



ФИЗИЧЕСКИЙ  
ФАКУЛЬТЕТ  
МГУ ИМЕНИ  
М.В. ЛОМОНОСОВА

*teach-in*  
ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

# КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ. ЧАСТЬ 1

ЕЛЮТИН  
ПАВЕЛ ВЯЧЕСЛАВОВИЧ

—  
ФИЗФАК МГУ

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

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

## Содержание

<b>1</b>	<b>Лекция 1. Основные постулаты</b>	<b>6</b>
1.1	Основные постулаты и понятия . . . . .	7
1.2	Полином Эрмита . . . . .	14
<b>2</b>	<b>Лекция 2. Операторы. Часть 1</b>	<b>16</b>
2.1	Операторы . . . . .	16
2.2	Простейшие операторы . . . . .	22
<b>3</b>	<b>Лекция 3. Построение функций</b>	<b>29</b>
3.1	Построение сложных функций . . . . .	29
3.2	Ограниченный оператор . . . . .	31
3.3	Постулат 3 . . . . .	38
<b>4</b>	<b>Лекция 4. Операторы. Часть 2</b>	<b>40</b>
4.1	Операторы . . . . .	44
4.2	Унитарные операторы . . . . .	50
<b>5</b>	<b>Лекция 5. Преобразования</b>	<b>52</b>
5.1	Повторение . . . . .	52
5.2	Операторы $\sigma_i$ матрицы Паули . . . . .	53
5.3	Описание системы двумерных векторов . . . . .	55
5.4	Определение собственных значений оператора . . . . .	56
5.5	Собственные значения оператора Фурье . . . . .	58
5.6	Операторы, где известно только их комутационное соотношение с эр- митово сопряженным . . . . .	60
<b>6</b>	<b>Лекция 6. Векторы состояния</b>	<b>62</b>
6.1	Основные постулаты модели квантовой теории . . . . .	62
6.2	Классическая модель и её квантовый аналог . . . . .	64
6.3	Классы операторов . . . . .	65
6.3.1	Частица во внешнем поле . . . . .	65
6.3.2	Системы из взаимодействующих частиц . . . . .	67
6.3.3	Частица в электромагнитном поле . . . . .	70
<b>7</b>	<b>Лекция 7. Квантовые системы</b>	<b>71</b>
7.1	Задачи четвертого постулата . . . . .	73

<b>8 Лекция 8. Решение задач с помощью уравнения Шредингера. Часть 1</b>	<b>75</b>
8.1 Типы гамильтонианов . . . . .	75
8.2 Задачи, связанные с исследованием временной эволюции . . . . .	77
8.3 Случай непрерывного спектра . . . . .	79
8.3.1 Вывод . . . . .	82
8.3.2 Описание постулатов Бора . . . . .	82
8.3.3 Повторение . . . . .	83
8.3.4 Уравнения Шредингера в координатном представлении . . . . .	83
<b>9 Лекция 9. Решение задач с помощью уравнения Шредингера Часть 2</b>	<b>85</b>
9.1 Гейзенберговская картина . . . . .	85
9.2 Вывод . . . . .	89
9.3 Разделение переменных . . . . .	89
9.4 Схема решения нестационарного уравнения Шредингера . . . . .	90
<b>10 Лекция 10. Исследование систем Часть 1</b>	<b>94</b>
10.1 Исследование дискретного спектра с малым Борновским параметром . . . . .	94
10.1.1 Вывод . . . . .	98
10.2 Задача о двух дельта-ямах . . . . .	98
<b>11 Лекция 11. Исследование систем. Часть 2</b>	<b>102</b>
11.1 Случай дискретного спектра в системах с малым Борновским параметром . . . . .	102
11.2 Случай дискретного спектра в системах с большим Борновским параметром . . . . .	102
11.3 Задача трёхмерного движения заряженной частицы в постоянном однородном магнитном поле . . . . .	106
11.4 Вывод . . . . .	111
<b>12 Лекция 12. Свойства решений одномерного стационарного уравнения Шредингера</b>	<b>113</b>
12.1 Случай дискретного спектра . . . . .	113
12.2 Аналогия с непрерывным спектром . . . . .	122
<b>13 Лекция 13. Задачи теории рассеяния</b>	<b>125</b>
13.1 Повторение . . . . .	125
13.2 Модели с малым и умеренным значением Борновского параметра . . . . .	125

<b>14 Лекция 14. Задача о прохождении потенциального барьера</b>	<b>136</b>
14.1 Сингулярные возмущения . . . . .	139
14.2 Вывод . . . . .	146
<b>15 Лекция 15. Задачи теории рассеяния</b>	<b>147</b>
15.1 Функция Грина . . . . .	147
15.2 Устройство волновой функции справа . . . . .	149
15.3 Устройство волновой функции слева . . . . .	149
15.4 Основные выводы . . . . .	152
15.5 Другие представления функции Грина . . . . .	152
15.6 Квазиклассическое приближение . . . . .	153
<b>16 Лекция 16. Правила квантования Бора-Зоммерфельда</b>	<b>156</b>
<b>17 Лекция 17. Квазиклассическое приближение (метод ВКБ)</b>	<b>169</b>
17.1 Правило квантования Бора-Зоммерфельда . . . . .	170
17.2 Формулы метода ВКБ . . . . .	176
17.3 Принцип соответствия . . . . .	177
<b>18 Лекция 18. Магнитный момент</b>	<b>179</b>
18.1 Задача о движении частицы в центральном поле . . . . .	179

## Лекция 1. Основные постулаты

Ранее была изображена схема устройства квантовой теории в пространстве параметров. Это единственная фундаментальная теория, охватывающая всё доступное в эксперименте пространство параметров, где ни разу не было обнаружено расхождения теории и измерений с точностью, которая превосходила бы точность теории или эксперимента. Эта обширность делает квантовую теорию неоднородной. Есть области, где характерное действие много больше постоянной Планка. Квантовые эффекты сильно заторможены. Пример — альфа-распад атомных ядер. При оценке характерные действия (интеграл от модуля импульса по подбарьерной области, действие второго сорта) будут в 30-40 раз превосходить  $\hbar$ .

Только квантовая механика даёт возможность рассчитать эту величину, но результат оказывается близким к классике. Классика утверждает, что распада не будет, а квантовая механика утверждает, что будет со временем полураспада 4 млрд. лет. Один угол пространства параметров, где значение больше  $\hbar$ , а второй, где много меньше  $\hbar$ , ультра квантовая область, где даже для грубой оценки нельзя пользоваться классической теорией. Здесь расхождения в квантовой и классической теории могут быть очень велики.

Необходимо уметь анализировать три области: квазиклассическую, существенно квантовую и ультра-квантовую, а также представлять, как результаты переходят друг в друга. Начнём с математического аппарата и связанных с ним основных терминов. Квантовая механика оторвана от повседневного опыта, поэтому её изучение представляет собой серьёзную трудность.

Д. Займан выделил в качестве первых двух ступеней в изучении квантовой теории следующие:

- 1) Переход от классической теории к квантовой;
- 2) Аппарат гильбертова пространства.

Первые учебники по квантовой теории: Д. И. Блохинцев «Основы квантовой механики», Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц «Квантовая механика, нерелятивистская теория», а на русский язык переведён стандартный учебник Л. Шиффа. Начиная с 70-х годов стали переходить на постулативный способ изложения, поскольку курс ядерной физики давал достаточные знания по старой квантовой теории.

Исторически было две квантовых теории. «Старая» построена Н. Бором. Она давала возможность описания спектров некоторых периодически движущихся в классике систем. Не имела своих уравнений движения, опиралась на классическую механику в её первоизданном виде и приделывала сверху определённые правила квантования, которые из классических решений вынимали только часть. Она имела принцип

соответствия в качестве одного из рабочих инструментов. Она была с 1913 по 1926 годам. С 1925 годов, начиная с работ В. Гейзенберга, появилась квантовая механика в том виде, в какой она предстаёт сегодня. Выяснилось, что она действительно повторяет результаты «старой» квантовой теории и с тех пор прогресс шёл безостановочно.

## Основные постулаты и понятия

**Постулат 1.** Состояние =  $|\psi\rangle$

Состоянию квантовой системы ставится в соответствие нормированный вектор гильбертова пространства.

**Постулат 2.** Величина =  $A$

Наблюдаемой физической величине ставится в соответствие линейный эрмитов оператор, действующий в гильбертовом пространстве.

1) *Квантовая теория* — динамическая теория, которая вертится вокруг следующей проблемы:

*если известно состояние системы  $S$  в момент  $t_1$ , то хотелось бы знать состояние системы в любой последующий момент времени  $t$ :*

$$S(t_1) \rightarrow S(t > t_1)$$

*Состояние* — это набор параметров, имеющих возможность меняться со временем. Пример динамической теории — классическая механика. Часто основной задачей указывают решение задачи о движении частицы во внешнем силовом поле. Пишется набор трёх уравнений Ньютона. Поясняется, что вектор  $\vec{r}(t_1)$  и  $\vec{v}(t_1)$  необходимо указать в начальный момент времени, тогда можно почти всегда решить задачу о движении и найти  $\vec{r}(t > t_1)$ , а дифференцируя найти  $\vec{v} = \dot{\vec{r}}$

Практичное определение: состояние меняется, необходимо узнать, как система из одного состояния переходит в другое или другие.

2) Развёрнутый термин — *физическая величина*. Параметры квантовой системы тоже являются физическими величинами. Например, электрон. Указывается его масса, он будет материальной точкой, будет двигаться, имеет электрический заряд, характеризует взаимодействие.  $m$ ,  $e$  — характеристики частицы (электрона). Эти величины физические. Их словарное определение заряда и массы начинаются со слов «скалярная физическая величина ...». Но эти величины *не снабжаются операторами*.

Если и может изменяться масса электрона со временем, то с очень малой скоростью, характерное время составляет больше, чем миллиарды лет, а значит в нашей

вселенной можно пренебрегать. Заряд электрона впервые измерен чуть более ста лет назад с точностью в несколько процентов. Границы, которые дают лабораторные наблюдения, очень размытые.

Есть особый класс физических величин — *наблюдаемые*. Сложилась такая номенклатура, заряд и масса такими не являются. Для квантовой механики сборник рекомендуемых терминов № 104 был выпущен Академией наук СССР в 1985 году. Там наблюдаемая была определена так:

*Принципиально наблюдаемая физическая величина (координата, импульс, энергия, угловой момент, спин и т. д.), которой в пространстве состояний сопоставляется некоторый самосопряжённый оператор — оператор этой наблюдаемой.*

Координата и импульс — пара канонически сопряженных переменных классической механики. Угловой момент — это обобщённый импульс, которому соответствует обобщённая угловая координата. То есть в класс наблюдаемых величин собраны те, что в классической механике являются динамическими переменными, причём канонического формализма. Энергия и сопряжённая координата  $t$ . Это энергетически-временной дуализм. Спин — угловой момент покоящейся частицы.

Наблюдаемые примерно соответствуют динамическим переменным гамильтонова формализма. Почему не назвать наблюдаемые динамическими переменными? В формализме квантовой теории наблюдаемые (операторы) от времени не зависят. Переменные должны зависеть от времени, но величина переменная, а изображающие её операторы от времени не зависят.

Операторы наблюдаемых несут информацию о значениях, которые эта наблюдаемая в данной системе может принимать. Векторы несут информацию о том, с какой вероятностью наблюдаемая будет принимать то или иное допустимое значение.

В классической динамической теории знание набора динамических переменных в задаче о движении (координат и импульсов как функции времени) полностью исчерпывает возможную информацию о состоянии системы и даёт возможность вычислить любые её характеристики (как её энергия меняется, что происходит с её угловым моментом, каковы корреляционные функции, координаты первой степени свободы импульса ...). Что бы не захотели, всё содержится в списке (файле), который содержит все значения всех координат и всех импульсов в разные моменты времени.

В квантовой теории полная информация об эволюции системы и о том, что можно захотеть измерить в отношении системы, разделена между двумя носителями: вектором состояния и оператором физической величины, причём в части задач достаточно исследовать свойства оператора.

Атом, атомные спектры, дискретный набор частот — одна из первых задач атомной физики: «Почему эти частоты таковы?» Эти частоты можно вычислить как разности собственных значений оператора энергии системы, описывающей этот атом, делённый на постоянную Планка. Откуда бы не вышел атом водорода, его гребёнка спектра будет одна и та же, каким бы методом его не готовили, каким бы ни было его состояние.

Возможные наборы физических величин зашиты в операторах, а векторы состояний нужны, чтобы описать особые случаи: что происходит с системой в ходе времени, как одно её состояние превращается в другое; сколько времени занимает переход из возбуждённого состояния в основное с испусканием соответствующего кванта.

В первом постулате отсутствует слово «каждый». Описание состояния вектором не есть наиболее общий способ. В частном случае, в классе чистых состояний, он охватывает примерно 95% от вводного тезауруса квантовой физики. Важно помнить, что и математике можно придать другую форму. Можно решать задачу  $r_0, v_0$  *единственная траектория*, а можно решать задачу *начальные значения координат импульсов распределены по какому-либо закону*.

Каждому значению наблюдаемой ставится в соответствие оператор. В квантовой теории используются операторы, которые никаким физическим величинам не ставятся в соответствие. Например, чтобы узнать, как происходят преобразования физических величин, векторов состояния, если сдвинули время на часах, поменяли ориентацию осей в пространстве, сдвинули систему отсчёта в пространстве. Всё это приводит к изменениям состояния операторов, то эти изменения сами даются операторами и нужно знать, как ими пользоваться для того, чтобы упрощать задачи.

Состояние обозначили знаком  $|\psi\rangle$ . Формальное определение гильбертова пространства — линейное пространство, в котором задано скалярное произведение. От этого пространства требовалось, чтобы у него была бесконечная размерность, но потом требование бесконечности исчезло. Будем работать с линейными пространствами любых размерностей.

