соображении. Для $\psi^{(+)}$: Слева падающая + отраженная волны, справа только прошедшая. Для $\psi^{(-)}$ наоборот (рис. 5.3).

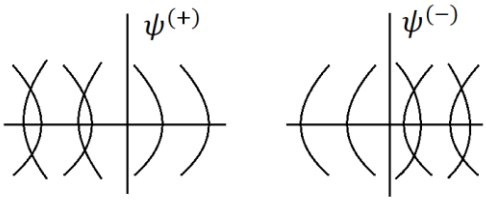

Рис. 5.3. Падающие и отраженные волны

Чаще всего в таких задачах интересует не явный вид волновых функций, а потоки, связанные с падающей, прошедшей и отраженной волнами в асимптотике на больших расстояниях от препятствия. Можем определить коэффициенты отражения $\left(R^{(\pm)}\right)$ и прохождения $\left(T^{(\pm)}\right)$.

$$R^{(\pm)} \equiv \frac{j_{\text{отр}}}{j_{\text{пад}}} = \left|\frac{A_{\text{отр}}}{A_{\text{пад}}}\right|^2,$$

$$T^{(\pm)} \equiv \frac{j_{\text{прош}}}{j_{\text{пад}}} = \frac{k_{\text{прош}}}{k_{\text{пад}}}\left|\frac{A_{\text{прош}}}{A_{\text{пад}}}\right|^2.$$

Исследуем решение $\psi^{(+)}$.

(I): $\psi \ = \ A_I e^{ikx} + B_I e^{-ikx}$;

(II) $\psi \ = \ A_{II}e^{ikx}$.

Сшивка в точке $x = 0$:

$$\psi(+0) = \psi(-0) => A_{II} - A_I + B_I.$$

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА

teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

Условие для скачка производных:

$$\psi'^{(+0)} - \psi'^{(-0)} = -\frac{2mV_0}{\hbar^2}\psi(0) \;=>\quad ikA_{II} - ik(A_I - B_I) = -\frac{2mV_0}{\hbar^2}A_{II} \;=>$$

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

Пусть $A_I \equiv N$.Выразим A_{II} и B_I через N:

$$2N = 2A_{II}\left(1 - i\frac{mV_0}{\hbar^2 k}\right),\quad \frac{mV_0}{\hbar^2 k} \equiv \beta \;=> A_{II} = \frac{N}{1 - i\beta};$$

$$B_I = A_{II} - N = \frac{i\beta}{1 - i\beta}N.$$

Общее решение:

$$\psi_k^{(+)} = N\begin{cases} e^{ikx} + \dfrac{i\beta}{1 - i\beta}e^{-ikx}, & x < 0 \\ \dfrac{1}{1 - i\beta}e^{-ikx}, & x \geq 0 \end{cases}.$$

Определим N из условия:

$$\int dx \psi_k^{(+)^*}\psi_{k'}^{(+)} = \delta(k - k').$$

Но для определения Ти Rдостаточно знать только отношение амплитуд волн:

$$\frac{A_{\text{отр}}}{A_{\text{пад}}} = \frac{B_I}{N} = \frac{i\beta}{1 - i\beta} \;=>\; R = \frac{\beta^2}{1 + \beta^2} = \frac{m^2V_0^2}{\hbar^4k^2 + m^2V_0^2} = \left(\frac{mV_0^2}{2\hbar^2} = -E_0\right) = -\frac{E_0}{E - E_0};$$

$$\frac{A_{\text{прош}}}{A_{\text{пад}}} = \frac{A_{II}}{N} = \frac{1}{1 - i\beta}\left(k_{\text{прош}} = k_{\text{пад}}\right) => T = \frac{\hbar^4k^2}{\hbar^4k^2 + m^2V_0^2} = \frac{E}{E - E_0};$$

$$R + T \equiv 1.$$

Если $E \to \infty$ $(E \gg |E_0|)$ $=>$ $R \to 0,\ T \to 1.$

Если $E \to E_0$в коэффициентах отражения и прохождения появляется полюс (при рассмотрении аналитического продолжения в комплексную плоскость до потери аналитичности). В нерелятивистской квантовой механике задачи решаются проще, но в релятивистской квантовой теории поля иногда проще действовать через аналитические свойства (амплитуды рассеяния). В квантовой теории поля широко

распространен *метод размерной регуляризации*, построенный на том, что считают амплитуду некоторого квантового перехода в некотором наборе точек (N) вещественной оси, где N–размерность пространства-времени, после чего организуют аналитическое продолжение в комплексную плоскость по N. В нашем результате мы можем увидеть эту интересную особенность коэффициента прохождения.

Эволюция одномерного смешанного состояния

Задача 14(из списка обязательных задач):

Частица массы mсовершает одномерное движение по оси x в потенциале ящика длины Lc непроницаемыми стенками (рис. 5.4). Пусть:

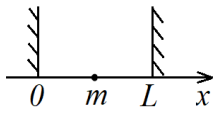

Рис. 5.4. Частица в потенциальном ящике

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

Найти матрицу плотности в момент времени t: $\rho(x,x',t)=?$

Собственные функции $\widehat{H}$стационарной задачи:

$$\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{\pi n x}{L}\right).$$

$$\rho(x,x',0)=\frac{1}{2}\psi_1(x)\psi_1(x')+\frac{i}{8}\psi_2(x)\psi_1(x')-\frac{i}{8}\psi_1(x)\psi_2(x')+\frac{1}{2}\frac{i}{8}\psi_2(x)\psi_2(x')=>$$

Перепишем в виде матрицы оператора в базисе из ψ_n:

$$\rho(x,x',0)=\sum_{nn\prime}\rho_{nn'}(x)\psi_n(x){\psi_{n'}}^*(x');$$

$$\rho_{nn'}=\begin{pmatrix}\frac{1}{2} & -\frac{i}{8} & 0\\ \frac{i}{8} & \frac{1}{2} & 0\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}.$$

Перейдем от момента времени 0 к t:

$$\psi_n(x,t) = \psi_n(x)e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}, \qquad \psi^*_{n'}(x,t) = \psi_{n'}(x)e^{\frac{i}{\hbar}E_{n'}t} \Rightarrow$$

$$\rho_{nn'}(t) = \rho_{nn'}(0)e^{\frac{i}{\hbar}(E_{n'}-E_n)t}, \;\; E_2 - E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}3$$

$$\rho_{nn'}(t) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{i}{8}e^{\frac{i\,3\pi^2\hbar}{\hbar 2mL^2}t} & 0 \\ \frac{i}{8}e^{-\frac{i\,3\pi^2\hbar}{\hbar 2mL^2}t} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow$$

Явная запись в прежнем координатном представлении:

$$\rho(x,x',t) = \frac{1}{L}\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)\sin\left(\frac{\pi x'}{L}\right)\left\{1 + \frac{i}{2}\cos\left(\frac{\pi x}{L}\right)e^{-\frac{i\,3\pi^2\hbar}{\hbar 2mL^2}t} - \frac{1}{2}\cos\left(\frac{\pi x'}{L}\right)e^{\frac{i\,3\pi^2\hbar}{\hbar 2mL^2}t} + 4\cos\left(\frac{\pi x}{L}\right)\cos\left(\frac{\pi x'}{L}\right)\right\}.$$

Схема решения для произвольной $\rho(x,x',0)$:

1) Переписать $\rho(x,x',0)$ в виде матрицы из собственных функций гамильтониана;
2) Умножить соответствующие матричные элементы на временные экспоненты;
3) Если необходимо, свернуть в прежний вид.

Схема не меняется по сравнению с анализом поведения чистых состояний. Решение становится более громоздким. Чаще будем решать задачи про чистые состояния для отработки методик решения.

Семинар 6

Гармонический осциллятор

Для любой стационарной системы, в том числе и одномерной, основная задача – задача на собственные значения и собственные функции гамильтониана. На прошлом семинаре все задачи были решены в координатном представлении (так удобнее).

Общая классификация одномерных задач:

0. $U(x) = const$ – свободное движение в отсутствие сил (решение не сложно получить как в координатном, так и в импульсном представлении);
1. $U(\hat{x}) = U_0 - F\hat{x}$ – в координатном представлении получим дифференциальное уравнениевторого порядка (не решается в элементарных функциях), в импульсном – уравнение первого порядка с разделяющимися переменными;
2. $U(\hat{x}) = \frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2}$ – одинаковая зависимость гамильтониана от импульса и координаты =>неважно, в каком представлении решать, собственные функции отличаются только размерностью переменной:

   Для гамильтониана: $\widehat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2} \Rightarrow E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$,

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

$$\psi_n(p) = \left(\frac{1}{\pi\hbar m\omega}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^4 n!}} e^{-\frac{p^2}{2m\omega\hbar}} H_n\left(\frac{p}{\sqrt{\hbar m\omega}}\right).$$

   На лекции будет разобран способ решения задач об осцилляторах не в координатное или импульсное представление, а *в представлении повышающих и понижающих операторов.*

3. Далее не трудно догадаться, что при повышении степени координаты в выражении потенциальной энергии проще работать в координатном представлении.

Повышающие и понижающие операторы

Для осциллятора:

$$\hat{a}^- \equiv \frac{m\omega\hat{x} + i\hat{p}_x}{\sqrt{2m\omega\hbar}}, \qquad \hat{a}^+ = (\hat{a}^-)^+ \equiv \frac{m\omega\hat{x} - i\hat{p}_x}{\sqrt{2m\omega\hbar}}.$$

Причем:

1. $[\hat{a}^-, \hat{a}^+] = 1$ – следствие канонического коммутационного соотношения для $\hat{x}, \hat{p}_x$;
2. Действие на собственные вектора гамильтониана:
$$\begin{cases} \hat{a}^-|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \\ \hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \end{cases};$$
3. Операторы координаты и импульса:
$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}^- + \hat{a}^+),$$
$$\hat{p}_x = \sqrt{\frac{\hbar\omega m}{2}}\frac{1}{i}(\hat{a}^- - \hat{a}^+);$$
Любой наблюдаемый оператор, относящийся к линейному осциллятору, будет записываться как функция операторов координат, операторов импульсов и времени => любой оператор можно выразить через $\hat{a}^-, \hat{a}^+$.
4. Выражение для гамильтониана через $\hat{a}^-, \hat{a}^+$:
$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^-\hat{a}^+ + \frac{1}{2}\right).$$

Так, чисто алгебраически без решения дифференциальных уравнений можно построить решение задач для осциллятора.

Эволюция когерентной смеси состояний оператора

Пример 1(из списка обязательных задач):

Пусть при $t = 0$ линейный гармонический осциллятор находится в состоянии:

$$|\psi^{(0)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle -$$

когерентная смесь основного и низшего возбужденного состояния оператора с равными весами.

Найдем средние значения, дисперсии координаты, импульса и энергии в момент времени t.

Ясно, что средние значения и дисперсии энергии не зависят от t. Энергия – интеграл движения любой стационарной системы. Считаем по начальному состоянию без матричных элементов:

$$\bar{E} = \frac{1}{2}E_0 + \frac{1}{2}E_1 = \hbar\omega;$$

$$DE = \frac{1}{2}\left(-\frac{\hbar\omega}{2}\right)^2 + \frac{1}{2}\left(+\frac{\hbar\omega}{2}\right)^2 = \frac{\hbar^2\omega^2}{4}.$$

Для координаты:

$$\bar{x}(t) = \langle\psi(t)|\hat{x}|\psi(t)\rangle,$$

где $|\psi\,(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle e^{-i\frac{\omega}{2}t} + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle e^{-i\frac{3\omega}{2}t}$.

$$\bar{x}(t) = \left\{\frac{1}{\sqrt{2}}\langle 0|e^{i\frac{\omega}{2}t} + \frac{1}{\sqrt{2}}\langle 1|e^{i\frac{3\omega}{2}t}\right\}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}^- + \hat{a}^+)\left\{\frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle e^{-i\frac{\omega}{2}t} + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle e^{-i\frac{3\omega}{2}t}\right\} =$$

$$= (!\,\text{только}\ \neq 0\ \text{слагаемые!}\ \ \langle n|\hat{a}^-|n+1\rangle, \langle n+1|\hat{a}^+|n\rangle) =$$

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left\{\langle 0|\hat{a}^-|1\rangle\frac{1}{2}e^{-i\omega t} + \langle 1|\hat{a}^+|0\rangle\frac{1}{2}e^{i\omega t}\right\} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\cos\omega t\,;$$

$$\overline{x^2}(t) = \{\ldots\}\frac{\hbar}{2m\omega}\left(\hat{a}^{-2} + \hat{a}^{+2} + \hat{a}^+\hat{a}^- + \hat{a}^-\hat{a}^+\right)\{\ldots\} = (!\,\text{только}\ \neq 0\ \text{слагаемые!}) =$$

$$= \frac{1}{2}\{\langle 0|\hat{a}^+\hat{a}^- + \hat{a}^-\hat{a}^+|0\rangle + \langle 1|\hat{a}^+\hat{a}^- + \hat{a}^-\hat{a}^+|1\rangle\}\frac{\hbar}{2m\omega} =$$

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

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

Заметим, что если $\overline{x^2}$ не зависит от t, то его можно вычислить иначе:

$$\overline{x^2} = \frac{2}{m\omega^2}\bar{U}.$$

Среднее от потенциальной энергии по состоянию и по времени по теореме вириала – половина этой энергии. Если $\bar{U}$ не зависит от t:

$$\overline{x^2} = \frac{2}{m\omega^2}\bar{E}\frac{1}{2} = \frac{\hbar}{m\omega}.$$

Для импульса:

$$\bar{p}(t) = m\frac{d\bar{x}}{dt} = -\sqrt{\frac{\hbar\omega m}{2}}\sin\omega t\,;$$

$$\overline{p^2}(t) = \overline{p^2}(0) = 2m\bar{T} = m\bar{E} = \hbar\omega m;$$

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

Заметим, что дисперсия импульса и дисперсия координаты меняются в противофазе.