Чтобы построить скалярное произведение, нужно иметь два экземпляра пространства, их элементы обозначаются символами  $\langle\psi|$ , были введены П. Дираком в 1939 году и получили обозначение, при котором левый вектор назывался *bra*, правый вектор назывался *ket*. (*bra(c)ket*)

Скалярное произведение  $S = \langle\psi|\phi\rangle$  есть скалярная конструкция, обладающая следующими свойствами:

- 1) Если поменять порядок, возникнет  $*$  — комплексно сопряжённая величина т. е.

$$\langle\psi|\phi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle^*;$$

2) Линейность. Если взять линейную комбинацию, сумму векторов, то в виде скалярного произведения получится сумма двух скалярных произведений, т. е.

$$\langle \psi + \psi' | \phi \rangle = \langle \psi | \phi \rangle + \langle \psi' | \phi \rangle;$$

3) Линейность. Если взять линейную комбинацию, сумму векторов, то в виде скалярного произведения получится сумма двух скалярных произведений, т. е.

$$\langle \psi | \phi + \phi' \rangle = \langle \psi | \phi \rangle + \langle \psi | \phi' \rangle;$$

4) Умножение на число. Если умножить вектор на число, то число вынесется из скалярного произведения

$$\langle \psi | a \phi \rangle = a \langle \psi | \phi \rangle;$$

5) Умножение на число. Если умножить вектор на число, то число вынесется из скалярного произведения

$$\langle b \psi | \phi \rangle = b^* \langle \psi | \phi \rangle.$$

Если эти условия выполнены, то пространство гильбертово.

**Пример 1.1.** Пространство  $C_2$ . Два числа  $\psi_1$  и  $\psi_2$  будут соответствовать кет-вектору  $|\psi\rangle = \begin{vmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{vmatrix}$ . Ему соответствует бра-вектор  $\langle\psi| = \begin{vmatrix} \psi_1^* & \psi_2^* \end{vmatrix}$ , а можно  $\langle\psi| = \begin{vmatrix} \psi_1^* & \psi_2^* \end{vmatrix}$ .

Скалярное произведение двух разных кет и бра будет записываться так:

$$\langle\phi|\psi\rangle = \phi_1^* \psi_1 + \phi_2^* \psi_2 \tag{1.1}$$

Приведём пример другого гильбертова пространства, место которого в квантовой механике исключительно.

**Пример 1.2.** Пространство  $L_2$ . Элементами множества являются комплексные функции  $\psi(x)$ . Для простоты будем думать, что функция от одной вещественной переменной и задана на интервале  $(-\infty; \infty)$ , а также убывает на больших значениях аргумента достаточно быстро, чтобы

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx < \infty$$

Эти технические требования при необходимости будем ослаблять.

**Определение 1.1.** Скалярное произведение равно интегралу от произведения кет-вектора на бра-вектор второй функции в виде интеграла

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi^*(x) \psi(x) dx \quad (1.2)$$

Заметим, что все пять условий выполняются. Обозначение элемента наводит на мысль, что это функция от переменной  $x$ . Элементы пространства  $L_2$  называются *функциями*. Все нужные интегралы сходятся, а расходящиеся выбрасываются. Все математические величины обрабатываются, а все осложняющие убираются.

**Норма** устанавливается с помощью скалярного произведения. Вектор умножается сам на себя, а результат есть квадрат нормы или

$$\|\psi\| = \sqrt{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (1.3)$$

**Определение 1.2.** Вектор, норма которого равна 1, называется **нормированным** или **единичным**.

**Определение 1.3.** Вектор, норма которого равна 0, называется **нулевым**.

**Определение 1.4.** Если скалярное произведение двух векторов  $\langle \psi | \varphi \rangle = 0$ , тогда векторы **ортогональны**.

Для определения длины вектора в гильбертовом пространстве вычислим норму разности двух векторов:

$$\|\varphi - \psi\|^2 = \|\varphi\|^2 - \langle \varphi | \psi \rangle - \langle \psi | \varphi \rangle + \|\psi\|^2$$

Если векторы нормированы, то первое и последнее слагаемые равны 1 :

$$\|\varphi - \psi\|^2 = 2 - S - S^* \quad (1.4)$$

Скалярное произведение — модуль одного вектора на модуль другого на косинус угла между ними. Если есть единичный вектор, то вращая его в пространстве можно изменить  $S$  от случая, когда это единица, до случая, когда единица с минусом, т.е. вектор развёрнут в противоположную сторону. Тогда расстояние между концами двух нормированных векторов в гильбертовом пространстве  $C_2$  находится в интервале

$$0 \leq \|\varphi - \psi\|^2 \leq 4$$

Теперь есть мера, чтобы определять близко или далеко друг к другу находятся два состояния в пространстве  $\mathcal{C}_2$ .

**Определение 1.5.** Состояния называются *близкими*, если между концами много меньше 1.

**Определение 1.6.** Состояния называются *далёкими*, если расстояние между концами порядка 1.

Больше двойки получиться не может.

Сейчас используется квадрат модуля скалярного произведения. Стали называть величину *Fidelity* («верность», «точность»), один из векторов состояния копирует другой

$$F = |S|^2 = |\langle \varphi | \psi \rangle|^2$$

Это не очень удобно, поскольку близкие векторы — те, у которых  $F$  близко к 1. В экспериментальных работах пишут  $Fidelity = 0,9997$ .

В двумерном пространстве два вектора:

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \psi_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \psi_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (1.5)$$

В гильбертовом пространстве может быть введён набор векторов, каждый из которых единичный, любая пара с неравными индексами обладает нулевым скалярным произведением, ортогональна. В дополнительном свойстве сумма равняется единичному оператору:

$$\sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| = \hat{I} \quad (1.6)$$

В гильбертовом пространстве задан *базис*, если есть набор попарно ортогональных векторов, обладающий этим свойством. В данном пространстве с размерностью  $n$  нет ненулевого вектора, который был бы ортогонален всем векторам базиса.

Если левой и правой частью подействовать на произвольный вектор  $\varphi$ , то будет получено равенство; каждый вектор базиса  $\psi_n$  будучи скалярно умноженным на  $\varphi$ , даст число  $a_n$ , оно в свою очередь будет умножено на тот же самый вектор,

потом эти векторы будут просуммированы; в результате получится тот же самый вектор  $\varphi$ , который в начале разбирался на части.

Векторы линейного пространства могут быть представлены в виде разложения по базису (пример выше). Приступая к решению задачи нужно начать с разложения вектора по базису и получить систему уравнений. Также можно произвольную функцию  $\varphi(x)$  представить в виде разложения на набор функций  $\varphi_n(x)$  если  $\varphi_n(x)$  образуют базис:

$$\varphi(x) = \sum a_n \varphi_n(x) \quad (1.7)$$

Необходимо, чтобы выполнялись следующие условия:

- 1) Функция была нормирована;
- 2) Разные функции были ортогональны друг другу;
- 3) Выполнялось условие полноты, т. е. свойство отсутствия ненулевого вектора ортогонального всем.

В системе  $C_2$  всего два базисных вектора: «первый» и «второй».

В пространстве  $L_2$  количество функций базиса бесконечно. Оно является гильбертовым. Нужно быть внимательным к системе обозначений. Р. Декарт, когда ввёл обозначение для числа  $a$  в степени  $b$  как  $a^b$ , изобразив  $b$  маленькой, сделал ошибку, которая до сих пор портит жизнь физикам, потому что основная информация о числе записана в виде плохо читаемого маленького иероглифа. Например, число  $\hbar = 1,054 \cdot 10^{-27}$ , главной является степень. Если начинать жить с начала, то стоило бы завести систему, где  $\hbar = -27^{1,054}$ .

В языках программирования потребовалась однострочная запись и были придуманы значки в языке Фортран — двойная звёздочка «\*\*», в языке Алгол — стрелка вверх «↑», Бейсик — шляпка «^». Последний прижился — в электронном письме будет написано  $\hbar = 1,054 \cdot 10^{\{-27\}}$ .

Одновременно, с появлением обозначений П. Дирака, завелось «правило»:  $\varphi_n(x)$  заменяют  $|n\rangle$  — вектором состояния  $n$ -ой функции данного базиса.

В записи  $|\varphi\rangle = \sum a_n |n\rangle$   $n$  — целое число. Когда работают с короткими базисами, например,  $C_2$ , пишут 0, 1 или 1, 2.

В двумерном пространстве произвольный вектор может быть записан в виде

$$C_2 \Rightarrow |f\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle$$

В определениях используется слово «линейный». В линейном пространстве можно приготовить состояние, которое будет устроено как суперпозиция двух векторов базиса с произвольными коэффициентами.

Рассматривать линейную суперпозицию двух состояний стали после того, как стало понятно, что коэффициенты  $\alpha$  и  $\beta$  сохраняются, если не трогать систему. Состояние продолжает быть тем же самым. Можно представить эту комбинацию как носитель информации.

Нормированное состояние системы с двумерным базисом в 1995 году благодаря Б. Шумахеру получило название *кубит*. «Кью» — означает, что объект квантовый, а «бит» — классическая единица. С другой стороны слово «кьюбит» звучит как английское *qubit* — древняя, средневековая мера длины локтя.

Как преобразуются векторы и какое количество информации хранится в квантовых системах, находящихся в суперпозиции?

Вопрос непростой, поскольку видно, что у кубита четыре вещественных параметра: действительная часть  $\alpha$ , действительная часть  $\beta$ , мнимая часть  $\alpha$ , мнимая часть  $\beta$ . А также условие нормировки, которое говорит:  $|\alpha| + |\beta| = 1$ . Следовательно, данное состояние в форме кубита несёт в себе три вещественных параметра.

Сколько бит можно передать с помощью одного кубита? Это вопрос, на который можно будет взглянуть в будущем.

На примере соотношения (1.5) можно построить базисы в любом конечномерном пространстве. Например, в пространстве

$$C_3 = \begin{pmatrix} |1\rangle & |0\rangle & |0\rangle \\ |0\rangle & |1\rangle & |0\rangle \\ |0\rangle & |0\rangle & |1\rangle \end{pmatrix}$$

Для работы в  $L_2$  необходима система из бесконечного числа функций, обладающая свойствами:  $\langle m|n\rangle = \delta_{mn}$ , где  $\delta$  — символ Кронекера; разные функции базиса ортогональны друг другу, одинаковые функции имеют единичную длину и второе условие  $\sum |n\rangle\langle n| = I$ .

## Полином Эрмита

Чаще всего нужны функции Эрмита, где конструкция состоит из произведения нормировочного коэффициента на экспоненту и полином Эрмита:

$$\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} e^{-x^2/2} H_n(x), \quad (1.8)$$

где полином Эрмита получается дифференцированием экспоненты  $n$  раз:

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}$$

Функция устроена как убывающая гауссиана, умноженная на полином. В наглядных образах это  $H_0 = 1$ ,  $H_1 = 2x$ ,  $H_2 = 4x^2 - 2$ , как показано (Рис. 1.1).

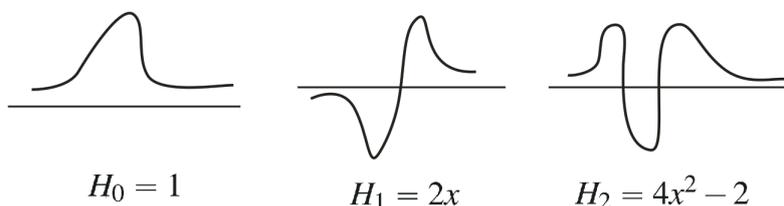


Рис. 1.1. Примеры графиков  $H_0, H_1, H_2$

В общем случае все функции Эрмита с чётными  $n$  — чётны, с нечётными  $n$  — нечётны. Можно показать, что функция  $H_n(x)$  при конечных значениях имеет  $n$  нулей. При любой ширине можно любую функцию представить как

$$\forall \psi(x) = \sum a_n \varphi_n(x)$$

Все локальные функции могут быть представлены с помощью небольшого числа функций базиса.

Если система должна представляться разложением по бесконечному числу функций базиса, достаточно взять небольшое число слагаемых. Все компактные функции похожи друг на друга.

При конечной области локализации базисом является набор тригонометрических функций на (Рис. 1.2), по которому осуществляется разложение Фурье.

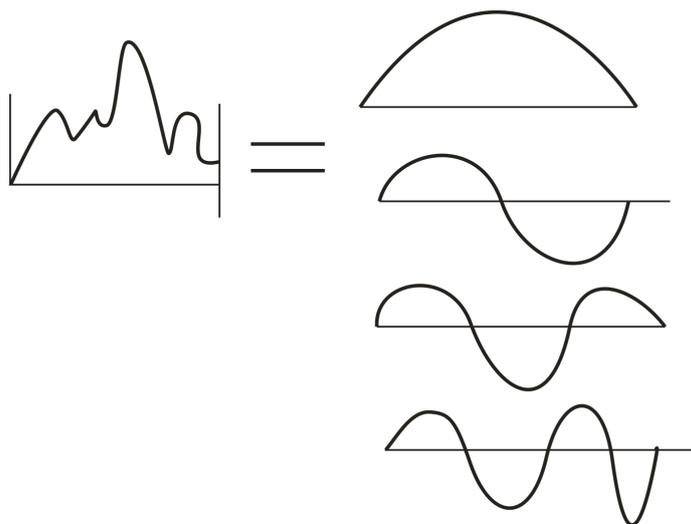


Рис. 1.2. Пример базиса конечной области локализации

## Лекция 2. Операторы. Часть 1

Рассмотрим два первых постулата квантовой теории.

**Постулат 1.** Состоянию будем ставить в соответствие нормированный вектор гильбертова пространства  $|\psi\rangle$ :

$$\text{Состояние} \rightarrow |\psi\rangle$$

Под *гильбертовым пространством* подразумевается пространство, в котором есть скалярное произведение, базис. *Базис* – такой набор векторов, что любой вектор пространства может быть представлен как линейная комбинация векторов базиса.

В пространстве роль базиса играет набор функций Эрмита. Это нормированные функции, представляющие собой произведение полинома на гауссиану  $e^{-\frac{x^2}{2}}$ . С другой стороны, это собственная функция оператора энергии для гармонического осциллятора. Гармонический осциллятор – маркированная простотой модель, а оператор, который работает как генератор базиса, – оператор энергии.

Комбинация из нескольких функций базиса создает представление о любой функции пространства. Например, функция Гаусса, у которой в 2 раза увеличена ширина, и функция Гаусса, которая смещена от начала координат на единицу.

### Операторы

**Постулат 2.** Любой физической, наблюдаемой величине ставится в соответствие линейный эрмитов оператор в гильбертовом пространстве, действующий на вектор состояния той же системы:

$$\text{Величина} \rightarrow \hat{L}$$

Существует большой набор пространств. Он начинается с пространства  $C_2$ , в котором векторы – столбики из двух чисел. Другие пространства создаются по степени увеличения векторов. В итоге создается конечный, счетный базис пространства  $L_2$ , в котором можно описывать свойства функций одной переменной.

Под *оператором* подразумевается следующее

$$\hat{L}|\psi\rangle = |\phi\rangle$$

Таким образом, *оператор* – это то, что превращает один из векторов в другой.

Любой физической величине ставится в соответствие линейный оператор:

$$\hat{L}(a\psi_1 + b\psi_2) = a\hat{L}\psi_1 + b\hat{L}\psi_2$$

Уравнения движения можно представить как линейные уравнения. Но любое линейное уравнение можно представить как нелинейное. Обратное невозможно. Поэтому упрощается задача по нахождению корня уравнения.

Для получения линейного уравнения и дальнейшего его решения нужно использовать операторы. Рассмотрим следующие операторы:

- 1) Оператор, который завязан на идее состояния гильбертова пространства скалярного произведения. Такой оператор можно записать следующим образом:

$$\begin{aligned}\hat{P} &= |\psi\rangle\langle\psi| \\ \hat{P}|\varphi\rangle &= |\psi\rangle(\langle\psi|\varphi\rangle) \\ S &= \langle\psi|\varphi\rangle\end{aligned}$$

На какой бы вектор оператор не применим, окажется, что в результате вектор  $|\psi\rangle$  будет направлен вдоль ket-вектора. Скалярное произведение может изменяться, так как это комплексная величина, по модулю не превосходящая единицы.

Таким образом, из вектора  $|\varphi\rangle$  выделяем компоненту, которая будет направлена вдоль вектора  $|\psi\rangle$ . Поэтому оператор  $\hat{P}$  назовем *проекционным*.

Размерность пространства варьируется от 2 до бесконечности. Идея проектирования использует абстрактную алгебру, поэтому одинаково применима к пространствам всех размерностей.

- 2) Рассмотрим пространство  $C_2$ .

Вектор базиса можно представить в следующем виде:

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

Таким образом, вектор – это столбик из двух комплексных чисел  $\alpha, \beta$ . А линейный оператор – матрица вида

$$\hat{L} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix},$$

где все числа  $a, b, c, d$  тоже являются комплексными.

Существует правило умножения матриц: при перемножении двух матриц строка умножается на столбец. Из него можно сделать вывод, что свойством оператора будет линейность.

3) Рассмотрим пространство  $L_2$ .

Вектор базиса можно представить в качестве функции вещественной переменной  $\psi(x)$ .

Изобразим оператор, который действует на волновую функцию  $\psi(x)$ :

$$\hat{L}\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} L(x, \xi) \psi(\xi) d\xi = |\phi(x) \rangle$$

$L(x, \xi)$  – ядро

Для получения изображения функции, создаваемой оператором, нужно умножить функцию  $\psi(x)$  на функцию двух переменных (ядро) и вычислить интеграл, зная, что он сходится.

Физическая и геометрическая суть оператора состоит в следующем. В нем присутствует половина, которая работает на ту функцию, которая проектируется, а вторая – на которую производится умножение.

$$L(x, \xi) = \varphi(x)\varphi^*(\xi)$$
$$\hat{L}\psi(x) = \varphi(x) \int \varphi^*(\xi)\psi(\xi)d\xi$$
$$\int \varphi^*(\xi)\psi(\xi)d\xi = S$$

Таким образом, можно построить проекционный оператор  $L(x, \xi)$  в пространстве  $L_2$ .

4) Существует единичный оператор  $\hat{I}$ .

$$\hat{I} = \sum_n |n\rangle\langle n|$$

Суть базиса: если есть базис в пространстве, то сумма проекционных операторов, связанных с каждым вектором базиса, представляет собой единичный оператор.

Под *единичным оператором* подразумевается

$$\hat{I}|\psi\rangle = |\psi\rangle$$

То есть, это оператор, действуя на любую функцию гильбертова пространства  $|\psi\rangle$ , оставляет ее неизменной.

Единичный оператор выступает в качестве критерия условия полноты пространства. Можно превратить вектор в сумму векторов базиса, вести расчеты с таким представлением и в конце сложить решения для отдельных проекций. В результате получится решение исходной задачи.

В конечномерном пространстве единичный оператор будет выглядеть следующим образом:

$$\hat{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & \dots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \dots \end{pmatrix}$$

В пространстве  $L_2$  единичный оператор будет выглядеть по-другому. Введем ядро, умножив которое на любую функцию и проинтегрировав, получили первоначальную функцию.

$$\hat{I}\psi(x) = \int \delta(x - \xi)\psi(\xi)d\xi = \psi(x)$$

Таким образом, получили запись для единичного оператора. В данном случае  $\delta(x - \xi)$  – ядро единичного оператора в пространстве  $L_2$  в интегральной форме. Функция представляет собой результат выполнения суммы конечного числа операций над значением аргумента, вычисление трансцендентных функций по табличным данным и других. Относится к классу обобщенных дельта-функций.

Существует математический подход. Рассматриваем функцию, представляющую собой элемент некоторого семейства, параметр нулевой функции этого семейства. В дальнейшем производим вычисления интеграла при конечных значениях параметра и устремляем его к нулю. В результате можно получить следующее изображение:

Пик сужается, вырастая по высоте. Выполняется следующее правило:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \frac{\varepsilon}{\chi^2 + \varepsilon^2}$$

$$\psi(x) \equiv 1$$

$$\hat{I}\psi(x) = \int \delta(x - \xi)\psi(\xi)d\xi = \psi(x) = 1$$

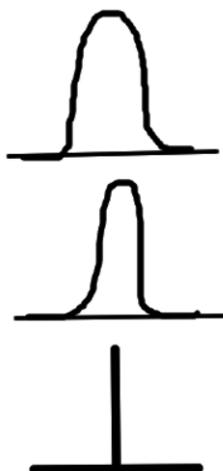


Рис. 2.1. Изображение функции семейства

Интегральные операторы используются при доказательстве теорем, но они не часто используются для решения задач. Встречается следующая запись ядра:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{ixy} \psi(y) dy$$

Тогда действие оператора на функцию:

$$\hat{F}\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ixy} \psi(y) dy$$

Данная формула определяет преобразование Фурье. Роль: представить колебания как функцию времени в форме суперпозиции спектров гармонических процессов. Таким образом, можно увидеть, какие частоты представлены в заданном законе движения. Например, возможно определение спектра излучения электрона, движущегося в кулоновском поле тяжелого потенциального центра протона.

Существует два эквивалентных описания движения: пространственная и спектральная картина. Являются эквивалентными математически, но экспериментально они разные.

Также оператор Фурье осуществляет преобразование перехода между двумя способами описания состояния системы. Один – аналог описания пространства, другой – Фурье-сопряженный ему аналог импульсного описания. Тогда импульс – это не канонически сопряженная величина, а характеристика описания, характеризующаяся описанием Фурье преобразования.

Таким образом, совершив Фурье преобразование и сделав его в обратную сторону, происходит переход от частоты обратно к координате. В итоге получаем исходную функцию. Произведение оператора Фурье на его обратный оператор представляет собой единичный оператор. Тогда получаем соотношение:

$$\delta(x, y) = \frac{1}{2\pi} \int e^{ixy} dy$$

Физической величине сопоставляется линейный эрмитов оператор. Эрмитов оператор – это тот самосопряженный оператор, который при перестановке откладок, в которых вычисляется матричный элемент, превращается в комплексно-сопряженное выражение

$$\hat{L}|\psi\rangle = |\varphi\rangle$$

Часто встречается следующая конструкция:

$$\langle \Theta | \hat{L} | \psi \rangle$$

Это число, которое не лежит ни в каком пространстве. Представляет собой скалярное произведение векторов  $\langle \Theta |$  и  $|\hat{L}|\psi\rangle$ . Число может быть комплексным, по модулю любым.

При изображении зиккурата Займана говорили, что информация о состоянии оказывается расщепленной между двумя математическими структурами: векторами состояния и операторами. Операторы отвечают за то, какие значения могут быть у физической величины (диапазон). С помощью матричных элементов производится определение точных значений. Матричный элемент соединяет в себе характеристики состояния и оператора.

Таким образом, эрмитов оператор – это оператор, для которого выполняется равенство

$$\langle \psi | \hat{L} | \phi \rangle = (\langle \phi | \hat{L}^+ | \psi \rangle)^*$$

Для любого оператора  $\hat{L}$  можно найти оператор  $\hat{L}^+$ , который удовлетворяет соотношению выше. Оператор  $\hat{L}^+$  называется эрмитово сопряженным. Если выполняется условие

$$\hat{L} = \hat{L}^+$$

то оператор будет эрмитово самосопряженным.

Если работает в пространстве  $C_2$  или  $C_1$  ( $n$ -мерном, комплексном, эрмитовом пространстве), должны выполняться соотношения для матричных элементов

$$L_{mn} = L_{nm}^*$$

Матричные элементы должны быть

$$\hat{L} = \begin{vmatrix} p & q \\ q^* & r \end{vmatrix},$$

где диагональные  $p, r$  – вещественные элементы, а недиагональные  $q, q^*$  при перемене индексов при транспонировании должны переходить в комплексно сопряженные.

Рассмотрим перенос математического свойства для матричных элементов в пространстве  $C_2$  в пространство  $L_2$ . В дискретном пространстве при перемене векторов, при которых вычисляется матричный элемент, должно получиться комплексное сопряжение. В пространстве  $L_2$  ядро должно обладать свойством:

$$L^+(x, \xi) = L(\xi, x)$$

Оператор Фурье является эрмитовым. При перестановке параметров  $x, y$  выражение не поменяется, но показатель экспоненты станет отрицательным. Например, гауссовы функции  $e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}$  и лоренцевы функции  $\frac{c}{\pi} \frac{\epsilon}{\chi^2 + \epsilon^2}$ . Для них можно вычислить Фурье-интегралы.

Определим простейшие операторы в пространстве  $L_2$  и покажем их принадлежность к классу эрмитовых.

## Простейшие операторы

Среди использующихся инструментов важную роль играют простейшие операторы. Например, оператор координаты

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

Геометрически изображен на (Рис. 3.1)

Определим, является ли оператор координаты эрмитовым.

$$\int \varphi^*(x)x\psi(x)dx = \left( \int \psi^*(x)x^* \varphi(x)dx \right)^*$$
$$\hat{x}^+ = \hat{x}$$

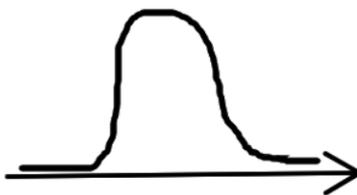


Рис. 2.2. Геометрическое изображение простейшего оператора

Таким образом, оператор координаты является эрмитовым. Он попадает в класс, который задается вторым постулатом. Фурье преобразование содержит такой элемент, когда дифференцируем величину, умножаем Фурье образ на независимую переменную, частоту.

Рассмотрим оператор дифференцирования  $\hat{d}$  такой, что выполняется следующее условие

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

Геометрически изображен на (Рис. 2.3).

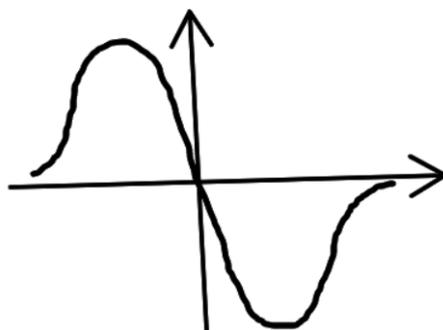


Рис. 2.3. Геометрическое изображение простейшего оператора

Определим, является ли оператор дифференцирования эрмитовым.

$$\begin{aligned} \langle \varphi | \hat{d} \psi \rangle &= \int \varphi^*(x) \frac{d\psi}{dx} dx = \\ &= - \int \psi^*(x) \frac{d\varphi}{dx} dx \end{aligned}$$

Знак минус берется после интегрирования по частям. И в итоге получаем следующее условие:

$$\hat{d}^+ = -\hat{d}$$

Таким образом, оператор дифференцирования не является эрмитовым. Если взять оператор вида

$$\begin{aligned}\hat{k} &= i\hat{d} \\ \hat{k}^+ &= (-i)(\hat{d}^+) = -i(-\hat{d}) = i\hat{d} = \hat{k} \\ \hat{k} &= \hat{k}^+\end{aligned}$$

Оператор  $\hat{k}$  – эрмитово самосопряженный оператор, который несет в себе блок ядра дифференцирования и мнимую константу. Блок операторов

$$\hat{x}, \hat{k} = -i \frac{d}{dx}$$

составляет набор элементов, из которого образуются основные уравнения движения. Оператор указывает на возможности определенных значений величин. Это создается через свойства спектра, собственных значений и чисел, соответствующих решению уравнения

$$\hat{L}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$$

Если вектор  $|\psi\rangle$  является нормированным и выполняется уравнение, то  $\psi$  будет собственным вектором, а  $\lambda$  – собственным значением оператора  $\hat{L}$ .

Эрмитовость вводим для того, чтобы объяснить следующие условия:

- 1) Собственные значения эрмитовых операторов являются вещественными.

Пусть

$$\langle \psi | \hat{L} | \psi \rangle = \lambda \langle \psi | \psi \rangle =$$

В левой части уравнения находится среднее значение оператора по вектору состояния  $\psi$ . Поскольку оператор эрмитов, действие вектора – это равносильно вычислению среднего значения

$$\begin{aligned}\langle \psi | \hat{L}^+ | \psi \rangle &= \lambda \langle \psi | \psi \rangle \\ &= (\langle \psi | \hat{L} | \psi \rangle)^* = \lambda^* \langle \psi | \psi \rangle \\ \lambda &= \lambda^*\end{aligned}$$

Рассматриваем математические конструкции, в которых собственные значения действительные. Из этого вытекает, что в результате однократного измерения определяется нужная и единственная величина.

2) Если эрмитов оператор имеет две собственных функции, относящиеся к двум различным собственным значениям, то функции будут ортогональны.

$$\hat{L}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$$

$$\hat{L}|\varphi\rangle = \mu|\varphi\rangle$$

$$(\lambda - \mu)\langle\psi|\varphi\rangle = 0$$

$$\lambda - \mu \neq 0$$

$$\langle\psi|\varphi\rangle = 0 \text{ – условие ортогональности}$$

Вектор состояния может быть представлен как совокупность вектора базиса и всех векторов с разными индексами, ортогональных друг другу. Базис – такой набор векторов, в котором длины всех векторов равны единице.

Если у эрмитова оператора все собственные значения различны, то из его собственных функций можно построить базис.

Таким образом, эрмитовы операторы рожают базисы.