Эффект Мёссбауера

Пример 2:

Для простоты представим некий изотропный кубический кристалл, в узле которого находится ядро, точка минимума потенциальной энергии взаимодействия ионного остова с кристаллическим полем, в котором находится ядро. Начало координат на рис. 6.1 – точка равновесия ядра. Изотропность означает, что малые колебания ядра вблизи положения равновесия происходят с одинаковой частотой ω по всем трем осям.

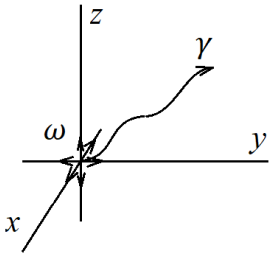

Рис. 6.1. Ядро кубического кристалла испускает квант

Пусть ядро находится в основном состоянии (невозбужденном): $|0\rangle_x|0\rangle_y|0\rangle_z$. Ядро испускает γ-квант с импульсом $\hbar\vec{k}$. При этом за счет внутреннего перехода высвобождается энергия ΔE. Спрашивается, с какой вероятностью при испускании ядро не испытает «отдачи» (в системе отсчета, связанной с кристаллом).

В таком случае конечное состояние:

$$|\psi\rangle_f = |0\rangle_x|0\rangle_y|0\rangle_z.$$

В результате испускания γ-кванта состояние колебаний по осихизменяется.

Оператор сдвига по p_xна q:

$$\widehat{U}_{p_x}(q) = e^{-\frac{i}{\hbar}q\hat{x}} => |i\rangle_x = |0\rangle_x \rightarrow\ e^{ik_x\hat{x}}|0\rangle_x.$$

Вероятность того, что отдачи не будет:

$$w_{00}^{(x)} = \left|\langle 0\left|e^{ik_x\hat{x}}\right|0\rangle\right|^2.$$

Запись через понижающие и повышающие операторы:

$$e^{ik_x\hat{x}} = e^{ik_x\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}^- + \hat{a}^+)} = \left(k_x\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \equiv z\right) = e^{iz\hat{a}^+ + iz\hat{a}^-}.$$

Пусть $iz\hat{a}^+ = \hat{A},\ iz\hat{a}^- = \hat{B},$ тогда:

$$\left[\hat{A},\hat{B}\right] = -z^2[\hat{a}^+,\hat{a}^-] = z^2 = iC\ \ => e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{-i\frac{\hat{C}}{2}}e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}\ \ =>$$

$$e^{ik_x\hat{x}} = e^{-\frac{z^2}{2}}e^{iz\hat{a}^+}e^{iz\hat{a}^-}\ \ =>$$

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА

teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

Запись матричного элемента:

$$\langle 0|e^{ik_x\hat{x}}|0\rangle = e^{-\frac{z^2}{2}}\langle 0|e^{iz\hat{a}^+}e^{iz\hat{a}^-}|0\rangle = \left(e^{iz\hat{a}^-} = 1 + iz\hat{a}^- + \cdots\right) = \langle 0|0\rangle = 1 \ = e^{-\frac{\hbar k_x^2}{4m\omega}}.$$

$$w_{00}^{(x)} = e^{-\frac{\hbar k_x^2}{2m\omega}}.$$

$$w_{00} = w_{00}^{(x)}w_{00}^{(y)}w_{00}^{(z)} = e^{-\frac{\hbar k^2}{2m\omega}} = e^{-\frac{E_{\text{отдачи}}}{\hbar\omega}},$$

Квантовый осциллятор не классический, не может принять любую энергию от улетающего фотона в качестве энергии отдачи, а только энергию, кратную $\hbar$. Если $E_{\text{отдачи}} \gg \hbar\omega$, то вероятность испускания без отдачи мала, если наоборот, то вероятность может оказаться большой.

Энергия отдачи для характерных -переходов: $E_{\text{отдачи}}{\sim}10^2$эВ для характерных масс тяжелых γ-активных ядер. $\hbar\omega$определяется жесткостью связей ядра в кристалле. $\hbar\omega{\sim}10^2 - 10^4$эВ.

Мёссбауер исследовал жесткий кристалл с $\hbar\omega{\sim}10^4$эВ. Вероятность испускания в его задача была около 99%.

Мёссбауеровская спектроскопия – один из инструментов экспериментального исследования, измерения очень малых частотных сдвигов. С помощью этого эффекта впервые было доказано, что энергия фотона убывает в поле тяжести Земли.

Эволюция комплексного когерентного состояния осциллятора

<u>Пример 3 (из списка обязательных задач):</u>

Пусть при t=0 осциллятор находится в состоянии:

$$|\psi^{(0)}\rangle \equiv |z\rangle \equiv e^{-\frac{|z|^2}{2}}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{z^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle,$$

то есть вектор состояния определен коэффициентами разложения в полном ортонормированном базисе из собственных векторов гамильтониана. Нетрудно проверить, что $e^{-\frac{|z|^2}{2}}$ - правильный коэффициент нормировки ($\langle z|z\rangle = 1$). Необходимо найти средние значения и дисперсии координаты и импульса в зависимости от t.

Важно!

$$\hat{a}^-|z\rangle = e^{-\frac{|z|^2}{2}}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{z^n}{\sqrt{n!}}\sqrt{n}|n-1\rangle = (k=n-1) = ze^{-\frac{|z|^2}{2}}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{z^k}{\sqrt{k!}}|k\rangle = z|z\rangle,$$

то есть $|z\rangle -$ собственный вектор оператора $\hat{a}^-$.

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{|z|^2}{2}}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{z^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle\cdot e^{-i\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)t} = e^{-i\frac{\omega}{2}t}\cdot e^{-\frac{|z|^2}{2}}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\left(ze^{-i\omega t}\right)^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle$$
$$= e^{-i\frac{\omega}{2}t}|ze^{-i\omega t}\rangle.$$

Мы получили вектор из того же класса, то есть в процессе эволюции состояния эволюционирует само число z.

$$\bar{x}(t) = \left\langle ze^{-i\omega t}\left|\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}^+ + \hat{a}^-)\right|ze^{-i\omega t}\right\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(ze^{-i\omega t} + z^*e^{i\omega t}\right) = \left(z \equiv |z|e^{i\varphi}\right) =$$
$$= |z|\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\cos(\omega t - \varphi) = x_{\text{ц}}\cos(\omega t - \varphi) -$$

центр пакета тоже совершает гармонические колебания с амплитудой, увеличивающейся с ростом $|z|$.

$$\overline{x^2} = \frac{\hbar}{2m\omega}\left\langle ze^{-i\omega t}\left|\hat{a}^{+2} + \hat{a}^{-2} + \hat{a}^+\hat{a}^- + \hat{a}^-\hat{a}^+\right|ze^{-i\omega t}\right\rangle = \bar{x}^2 + \frac{\hbar}{2m\omega} \Rightarrow$$

$$Dx = \frac{\hbar}{2m\omega} -$$

не зависит от t и z.

Для импульса аналогично.

Рассмотренное состояние минимизирует соотношение неопределенностей (гауссов волновой пакет в потенциале гармонического осциллятора). Это *квантовое описание классического колебания*. Такие состояния называют *когерентными состояниями осциллятора*, широко используются в теории сверхточных измерений.

Семинар 7

Использование симметрий для решения задач

Переходим от одномерных задач к многомерным. В задачах для стационарных систем в гамильтонианах обязательно будет содержаться оператор кинетической энергии, который в координатном представлении превратится в оператор Лапласа. Аналитическое решение подобных уравнений вручную возможно только тогда, когда переменные разделяются, а значит, задача обладает некоторой симметрией.

Есть одномерные задачи, в которых соображения симметрии помогают. Соображения симметрии позволяют проводить качественный анализ даже в тех случаях, в которых трудно получить решение аналитически.

Симметрии динамики

Преобразование в гильбертовом пространстве $\mathcal{H}$ чистых состояний, обладающее свойством:

$$\widehat{U}^{-1} = \widehat{U}^{+}\left(\widehat{U}^{+}\widehat{U} = \widehat{U}\widehat{U}^{+} = 1\right)$$

называется симметрией динамики квантовой системы, если оно не изменяет эволюционное уравнение.

Пусть $\widehat{H}$ – гамильтониан нашей системы. Эволюционное уравнение в картине Шредингера:

$$i\hbar\frac{\partial|\psi\rangle}{\partial t} = \widehat{H}|\psi\rangle.$$

Совершаем преобразование:

$$|\psi\rangle \to |\psi'\rangle = \widehat{U}|\psi\rangle.$$

Построим уравнение для преобразованных волновых функций:

$$|\psi\rangle = \widehat{U}^{+}|\psi'\rangle \;\; => i\hbar\frac{\partial\widehat{U}^{+}}{\partial t}|\psi'\rangle + i\hbar\widehat{U}^{+}\frac{\partial|\psi'\rangle}{\partial t} = \widehat{H}\widehat{U}^{+}|\psi'\rangle.$$

Домножим уравнение слева на оператор $\widehat{U}$, первое слагаемое левой части перенесем в правую:

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

Это уравнение будет иметь прежний вид, если справа образуется первоначальный гамильтониан $\hat{H}$:

$$\hat{H}=\hat{U}\hat{H}\hat{U}^{+}+i\hbar\hat{U}^{+}\frac{\partial\hat{U}}{\partial t}.$$

Для стационарных систем $\left(\frac{\partial\hat{H}}{\partial t}=0\right)$ особую роль играют стационарные симметрии динамики $\frac{\partial\hat{U}}{\partial t}=0$. В таком случае:

$$\hat{H}=\hat{U}\hat{H}\hat{U}^{+}<=>\left[\hat{H},\hat{U}\right]=0.$$

Как правило, унитарные преобразования можно разбить на группы преобразований (два унитарных преобразования можно рассмотреть как третье аналогичного характера преобразование, заменяющее их последовательное действие). В этом случае группа может быть описана параметром α.

Пример:

Оператор трансляции: $T_x(\alpha)=e^{\frac{i}{\hbar}\alpha\hat{p}_x}$.

В общем случае: $U=e^{i\alpha\hat{F}}$,где $\alpha-$ некоторый *вещественный параметр*, задающий разные преобразования данной группы, оператор $\hat{F}-$*генератор данной группы*. Возможно обобщение на случай многих параметров.

$$\left.\begin{matrix}\left[\hat{H},\hat{U}\right]=0\\U=e^{i\alpha\hat{F}}\end{matrix}\right\}=>\left[\hat{H},\hat{F}\right]=0\ =>\frac{\partial\hat{F}}{\partial t}=0\ =>$$

$\hat{F}-$ интеграл движения.

Так, всякая симметрия динамики в квантовой механике связана с законом сохранения (частный случай теоремы Нётер).

Так как для стационарной симметрии динамики $\left[\hat{H},\hat{F}\right]=0$ =>существует полный ортонормированный базис в гильбертовом пространстве $\mathcal{H}$, составленный из

общих собственных векторов $\hat{H}$ и $\hat{F}$. Тогда при решении задачи $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$можем сначала решить уравнение на собственные вектора оператора $\hat{F}$:

$$\hat{F}|\psi_f\rangle = f|\psi_f\rangle.$$

Способ актуален, если второе уравнение существенно проще первого. Так мы сузим область поиска решений. Многомерная задача за счет рассмотренных симметрий может быть сведена к одномерной, то есть возможно понижение размерности задачи.

Так, например сферически симметричная трехмерная задача сводится к одномерной радиальной. Например, задача об электронной оболочке атома в сферически симметричном поле ядра.