Рассмотрим, если одному и тому же собственному значению принадлежат разные функции.

$$\hat{L}|\psi_1\rangle = \lambda|\psi_1\rangle$$

$$\hat{L}|\psi_2\rangle = \lambda|\psi_2\rangle$$

Можно сделать из функций  $\psi_1$  и  $\psi_2$  пару ортогональных функций:

$$|\varphi_1\rangle = |\psi_1\rangle$$

$$|\varphi_2\rangle = |\psi_1\rangle + \alpha|\psi_2\rangle$$

Так как оператор  $\hat{L}$  линейный, то суммы функций  $\psi_1$  и  $\psi_2$  тоже будут обладать собственными значениями  $\lambda$ . Но введя параметр  $\alpha$ , можно потребовать, чтобы скалярное произведение функций  $\varphi_1$  и  $\varphi_2$  было равно нулю

$$\langle\psi_1|\varphi_1\rangle + \alpha\langle\psi_1|\psi_2\rangle = 0$$

$$\alpha = \frac{-\langle\psi_1|\psi_1\rangle}{\langle\psi_1|\psi_2\rangle}$$

Получилось линейное уравнение. Значение  $\alpha$  будет единственное и такое, что функции  $\varphi_1$  и  $\varphi_2$  удовлетворяют условию

$$\langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle = 0$$

Если таких функций больше, например три, то

$$|\varphi_2\rangle = |\psi_1\rangle + \alpha' |\psi_2\rangle + \beta |\psi_3\rangle$$

Потребуем, чтобы функция  $\varphi_3$  была ортогональна к  $\varphi_1$  и  $\varphi_2$ . Получатся два уравнения, которые будут иметь единственное решение для  $\alpha'$  и  $\beta$ .

Эрмитову оператору свойственно порождать базис, то есть ортогональную систему функций единичной длины. Построение проводят с помощью ортогонализации по Шмидту.

Задачи о том, как определяются собственные значения операторов, заданных матрицами конечной размерности, решаются следующим образом. Пусть есть матрица оператора  $\hat{L}$

$$\hat{L} = \begin{vmatrix} \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \end{vmatrix}$$

Записывается система уравнение, получая произведение числа, единичного вектора  $\hat{I}$  на столбик. Переносим правую часть влево, получая однородную систему линейных уравнений. Чтобы она имела нетривиальное решение, должно выполняться условие

$$\text{Det}(\hat{L} - \lambda \hat{I}) = 0$$

Пусть есть пространство  $C_2$

$$\hat{L} = \begin{vmatrix} p & q \\ q^* & r \end{vmatrix}$$

Матрица имеет вид

$$\hat{L} = \begin{pmatrix} p - \lambda & q \\ q^* & r - \lambda \end{pmatrix}$$

Определитель для него будет иметь вид

$$\text{Det} = (p - \lambda)(r - \lambda) - |q|^2 = 0$$

$$\lambda^2 - \lambda(p+r) + pr - |q|^2 = 0$$
$$\lambda_{1,2} = \frac{p+r}{2} + \sqrt{\left(\frac{p+r}{2}\right)^2 - pr + |q|^2} = \frac{p+r}{2} + \sqrt{\left(\frac{p-r}{2}\right)^2 + |q|^2}$$

Тем самым показали решение простейшей задачи. Задача позволяет определить свойства спектра при изменении параметров матрицы  $\hat{L}$ .

Пусть  $q = 0$ , тогда

$$\begin{vmatrix} p & 0 \\ 0 & r \end{vmatrix} \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} p \\ 0 \end{vmatrix} = p \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \end{vmatrix}$$

Таким образом

$$\lambda_1 = p$$

$$\lambda_2 = r$$

Если  $p \neq r$ , то

$$|\psi_1\rangle = \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \end{vmatrix}$$
$$|\psi_2\rangle = \begin{vmatrix} 0 \\ 1 \end{vmatrix}$$

Если эрмитов оператор имеет собственный вектор и соответствует двум разным собственным значениям, то векторы будут ортогональны. Тем самым, подтвердили данное утверждение.

Задачу можно прочесть по-другому. Пусть  $p, r$  – два собственных значения. Если воздействовать на систему чем-то, что меняет векторы, уводя их от базисности, и включить в матрицу недиагональный элемент  $q$ , то с собственными значениями будет происходить следующее.

В подкоренное выражение будет добавлена положительная величина. Если  $q$  мала по сравнению с первым членом, то с помощью

$$\sqrt{1 + \varepsilon} \simeq 1 + \frac{\varepsilon}{2}$$

разложить подкоренное выражение. Поведение собственных значений будет иметь следующий вид: квадратичное повышение верхнего собственного значения и понижение нижнего.

Если  $q$  велико, то можно пренебречь первым членом. Можно извлечь корень и получим

$$\lambda_{1,2} \simeq \frac{p+r}{2} \pm q$$

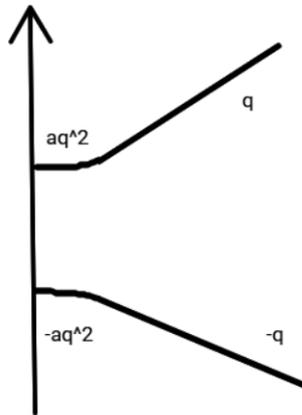


Рис. 2.4. Геометрическое изображение решения

Для системы в пространстве  $S_2$  при изменении параметров, приводящих к увеличению недиагонального матричного элемента оператора, расстояние между собственными значениями всегда будет увеличиваться при малых воздействиях по квадратичному закону, при больших – по линейному.

Например, спин. Есть частицы со спином  $-\frac{1}{2}$  такие, что у них есть магнитный момент. Энергия частиц во внешнем магнитном поле зависит от проекции спина на направление магнитного поля и принимает ровно два значения. Чем больше недиагональный элемент, тем больше будет расстояние и больше частота перехода.

При рассмотрении случаев, когда собственных значений три и больше, решение будет приближенным. Более точное решение может быть достигнуто с помощью использования персональных компьютеров и вычислительных алгоритмов. Но для определения матричных элементов нужно решить задачу теоретически, чтобы знать явную формулу для функций.

## Лекция 3. Построение функций

Рассматриваем разложение вектора по базису в виде

$$|\psi\rangle = \sum a_n |\varphi_n\rangle = \sum a_n |n\rangle$$

Базис имеет столько векторов, какова размерность пространства. В качестве простейшего объекта рассматривается двумерное, комплексное пространство  $C_2$ , а в качестве примера пространства с бесконечно счетным сложным базисом – пространство  $L_2$  комплекснозначных функций, одной действительной переменной, подчиненных условию конечности интеграла от квадрата модуля. Последнее условие вводится для задания нормируемости.

Базисные свойства утверждаются скалярным произведением

$$\langle m | n \rangle = \delta_{mn}$$

Если индексы будут разные, то скалярное произведение будет равно нулю, а если одинаковые – единица. Свойство не всегда проявляется сразу. Если векторы неортогональны, то есть принадлежат одному и тому же собственному значению оператора, то можно их сделать ортогональными с помощью соответствующих операций.

Важно соотношение, которое определяет собственные векторы оператора  $\hat{L}$

$$\hat{L}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$$

Доказано, что векторы, соответствующие разным собственным значениям, являются ортогональными друг другу. Если добавить ортогонализацию по Шмидту, то можно построить базис пространства.

Если работаем с задачей, в которой интересуют свойства физической величины, представляющиеся оператором  $\hat{L}$ , то в этом случае самым удобным будет базис собственных функций этого оператора.

Рассмотрим возможность построения функций от операторов  $\hat{L}$ .

### Построение сложных функций

Существуют операторы, которые зависят от координат или импульсов. Поэтому для учета всех параметров вводится построение сложных функций.

Например, спектр атома водорода в современной квантовой теории (Гейзенберг, Шредингер, Паули, Дирак). В теории Бора описан спектр и подобрано условие, которое может привести к такой форме. Паули решил задачу с учетом симметрии и наличия интеграла движения, отсутствующего в других системах. Для объяснения

полученной теории нужно рассмотреть функции на основе операторов координат и импульсов.

Операторы координаты и импульса изображались как

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

Геометрически оператор координат на (Рис. 3.1)

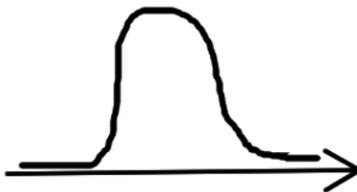


Рис. 3.1. Геометрическое изображение простейшего оператора

Запись оператора импульса

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

Операторы являются фундаментальными, но они не имеют собственных векторов. Решим уравнение

$$\begin{aligned}\hat{p}\psi &= \lambda \psi \\ -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x} &= \lambda \psi \\ \frac{d\psi}{\psi} &= \frac{i}{\hbar} \lambda dx \\ \psi &= Ae^{\frac{i\lambda x}{\hbar}}\end{aligned}$$

Если определить интеграл полученной функции

$$\int |\psi|^2 dx = \infty$$

Получаем, что операторы обладают такими математическими свойствами, которые создают критические условия. Если брать значение  $\lambda$  любое в различных задачах, то спектр получим непрерывным.

## Ограниченный оператор

У оператора есть множество числовых значений, которое называется *спектром*. Для построения данного определения вводится понятие *ограниченного оператора*. Это такой оператор:

$$\begin{aligned} \|\psi\| &= 1 \\ \|\hat{L}|\psi\rangle\| &< C \end{aligned}$$

Оператор ограничен, если из конечного вектора он может сделать вектор конечной длины и заранее установлено, какого числа он не превосходит.

Конструкция, которая строится для собственных значений, переписывается в следующем виде

$$\begin{aligned} \hat{L}\psi &= \lambda\psi \\ (\hat{L} - \lambda\hat{I})|\psi\rangle &= 0 \end{aligned}$$

Полученный определитель будет исследоваться для данной задачи. Значение параметра, при которых существует обратный оператор

$$(\hat{L} - \lambda\hat{I})^{-1}$$

Если определен всюду и ограничен, то  $\lambda$  регулярная точка для  $\hat{L}$ . Если нет обратного оператора, то  $\lambda$  будет принадлежать спектру.

Пусть  $\lambda$  – собственное значение оператора. Это значит, что

$$(\hat{L} - \lambda\hat{I})|\psi\rangle = 0$$

Возьмем несобственный вектор  $\phi$  и подействуем на него определителем, получаем

$$(\hat{L} - \lambda\hat{I})|\phi\rangle = |\Theta\rangle$$

Сложим полученные уравнения:

$$(\hat{L} - \lambda\hat{I})|\psi\rangle + |\phi\rangle = |\Theta\rangle$$

Для того, чтобы существовал оператор  $(\hat{L} - \lambda\hat{I})^{-1}$ , подействуем им на обе части уравнения

$$(\hat{L} - \lambda\hat{I})|\phi\rangle = |\Theta\rangle$$

и получим

$$|\varphi\rangle = (\hat{L} - \lambda\hat{I})^{-1}|\Theta\rangle$$

$$|\psi\rangle + |\varphi\rangle = (\hat{L} - \lambda\hat{I})^{-1}|\Theta\rangle$$

Сравним правые части полученных уравнений — описываемые операторы не имеют обратных, так как исчезла однозначность. Это происходит из-за того, что  $|\psi\rangle \neq 0$ . Таким образом, выражение

$$(\hat{L} - \lambda\hat{I})|\psi\rangle = 0$$

не будет выполняться. Вся совокупность собственных значений оператора принадлежит спектру.

Экспериментально показано, что большое количество точек обладают свойством: выражение  $(\hat{L} - \lambda\hat{I})^{-1}$  не ограничено. Можно показать, что в силу действительности собственных значений  $\lambda$  все точки комплексной плоскости, записываемые в виде  $\xi + i\eta$ , являются регулярными.

Пусть есть вещественная ось параметров. Только на ней могут находиться точки спектра для этого оператора.

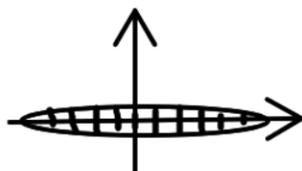


Рис. 3.2. Точки спектра оператора

Все точки, являющиеся собственными значениями и образующие дискретный спектр, принадлежат спектру. Существует один или несколько интервалов, заполненные точками, принадлежащими спектру.

Величина  $\lambda$ , которая входит в уравнение

$$\hat{L}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$$

называется *собственным значением*. И если  $|\psi\rangle$  нормируема, то  $\lambda$  должна принадлежать дискретному спектру. Если же  $|\psi\rangle$  не нормируема, то  $\lambda$  принадлежит непрерывному спектру.

При работе с операторами используется базис и разложение вектора в состоянии системы по этому базису. Оператор  $\hat{L}$ , введенный в постулате 2, является абстрактным.

Таким образом, обобщим идею существования базиса и наличия в нем соотношения ортонормированности на функции, которые являются решениями уравнения

$$\hat{L}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$$

при значениях  $\lambda$ , принадлежащих непрерывному спектру.

Когда  $\hat{L}$  является оператором, представляющим собой координату, и оператором, представляющим собой импульс, решения уравнения могут быть использованы как функции базиса. То есть любая функция может быть по ним разложена, но только не в виде суммы, а в виде интеграла по непрерывному параметру.

Для дискретного спектра

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum a_n |\varphi_n\rangle \\ a_n &= \int \varphi_n^*(x) \psi(x) dx \\ \psi(x) &= \sum_{n=1}^{\infty} \left( \int \varphi_n^*(\xi) \psi(\xi) d\xi \right) \varphi_n(x) = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left( \sum_{n=1}^{\infty} \varphi_n(x) \varphi_n^*(\xi) \right) \psi(\xi) d\xi \\ L(\xi, x) &= \sum_{n=1}^{\infty} \varphi_n(x) \varphi_n^*(\xi) = \hat{L} = \delta(\xi, x) \\ \psi(x) &= \int \delta(\xi, x) \varphi^*(\xi) d\xi \end{aligned}$$

Если эрмитов оператор обладает полной системой функции дискретного спектра, то есть любую функцию класса  $L_2$  можно разложить по базису, а потом с нужными коэффициентами сложить, то получится исходное выражение. Тогда в силу уравнения

$$\hat{L}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$$

при воздействии оператора на собственную функцию, отвечающую собственному значению  $\lambda_n$ , они появятся в правой части.

Поскольку все функции ортогональны, то можно записать

$$L(\xi, x) = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n \varphi_n(x) \varphi_n^*(\xi)$$

Таким образом, получаем возможность как записать оператор в собственном базисе, выбирая его основываясь на условия задачи.

Если решаем задачу, где базис – набор функций оператора  $\hat{L}$ , то система задана в  $L$ -представлении

$$\hat{L}|n\rangle = \lambda_n|n\rangle$$

Выбор базиса возможен произвольно. Для точности решения опираемся на условия задачи. Если она решена правильно, то результат не должен зависеть от того, в каком представлении записан базис и решалась сама задача. Все условия инвариантности справедливы только тогда, когда решение верно.