Понижение размерности. Качественный анализ

Пример:

Пусть есть одномерная система. Точечная квантовая частица массы mдвижется в потенциальном поле U(x). Пусть U(x) обладает симметрией:

$$U(-x) = U(x) -$$

четная функция координат.

Введем унитарное преобразование – *оператор пространственной инверсии*:

$$\hat{P}\psi(x) = \psi(-x) -$$

является преобразованием симметрии динамики, то есть если теперь решаем задачу $\hat{H}\psi_E = E\psi_E$, то можем потребовать, чтобы собственные функции гамильтониана были одновременно собственными функциями оператора $\hat{P}$:

$$\hat{P}\psi_E(x) = \psi_E(-x) = \lambda_p\psi_E(x) = \pm\psi_E(x).$$

В этом случае все функции полного ортонормированного базиса ψ_E или четны, или нечетны. Поскольку уровни дискретного спектра в одномерных задачах всегда невырожденные, а значит такой базис только один, то можем утверждать, что все собственные функции дискретного спектра в одномерной задаче с четным потенциалом или четные, или нечетные. Получаем две более простые задачи вместо одной сложной.

Пусть потенциал задан графиком. Есть потенциальная яма глубины U_0 и характерной ширины a симметричный относительно пространственной инверсии (рис.7.1). Необходимо исследовать дискретный спектр задачи. В найти его не можем, так как $U(x)$ явно не задана. Но в силу симметрии можно сказать, что все собственные функции или четные, или нечетные для дискретного спектра.

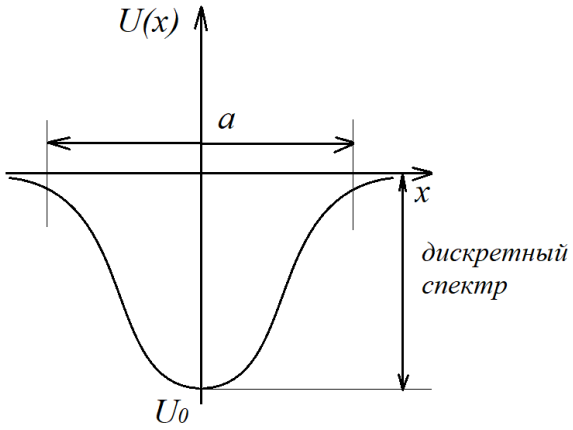

Рис. 7.1. Симметричная потенциальная яма

Вспомним осцилляторную теорему. Спектр ограничен снизу, собственные функции должны обладать тем свойством, что СФ отвечающая низшему состоянию должна иметь 0 узлов, следующему – 1 узел и т.д. Очевидно, собственная функция, отвечающая низшему энергетическому уровню, имеет следующий вид (рис. 7.2):

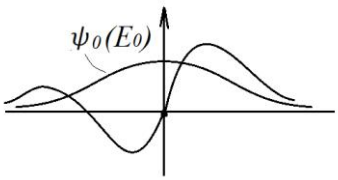

Рис. 7.2. Собственные функции состояний 0 и 1

Соответственно эта функция должна быть четной. У следующей функции один ноль, она нечетная. И так далее идет чередование. Чтобы подсчитать точно число дискретных уровней, нужно честно решать задачу.

Проведем оценку:

$$E_k \sim \frac{\hbar^2}{2ma^2}, \quad |U| \sim |U_0|,$$

$$\frac{|U|}{E_n} \sim \frac{2m|U_0|a^2}{\hbar^2} = \varepsilon_B -$$

«борновский параметр», безразмерная величина, характеризующая влияние потенциала на частицу. Если$\varepsilon_B \ll 1$, то связанные состояния скорее всего отсутствуют. Если $\varepsilon_B \gg 1$, то связанных состояний много.

Для конкретного потенциала «борновский параметр» и число дискретных уровней всегда жестко связаны между собой.

Добавим к исходному потенциалу узкий $(\delta \to 0)$ высокий $(U_1 \to \infty)$выброс на фоне этого потенциала в окрестности нуля, $\delta U_1 \equiv V \equiv const$.

В случае интегрируемой сингулярности условия сшивки таковы: сама волновая функция остается непрерывной, а первая производная испытывает скачек конечной величины, причем величина этого скачка пропорциональна значению функции в точке сингулярности. Это означает, что нечетные функции с узлами в нуле этого барьера не почувствуют, нечетные уровни не смещаются. Четные функции обладают максимумом в нуле, уровни смещаются вверх.

В силу строгого чередования четных и нечетных уровней E_0никогда не будет выше E_1 (в пределе E_0 достигает E_1). При наличии такой сингулярности можно создать в одномерном случае двукратно вырожденный дискретный уровень.

При наличии всего трех уровней при достаточно большом V их останется два. Поднимаясь, E_2 перейдет в непрерывный спектр.

Гребенка Дирака

Пример 2:

Рассмотрим одномерное движение точечной квантовой частицы массы m в потенциале (рис. 7.3):

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

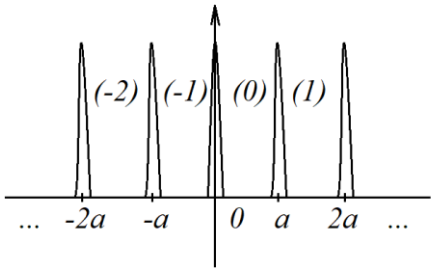

Рис. 7.3. Периодический потенциал. Гребенка Дирака

Появилось бесконечное количество точек сингулярностей. При решении стационарного уравнения стандартным путем необходимо разбить область определения волновой функции на интервалы, где она регулярна:

$$(n):\ x \in (na, (n+1)a).$$

На каждом интервале задача легко решается. Кроме того необходимо записать условие сшивки для констант интегрирования. Так мы получим систему бесконечного числя уравнений для бесконечного числа констант.

С другой стороны в задаче наблюдается симметрия относительно сдвига наa. Оператор кинетической энергии инвариантен относительно любых сдвигов, U инвариантен относительно сдвигов на a. В этом случае симметрия динамики:

$$\hat{U} = \hat{T}_x(a).$$

$$(n):\quad \psi'' + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0,\ E \geq 0 \ =>\ k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \ =>$$

Фундаментальная система решений на n-ом интервале:

$$\psi_n(x) = A_n e^{ikx} + B_n e^{-ikx} =>$$

$$A_n, B_n (n = -\infty, \dots, +\infty) - \infty\text{мернаясистемауравнений?}$$

Используем симметрию, потребуем, чтобы собственная функция гамильтониана была собственной функцией оператора $\hat{U}$:

$$\hat{U}\psi(x) = \psi(x+a) = \lambda\psi(x).$$

Запишем $\lambda = e^{iqa}$,где $q \in \left(-\frac{\pi}{a}, +\frac{\pi}{a}\right] \ =>$

$$\psi(x+a) = e^{iqa}\psi(x), \quad \forall x.$$

Выберем $\forall x \in (n) => (x+a) \in (n+1) =>$

$$A_{n+1}e^{ik(x+a)} + B_n e^{-ik(x+a)} = e^{iqa}\left[A_n e^{ikx} + B_n E^{-ikx}\right] =>$$

$$\begin{cases} A_{n+1} = e^{i(q-k)a}A_n \\ B_{n+1} = e^{i(q+k)a}B_n \end{cases} -$$

рекуррентные соотношения =>

$$\begin{cases} A_n = e^{in(q-k)a}A_0 \\ B_n = e^{in(q+k)a}B_0 \end{cases} =>$$

остались две независимые константы интегрирования A_0 и B_0. Значит, достаточно записать условия сшивки в одной точке, условие симметрии автоматически выполнит условие сшивки во всех остальных точках.

Запишем условия сшивки в точке $x = a$.

Из условия непрерывности:

$$A_0e^{ika} + B_0e^{-ika} = A_1e^{ika} + B_1e^{ika} = A_0e^{iqa} + B_0e^{iqa} =>$$

1) $\left[e^{ika} - e^{iqa}\right]A_0 + \left[e^{-ika} - e^{iqa}\right]B_0 = 0;$

Из условия сшивки производных:

$$ikA_1e^{ika} - ikB_1e^{-ika} - \left(ikA_0e^{ika} - ikB_0e^{-ika}\right) = \frac{2mV}{\hbar^2}\left(A_0e^{ika} + B_0e^{-ika}\right),$$

$A_1e^{ika} = A_0e^{iqa}, B_1e^{-ika} = B_0e^{iqa}$ и разделим выражение на ik, $\frac{mV}{\hbar^2 k} = æ$:

$$A_0e^{iqa} - B_0e^{iqa} - A_0e^{ika} + B_0e^{-ika} = -i2æ\left(A_0e^{ika} + B_0e^{-ika}\right) =>$$

2) $\left[e^{iqa}(1+2iæ) - e^{ika}\right]A_0 + \left[-e^{iqa}(1-2iæ) + e^{-ika}\right]B_0 = 0 =>$

получили однородную систему двух уравнений для двух неизвестных. Система имеет нетривиально решение в том случае, если ее определитель равен нулю.

Но в условии задачи требуется исследовать спектр гамильтониана. Для этого требуется решить следующее уравнение: $\det\| \quad \| = 0$.

$$\left[e^{ika}-e^{iqa}\right]\left[-e^{iqa}(1-2i\text{æ})+e^{-ika}\right]-\left[e^{-ika}-e^{iqa}\right]\left[e^{iqa}(1+2i\text{æ})-e^{ika}\right]=0$$

В результате должно получиться вещественное уравнение для E!

Домножим выражение на $\frac{1}{4}e^{-iqa}$:

$$e^{iqa}\left\{\frac{1-2i\text{æ}}{4}+\frac{1+2i\text{æ}}{4}\right\}+e^{-iqa}\left\{\frac{1}{4}+\frac{1}{4}\right\}+e^{ika}\left\{\frac{-1+2i\text{æ}}{4}+\frac{-1}{4}\right\}+$$

$$+e^{-ika}\left\{\frac{-1}{4}+\frac{-1-2i\text{æ}}{4}\right\}=0\ \Rightarrow \cos qa-\cos ka-\text{æ}\sin ka=0\ \Rightarrow$$

$\cos ka-\frac{mVa}{\hbar^2(ka)}\sin ka=\cos qa-$ транцендентное уравнение относительно $z=ka$.

$$E=\frac{\hbar^2k^2}{2m}=\frac{\hbar^2}{2ma^2}z^2,$$

где z – корни уравнения:

$$\cos z+\frac{mVa}{\hbar^2}\frac{1}{z}\sin z=\cos qa.$$

Решим уравнение графически (рис. 7.4).

$$\cos z+\frac{mVa}{\hbar^2}\frac{1}{z}\sin z=f(z)=\sqrt{1+\frac{m^2V^2a^2}{\hbar^2z^2}}\cos\big(z-\varphi(z)\big),$$

$$\varphi(z)=\arccos\left(\frac{mVa}{\sqrt{\hbar^2z^2+m^2V^2a^2}}\right).$$

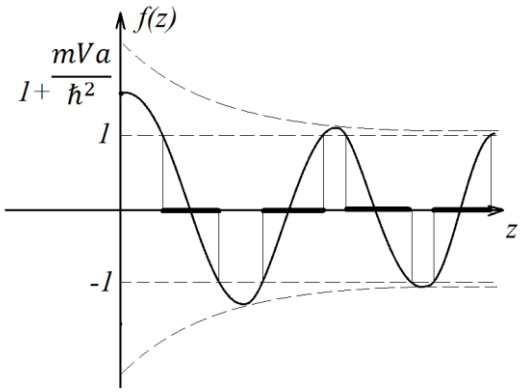

Рис. 7.4. Графическое решение

$\cos qa$ – вещественное число в интервале от -1 до 1. Для каждого конкретного qa получаем набор коренй. qaпробегает все возможные значения => косинус пробегает все возможные значения от -1 до 1. Возможные решения оказываются участками оси z, в которых график проходит в интервале от -1 до 1. С увеличением z участки растут, а расстояния между ними сокращаются. В пределе получим сплошной спектр.

Таким образом, мы получили непрерывный несплошной спектр – *зонный спектр* (характерен для задач с периодичностью).

Если перевернем гребенку и рассмотрим последовательность ям, то сохранится зонная структура, но нижняя зона заедет в область отрицательных энергий – частица не привязана к конкретному центру, а может свободно перемещаться по периодическому кристаллу.

Кристалл с точки зрения электрона – набор ионных остовов положительного заряда, которые являются периодически расставленными потенциальными ямами. Так, рассмотренная задача имеет непосредственное отношение к квантовой теории проводимости, зонам проводимости (зона, в которой есть состояния электронов, способных путешествовать без изменения энергии в стационарном состоянии как свободные по решетке).

Семинар 8

Частицы со спином

Теория спина

Спин – собственный момент количества движения, момент количества движения частицы в системе ее покоя. Не имеет классического аналога.

В модели Уленбека и Гаудсмита проведена аналогия между атомами и планетарными системами, они предположили, что электроны должны еще и вращаться вокруг собственной оси. Наблюдается расхождение эксперимента с теорией (расщепление линий в магнитном поле, нормальный и аномальный эффекты Зеемана).

Кроме того они предположили, что проекция момента импульса, связанная с вращением электрона вокруг собственной оси на эту ось принимает 2 значения: $\pm\frac{1}{2}\hbar$ и гиромагнитное отношение для этого вращения в 2 раза больше чем положено с точки зрения традиционного расчета в рамках классической электродинамики для вращающегося сферически симметричного объекта. Оба эти предположения были неразумными, однако привели к правильному объяснению аномального магнитного эффекта Зеемана.

Паули построил строгую нерелятивистскую теорию спина – спин не может быть связан с вращением и реальным движением в пространстве.

Введем оператор наблюдаемой спина (обычный момент количества движения, его коммутационные соотношения должны быть соотношениями момента, но он не должен быть связан с движениями в пространстве):

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

Далее легко доказать, что в пространстве обычных координатных волновых функций такого оператора не существует, потому что в этом пространстве оператор, который коммутирует со всеми координатами и импульсами, обязательно кратен единичному оператору, а операторы, кратные единичному не могут не коммутировать. Поэтому для введения подобного оператора необходимо изменить структуру пространства волновых функций.

Паули предложил перейти для частиц спина $\frac{1}{2}$ к пространству двухкомпонентных (*спинорных*) волновых функций:

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

Оператор спина определяется следующим образом:

$$\hat{\vec{S}} = \frac{\hat{\vec{\sigma}}}{2}.$$

$\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z -$ матрицы Паули, обладают следующими свойствами:

1) $Tr\,(\hat{\sigma}_i) = 0$;
2) $\hat{\sigma}_i^+ = \hat{\sigma}_i$;
3) $\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j = \delta_{ij}\hat{I}_2 + i\varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k \;=>\; (\hat{\sigma}_i)^2 = 1$ и$\left[\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j\right] = i\varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k$.

Явный вид матриц Паули (а также $\hat{\vec{\sigma}}' \equiv \hat{U}\hat{\vec{\sigma}}\hat{U}^+$, где $\hat{U}$ – любая унитарная матрица 2×2):

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

Оператор, кратный единичному - $\hat{\vec{S}}^2$:

$$\hat{\vec{S}}^2 = \frac{1}{4}\hat{\vec{\sigma}}^2 = \frac{3}{4}\hat{I}_2 = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)\hat{I}_2.$$

Теперь можем строить теорию частиц произвольного спина, используя спинорные волновые функции. Наиболее интересна теория частиц со спином $\frac{1}{2}$, на практике в нерелятивистской физике чаще всего имеем дело именно с такими частицами (электроны, протоны, нейтроны, кварки).

Таким образом, мы ввели технические аспекты. Физическое содержание теории Паули появляется тогда, когда выясняется влияние наличия спина на поведение частиц. Самое главное то, как величины, связанные со спином, участвуют во взаимодействии с внешними полями. С каждым спиновым механическим моментом связан *магнитный момент*:

$$\hat{\vec{\mu}} = sign(Q)2\mu_0\hat{\vec{S}},$$

где $\mu_0 = \frac{|e|\hbar}{2mc}$ *– магнетон Бора (для электронов)*.

Для орбитального момента:

$$\hat{\vec{\mu}}_l = sign(Q)\mu_0 \hat{\vec{l}}.$$

Двойка в теории Паули, как и Уленбека и Гаудсмита, появляется феноменологически, объясняется только при подключении релятивистской теории.

Уравнение Паули для эволюции двухкомпонентной волновой функции:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}_p\psi,$$

где гамильтониан для частицы с зарядом +e, массой m:

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

где $\vec{B} \equiv rot\ \vec{A}$.

Обратим внимание, что в аргументе потенциалов и полей стоит оператор координаты, то есть принимаем еще один феноменологический принцип – *принцип локальности взаимодействия*. Частица, заряженная точечно, чувствует поле в той точке, в которой сама находится.

На сегодняшний день мы понимаем, что теория Паули корректно описывает все нерелятивистские явления, связанные с квантовыми заряженными частицами спина $\frac{1}{2}$.Поправки к ней, как правило, связаны с релятивистской физикой.

Опыт Штерна и Герлаха

Существует множество явлений, завязанных на наличии спина у электрона. Например, классическое экспериментальное доказательство существования спина у электрона - опыт Штерна-Герлаха.

<u>Идея состоит в следующем</u>: если направить поток квантовых частиц так, что они пролетают через область сильно неоднородного магнитного поля (между двумя полюсами электромагнита, рис. 8.1), то происходит разделение пучка на два по

проекциям спина на направления неоднородности магнитного поля. При этом соотношение интенсивностей – соотношение вероятностей того, что $S_z = \pm\frac{1}{2}$:

$$\frac{I_1}{I_2} = \frac{w\left(+\frac{1}{2}\right)}{w\left(-\frac{1}{2}\right)}.$$

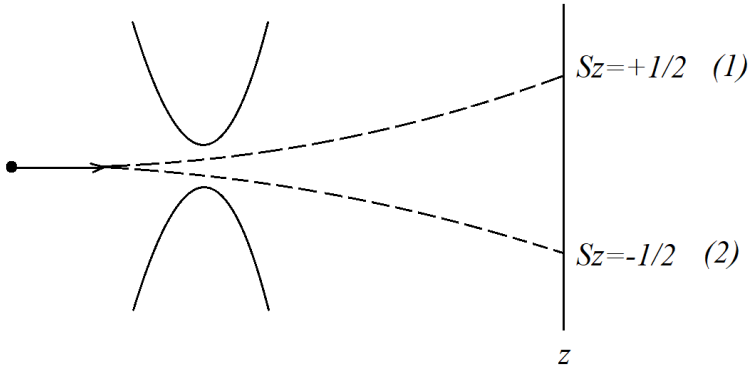

Рис. 8.1. Опыт Штерна и Герлаха

$$w\left(+\frac{1}{2}\right) = \left|\int d\vec{r}\psi^*_{S_z=+\frac{1}{2}}(\vec{r})\psi_{S_z=+\frac{1}{2}}(\vec{r})\right|^2$$

$\psi_{S_z=+\frac{1}{2}}$ – собственная функция оператора $\hat{S}_z$ с собственным значением $+\frac{1}{2}$:

$$\hat{S}_z\psi_{+\frac{1}{2}} = +\frac{1}{2}\psi_{+\frac{1}{2}}.$$

$$\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix} = +\frac{1}{2}\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix} =>$$

$$\psi_1 = \psi_1, \qquad \psi_2 = -\psi_2 \; => \psi_2 = 0 \; =>$$

$$\psi_{+\frac{1}{2}} = \phi(\hat{\vec{r}}, t)\begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix} = \phi\chi_{+\frac{1}{2}}, \qquad \psi_{-\frac{1}{2}} = \phi(\hat{\vec{r}}, t)\begin{pmatrix}0\\ 1\end{pmatrix} = \phi\chi_{-\frac{1}{2}},$$

В общем случае если есть выделенное направление nв пространстве, то можно построить оператор проекции спина на направление nc собственными значениями $\pm\frac{1}{2}$:

$$S_{\vec{n}} = \vec{n}\hat{\vec{S}},$$

$$\hat{S}_{\vec{n}}\psi_{\vec{n}} = +\frac{1}{2}\psi_{\vec{n}},$$

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА

teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

$\psi_{\vec{n}}$ – состояние, в котором спин направлен по оси $\vec{n}$.

$$\psi_{\vec{n}} = \phi(\hat{\vec{r}}, t)\chi_{\vec{n}}, \qquad \chi_{\vec{n}} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi} \end{pmatrix},$$

θ, φ – сферические углы, орбитальный и азимутальный углы вектора $\vec{n}$ соответственно.

Прибор Штерна-Герлаха. Поляризованный пучок

Пример 1:

Рассмотрим опыт Штерна-Герлаха (рис. 8.1). Прибор разделяет пучок электронов на два в зависимости от проекции их спина на ось z. Исходный пучок поляризован таким образом, что все частицы пучка имеют спин, направленный по оси $\vec{n}(\theta, \varphi)$. Найти отношение интенсивностей пятен $\frac{I_1}{I_2}$.

Исходный пучок: $\phi(\hat{\vec{r}}, t)\chi_{\vec{n}}$.

В результате взаимодействия с прибором Штерна-Герлаха в конечном состоянии: $\phi(\hat{\vec{r}}, t)\chi_{\pm\frac{1}{2}}$.

Тогда при вычислении скалярного произведения (если считаем, что влияние прибора сводится к воздействию на спин и не меняет существенно координатного поведения) считаем, что интеграл от координатных частей – константа, главным оказывается произведение спинорных частей:

$$w\left(+\frac{1}{2}\right) = \left|\chi^{+}_{\pm\frac{1}{2}} \cdot \chi_{\vec{n}}\right|^2 = (1 \quad 0)\begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi} \end{pmatrix} = \cos^2\frac{\theta}{2};$$

$$w\left(-\frac{1}{2}\right) = \sin^2\frac{\theta}{2}.$$

Довольно часто можем считать эти вероятности напрямую. Заметим, что для нахождения w $\pm$можно воспользоваться простыми соображениями:

$$\begin{cases} w_+ + w_- = 1 \\ w_+\left(+\frac{1}{2}\right) + w_-\left(-\frac{1}{2}\right) = \bar{S}_z \end{cases} => w_+ - w_- = 2\bar{S}_z =>$$

$$\begin{cases} w_+ = \frac{1}{2} + \bar{S}_z \\ w_- = \frac{1}{2} - \bar{S}_z \end{cases}.$$

Теперь изменим задачу и зададим произвольное смешанное состояние:

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & \frac{i}{8} \\ -\frac{i}{8} & \frac{3}{4} \end{pmatrix} =>$$

$$\frac{I_1}{I_2} = \frac{1 + 2\bar{S}_z}{1 - 2\bar{S}_z}, \qquad \bar{S}_z = Tr\left(\hat{\rho}\hat{S}_z\right) = \frac{1}{2}Tr\left(\begin{pmatrix} \frac{1}{4} & \frac{i}{8} \\ -\frac{i}{8} & \frac{3}{4} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\right) = \frac{1}{2}Tr\begin{pmatrix} \frac{1}{4} & \\ & -\frac{3}{4} \end{pmatrix}$$

$$= -\frac{1}{4}$$

$$=> \frac{I_1}{I_2} = \frac{1}{3}.$$

В каком случае разделение волновой функции на произведение спинорной и координатной частей сохраняется в процессе эволюции?