Для непрерывного спектра

$$\psi(x) = \int a(\xi)\varphi(\xi, x)d\xi$$

Уравнение будет задаваться следующим образом

$$\hat{L}\varphi(\lambda, x) = \lambda\varphi(\lambda, x)$$

Для любой функции  $\psi(x)$  можно записать функцию

$$a(\lambda) = \int \psi(x)\varphi^*(\lambda, x)dx$$

Данная запись будет эквивалентом функции  $a_n$ , записанной для дискретного спектра. Присутствует сходство. В одном случае состояние системы изображается набором коэффициентов  $a_n$ , то есть коэффициентами разложения по дискретному базису с конечным или счетным числом. Если проводить вычисления для непрерывного спектра, то каждой функции  $\psi(x)$  сопоставляется функция непрерывно меняющегося параметра  $\lambda$ .

Для функции  $\psi(x)$ , которая для дискретного спектра задается

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n\varphi_n(x)$$

можно построить аналогичную функцию для непрерывного спектра

$$\psi(x) = \int a(\lambda)\varphi(\lambda, x)dx$$

Можно наблюдать, что в обоих случаях строится вектор из суммы компонент.

Рассмотрим, как строится для непрерывного спектра функция  $a(\lambda)$ .

$Det : \delta(x - \xi)$  – ядро единичного оператора

$$\psi(x) = \int \delta(y - x) \psi(y) dy$$

Интерпретируем полученную структуру. В роли амплитуд будет играть сама функция  $\psi(x)$ , а в качестве базиса – функции  $\delta(y - x)$ . В каждой точке пространства есть дельта-функции, которые складываются, умножаются на  $\psi(y)$ , которые играют аналогичную амплитуде  $a_n$  роль в дискретном спектре.

Величину  $\delta(a - x)$  можно считать решением уравнения

$$x\varphi(x) = a\varphi(x)$$

При любом значении  $x \neq a$  функция будет обращаться в ноль. В результате уравнение будет выполняться. Поведение в одной точке можно задать математически:

$$\psi(x) = \int \delta(y - x) \psi(y) dy = 1$$

Если считать, что уравнение  $\psi(x)$  применимо к самой дельта-функции, то получим

$$\psi(x) = \int \delta(a - x) \delta(x - b) dx = \delta(a - b)$$

Функция базиса – дельта-функция в точках  $a = 1, 2, \dots$ . Формулу единичного оператора можно интерпретировать как один из вариантов использования теоремы о разложении по непрерывному базису. Исходя из того, что оператор единичный, то есть не только возвращает функцию в том же виде, но и с той же длиной, то можно выбрать дельта-функцию правильно нормированную. Последнее условие показывает, что две квазисобственные функции, свернутые в скалярное произведение, образуют дельта-функцию. Поэтому его называют *условием нормировки на дельта-функцию*.

Идея базиса выполняется в том случае, если знаем, что они имеют правильные длины. Поэтому каждому вектору, по которому идет разложение в непрерывном спектре, нужно задать однозначную длину. Существует условие требования: две функции, соответствующие разным собственным значениям, должны при вычислении скалярного произведения создавать дельта-функцию. При неравных аргументах должны быть ортогональны, при равных – дельта-функция обращается в ноль.

Для оператора  $\hat{x}$  спектр будет непрерывным в области от  $-\infty$  до  $\infty$ , а функции

$$\varphi(\lambda, x) = \delta(\lambda - x)$$

Пусть есть эрмитов оператор  $\hat{k}$ :

$$\hat{k} = -i\hat{d} = -i\frac{d}{dx}$$

$$\lambda = (-\infty, \infty)$$

$$\varphi(\lambda, x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{i\lambda x}$$

Коэффициент возникает из теоремы о том, как устроено произведение прямого и обратного преобразования Фурье.

$$a(\lambda) = \int \psi(x)\varphi^*(\lambda, x)dx$$

$$a(\lambda) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int e^{-i\lambda x}\psi(x)dx$$

$$\int a(\lambda)\varphi(\lambda, x)dx = \int a(\lambda)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{i\lambda x}d\lambda$$

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \left( \int e^{-i\lambda y}\psi(y)dy \right) e^{i\lambda x}d\lambda = \int \psi(x)\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int e^{i\lambda(x-y)}d\lambda dx$$

Получили ядро оператора, в котором к функции последовательно применено прямое и обратное преобразование Фурье. Результат операций эквивалентен единичной операции, поэтому ничего не изменяется. Тогда

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int e^{i\lambda(x-y)}d\lambda = \delta(x-y)$$

$$\psi(x) = \int \psi(y)\delta(x-y)dy$$

Функция оператора имеет бесконечный набор собственных функций, непрерывный набор точек спектра, ни одна из которых не будет являться собственным значением.

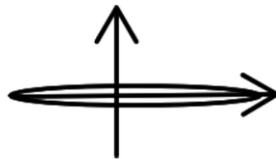


Рис. 3.3. Непрерывный набор точек оператора

При решении задачи  $\lambda$  можно взять не только вещественным, но и комплексным. Тогда для вещественной части выражения можно получить изображение:

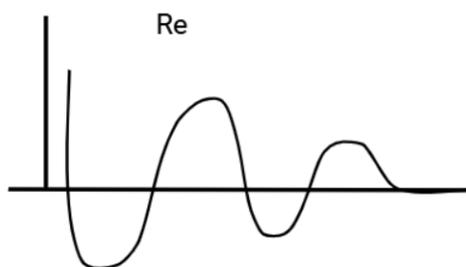


Рис. 3.4. Вещественная часть выражения

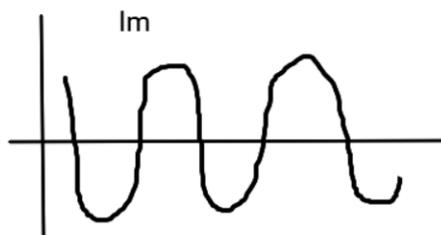


Рис. 3.5. Мнимая часть выражения

Но при решении задачи получаются волновые функции вида

Это объясняется правилом селекции. Оно состоит в том, что функции базиса можно нормировать на дельта-функцию. Из экспонент с мнимым показателем можно изменять единичный оператор и заменять его. Для вещественных – только при наложении дополнительных условий.

Если есть оператор, для которого нормированных векторов, на которых возможно построить базис, не существует, то используем функции, которые дают решение уравнения

$$\hat{L}\varphi(\lambda, x) = \lambda\varphi(\lambda, x)$$

где  $\lambda$  принадлежит непрерывному спектру.

У многих операторов могут быть как дискретные, так и непрерывные спектры. Поэтому нужно вводить базис, содержащий точки из обоих спектров. Они записываются в виде

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \varphi_n(x) + \int_{\lambda}^{\infty} a(\lambda, x) \varphi(\lambda, x) d\lambda$$

В частности, у атома водорода присутствуют оба вида спектров и запись функции производится пренебрежением второго слагаемого.

Рассмотрим роль собственных функций и спектров.

### Постулат 3

1) Наблюдаемое может принимать только значения принадлежащие спектру ее оператора:

- Если наблюдаемый оператор имеет дискретный спектр, то вероятность получения измеренного значения этой величины в данном состоянии  $\psi(x)$  есть квадрат скалярного произведения вектора состояния на базисную функцию, отвечающую собственному значению  $\lambda_n$ ;

$$\omega_n = | \langle \varphi_n | \psi \rangle |^2$$

- Если наблюдаемый оператор имеет непрерывный спектр, то вероятность того, что собственное значение будет лежать в интервале от  $\lambda_1$  до  $\lambda_2$ , будет выражаться

$$\omega(\lambda_1, \lambda_2) = \left( \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} \varphi^*(\lambda, x) \psi(x) dx \right)^2$$
$$\omega(\lambda_1, \lambda_2) = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} |\varphi(\lambda, \xi) | \psi \rangle|^2 d\xi$$

Постулат объясняет причину того, что эрмитовы операторы отображены. Они обладают собственными значениями, а измеренные в эксперименте значения вещественные.

Пункт дает представления о построении гамильтонианов и описании их спектров, а также рассматривать математический аппарат построения атомов. Дает возможность решения таких задач, где известна

$$\omega_n = A e^{-\frac{E_n}{T}}$$

Формула носит название *канонического распределения* или *распределения Гиббса*.  $E_n$  – энергетический уровень системы,  $T$  – температура в энергетических единицах,  $A$  – нормировочный множитель.

Формулы достаточно для решения большинства физических задач. Если прологарифмировать правую часть, то получим

$$F = -T \ln \sum_n e^{-\frac{E_n}{T}}$$

где  $F$  – свободная энергия – термодинамический потенциал, зависящий от объема системы  $V$ , температуры  $T$ . Формула позволяет проводить расчеты всех характеристик системы.

- 2) Значения, принадлежащие спектру ее оператора, будут вероятностные.

## Лекция 4. Операторы. Часть 2

Постулат 3 вводит связь собственного значения наблюдаемой величины  $\lambda_n$  как

$$\omega_n = | \langle \varphi_n | \psi \rangle |^2$$

отвечающий значению  $\lambda_n$ . Аналогично построена вероятность того, что величина, принадлежащая непрерывному спектру, будет иметь значение, лежащее в интервале от  $\lambda_1$  до  $\lambda_2$ , и будет выражаться

$$\omega(\lambda_1, \lambda_2) = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} |\varphi^*(\lambda, \xi) | \psi \rangle|^2 d\xi$$

$$|\varphi^*(\lambda, \xi) | \psi \rangle|^2 = \omega(\lambda)$$

В постулатах 1 и 2 рассматривали такие аппараты теории как вектор состояния и операторы. Вводились как аппараты динамической теории, чтобы возможно было вычисление характеристик состояния. При задании некоторого значения фундаментальных изменений в момент времени  $t_0$  достаточно, чтобы предсказать результаты фундаментального набора изменений в любой последующий момент времени.

При введении постулата 3 появляется искажение вероятностного объяснения. Присутствует часть уравнений, описывающих динамический взгляд на систему, и часть – статистический.

Рассмотрим процесс распада ядер. Пусть есть состояние с энергией ядра  $E_2$  и  $E_1$ . Электрон совершает переход со второго уровня на первый.

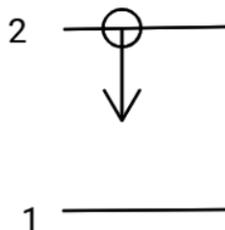


Рис. 4.1. Переход электрона со второго уровня на первый

При переходе излучается частота

$$\omega_{21} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar}$$

Если есть третий уровень. Электрон совершает переход с третьего на второй уровень или на первый. Состояния обладают энергией ядра  $E_3$ ,  $E_2$  и  $E_1$ , соответственно.

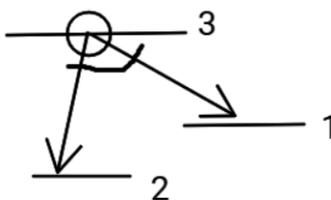


Рис. 4.2. Переход электрона с третьего уровня на второй и первый

При переходе излучается частота

$$\omega_{32}, \omega_{31}$$

Тогда электрон начнет двигаться. Это объясняется тем, что канал предстоящего распада квантовой системы может быть определен только вероятностным образом.

В данном состоянии оператор общего вида может иметь разнообразные собственные значения. Полное описание этих значений создаст функцию распределения, которая в зависимости от рассматриваемого пространства может быть сложной. В пространстве  $S_2$  вид будет (Рис. 4.3).

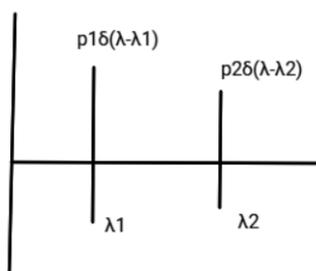


Рис. 4.3. Функция распределения в пространстве  $S_2$

Каждому собственному значению соответствуют определенные вероятности:  $\lambda_1 - p_1 \delta(\lambda - \lambda_1)$  и  $\lambda_2 - p_2 \delta(\lambda - \lambda_2)$ .

Если говорим об операторах с непрерывным спектром, то функция распределения представляет собой вещественную функцию действительной переменной (Рис. 4.4).

В данном случае нужно указывать значение функции в нескольких точках пространства. В результате получается сжатое описание, характеризующееся средним значением  $L$ .

Для дискретного спектра

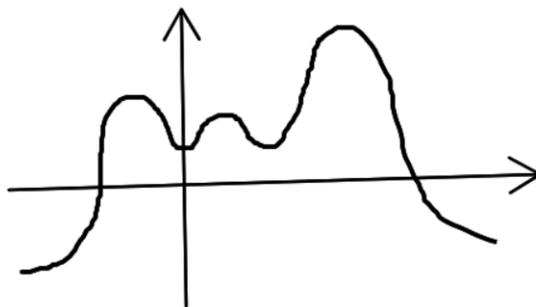


Рис. 4.4. Функция распределения с непрерывным спектром

$$\bar{L} = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda_n \omega_n$$

Если пространство конечное, то сумма производится до элемента  $k$ , если счетное, то до  $\infty$ .

Если помимо участка дискретного спектра присутствует участок непрерывности, то

$$\bar{L} = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda_n \omega_n + \int \lambda \omega(\lambda) d\lambda$$

Для вычисления величины  $\bar{L}$  достаточно

$$\bar{L} = \langle \psi | \hat{L} | \psi \rangle$$

Если оператор  $\hat{L}$  имеет базис, то

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \sum_{n=1}^{\infty} a_n \varphi_n(x) \\ a_n &= \langle \psi_n | \psi \rangle \end{aligned}$$

В итоге получаем искомую формулу. Выделенность состоит в том, что нефизическая величина не будет флуктуировать. Функция распределения выглядит на (Рис. 4.5).

Вероятность в этом случае следующая  $\delta(\vec{r} - \vec{r}_0(t))$ . Таким образом, получаем закон движения для описания средней координаты.

Если разброс значений не интересен, то есть можно расположить вероятности близко друг к другу и получится для двух собственных значений одно значение вероятности, равное единице (Рис. 4.6).

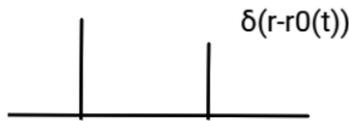


Рис. 4.5. Функция распределения



Рис. 4.6. Функция распределения

Если разброс значений интересен, то производим следующие вычисления

$$\langle \psi | (\hat{L} - \langle L \rangle)^2 | \psi \rangle = D_L$$

Такая величина называется *дисперсией* величины  $L$ . Размерность квадрата. Представляет собой второй момент, привязанный к среднему значению.