Для этого гамильтониан Паули должен распасться на сумму двух слагаемых, одна из которых зависти только от координат и импульсов, а другая от оператора спина. Легко догадаться, что это произойдет в том случае, когда в последнем слагаемое нет зависимости от координаты (поле $\vec{B}$однородно по координате, $\vec{B} = \vec{B}(t)$):

$$\hat{H}_p = \hat{H}_{\vec{r}} + \hat{H}_{\vec{S}}, \qquad \hat{H}_{\vec{S}} = -2\mu_0\hat{\vec{S}}\vec{B}(t) =>$$

$$\begin{cases} i\hbar\dfrac{\partial \Phi}{\partial t} = \hat{H}_{\vec{r}}\Phi \\ i\hbar\dfrac{\partial \chi}{\partial t} = \hat{H}_{\vec{S}}\chi \end{cases}.$$

Электронный парамагнитный резонанс

Пример:

Пусть магнитное поле однородно, но нестационарно:

$$\vec{B}(t) = B_0\vec{e}_z + B_1\left(\cos\omega t\,\vec{e}_x + \sin\omega t\,\vec{e}_y\right).$$

Пусть при $t = 0$: $S_z = +\frac{1}{2}$. С какой вероятностью в момент времени tспин окажется противонаправлен? $w_-(t) =$?

$$i\hbar\frac{\partial \chi}{\partial t} = 2\mu_0\frac{\hat{\vec{\sigma}}}{2}\vec{B}\chi = \mu_0\begin{pmatrix} B_0 & B_1\cos\omega t - iB_1\sin\omega t \\ B_1\cos\omega t + iB_1\sin\omega t & -B_0 \end{pmatrix}\chi \Rightarrow$$

$$\frac{\mu_0 B_0}{\hbar} = \Omega_{||}, \qquad \frac{\mu_0 B_1}{\hbar} = \Omega_{\perp}, \qquad \chi = \begin{pmatrix} u(t) \\ v(t) \end{pmatrix}, \qquad u(0) = 1, v(0) = 0 \Rightarrow$$

$$i\begin{pmatrix} \dfrac{\partial u(t)}{\partial t} \\ \dfrac{\partial v(t)}{\partial t} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Omega_{||} & \Omega_{\perp}e^{-i\omega t} \\ \Omega_{\perp}e^{i\omega t} & -\Omega_{||} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u(t) \\ v(t) \end{pmatrix} \Rightarrow$$

$$\begin{cases} i\dfrac{\partial u(t)}{\partial t} = \Omega_{||}u + \Omega_{\perp}e^{-i\omega t}v \\ i\dfrac{\partial v(t)}{\partial t} = \Omega_{\perp}e^{i\omega t}u - \Omega_{||}v \end{cases}.$$

Переход:

$$u(t) = f(t)e^{-i\frac{\omega}{2}t}, \qquad v(t) = g(t)e^{+i\frac{\omega}{2}t}, \qquad f(0) = 1, g(0) = 0 \Rightarrow$$

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА

teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

$$\begin{cases} i\dfrac{\partial f}{\partial t}+\dfrac{\omega}{2}f=\Omega_{||}f+\Omega_{\perp}g \\ i\dfrac{\partial g}{\partial t}-\dfrac{\omega}{2}g=\Omega_{\perp}f-\Omega_{||}g \end{cases} =>$$

из нижнего уравнения:

$$f=\frac{1}{\Omega_{\perp}}\left\{i\frac{\partial g}{\partial t}+\left(\Omega_{||}-\frac{\omega}{2}\right)g\right\} =>$$

$$-\frac{1}{\Omega_{\perp}}\frac{\partial^2 g}{\partial t^2}+\frac{i\Omega_{||}-\frac{\omega}{2}}{\Omega_{\perp}}\frac{\partial g}{\partial t}=\left(\Omega_{||}-\frac{\omega}{2}\right)\frac{1}{\Omega_{\perp}}\left\{i\frac{\partial g}{\partial t}+\left(\Omega_{||}-\frac{\omega}{2}\right)g\right\}+\Omega_{\perp}g =>$$

$$\frac{\partial^2 g}{\partial t^2}+\left[\Omega_{\perp}^2+\left(\Omega_{||}-\frac{\omega}{2}\right)^2\right]g=0-$$

уравнение гармонических колебаний, $\left[\Omega_{\perp}^2+\left(\Omega_{||}-\frac{\omega}{2}\right)^2\right]=\Omega^2$.Добавляя требование $g(0)=0$:

$$g(t)=A\sin\Omega t,$$

где константа Аопределяется из второго граничного условия.

$$f(t)=\frac{i}{\Omega_{\perp}}A\cos\Omega t+\frac{\Omega_{||}-\frac{\omega}{2}}{\Omega_{\perp}}A\sin\Omega t, \qquad f(0)=1 =>$$

$$\frac{i\Omega}{\Omega_{\perp}}A=1 => A=-i\frac{\Omega_{\perp}}{\Omega} =>$$

$$u(t)=e^{-i\frac{\omega}{2}t}\left[\cos\Omega t-i\frac{\Omega_{||}-\frac{\omega}{2}}{\Omega}\sin\Omega t\right],$$

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

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

Вероятность обнаружить частицу в момент tв состоянии со спином $-\frac{1}{2}$ осциллирует по синусу.

$$w_{-}^{\max} = \frac{\Omega_{\perp}^2}{\Omega_{\perp}^2 + \left(\Omega_{||} - \frac{\omega}{2}\right)^2},$$

где $\frac{\mu_0 B_0}{\hbar} = \Omega_{||}$, $\frac{\mu_0 B_1}{\hbar} = \Omega_{\perp}$.

Мы наблюдаем электронный парамагнитный резонанс (ЭПР): если $\omega = \frac{2\mu_0 B_0}{\hbar}$, то $w_{-}^{\max} = 1$ =>периодическое изменение спина электрона.

С другой стороны вспомним, что одно из этих энергетических состояний электрона более выгодное (спин вниз), то независимо от того, что было в начале, в резонансе половину времени электрон проводит в энергетически невыгодном состоянии. Это означает, что он будет возвращаться в исходное состояние не только за счет внешнего поля, но и будет иногда испускать фотон частоты ω, чтобы попасть в энергетически выгодное состояние.

Так, при помещении системы электронов в электромагнитное поле наблюдается излучение на частоте ω. Причем излучение области будет тем интенсивнее, чем больше в этой области электронов. Поставив снаружи детектор, получим из каждой точки образца сигнал, пропорциональный плотности электронов.

Семинар 9

Теория моментов

Сложение моментов. Коэффициенты Клебша-Гордана

В квантовой теории моменты являются операторами. Измерять момент как вектор в общем случае нельзя.

Пусть есть система, состоящая из двух подсистем 1 и 2. Состояние первой подсистемы характеризуется моментом количества движения $\hat{\vec{j}}_1$, второй подсистемы - $\hat{\vec{j}}_2$. В силу того, что момент является аддитивной наблюдаемой, то оператор суммарного момента:

$$\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{j}}_1 + \hat{\vec{j}}_2.$$

Если для первой подсистемы есть базис состояний $|j_1 m_1\rangle$, для второй подсистемы - $|j_2 m_2\rangle$, тогда сложение моментов предполагает, что можно построить базис в пространстве состояний всей системы с определенными значениями полного момента J^2и его проекции на ось z$J_z . j_1^2, j_2^2 -$ скаляры, соответственно будут коммутировать с полным оператором J.

Таким образом, можем построить полный базис с определенным значением квантовых чисел $|jm_j j_1 j_2\rangle$. С другой стороны базис в пространстве состояний объединенной системы можно строить из произведений базисных элементов состояний подсистем $|j_1 m_1\rangle \cdot |j_2 m_2\rangle$. Между этими двумя базисами полной системы должен существовать линейный переход:

$$|jm_j j_1 j_2\rangle = \sum_{m_1 m_2} C_{jm_j}^{m_1 m_2}(j_1 j_2)|j_1 m_1\rangle \cdot |j_2 m_2\rangle,$$

$C_{jm_j}^{m_1 m_2}(j_1 j_2) -$ *коэффициенты Клебша-Гордана.*

$$C_{jm_j}^{m_1 m_2}(j_1 j_2) = \langle jm_j j_1 j_2 | j_1 m_1 j_2 m_2\rangle.$$

$C_{jm_j}^{m_1 m_2}(j_1 j_2)$ отличен от нуля только при $\boldsymbol{m = m_1 + m_2} \Rightarrow \boldsymbol{j \in |j_1 - j_2|, \dots, j_1 + j_2}$с единичным шагом.

Пример 1:

Пусть в поле Нполный момент электрона $\hat{\vec{j}} = \hat{l} + \hat{s}$ - сумма орбитального и спинового моментов. Пусть $\phi_{nlm}(\vec{r}) -$ ВФ орбитального движения, $\chi_{m_s}\left(m_s = \pm\frac{1}{2}\right) -$ описывает состояние с определенными значениями S^2и S_z. Записать ψ_{njlm_j}, если $n = 3, l = 2, j = \frac{5}{2}, m_j = \frac{5}{2}$.

$$\psi_{njlm_j} = \sum_{mm_s} C_{jm_j}^{mm_s}\left(l\frac{1}{2}\right)\phi_{nlm}\chi_{m_s}$$

$$m_j = \frac{5}{2} = m + m_s = \left(m = -2, \dots, +2;\ \ m_s = -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\right) = 2 + \frac{1}{2} -$$

m_j максимально, это значение можно получить единственным способом, отличен от нуля единственный коэффициент Клебша-Гордана.

$$\psi_{3\frac{5}{2}2+\frac{5}{2}} = \phi_{32+2}(\vec{r})\chi_{+\frac{1}{2}} = \left(\chi_{+\frac{1}{2}} = \binom{1}{0}\right) = \binom{\phi_{32+2}}{0}.$$

Вывод:

$$C_{j_1+j_2,+j_1+j_2}^{+j_1+j_2}(j_1 j_2) = 1,$$

Остальные коэффициенты Клебша-Гордана равны нулю.

Как складывать моменты, если их больше чем 2? Правило в этом случае индуктивно (сначала складываем первые 2, затем прибавляем третий и так далее).

Правило сложения моментов определят связь базиса в пространстве состояний всей системы с базисами в пространствах состояний подсистем. Если в пространстве системы ее базис может быть построен из упорядоченных произведений пространств подсистем, то в линейной алгебре мы говорим о прямом произведении пространств.

Введем пространство(j_1), построенное как линейная оболочка базиса $|j_1 m_1\rangle \to (j_1), |j_2 m_2\rangle \to (j_2)$,то пространство, построенное как линейная оболочка $|j m_j j_1 j_2\rangle \to (j)$,то:

$$(j_1) \otimes (j_2) = \bigoplus_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} (j) -$$

прямое произведение двух пространств можем разложить в прямую сумму.

Пример 2:

$$\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{l}} + \hat{\vec{s}}_e + \hat{\vec{s}}_p, \qquad l = 2, s_e = s_p = \frac{1}{2}.$$

Пространство состояний всего атома водорода с учетом ядра может быть простроена следующим образом:

$$(2) \otimes \left(\frac{1}{2}\right) \otimes \left(\frac{1}{2}\right) = (2) \otimes \{(0) + (1)\} = (2) \oplus (1) \oplus (2) \oplus (3)$$

При $l = 2$ количество возможных состояний орбитального движения 5, количество спиновых состояний протона и электрона по 2. Всего независимых состояний у такой системы 20. Базис в пространстве состояний должен содержать 20 базисных элементов (5+3+5+7=20).

Так, возможные значения момента – 1, 2, 3.

Построение состояния с определенным моментом электронной оболочки гелия

Задача:

Пусть есть две частицы со спинами $\frac{1}{2}$. Полный спин системы:

$$\hat{\vec{S}} = \hat{\vec{s}}_1 + \hat{\vec{s}}_2, \quad \left(s_1 = s_2 = \frac{1}{2}\right).$$

Вычислить все коэффициенты Клебша-Гордана отличные от нуля, то есть построить полный ортонормированный базис состояний с определенным значением спина.

$$\psi = \phi\chi,$$

$$\chi = \chi^{(1)}\chi^{(2)},$$

$\chi^{(1)}$ – описывает спиновое состояние первой частицы, $\chi^{(2)}$ – спиновое состояние второй частицы.

$|SM_s\rangle$ – состояние с определенными значениями $\hat{\vec{S}}^2$ и $\hat{S}_z$.

$$|SM_s\rangle = \sum_{m_1 m_2} C_{SM_S}^{m_1 m_2} \left(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right) \chi_{m_1}\chi_{m_2}.$$

$$S = \begin{bmatrix} 0 & => M_S = 0 \\ 1 & => M_S = -1, 0, +1 \end{bmatrix}$$

Как мы видели, у нас всегда есть возможность явно построить состояния с максимальной (и минимальной) проекцией момента:

$$S = 1, \qquad M_S = +1 = m_1 + m_2 = +\frac{1}{2} + \frac{1}{2} =>$$

$$|1+1\rangle = C_{1+1}^{+\frac{1}{2}+\frac{1}{2}} \binom{1}{0}\binom{1}{0} => C_{1+1}^{+\frac{1}{2}+\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right) = 1 => |1+1\rangle = \binom{1}{0}\binom{1}{0}.$$

Ясно, что $|1-1\rangle$ так же можно набрать единственным способом =>

$$|1-1\rangle = \binom{0}{1}\binom{0}{1}, \qquad C_{1-1}^{-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right) = 1.$$

Для остальных векторов состояний алгоритм построения связан с повышающим и понижающим операторами.

$$\hat{S}_- = \hat{S}_x - i\hat{S}_y = \hat{s}_{1-} + \hat{s}_{2-}.$$

Вспомним:

$$\hat{j}_-|jm_j\rangle = \sqrt{(j+m_j)(j+1-m_j)}|jm_j - 1\rangle$$

$$\hat{S}_-|1+1\rangle = \sqrt{2}|1\ \ 0\rangle$$

$$|1\ \ 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{S}_-|1+1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{S}_{1-} + \hat{S}_{2-})\binom{1}{0}\binom{1}{0} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\binom{0}{1}\binom{1}{0} + \binom{1}{0}\binom{0}{1}\right\} =>$$

$$C^{+\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}_{1\,0}\left(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right) = C^{-\frac{1}{2}+\frac{1}{2}}_{1\,0}\left(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}.$$

Осталось построить состояние $|0\ \ 0\rangle$:

$$|0\ \ 0\rangle = (m_1 + m_2 = 0) = C^{+\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}_{0\,0}\binom{1}{0}\binom{0}{1} + C^{-\frac{1}{2}+\frac{1}{2}}_{0\,0}\binom{0}{1}\binom{1}{0} = \alpha\binom{1}{0}\binom{0}{1} + \beta\binom{0}{1}\binom{1}{0}.$$

Нормировка:

$$\||0\ \ 0\rangle\| = 1 \ \Rightarrow |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1.$$

Кроме того, базис ортонормированный:

$$\langle 0|1\ \ 0\rangle = 0 \ \Rightarrow \ \alpha\frac{1}{\sqrt{2}} + \beta\frac{1}{\sqrt{2}} = 0 \ \Rightarrow \ \beta = -\alpha \ \Rightarrow |\alpha| = \frac{1}{\sqrt{2}} -$$

можно выбрать $\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}} \Rightarrow \ \beta = -\frac{1}{\sqrt{2}} \Rightarrow$

$$|0\ \ 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\binom{1}{0}\binom{0}{1} - \binom{0}{1}\binom{1}{0}\right\},$$

$$C^{+\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}_{0\,0} = -C^{-\frac{1}{2}+\frac{1}{2}}_{0\,0} = \frac{1}{\sqrt{2}}.$$

Так, построение базиса завершено.

<u>Следствия:</u>

$$S = 1: \begin{cases} |1+1\rangle = \binom{1}{0}\binom{1}{0} \\ |1+1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\binom{1}{0}\binom{0}{1} + \binom{0}{1}\binom{1}{0}\right\} - \textit{триплет.} \\ |1-1\rangle = \binom{0}{1}\binom{0}{1} \end{cases}$$

Все три состояния триплета симметричны относительно перестановки 1 и 2 спинора:

$$\chi_{S=1}(s_1 s_2) = \chi_{S=1}(s_2 s_1).$$

$$S = 0\colon\ |0\ \ 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\binom{1}{0}\binom{0}{1} - \binom{0}{1}\binom{1}{0}\right\} - \textit{синглет}.$$

Синглетное состояние антисимметрично относительно перестановки 1 и 2 спинора:

$$\chi_{S=0}(s_1 s_2) = -\chi_{S=0}(s_2 s_1).$$

Или, объединяя выражения, получим:

$$\chi_S(s_1 s_2) = (-1)^{S+1}\chi_S(s_2 s_1).$$

Определим оператор перестановки спиновых переменных:

$$\hat{P}_S\colon\ \hat{P}_S\chi\,(s_1 s_2) = \chi\,(s_2 s_1)\ =>$$

$$\hat{P}_S\chi_S = (-1)^{S+1}\chi_S = \begin{cases} 1\chi_1 \\ -1\chi_0 \end{cases},$$

$$\hat{\vec{S}}^2\chi_S = S(S+1)\chi_S = \begin{cases} 2\chi_1 \\ 0\chi_0 \end{cases} =>$$

действия операторов $\hat{P}_S$ и $\hat{\vec{S}}^2 - 1$ совпадают на любой из базисных векторов. Так как совпадают действия на базисные вектора полного ортонормированного базиса, то совпадает действие этих операторов на любой вектор рассматриваемого пространства:

$$\hat{P}_S = \hat{\vec{S}}^2 - 1 = \left(\hat{\vec{s}}_1 + \hat{\vec{s}}_2\right)^2 - 1 = \hat{\vec{s}}_1^2 + 2\hat{\vec{s}}_1\hat{\vec{s}}_2 + \hat{\vec{s}}_2^2 - 1 = \frac{3}{4} + 2\hat{\vec{s}}_1\hat{\vec{s}}_2 + \frac{3}{4} - 1 = \frac{1}{2} + 2\hat{\vec{s}}_1\hat{\vec{s}}_2.$$

Полученный результат важен чисто алгебраически, пригодится в следующем семестре, когда перейдем к изучению многочастичных квантовых систем. Крайне важным оказывается требование симметрии относительно перестановки. Для частиц со спином $\frac{1}{2}$ существует уникальная возможность выразить оператор спиновых перестановок через спиновые операторы самих частиц:

$$S = \frac{1}{2}\colon\ \hat{P}_S = \frac{1}{2} + 2\hat{\vec{s}}_i\hat{\vec{s}}_j.$$

Есть еще одно полезное алгебраическое упражнение (из списка обязательных задач): через операторы $\hat{\vec{s}}_i\hat{\vec{s}}_j$ можно явным образом построить выражения для операторов проектирования на синглетные и триплетные состояния (любую

спиновую функцию можно разложить как сумму синглетных и триплетных – образуют полный ортонормированный базис).

Отражение тока в слабых распадах

Изучалось рождение бозонов в столкновениях протонов и антипротонов.

Протон состоит из кварков uud, антипротон - $\bar{u}\bar{u}\bar{d}$. Для рождения W^+должны столкнуться u и $\bar{d}$:

$$u_L\bar{d}_R \to W^+.$$

Массы кварков u и $\bar{d}$ много меньше массы W^+ бозона и соответственно энергий, при которых наблюдается явление. u и $\bar{d}$ ведут себя практически как ультрарелятивистские частицы.

Для ультрарелятивистских частиц со спином $\frac{1}{2}$ (таковыми являются кварки в этом столкновении) есть свойство. У таких частиц, участвующих в слабом взаимодействии (чувствительно к состоянию спиральности фермиона – взаимодействуют левый кварк и правый антикварк – спины сонаправлены):

$$S_{W_z} = S_{u_z} + s_{\bar{d}_z} = +1.$$

После W^+ должен распасться:

$$W^+ \to e^+ + \nu_e \;=>$$

В силу закона сохранения импульса спины позитрона и нейтрино сонаправлены, частицы ультрарелятивистские. У нейтрино спин направлен по импульсу, у позитрона – против импульса. Поэтому импульсы позитронов будут направлены против оси z.

До столкновения и слабых процессов положительно заряженные протоны летели по оси z. После слабого взаимодействия положительно заряженные позитроны летят против оси z. Происходит отражение электрического тока.

Семинар 10

Метод Вентцеля-Крамерса-Бриллюэна

Метод Вентцеля-Крамерса-Бриллюэна

Метод ВКБ – квазиклассический метод описания системы, у которой квантовые эффекты являются слабой поправкой по отношению к почти классическому поведению.

Пусть необходимо решить стационарную задачу:

$$\hat{H}\psi = E\psi.$$

Предлагается искать решение задачи в виде:

$$\psi = a \cdot e^{\frac{i}{\hbar}S},$$

При этом искать амплитудный множитель и фазу волны в виде формального разложения по степеням постоянной планка:

$$a = a_0 + \hbar a_1 + \hbar^2 a_2 + \cdots,$$

$$S = S_0 + \hbar S_1 + \hbar^2 S_2 + \cdots.$$

Для стационарного уравнения Шредингера в координатном представлении a, S–функции координаты.

Кроме того, в результате обнаруживается, что S_0 совпадает с функцией классического действия (удовлетворяет уравнению типа Гамильтона-Якоби). Рассмотрим простейший случай. Точечная частицамассы m движется в одномерном потенциале $U(x)$:

$$S_0 = \int p(x)dx\,, \qquad p(x) = \sqrt{2m\big(E - U(x)\big)};$$

$$a_0 = \frac{C}{\sqrt{p(x)}}.$$

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА

teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

Так, сущность метода ВКБ состоит в построении решения стационарного уравнения Шредингера в виде произведения амплитудного и фазового множителей с разложением по степеням $\hbar$.

Существуют *условия применимости метода ВКБ*. Для частиц в механике квантовые эффекты – это в первую очередь волновые эффекты (в классической механике частицы ведут себя как корпускулы). По аналогии с оптикой, волновые свойства проявляются как малая поправка тогда, когда от волновой оптики можем перейти к приближению геометрической оптики.

Так, метод ВКБ применим, когда:

1) длины волн много меньше характерных областей локализации частиц
$$\lambda \ll L;$$
2) длины волн меняются медленно:
$$\left|\frac{d\lambda}{dx}\right| \ll 1 \quad \left(\lambda \equiv \frac{\hbar}{p(x)}\right).$$

Главная проблема ВКБ приближения: как правило, не во всей области определения волновой функции выполняются условия применимости. Необходимо разбивать область определения на подобласти, искать решение в каждой подобласти и сшивать их. Существует много методов сшивки.

3 основных результата метода ВКБ:

1) Правило Бора-Зоммерфельда:

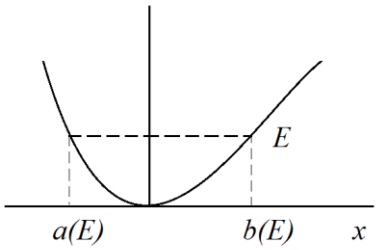

Рис. 10.1. Одномерная односвязная потенциальная яма

Для одномерной и односвязной потенциальной ямы (рис. 10.1) высоко лежащие $(n \gg 1)$ уровни энергии определяются как корни уравнения:

$$\frac{1}{\pi}\int_{a(E)}^{b(E)} dx\,\sqrt{2m\big(E-U(x)\big)} = \hbar\left[n+\gamma+o\left(\frac{1}{n}\right)\right],$$

$[a(E), b(E)]$ – границы классически допустимой области движения,

$\gamma = \gamma(a) + \gamma(b),\ \gamma(x) \equiv \begin{cases} \frac{1}{2}, & \text{"стенка"} \\ \frac{1}{4}, & \text{"точка поворота"} \\ 0, & \text{остальные случаи} \end{cases}$ – добавка, связанная с тем, что при отражении от стенки или точки поворота волна вероятности может испытывать фазовый сдвиг.

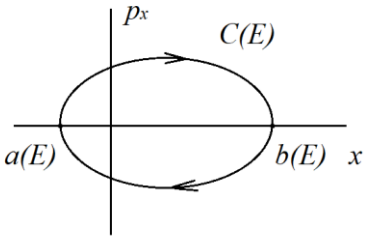

Рис. 10.2. Фазовая траектория для энергии E

При переходе к фазовому пространству (рис. 10.2) для одномерной задачи каждой энергии отвечает определенная замкнутая фазовая траектория $C(E)$ =>

$$\frac{1}{\pi}\int_{a(E)}^{b(E)} dx\sqrt{2m\big(E-U(x)\big)} = \frac{1}{2\pi}\oint_{C(E)} p_x dx.$$

В случае произвольной размерности стационарное состояние задается не одним значением энергии, а полным набором наблюдаемых, коммутирующих с энергией. У вполне интегрируемой системе число интегралов движения равно числу степеней свободы. Так, уже задаются не фазовые траектории, а фазовые поверхности в многомерном пространстве, получим систему уравнений:

$$\frac{1}{2\pi}\oint_{C_i} p_i dq_i = \hbar\left[n_i + \gamma_i + o\left(\frac{1}{n}\right)\right].$$

Для циклических координат:

$$\frac{1}{2\pi}\oint_{0}^{2\pi} d\varphi\ L_z = \hbar m.$$

2) Коэффициент прохождения через барьер:

$$T(E) \cong e^{-\frac{2}{\hbar}\int_a^b dx|p|},$$

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА

teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

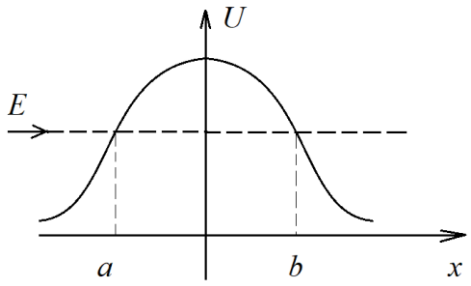

Рис. 10.3. Потенциальный барьер

a, b – границы классически запрещенной области (рис. 10.3),
$|p| = \sqrt{2m(U(x) - E)}$.

Формула для коэффициента прохождения через барьер грубая. Она дает хорошую оценку по порядку величины, но если аккуратно применять метод ВКБ, то может появиться предэкспоненциальный множитель, который близок к единице только для очень плавных барьеров. Формула применима только тогда, когда ширина барьера много больше характерной длины волны, модуль показателя экспоненты много больше 1, то есть коэффициент проницаемости мал.

3) Количество независимых квантовых состояний частицы, локализованной в области в координатно-импульсном пространстве:

$$\Delta N_{nl} = \frac{\Delta V_{\vec{r}} - \Delta V_{\vec{p}}}{(2\pi\hbar)^3}(2s+1).$$

Применимо при локализации в достаточно большой области. Речь идет о большом числе состояний.

Холодная электронная эмиссия

<u>Задача (из списка обязательных задач):</u>

Найти зависимость тока холодной эмиссии из металла от прилагаемого электрического поля.