Чаще используется величина

$$\Delta_L = \sqrt{D_L}$$

Такая величина называется *неопределенностью* дисперсии величины  $L$ .

Задачи, когда исследуются более высокие моменты, например

$$\langle \psi | \hat{L}^3 | \psi \rangle$$

$$\langle \psi | \hat{L}^4 | \psi \rangle$$

встречаются редко. Для проверки таких расчетов нужно набирать большую статистику. Чем выше номер момента, тем больше нужно набрать данных. Поэтому используются понятия дисперсии и неопределенности для определения характеристик.

После получения динамических уравнений проводим их решение. С помощью оценок неопределенности можно понять, большая ли неопределенность по сравнению со средним значением. Если она мала, ситуация классическая. Если намного больше

характерных значений, то решаем для свободной частицы задачу о неопределенности во времени.

## Операторы

Знаем, что из одних операторов возможно построение других

$$\hat{p} \rightarrow \frac{\hat{p}^2}{2m} = \hat{T}$$

Любые функции сложнее линейной будут включать в себя операцию умножения. Она определяется тривиально. Например:

$$\begin{aligned}\hat{L}\hat{M}|\psi\rangle & \\ \hat{M}|\psi\rangle &= |\tilde{\psi}\rangle \\ \hat{L}|\tilde{\psi}\rangle &= |\Theta\rangle\end{aligned}$$

Но возможно наоборот

$$\begin{aligned}\hat{L}|\psi\rangle &= |\tilde{\psi}\rangle \\ \hat{M}|\tilde{\psi}\rangle &= |\tilde{\Theta}\rangle\end{aligned}$$

При этом получается, что нет оснований, что

$$|\Theta\rangle = |\tilde{\Theta}\rangle$$

Произведение операторов зависит от того, в каком порядке они перемножаются. Существуют типы преобразований, которые оставляют картину неизменной. Операторы получают определение от инвариантных соотношений.

Если два оператора различаются будучи перемноженными в двух разных порядках, то можно понять это действие как

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

Определение функции от двух операторов  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  назовем *коммутатором*. Введем обозначение

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

Если  $\hat{C} = 0$ , то операторы коммутируют между собой. Тогда у операторов  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  существуют общие собственные функции, а значит и собственные значения. Система может находиться в состоянии, где наблюдаемые  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  имеют точное значение.

Рассмотрим пространство  $C_2$ .

$$\hat{A} = \begin{vmatrix} p & q \\ q^* & r \end{vmatrix}$$

$$\hat{B} = \begin{vmatrix} a & b \\ b^* & c \end{vmatrix}$$

Запишем коммутатор таких операторов

$$\hat{C} = \begin{vmatrix} qb^* - bq^* & b(p-r) - q(a-c) \\ -b^*(p-r) + q^*(a-c) & -qb^* + bq^* \end{vmatrix}$$

На диагонали стоят выражения, различающиеся знаком, и каждое представляет собой комплексно сопряженную величину.

$$x + iy - (x - iy) = 2iy$$

Тогда на диагоналях стоят мнимые величины, а на антидиагоналях она различаются комплексным сопряжением и переменной знака. Тогда для эрмитовой матрицы получаем

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$$

где  $\hat{C}$  – эрмитова матрица.

Если величина коммутатора не равна нулю, то ее можно рассматривать, как степень некоммутативности. Чем больше величина  $\hat{C}$ , тем хуже коммутируют  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$ , тем дальше они от классических операторов.

Найдем операторы, между которыми коммутатор будет обладать максимальным значением коэффициента, показывающего степень растяжения. Важный случай: когда произведение  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  будет эрмитово. Это условие выполняется только в том случае, когда операторы коммутируют.

**Лемма 4.1.** *Каково бы ни было состояние  $\psi$  и каким бы ни был оператор  $\hat{A}$ , выражение в котором*

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

Докажем лемму.

$$\hat{A} | \psi \rangle = | \Theta \rangle$$

$$\langle \psi | \hat{A}^+ | = \langle \Theta |$$

$$\langle \Theta | \Theta \rangle \geq 0$$

Пусть есть операторы  $\hat{L}$  и  $\hat{M}$  и они эрмитовы. Тогда

$$[\hat{L}, \hat{M}] = i\hat{N}$$

Пусть также

$$\langle \hat{L} \rangle = \lambda$$

$$\langle \hat{M} \rangle = \mu$$

Возьмем операторы

$$\hat{L}' = \hat{L} - \lambda$$

$$\hat{M}' = \hat{M} - \mu$$

Убедимся, что записанные операторы эрмитовы и коммутатор равен  $i\hat{N}$ . Для этого построим

$$\hat{K} = \alpha\hat{L}' - i\hat{M}'$$

$$\hat{K}^+ = \alpha\hat{L}' + i\hat{M}'$$

$$\langle \psi | \hat{K}^+ \hat{K} | \psi \rangle \geq 0$$

$$\alpha^2 \langle \hat{L}'^2 \rangle + i\alpha \langle [\hat{L}', \hat{M}'] \rangle + \langle \hat{M}'^2 \rangle = \alpha^2 \langle \hat{L}'^2 \rangle - i\alpha \langle \hat{N} \rangle + \langle \hat{M}'^2 \rangle \geq 0$$

$\alpha$  – вещественный параметр и

$$[\hat{L}, \hat{M}] = i\hat{N}$$

Тогда

$$(\alpha\hat{L}' - i\hat{M}')(\alpha\hat{L}' + i\hat{M}') = i\alpha\hat{L}'\hat{M}' - i\hat{M}'\alpha\hat{L}' = i\alpha(\hat{L}'\hat{M}' - \hat{M}'\hat{L}')$$

Так как неравенство должно выполняться при любых значениях входящих в него величин, можно рассмотреть величину, как квадратичный полином от  $\alpha$ . Это означает, что не будет вещественных корней, а значит полином будет всегда положительный.

Потребуем, что дискриминант квадратного трехчлена должен быть неположительный:

$$\begin{aligned} \langle \hat{N} \rangle^2 - 4 \langle \hat{L}^2 \rangle \langle \hat{M}^2 \rangle &\leq 0 \\ \langle \hat{L}^2 \rangle &= D_L \\ \langle \hat{M}^2 \rangle &= D_M \\ D_L D_M &\geq \frac{\langle \hat{N} \rangle^2}{4} \end{aligned}$$

Вспоминаем о неопределенности

$$\begin{aligned} \Delta &= \sqrt{D} \\ \Delta_L \Delta_M &\geq \frac{|\langle \hat{N} \rangle|}{2} \end{aligned}$$

В любом состоянии произведение неопределенностей величин, представленных некоммутирующими операторами не меньше половины модуля среднего значения коммутатора в этом состоянии. Чем больше коммутатор, тем хуже коммутируют операторы, тем дальше функция распределения их собственных значений от классической. Показано, что неопределенности фиксируют степень.

Полученная формула носит название *соотношение неопределенностей Робертсона-Шредингера*. Формула отличается от соотношения неопределенностей Гейзенберга. В последней – все презумпции изложены явно и используется для выполнения измерений.

При вычислении любых величин, связанных с векторами, можно его умножить на любое число в виде степени  $e^\varphi$ . Тот факт, что наблюдаемые структуры имеют вид матричного элемента

$$\langle \psi | \hat{L} | \varphi \rangle$$

дает понятие, что существует операция, которая не будет менять функцию. Например, возьмем произвольные вектора, умножим их на один и тот же фазовый множитель. Справа множитель  $e^\alpha$ , слева –  $e^{-\alpha}$ . При перемножении получается единица. Функция не изменилась.

Существуют преобразования, которые не будут изменять наблюдаемые величины. Любые преобразования, проведенные с базисом и оператором, записанными в матричном виде, не изменят матричные элементы.

Значит, должен присутствовать множитель такой, что при перемножении на свой сопряженный даст единицу. Поэтому вводятся единичный оператор, превращающий вектор в него самого, обратный оператор такой, что

$$\hat{M}^{-1}\hat{M} = \hat{I}$$

Обратный оператор вводился при определении спектра. Пусть есть естественное движение и оператор (Рис. 4.7).



Рис. 4.7. Естественное движение и оператор

С оператором можно связать эрмитово сопряженный оператор и обратный оператор. Рассмотрим случай, когда оператор обладает таким свойством

$$\hat{U}\hat{U}^+ = \hat{I} = \hat{U}^+\hat{U}$$

Если свойство выполняется, то такой оператор называется *унитарным*. Рассмотрим свойства унитарного оператора:

$$\begin{aligned}\hat{U}|\psi\rangle &= \lambda|\psi\rangle \\ 1 * |\psi\rangle &= \hat{U}^+\hat{U}|\psi\rangle = |\lambda|^2|\psi\rangle \\ |\lambda|^2 &= 1 \\ \lambda &= e^{i\alpha}\end{aligned}$$

$\alpha$  – вещественное число. У любого унитарного оператора собственные значения по модулю равны единице. Это показывает, что операторы коммутируют.

Рассмотрим пространство  $C_2$ .

$$U = \begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix}$$

Так как эрмитовости нет, нельзя утверждать, что числа  $a, b, c, d$  – вещественные. Для вычисления  $U^+$  нужно поменять диагональные матричные элементы на комплексно сопряженные, а антидиагональные – заменить на комплексно сопряженные и переставить.

$$U^+ = \begin{vmatrix} a^* & c^* \\ b^* & d^* \end{vmatrix}$$

При перемножении матриц получаем единичную

$$\begin{aligned} \begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix} \begin{vmatrix} a^* & c^* \\ b^* & d^* \end{vmatrix} &= \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix} \\ |a|^2 + |b|^2 &= 1 \\ ac^* + bd^* &= 0 \\ a^*c + b^*d &= 0 \\ |d|^2 + |c|^2 &= 1 \end{aligned}$$

В каждой матрице получаем 4 комплексных переменных, значит, 8 вещественных. Поэтому на них накладывается 4 уравнения, где 2 и 3 уравнения эквивалентны. В результате, нельзя найти однозначного значения для матричных элементов, а получится параметризующее семейство.

Для параметризации воспользуемся тригонометрической единицей:

$$\sin^2 x + \cos^2 x = 1$$

Поэтому можно записать

$$\begin{aligned} a &= \cos\varphi e^{i\alpha} \\ b &= \sin\varphi e^{i\beta} \\ c &= \cos\psi e^{i\gamma} \\ d &= \sin\psi e^{i\delta} \end{aligned}$$

После выполнения нормировочных соотношений получили 6 параметров:  $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \varphi, \psi$ . Первое и последнее уравнения выполняются. Рассмотрим эквивалентные 2 и 3. В результате получаем следующие зависимости:

$$\begin{aligned} \psi &= \frac{\pi}{2} - \varphi \\ \delta &= \pi - \alpha + \beta + \gamma \end{aligned}$$

Общий вид правильно нормированной унитарной матрицы получается следующий:

$$U = \begin{vmatrix} \cos\varphi e^{i\alpha} & \sin\varphi e^{i\beta} \\ \sin\varphi e^{i\gamma} & -\cos\varphi e^{i(-\alpha+\beta+\gamma)} \end{vmatrix}$$

В пространстве  $C_2$  комплексных матриц общий вид унитарной матрицы содержит 4 вещественных параметра. Это гарантирует, что нормировка диагональных на

недиагональные элементы обеспечит равенство нулю произведения. При рассмотрении унитарного оператора свернули два класса обратных и эрмитовых матриц. Существует матрица, в которой они совпадают.

## Унитарные операторы

Существуют операторы, которые являются только эрмитовыми, а есть те, которые только унитарные. В первом случае сопряженный эрмитовой оператор равен самому оператору, в другом – эрмитово сопряженный равен самому оператору. Можно определить такой класс операторов, который будет обладать всеми перечисленными свойствами.

$$\begin{aligned}\hat{U}\hat{U}^+ &= \hat{I} \\ \hat{U}^+ &= \hat{U} \\ \hat{U}^2 &= \hat{I} \\ \hat{U} &= \sqrt{\hat{I}}\end{aligned}$$

Но такой класс будет обладать свойством, что любая степень этого оператора будет либо первой, либо нулевой. То есть либо получим в произведении единичный оператор, либо исходный. Поэтому любая функция от этого оператора, если она существует, будет линейной. Такой класс ценен как математический инструмент и как функция, описывающая реальность.

Рассмотрим матрицу вида

$$\hat{M} = \begin{vmatrix} p & q \\ q^* & r \end{vmatrix}$$

Умножим матрицу на саму себя и получим единичную матрицу. Тогда

$$\begin{aligned}p^2 + |q|^2 &= 1 \\ (p+r)q &= 0 \\ r^2 + |q|^2 &= 1\end{aligned}$$

Из уравнения

$$(p+r)q = 0$$

получаем следующие условия

$$q = 0$$

$$p^2 = 1$$

$$r^2 = 1$$

Матрица может быть записана двумя способами: как единичная, если одинаковые знаки корней

$$\hat{I} = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix}$$

или как  $\sigma_3$ , если разные знаки корней

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

Если же

$$q \neq 0$$

то получаем матрицу

$$\hat{M} = \begin{vmatrix} p & \sqrt{1-p^2}e^{i\alpha} \\ \sqrt{1-p^2}e^{i\alpha} & -p \end{vmatrix}$$

Существует бесконечное семейство решений. Если взять  $p = 1$ , то получается матрица  $\sigma_3$ . Если  $p = 0$ , то получим

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

и

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

Полученные матрицы представляют собой совокупность эрмитовых и унитарных матриц. Они обладают вещественными собственными значениями, как эрмитовы, и как унитарные – единичными. Тогда

$$\lambda_{1,2,3,4} = \pm 1$$

Матрица как пересечение двух классов называется *матрицей Паули*. Используется для описания поведения электрона, у которого есть два спиновых состояния.

## Лекция 5. Преобразования

### Повторение

- 1) *Унитарные* операторы – операторы, которые будучи умноженными на свой эрмитово-сопряженный оператор дают единицу. Данные операторы изображают преобразования, которые не влияют на наблюдаемые и могут быть использованы для того, чтобы преобразовать задачи к удобному для решения виду.
- 2) Существуют одновременно *эрмитовы* и *унитарные* операторы. Например, единичный оператор или матрицы Паули. Данные матрицы имеют собственные значения, равные  $\pm 1$ .

Запишем следующие преобразования:

$$|\psi\rangle \rightarrow U^+ |\psi\rangle$$
$$\hat{L} \rightarrow U^+ \hat{L} U = L'$$

Совокупность таких преобразований векторов и операторов называется **унитарные преобразования**.