При помещении металла в электрическое однородное поле E_0 за счет явления электростатической индукции вблизи металла поле искажается таким образом, что поверхность металла становится эквипотенциальной поверхностью. Соответственно силовые линии входят в металл и выходят из него под прямым углом (рис. 10.4). С одной стороны скапливается отрицательный заряд, с другой положительный, поле внутри металла равно нулю.

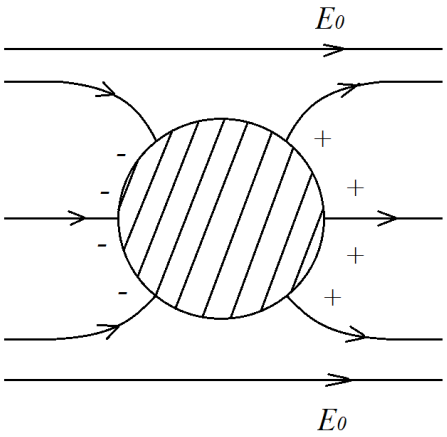

Рис. 10.4. Кусок металла в электрическом однородном поле

Если кусок металла макроскопический с точки зрения микромира (несколько мм), то решив электростатическую задачу, найдем поле вблизи границы металла в каждой точке.

Выделим малый кусок поверхности. С точки зрения электрона проводимости малый кусок поверхности макроскопического тела является практически плоскостью. Введем ось z, перпендикулярную границе раздела, оси x, y - в плоскости раздела (рис. 10.5).

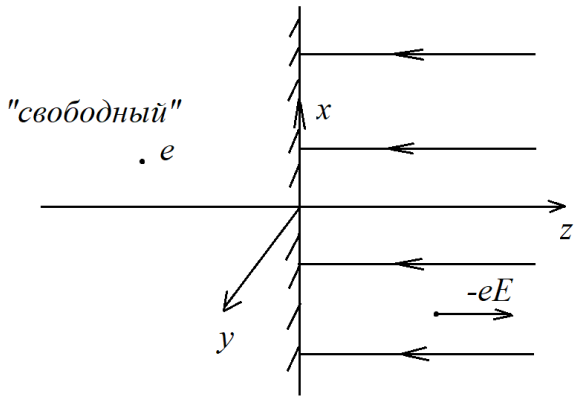

Рис. 10.5. Малый кусок поверхности металла в электрическом поле

Внутри металла на электрон никакие силы не действуют, он движется свободно. На электрон проводимости, вылетевший из металла, будет действовать постоянная сила $-eE$. Поле вблизи данного кусочка можем считать однородным и известным при заданном внешнем поле и заданной геометрии образца.

Внутри и снаружи металла электрон движется как свободный, но чтобы вылететь, электрону необходимо преодолеть потенциальный барьер, связанный с необходимостью преодоления притяжения решетки.

При $E = 0$ движение по оси z можем описать как движение в потенциале $U(z)$ (рис. 10.6), если потенциальную энергию электрона внутри металла примем за ноль, то снаружи $U = U_0$.

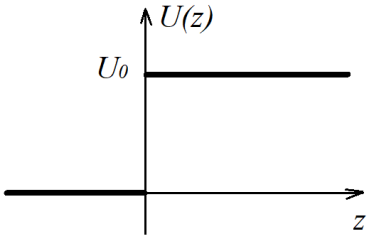

Рис. 10.6. Потенциал в отсутствии внешнего поля

При включении внешнего поля ($E \ll E_{\text{ат}}$ – на поверхности окажется небольшое количество электронов проводимости, концентрация электронов проводимости в металле практически не изменяется при включении поля)и нулевой потенциальной энергии электрона внутри металла внешний потенциал имеет линейную зависимость (рис. 10.7):

$$U(z) = U_0 - eEz.$$

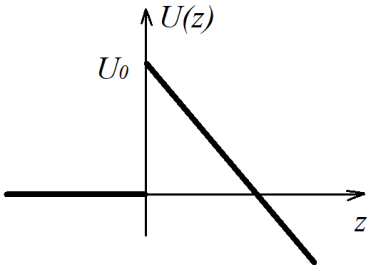

Рис. 10.7. Потенциал при включенном внешнем поле

Электроны проводимости являются фермионами, поэтому в каждом квантовом состоянии находится только один электрон. Полное число электронов проводимости в металле совпадает с количеством занятых квантовых состояний:

$$N_e = N_{\text{кв.сост.}} = \frac{V \cdot V_{\vec{p}}}{(2\pi\hbar)^3} \cdot 2.$$

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА

teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

При абсолютном нуле температуру электроны стремятся занять состояния с наименьшей возможной энергией. В результате окажутся заняты состояния с $|\vec{p}| \leq p_F$, p_F – максимальный допустимый импульс фермиона при нуле температуры в данной системе, *импульс Ферми*. Значит, объем, занятый электронами в импульсном пространстве:

$$V_p = \frac{4\pi}{3} p_F^3.$$

Концентрация электронов проводимости:

$$n_e = \frac{N}{V} = \frac{1}{4\pi^3\hbar^3}\frac{4\pi}{3}p_F^3 = \frac{p_F^3}{3\pi^2\hbar^3} \Rightarrow$$

$$p_F = \hbar(2\pi^2 n_e)^{\frac{1}{3}} \Rightarrow E = \frac{\vec{p}^2}{2m} \leq \mathcal{E}_F = \frac{p_F^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}(2\pi^2 n_e)^{\frac{2}{3}} \Rightarrow$$

электроны внутри металла будут занимать стационарные состояния с энергиями от нуля до *энергии Ферми* $\mathcal{E}_F$.

При $E = 0$ все электроны останутся внутри металла. При включении электрического поля становится возможно туннелирование.

Рассмотрим модель, в рамках которой внешнее поле не сильно меняет концентрацию свободных электронов и соответственно энергию Ферми. Но за счет туннелирования электронов через потенциальный барьер образуется ток холодной эмиссии.

Эмпирические параметры модели:

1) Работа выхода: $A_{\text{вых}} \equiv A$;
2) Концентрация электронов проводимости n_e.

n_e позволит рассчитать $\mathcal{E}_F$,$U_0 = A + \mathcal{E}_F$.

Плотность тока:

$$j_e = \langle e \cdot n_e \cdot v_z \rangle = e \cdot \int_0^{p_F} \frac{\pi(p_F^2 - p_z^2)dp_z}{(2\pi\hbar)^3} 2\frac{p_z}{m} \cdot T(\mathcal{E}_z),$$

где $\mathcal{E}_z = \frac{p_z^2}{2m}$. Последнее равенство для плотности тока получено путем рассмотрения бесконечно малого числа состояний, приходящегося на бесконечно малый интервал dp_z:

$$dn_e = V\frac{dV_{\vec{p}}}{(2\pi\hbar)^3}2.$$

Мы применяем квазиклассическое приближение для электронов проводимости, потому что они локализованы в большой области – куске металла макроскопических размеров, а внешнее поле слабое и не влияет на распределение электронов проводимости по энергиям внутри металла, то есть возникающий барьер широкий. Анализ показывает, что для реальных металлов при напряженностях электрического поля, не превышающих 10^6В/м барьер получается квазиклассическим с запасом (теряет квазиклассичность при приближении к 10^8В/м), тогда $T(\mathcal{E}_z)$ можно считать по квазиклассической формуле.

Окончательная формула для эмиссионного тока:

$$j_e = \frac{e}{4\pi^2\hbar^3 m}\int_0^{p_F} dp_z p_z(p_F^2 - p_z^2)\cdot e^{-\frac{2}{\hbar}\int_0^{z_m=\frac{U_0-\mathcal{E}_0}{eE}}\sqrt{2m(U_0-eE_z-\mathcal{E}_z)}dz}.$$

Учтем: $U_0 = A + \mathcal{E}_F$, $\frac{p_z dp_z}{m} = d\left(\frac{p_z^2}{2m}\right) = d\mathcal{E}_z$ =>

$$\int_0^{z_m=\frac{U_0-\mathcal{E}_0}{eE}} \sqrt{2m(A+\mathcal{E}_F-eE_z-\mathcal{E}_z)}dz = \sqrt{2m(A+\mathcal{E}_F-\mathcal{E}_z)}\int_0^{z_m=\frac{U_0-\mathcal{E}_0}{eE}}\left(1-\frac{z}{z_m}\right)^{\frac{1}{2}}dz =$$

$$= \sqrt{2m(A+\mathcal{E}_F-\mathcal{E}_z)}\left(-\frac{2}{3}\right)z_m\left(1-\frac{z}{z_m}\right)^{\frac{3}{2}}\Bigg|_0^{z_m} =$$

$$= \frac{2}{3}\sqrt{2meE}\left(\frac{(A+\mathcal{E}_F-\mathcal{E}_z)}{eE}\right)^{\frac{3}{2}} = \frac{2}{3}\frac{\sqrt{2m}}{eE}(A+\mathcal{E}_F-\mathcal{E}_z)^{\frac{3}{2}} =>$$

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

Введем следующие обозначения:

$$\frac{4\sqrt{2m}}{3\hbar e}A^{\frac{3}{2}} \equiv E_0 -$$

некая характерная напряженность электрического поля,

$$\frac{\mathcal{E}_F-\mathcal{E}_z}{A} = x =>$$

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

$$\boldsymbol{j_e = \frac{emA^2}{2\pi^2\hbar^3}\int_0^{\frac{\mathcal{E}_F}{A}} dx\, x \cdot \exp\left\{-\frac{E_0}{E}(1+x)^{\frac{3}{2}}\right\} -}$$

не берущийся в элементарных функциях интеграл. Чтобы нарисовать примерный график полученной функции, логично вычислить интеграл приближенно.

Посчитаем *плотность эмиссионного тока в приближении «плохого проводника»:*

$$\mathcal{E}_F \ll A \;=>$$

$$\frac{\mathcal{E}_F}{A} \ll 1 \;=>\; x \ll 1 \text{во всей области интегрирования } =>(1+x)^{\frac{3}{2}} \cong 1 \;=>$$

$$\boldsymbol{j_e} \cong \frac{emA^2}{2\pi^2\hbar^3} e^{-\frac{E_0}{E}} \int_0^{\frac{\mathcal{E}_F}{A}} dx\, x = \frac{emA^2}{2\pi^2\hbar^3} e^{-\frac{E_0}{E}} \frac{1}{2}\left(\frac{\mathcal{E}_F}{A}\right)^2 = \frac{em\mathcal{E}_F^2}{4\pi^2\hbar^3} e^{-\frac{E_0}{E}} = \boldsymbol{j_0 e^{-\frac{E_0}{E}}},$$

$j_0 = \frac{em\mathcal{E}_F^2}{4\pi^2\hbar^3}$ – эмиссионный ток насыщения холодной эмиссии, E_0 – значение напряженности, при котором ток становится заметным (рис. 10.8).

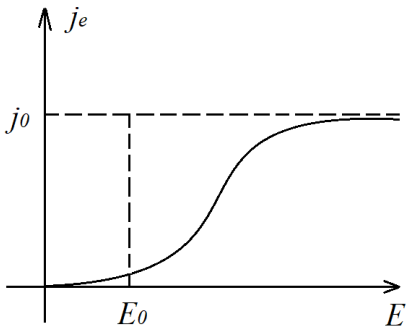

Рис. 10.8. График зависимости плотности эмиссионного тока от напряженности внешнего электрического поля

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

Семинар 11

Теория возмущений

Теория возмущений

Теория возмущений приводит к чрезвычайно сильному упрощению решения задач. Все сводится к арифметике.

Рассматриваем нужное уравнение:

$$\left(\hat{H}_0 + \hat{V}\right)\psi = E\psi$$

и вместо E и ψ подставляем предложенные ряды, считая, что возмущение достаточно мало, а решения нужного уравнения можно нумеровать теми же квантовыми числами n, α. Далее последовательно приравниваем справа и слева слагаемые одинакового по возмущению порядка. Получаем цепочку рекуррентных равенств, из которых алгебраическими выкладками получаем поправку нужного порядка.

Пусть есть задача про невозмущенный уровень, и мы работаем в первом порядке теории возмущений. Тогда в разложении оставляем только слагаемые первого порядка:

$$\left(\hat{H}_0 + \hat{V}\right)\left(\psi_n^{(0)} + \psi_n^{(1)}\right) = \left(E_n^{(0)} + E_n^{(1)}\right)\left(\psi_n^{(0)} + \psi_n^{(1)}\right).$$

В порядке $\sim V^0$получаем тождество.

В порядке $\sim V^1$: $\hat{V}\psi_n^{(0)} + \hat{V}\psi_n^{(1)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(1)} + E_n^{(1)}\psi_n^{(0)}$.