Использование унитарных преобразований позволяет оставлять инвариантным все интересующие факторы для того, чтобы производить сравнение с экспериментом. Данные преобразования преобразуют как векторы, так и операторы.

$$\langle \vartheta | \hat{L} | \psi \rangle = \langle \vartheta' | \hat{L}' | \psi' \rangle = \langle \vartheta | \hat{U} U^+ L U U^+ | \psi \rangle$$
$$\hat{I} = U U^+ - \text{единичный оператор}$$

### Свойства

При унитарном преобразовании матричные элементы переходят в преобразованные матричные элементы. Следовательно, если матрица обладала свойством эрмитовости, то и после преобразования она будет обладать данным свойством. Унитарное преобразование не затрагивает свойство эрмитовости, а значит не затрагивает и свойство вещественности собственных значений. *Собственные значения матрицы* – элементы диагонали приведенной к диагональному виду матрицы. *Собственные векторы* в таком базисе состоят из нулей и единиц. Собственные значения при унитарном преобразовании остаются инвариантными.

Можно построить аналогичную схему, в которой роль унитарной матрицы играет интегральный единичный оператор. Операция смены базиса также принадлежит к классу унитарных преобразований, поскольку наблюдаемые значения не зависят от выбора системы векторов.

## Действия над операторами

1)  $\hat{A} + \hat{B}$  – сложение – умножение

$$\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$$

Рассмотрим семейство таких трансцендентных функций, которые могут быть представлены в виде степенного ряда

$$f(\hat{A}) = \sum_{n=0}^n a_n \hat{A}^n$$

При вычислении наиболее часто используемых функций ( $e$ ,  $\cos x$ ,  $\sin x$ ,  $\operatorname{tg} x$ ) одна из возможностей – использование степенного ряда. Экспонента  $\exp(\hat{A})$  представляет собой важнейшую функцию, поскольку из неё вытекает семейство  $\cos x$ ,  $\sin x$ ,  $\operatorname{tg} x$ , следом семейство обратных функций и т.д.

Вычислить оператор можно в том случае, когда ряд быстро сходится. Пример экспоненциального ряда:

$$\exp(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!}$$

При достаточно больших  $z$  основной вклад в сумму ряда дают члены с номером  $n \simeq z$ . В реальных задачах экспонента редко имеет аргумент, превосходящий 100. Следовательно, данный метод можно отнести к практичным методам вычисления. Возможен сбой при вычислении функции от большого аргумента. Экспоненциальные функции от операторов часто представляют собой решение поставленных задач. Первая задача относится к классу  $C_2$ .

## Операторы $\sigma_i$ матрицы Паули

Если матрица является унитарной, то её произведение на эрмитово сопряженный оператор дает единичный оператор. Матрица Паули эрмитова, следовательно, будем умножать  $\sigma$  на  $\sigma_i$  и в результате получим единицу.

$$UU^+ = \hat{I}$$

$$\hat{\sigma} \hat{\sigma}_i = \hat{I}$$

Вычислим  $\exp(\alpha \sigma_i)$ . Разобьем правую часть на сумму четных и нечетных по  $n$  слагаемых.

$$\exp(i\alpha\sigma_i) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\sigma_i^{2n}}{(2n)!} \alpha^{2n} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\sigma_i^{2n+1}}{(2n+1)!} \alpha^{2n+1}$$

В первом слагаемом каждый оператор равен единичному. Коэффициент при этом операторе — *числовая функция*. При  $n = 0$  функция = 1.

$$\hat{1} \left( 1 - \frac{\alpha^2}{2!} + \frac{\alpha^4}{4!} \right) = \cos\alpha$$

При рассмотрении второго слагаемого нечетные члены будут равняться  $\hat{\sigma}$  со следующими коэффициентами:

$$\hat{\sigma} \left( \frac{i\alpha^1}{1!} - \frac{i\alpha^3}{3!} + \frac{i\alpha^5}{5!} \right) = i\sin\alpha$$

$$\exp(i\alpha\hat{\sigma}) = \hat{1}\cos\alpha + \hat{\sigma}\sin\alpha$$

Число степеней оператора после всех преобразований оказалось линейной функцией. Выбор экспоненциальной функции был обусловлен тем, что семейство трансцендентных функций привязано к экспоненциальной как к первоисточнику.

Чаще всего встречаются задачи, связанные с решением линейных дифференциальных уравнений:

$$\frac{dx}{dt} = \alpha x$$

$$x = x_0 e^{\alpha t}$$

$$\frac{d^2x}{dt^2} = \alpha^2 x$$

$$x = x_0 \cos(\alpha t) + x_0 \sin(\alpha t)$$

Структуру простейшего эрмитового оператора обозначим следующим образом:

$$\begin{vmatrix} E_2 & V \\ V & E_1 \end{vmatrix}$$

Если  $V = 0$ , то матрица диагональная с собственными значениями  $E_2$  и  $E_1$ . Что означает систему с двумя энергетическими уровнями с положениями 1 и 2.

Если включаем внешнее воздействие, которое часто описывается появлением недиагонального матричного элемента, тогда мы имеем дело с возмущенной двухуровневой системой. Приходим к решению **секулярного уравнения**:

$$\text{Det}(\hat{H} - \lambda\hat{I})$$

$$\hat{H} = \begin{vmatrix} E_2 & V \\ V & E_1 \end{vmatrix}$$

## Описание системы двумерных векторов

Можно описать эволюцию системы, обладающей двумерным вектором  $\psi_{1,2}$  как унитарное преобразование.

$$|\psi\rangle = \begin{vmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{vmatrix}$$

Норма векторов при эволюции не изменяется, так как она связана с вероятностью. Если вектор нормирован, то он в ходе эволюции остается нормированным, иначе вероятность станет отлична от 1. Если система не зависит от времени, то ее спектр остается один и тот же в любой момент времени. Если система обладает динамикой неизменных наблюдаемых, то можно описать эволюцию с помощью унитарного преобразования следующим образом:

$$U = \exp(i\hat{H}t/\hbar)$$

Чтобы вычислить и применить оператор, нужно разложить его в следующий ряд:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^n \hat{H}^n \frac{t^n}{n!}$$

При возведении в квадрат матрицы  $\hat{H}$  получим:

$$\begin{vmatrix} E_2 & V \\ V & E_1 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} E_2 & V \\ V & E_1 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} E_2^2 + V^2 & E_2V + E_1V \\ VE_2 + E_1V & V^2 + E_1^2 \end{vmatrix} \quad (5.1)$$

Для решения задачи используем приведение матрицы к диагональному виду. Тогда при возведении её в квадрат имеем следующее выражение:

$$\begin{vmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \lambda_1^2 & 0 \\ 0 & \lambda_2^2 \end{vmatrix}$$

Чтобы привести выражение 5.1 к диагональной матрице, нужно произвести унитарное преобразование:

$$\begin{vmatrix} E_2 & V \\ V & E_1 \end{vmatrix} RR^+ \begin{vmatrix} E_2 & V \\ V & E_1 \end{vmatrix} RR^+ \\ RR^+ = \hat{I}$$

Пусть

$$\begin{vmatrix} E_2 & V \\ V & E_1 \end{vmatrix} = \hat{L}$$

Тогда

$$R^+ \hat{L} R \rightarrow \hat{L}'$$

где  $\hat{L}'$  - диагональная матрица.

**Итог.** Возводить в степень матрицу удобно и естественно, если она диагональная. К диагональному виду матрицу можно привести с помощью унитарных преобразований.

$\hat{A}^n$  – удобно для диагональной

## Определение собственных значений оператора

Определение собственных значений оператора – важное достижение. Не важно, в каком состоянии находится система, существует возможность диктовать значения, которые могут наблюдаться в эксперименте. Так в спектре атома водорода были найдены собственные значения оператора. И вопросы о возможных состояниях, векторах и т.д. оставались неважными.

$$\hat{L}|\varphi\rangle = \lambda|\varphi\rangle$$

Если знать оператор в виде матрицы, то можно диагонализировав матрицу и решив секулярное уравнение найти собственные значения. В квантовой теории правил построения готовых матриц довольно мало. Правила эффективны для построения операторов с бесконечно большим размером базиса.

Возможно получение решения, используя правила перемножения оператора на самого себя.

$$\hat{P} = |\varphi\rangle\langle\varphi|$$

где  $\hat{P}$  – оператор проектирования

Куда бы ни был направлен оператор  $\varphi$  после того, как на него подействовал оператор проектирования, получается вектор, направленный вдоль  $\varphi$ .

$$\hat{P} = |\varphi\rangle\langle\varphi| = (\langle\varphi|\langle\varphi|)$$

Допустим, что у оператора  $\hat{P}$  есть собственные векторы и собственные значения.

$$\hat{P}|\theta\rangle = \lambda|\theta\rangle$$

Заметим, что

$$\hat{P}^2 = |\psi\rangle\langle\psi|\psi\rangle\langle\psi|$$

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1$$

$$\hat{P}^2 = |\psi\rangle\langle\psi| = \hat{P}$$

Следовательно

$$\hat{P}^2|\theta\rangle = \hat{P}(\hat{P}|\theta\rangle) = \hat{P}(\lambda|\theta\rangle) = \lambda(\hat{P}|\theta\rangle) = \lambda^2|\theta\rangle$$

$$\hat{P}|\theta\rangle = \lambda|\theta\rangle$$

$$\hat{P}^2|\theta\rangle = \lambda^2|\theta\rangle$$

Тогда корни уравнения имеют следующий вид:

$$\lambda^2 = \lambda$$

$$\lambda_1 = 1$$

$$\lambda_2 = 0$$

Используя алгебру оператора мы написали уравнения, которые связывают квадрат собственного значения с собственным значением.

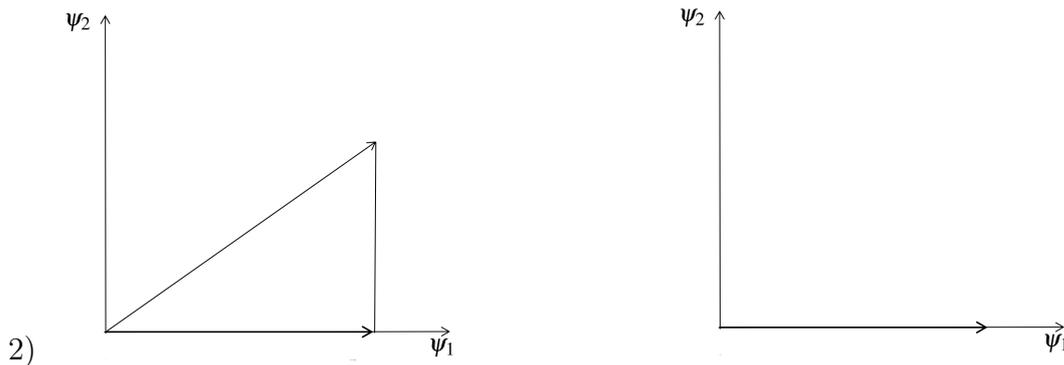


Рис. 5.1. Проекция вектора  $\psi$

Вектор-проекция, полученный на левом изображении не является собственным для оператора проектирования. Но в случае, если оператор лежит вдоль оси  $\psi_1$ , то после проектирования он переходит сам в себя (проекция на  $\psi_2 = 0$ ).

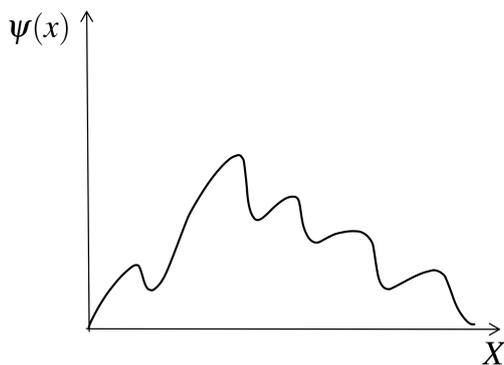


Рис. 5.2. Функция распределения плотности вероятности координаты  $\psi(x)$

Волновые функции изображают распределение плотности вероятности координаты после соответствующего преобразования, данные функции находятся в пространстве  $L_2$ .

Одним из таких преобразований можно считать оператор Фурье.

$$\hat{\Phi}_{\psi(x)} = \int \exp^{ixy} \psi(y) dy$$

### Собственные значения оператора Фурье

Можем записать интегральное уравнение:

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \exp^{ixy} \psi(y) dy = \lambda \psi(x)$$

Однако, в данной форме решение уравнения получить достаточно трудно.

Знаем решение уравнения типа:

$$\psi = \varphi + \int K \psi dy$$

В данном уравнении можно взять  $\varphi$  в качестве нулевого приближения, подставляя в подынтегральную функцию найдем первое и второе приближения.

Перемножим оператор Фурье на себя и построим квадратное уравнение

$$\hat{\Phi}^2_{\psi(x)} = \frac{1}{2\pi} \int \int \exp^{ixy} \exp^{iyz} \psi(z) dy dz$$

$$\delta(x+z) = \frac{1}{2\pi} \int \exp^{i(x+z)y} dy$$

При интегрировании по  $dz$   $\delta(x+z) = 0$

$$\hat{\Phi}^2_{\psi(x)} = \psi(-x)$$

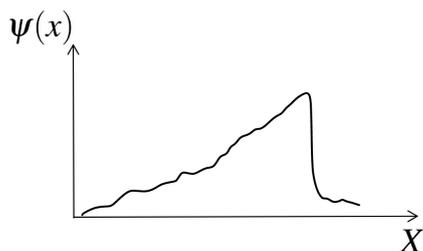


Рис. 5.3. Первоначальная функция распределения плотности вероятности

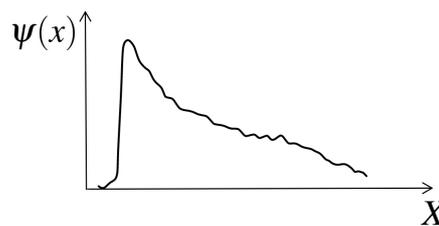


Рис. 5.4. Функция распределения плотности вероятности после действия на неё квадрата оператора Фурье

$$\hat{\Phi}_{\psi(-x)}^2 = \psi(x)$$

Помножив данное выражение на  $\Phi^2$  получим:

$$\hat{\Phi}_{\psi(x)}^4 = \psi(x)$$

Если четырежды применить преобразование Фурье к любой функции, для которой такое преобразование существует, то функция примет начальную форму. Например:

$$\hat{\Phi}_{\phi(x)}^4 = \lambda^4 \phi(x)^4$$

$$\lambda^4 = 1$$

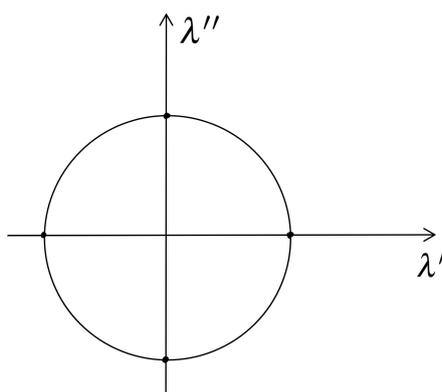


Рис. 5.5. Собственные значения оператора Фурье

В данном случае существует 4 собственных значения:  $1, -1, i, -i$ . Среди бесконечно-го числа функций можно выбрать 4 класса, которые будут различаться величиной

собственного значения. Известно, что существуют функции, которые переходят при Фурье преобразовании в себя. Самая известная из таких функций – гауссиана или функция Гаусса:

$$\exp\left\{-\frac{x^2}{2}\right\}$$

В классе функций Фурье переходящих в себя бесконечно много.