Решения невозмущенной задачи $\psi_n^{(0)}$ образуют полный ортонормированный базис, то:

$$\psi_n^{(1)} = \sum_{n\prime} C_{n\prime}\psi_{n\prime}^{(0)} \Rightarrow$$

$$\hat{V}\psi_n^{(0)} + \sum_{n\prime} C_{n\prime}\left(E_{n\prime}^{(0)} - E_n^{(0)}\right)\psi_{n\prime}^{(0)} = E_n^{(1)}\psi_n^{(0)} \Rightarrow$$

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА

teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

Домножим на $\psi_n^{(0)^*}$ и проинтегрируем (вычисляем соответствующий матричный элемент), тогда возникнет диагональный матричный элементоператора возмущения в базисе из невозмущенных функций V_{nn}:

$$V_{nn} + 0 = E_n^{(1)} \Rightarrow E_n^{(1)} = V_{nn} \Rightarrow$$

Получили поправку первого порядка для невырожденного уровня энергии – среднее значение энергии возмущения по невозмущенному состоянию.

Для построения волновой функции необходимо вычислить коэффициенты $C_{n'}$. Домножим на $\psi_{n'}^{(0)^*}$, $n' \neq n$ и проинтегрируем =>

$$V_{n'n} + C_{n'}\left(E_{n'}^{(0)} - E_n^{(0)}\right) = 0 \Rightarrow$$

$$C_{n'} = \frac{V_{n'n}}{E_{n'}^{(0)} - E_n^{(0)}},$$

$C_n = 0$ – из условия нормировки =>

$$\psi_n^{(1)} = \sum_{n' \neq n} \frac{V_{n'n}}{E_{n'}^{(0)} - E_n^{(0)}} \psi_{n'}^{(0)}.$$

Продолжая рассуждение для этого случая, можно обнаружить

$$E_n^{(2)} = \sum_{n' \neq n} \frac{|V_{n'n}|^2}{E_{n'}^{(0)} - E_n^{(0)}},$$

и так далее до любого порядка.

Если проследить за полученными выражениями, то можно обнаружить, что скорость сходимости в значительно степени регулируется параметром, который задает отношение модуля недиагональных матричных элементов оператора возмущения к расстоянию по энергии между уровнями невозмущенной системы. Быстрая сходимость ряда гарантируется выполнением условия:

$$|V_{n'n}| \ll \left|E_{n'}^{(0)} - E_n^{(0)}\right|,$$

то есть, *ограничена величина недиагональных матричных элементов оператора возмущения*.

Случай больших диагональных матричных элементов $|V_{nn}| \sim \left|E_n^{(0)}\right|$. Не является препятствием для применения теории возмущений. Тогда говорим, что неудачно было выбрано разбиение на $\hat{H}_0$ и $\hat{V}$. Разобьем $\hat{V}$:

$$\hat{V} = \hat{V}_0 + \hat{V}',$$

где $\hat{V}_0 = \begin{pmatrix} V_{11} & 0 & 0 \\ 0 & V_{22} & \\ 0 & & \ddots \end{pmatrix}$ – диагональная часть $\hat{V}$. Тогда можем расписать гамильтониан следующим образом:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}_0 + \hat{V}' = \hat{H}_0' + \hat{V}',$$

то есть теперь все диагональные элементы оператора возмущения равны нулю и не будут мешать построению рядов теории возмущений.

Главное условие применимости теории возмущений – малость недиагональных матричных элементов оператора возмущений в базисе из собственных векторов в невозмущенной задачи.

Теория возмущений – самый простой способ понять, как устроено решений.

Потенциал произвольной формы с выраженным минимумом

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

$U(x)$ – потенциал с одним ярко выраженным минимумом (рис. 11.1).

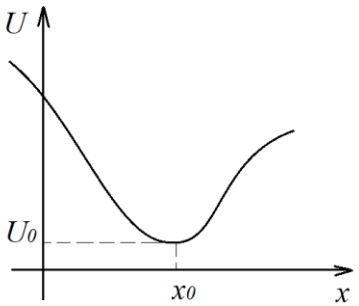

Рис. 11.1. Потенциал произвольной формы с одним ярко выражденным минимумом

Найти низколежащие уровни энергии.

Низколежащие колебания - колебания около точки равновесия. Малые колебания вблизи точки равновесия можно рассмотреть как колебания гармонического осциллятора. Задача гармонического осциллятора крайне удобна в качестве невозмущенной задачи.

Пусть $U(x) = U_0 + \frac{U_0''}{2}(x-x_0)^2 + \frac{U_0'''}{6}(x-x_0)^3 + \frac{U_0^{IV}}{24}(x-x_0)^4 + \cdots$

Перейдем от координаты x к $x - x_0 \equiv x$. Такой сдвиг не изменит оператора импульса. От энергии Eперейдем к $E - U_0 \equiv E$. Тогда гамильтониан запишется в виде:

$$\widehat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{U_0''}{2}\hat{x}^2 + \frac{U_0'''}{6}\hat{x}^3 + \frac{U_0^{IV}}{24}\hat{x}^4 + \cdots$$

$\frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{U_0''}{2}\hat{x}^2 = \widehat{H}_0$ – невозмущенный гамильтониан, остальное возмущение - $\frac{U_0'''}{6}\hat{x}^3 + \frac{U_0^{IV}}{24}\hat{x}^4 = \hat{V}$, прочими членами пренебрегаем. Задача действительно будет похожа на задачу гармонического осциллятора, если влияние членов возмущения будет быстро убывать с ростом степени. $\widehat{H}_0$ – гармоническое приближение, третий и четвертый члены – ангармоническая поправка.

Решение задачи для гамильтониана $\widehat{H}_0$:

$$\widehat{H}_0|n\rangle = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)|n\rangle = E_n^{(0)}|n\rangle, \qquad n = 0, 1, 2, \dots, \qquad S_n \equiv 1\ \forall n \Rightarrow$$

$$E_n^{(1)} = V_{nn} = \langle n|\alpha\hat{x}^3 + \beta\hat{x}^4|n\rangle = \left[\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^+)\right] = \beta\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2\langle n|(\hat{a} + \hat{a}^+)^4|n\rangle$$

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

$$= \begin{bmatrix} \hat{a}|k\rangle = \sqrt{k}|k-1\rangle \\ \hat{a}^+|k\rangle = \sqrt{k+1}|k+1\rangle \end{bmatrix} =$$

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА

teach-in ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

$$= \frac{\hbar^2\beta}{4m^2\omega^2}\{(n+1)(n+2) + (n+1)^2 + n(n+1) + n(n-1) + n^2 + n(n+1)\} =>$$

$$E_n^{(1)} = \frac{3\hbar^2\beta}{2m^2\omega^2}\left(n^2 + n + \frac{1}{2}\right).$$

В первом порядке теории возмущений выпал коэффициент α. Возможно слагаемое с α вносит больший вклад чем слагаемое с β, но оно работает только со второго порядка. Так, необходимо учесть вклад α во втором порядке теории возмущений, иначе ответ может подойти не для всех задач, в которых теория возмущений применима.

Поправка второго порядка:

$$E_n^{(2)} \cong \sum_{k\neq n} \frac{|\langle k|\alpha\hat{x}^3|n\rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}.$$

$$E_n^{(0)} - E_k^{(0)} = \hbar\omega(n-k),$$

$$\langle k|\hat{x}^3|n\rangle =$$

$$= \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{3}{2}}\left\langle k\middle|\hat{a}^3 + (\hat{a}^+\hat{a}\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}\hat{a}\hat{a}^+) + (\hat{a}\hat{a}^+\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a}^+\hat{a}) + \hat{a}^{+3}\middle|n\right\rangle =$$

$$= \delta_{k,n-3}\sqrt{n(n-1)(n-2)} + \delta_{k,n-1}3n^{\frac{3}{2}} + \delta_{k,n+1}3(n+1)^{\frac{3}{2}} +$$

$$+\delta_{k,n+3}\sqrt{(n+1)(n+1)(n+3)} =>$$

$$E_n^{(2)} \cong \frac{1}{\hbar\omega}\alpha^2\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^3\left\{\frac{n(n-1)(n-2)}{3} + \frac{9n^3}{1} + \frac{9(n+1)^3}{-1} + \frac{(n+1)(n+1)(n+3)}{-3}\right\}$$

$$== \frac{1}{\hbar\omega}\alpha^2\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^3\{-30n^2 - 30n - 11\} = -\frac{15\hbar^2\alpha^2}{4m^3\omega^4}\left(n^2 + n + \frac{11}{30}\right).$$

Таким образом, получаем выражение для энергии:

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

$$\frac{m\omega^2}{2} \equiv \frac{U_0''}{2} \Rightarrow \quad \omega \equiv \sqrt{\frac{U_0''}{m}},$$

$$\alpha \equiv \frac{U_0'''}{6}, \qquad \beta \equiv \frac{U_0^{IV}}{24}.$$

Очевидно, что если последующие поправки малы по сравнению с учтенными поправками от первой ангармоничности, то сами поправки от первой ангармоничности много меньше исходного выражения в гармоническом приближении. Получим условие применимости:

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

$$n^2+n+\frac{1}{2} \cong n^2+n+\frac{11}{30} \cong \left(n+\frac{1}{2}\right)^2 \Rightarrow$$

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

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

окончательная запись условия применимости.

Непертурбативные задачи

Существуют задачи, в которых теория возмущений не помогает. Такие задачи называют непертурбативными – задачи, которые в принципе нельзя решить по теории возмущений даже при наличии малого параметра в гамильтониане.

Пусть ответ зависти от малого параметра εкак $\sim e^{-1/\varepsilon}$. При $\varepsilon \to 0$ $e^{-1/\varepsilon}$стремится к нулю быстрее любой степени ε. Но разложение по степеням ε в ряд не даст результата.

Таких задач оказалось достаточно много, возник целый класс задач, где их назвали задачами нелинейной динамики, а непертурбативными задачами.

Поправки к энергии в случае вырождения

Рассмотрим поправки к энергии в первом порядке $\sim V^1$: $E_{n\alpha}^{(1)} = ?,\ S_n > 1$.

Задачу с вырождением можно считать пределом задачи без вырождения при энергетических уровнях, стремящихся друг к другу. В поправках к волновой функции первого порядка и к энергии во втором порядке в знаменателе стоит разность энергий, стремящаяся к нулю, соответственно получаем бесконечно большую поправку.

Если вырождения нет, то полный ортонормированный базис из невозмущенных функций строится единственным образом. Если есть вырождение, то есть подпространство состояний, относящихся к данному уровню энергии с размерностью S_n. То есть можно изменить базис так, чтобы диагонализировать конечномерную матрицу оператора возмущения в этом пространстве. Тогда все недиагональные элементы в этом правильном базисе занулятся, значит, без опасений можно устремлять знаменатель к нулю под нулевым числителем.

Таким образом, если найден правильный базис, то задача легко решается.

Из линейной алгебры помним, что если нужны поправки только первого порядка, то не обязательно строить правильный базис явным образом. Записываем характеристическое уравнение для матрицы в любом базисе и находим собственные значения этой матрицы (то, что будет на диагонали после диагонализации).

Таким образом, в этом случае поправки к энергии находим из характеристического уравнения для матрицы оператора возмущения в подпространстве из функций данного уровня энергии.

Пусть есть вырожденный уровень энергии, которому соответствует некий набор собственных функций:

$$E_n^{(0)} \to \psi_{n\alpha}^{(0)}, \qquad \alpha = 1, \dots, S_n.$$

Тогда можем построить матрицу:

$$V_{\alpha\beta}^{(n)} = \left\langle \psi_{n\alpha}^{(0)} \middle| \hat{V} \middle| \psi_{n\beta}^{(0)} \right\rangle,$$

$E^{(1)}$ – корни характеристического уравнения этой матрицы:

$$det \left\| V_{\alpha\beta}^{(n)} - E\delta_{\alpha\beta} \right\| = 0.$$

Для построения поправок второго порядка построение базиса необходимо. Кроме того, необходимо выяснить, что произойдет с задачей.

Алгебраическое уравнение степени S_n может иметь до S_n различных корней, некоторые корни могут быть кратными.

Если есть S_n различных корней, значит, есть S_n различных поправок. Так, исходно вырожденный уровень с кратностью вырождения S_n разбивается на S_n подуровней – *полное снятие вырождения*. Тогда уже со второго порядка работаем с невырожденным спектром.

Если есть кратные корни, то вырождение снимается частично.

Если корень один с кратностью S_n, то вырождение не снимается.

ФИЗИЧЕСКИЙ
ФАКУЛЬТЕТ
МГУ ИМЕНИ
М.В. ЛОМОНОСОВА

teach-in

ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