### Операторы, где известно только их коммутационное соотношение с эрмитово сопряженным

Каковы собственные значения  $\lambda$   $\hat{n} = \hat{a}^+ \hat{a}$  ?

При условии, что:

$$\hat{n}|\varphi\rangle = \lambda|\varphi\rangle$$

Подействуем оператором либо  $\hat{n}$ , либо  $\hat{a}$ . При перемножении на  $\hat{n}$  получим квадратное уравнение. При построении матрицы  $2 \times 2$ , удовлетворяющей выбранному значению, получим, что такой матрицы не существует. Значит, следует умножить на  $\hat{a}$ .

$$\hat{a}\hat{a}^+\hat{a}|\varphi\rangle = \lambda\hat{a}|\varphi\rangle$$

$$\hat{a}\hat{a}^+ = \hat{a}^+\hat{a} + \hat{I}$$

$$(\hat{a}^+\hat{a} + \hat{I})\hat{a}|\varphi\rangle = \lambda\hat{a}|\varphi\rangle$$

$$\hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}|\varphi\rangle = (\lambda - 1)\hat{a}|\varphi\rangle$$

$$\hat{a}|\varphi\rangle = |\theta\rangle$$

$$\hat{n}|\theta\rangle = (\lambda - 1)|\theta\rangle$$

Если для оператора  $\hat{n}$  найден собственный вектор  $\hat{\psi}$  у которого собственные значения  $\lambda$ , то подействовав на него оператором  $\hat{a}$ , заданным в условии задачи, получим вектор  $\theta$ , который будет собственным для оператора  $\hat{n}$ , причем собственные значения будут на единицу меньше  $\lambda$ .

Прделаем обратную процедуру

$$|\psi\rangle = \hat{a}^+|\varphi\rangle$$

$$\hat{n}|\psi\rangle = (\lambda + 1)|\psi\rangle$$

Следовательно спектр имеет вид:

$$\lambda - 3, \lambda - 2, \lambda, \lambda + 1, \lambda + 2, \lambda + 3 \dots$$

Спектр оператора  $\hat{n}$  в данном случае представляет собой двустороннюю бесконечную последовательность эквидистантных значений. Отметим, что неизвестна величина параметра  $\lambda$ .

Однако, спектр оператора  $\hat{n}$  не может быть двусторонне неограничен. Так как *среднее значение любого оператора, умноженного на эрмитово ему сопряженный должно быть неотрицательно.*

$$\langle A^+A \rangle \geq 0 \quad (5.2)$$

Спектр будет выглядеть следующим образом:

$$\lambda, \lambda + 1, \lambda + 2, \lambda + 3 \dots$$

В частности:

$$E = n\hbar\omega$$

Учитывая дополнительное слагаемое имеем:

$$E = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega$$

Если оператор имеет бесконечное число собственных значений, то это означает, что не существует матрицы конечного размера, которая обладала бы свойством 5.2.

Если не получается выбрать пространство  $C_k$  и в нём построить операторы, то нужно уйти в пространство  $L_2$  и сконструировать соответствующий оператор там.

Было доказано, что оператор умножения на координату при эрмитовом сопряжении переходит в себя, также данная операция была произведена с оператором дифференцирования. Поскольку умножение на независимую переменную и дифференцирование – Фурье сопряженные друг к другу операторы. Отметим, что условие эрмитовости не выполняется, так как оператор сопряжения при дифференцировании переходит в себя с переменной знака. Построим операторы  $\hat{a}$  и  $\hat{a}^+$ :

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{x} + \hat{d})$$

$$\hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{x} - \hat{d})$$

При двукратном преобразовании  $\hat{a}$  переходит сам в себя.

## Лекция 6. Векторы состояния

### Основные постулаты модели квантовой теории

1) Первый постулат

$$|\varphi\rangle \quad (6.1)$$

2) Второй постулат

$$\hat{L} \quad (6.2)$$

3) Третий постулат

$$\hat{L}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle \quad (6.3)$$

Замечание: если  $\lambda$  принадлежит непрерывному спектру, то  $\psi$  ненормируема.

$\omega_n$  – дискретный сектр + модификация для вырожденных состояний

$\omega(\lambda_1, \lambda_2)$  – непрерывный сектр

На данный момент не известны правила построения операторов. Однако, если существуют семейства унитарных преобразований, то, вероятно, оператор определяется алгебраическими соотношениями. Так как при унитарных преобразованиях коммутатор остается инвариантным.

Наблюдаемые величины – действительные числа. Следовательно, к любому вектору состояния можно дописать комплексный множитель в виде  $\exp(i\alpha)$ ,  $\alpha$  – вещественное. У этого вектора будут те же собственные значения, его скалярный вектор также останется прежним.

Если не существует физических способов различить состояния  $|\psi\rangle$  и  $|\psi\rangle\exp(i\alpha)$ , то разумно принять, что эти выражения эквивалентны друг другу.

$$|\psi\rangle \sim |\psi\rangle\exp(i\alpha)$$

Тогда дополним первый постулат

$$|\varphi\rangle \quad \text{или} \quad |\psi\rangle\exp(i\alpha)$$

Отметим, что если все собственные значения оператора  $L$  различны, то вероятность, что будет найдено собственное значение  $\lambda_n$  – это квадрат модуля скалярного произведения вектора состояния на тот вектор, который соответствует вектору собственного значения  $\lambda_n$ .

Если собственные значения оператора  $L$  вырожденные, то вероятность того, что получится собственное значение  $\lambda_n$ , равно сумме вероятностей того, что будет реализована каждая из компонент, отвечающих вектору  $n$ .

Чтобы проверить правильность теоретического расчета, мы сравниваем расчет с экспериментом и с измеренным значением, оцениваем какие погрешности имеют экспериментальное и теоретическое значения. Если погрешности меньше, чем разность средних значений теоретической и экспериментальной величин, то наблюдается расхождение. Если погрешности больше, чем разность средних значений теоретической и экспериментальной величин, то наблюдается согласие, в пределах точности эксперимента, которая равна, и теоретической точности, которая равна. Так для изолированного эксперимента гарантией его правильности является его *повторяемость и возобновляемость*.

*Если система находится в состоянии  $\psi$ , то после измерения величины  $L$  можно получить любое из значений  $\lambda_n$ , являющееся собственными для этого оператора. Если результат измерения равен  $\lambda_n$ , то система переходит в  $\varphi_n$ , которое является собственным значением.*

$|\psi\rangle \rightarrow \lambda_n \rightarrow |\varphi_n\rangle$  – постулат фон Неймана (проекционный постулат)

Скорость изменения векторов состояния конечна. Это означает, что если проводить повторное измерение, то за малое время вектор отойдет от своего значения  $\varphi_n$  незначительно и второе измерение, с вероятностью близкой к единице, даст тоже самое значение  $\lambda_n$ .

Критерий повторяемости измеренных значений, повторенных через малый интервал времени даст то же самое значение, которое было измерено. Запишем проекционный оператор:

$$\hat{P}_\psi = |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|\psi$$

Оператор из любого вектора  $\psi$  выделяет часть, которая пропорциональна вектору  $\varphi_n$ .

$$\langle\varphi_n|\psi\rangle \leq 1$$

Изменение вектора состояния, происходящее при измерении называется **редукцией** или **коллапсом волнового вектора**. Данная модель описания измерения придумана фон Нейманом в 1932 г. и лежит в основе теории квантовых измерений.

### Построение оператора $\hat{L}$

Единственное правило для построения представленной физической величины может быть сформулировано следующим образом:

*Писать можно всё, что угодно, но чтобы результаты совпадали с экспериментом.*

Сформулируем правило для некоторого слоя модели и обсудим его содержание и присущие ему ошибки. Существуют некое стандартное приближение и способы уточнения приближения, если имеются представления о точности результата.

## Классическая модель и её квантовый аналог

Если существует классическая модель, которая описывается набором компонент декартовых импульсов  $p_i$  и соответствующим набором декартовых компонент координат  $x_i$ , то должен быть известен гамильтониан, зависящий от  $p_i$  и  $x_i$ , который дает следующее уравнение движения:

$$\begin{aligned}\dot{x}_i &= \frac{\partial H}{\partial p_i} \\ \dot{p}_i &= -\frac{\partial H}{\partial x_i}\end{aligned}$$

где  $x_i$  – обобщенная координата

Квантовый аналог определяется операторами  $p_i$  и  $x_i$ , которые удовлетворяют перестановочным соотношениям

$$[\hat{x}_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}$$

где  $\delta_{ij}$  – символ Кронекера

Если берем операторы одного типа с разными индексами, то должно выполняться **условие их коммутации** друг с другом.

$$[\hat{x}_i, x_j] = 0 \quad [\hat{p}_i, p_j] = 0 \quad (6.4)$$

**Определение 6.1.** Если  $L$  – это функция от импульсов и координат, то соответствующий квантовый оператор – это функция от операторов импульсов и координат, которые определены коммутационными соотношениями 6.4.

$$L(\{p\}, \{x\}) \rightarrow \hat{L}(\{\hat{p}\}, \{\hat{x}\})$$

Среди данных функций присутствует гамильтониан, который построен по этому правилу

$$H(\{p\}, \{x\}) \rightarrow \hat{H}(\{\hat{p}\}, \{\hat{x}\})$$

Квантовая теория начинала строиться с классической модели атома водорода, которая состоит из протона и электронов. У протона есть 3 компоненты координаты и у электрона также есть 3 компоненты координаты. Следовательно это 6 степеней свободы, что является достаточно сложной системой. Такой системе будем строить квантовый аналог.

Отметим, что существуют системы, не попадающие под данное правило. Например, электрон, протон и нейтрон со спином  $\frac{1}{2}$  во внешнем магнитном поле.

$$\hat{H} = \begin{vmatrix} E_2 & V \\ V & E_1 \end{vmatrix}$$

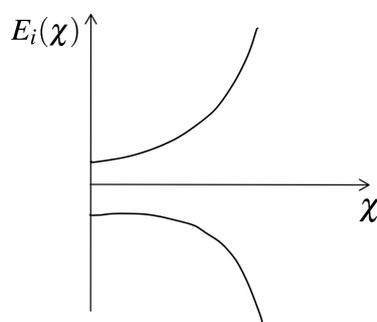


Рис. 6.1. Зависимость уровней энергии от напряженности магнитного поля вдоль оси  $x$

Классическая модель соответствует большим квантовым числам, случаю, когда действие много больше, чем постоянная Планка, а также частота перехода равна

$$\omega = \frac{E_2 - E_1}{\hbar}$$

## Классы операторов

### Частица во внешнем поле

$$\hat{H} = \frac{\vec{p}^2}{2m} + U(\vec{r}) \quad (6.5)$$

В данной модели 3 степени свободы ( $N=3$ ).

Замечание: квантовая модель никогда не бывает проще классической. За исключением очень узкого промежуточного слоя, где квантовую задачу легче решить, чем классическую.

Если система обладает высокой симметрией и позволяет разделить переменные, записав гамильтониан системы, например, в виде «гамильтониан движения по  $x$  +

гамильтониан движения по  $y$  + гамильтониан движения по  $z$ ».

$$U = \frac{m\omega_1^2}{2}x^2 + \frac{m\omega_2^2}{2}y^2 + \frac{m\omega_3^2}{2}y^2$$

Поверхность, построенная по данному уравнению, представлена на рисунке 6.2.

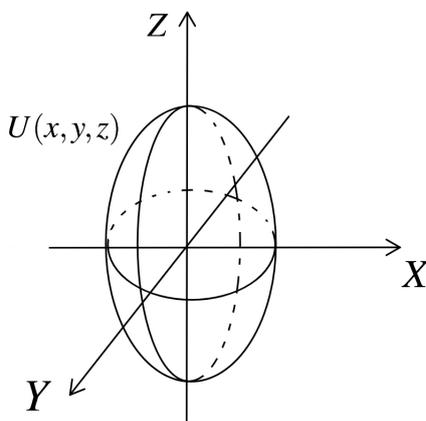


Рис. 6.2. Поверхность энергии  $U(x,y,z)$

При  $U(\vec{r}) = U(r)$  потенциал сферически симметричен и его зависимость представлена на рисунке 6.3.

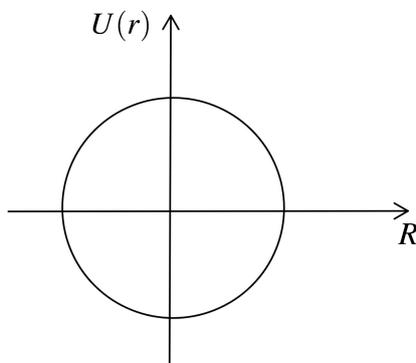


Рис. 6.3. Зависимость потенциала от радиуса сферы

В случае сферически симметричного потенциала вводятся динамическая переменная и угловой момент, переменные разделяются и движение частицы описывается как движение по радиусу, движение в плоскости, где лежит радиус орбиты, и отклонение от данной плоскости. Если есть разделение переменных – это всегда одномерная задача.

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + U(x) \quad \text{разделение переменных}$$

Для некоторых  $U(x)$  удастся проинтегрировать уравнение движения и найти закон движения в явном виде. В общем виде можно качественно исследовать зависимость частоты движения от энергии.

### Системы из взаимодействующих частиц

#### Кулоновское взаимодействие

$$\hat{H} = \sum_{i,j}^n \frac{p_i^2}{2m_i} + \frac{1}{2} \sum_{i,j}^n U(|r_i - r_j|) \quad \text{-- в классической теории} \quad (6.6)$$

Пояснение: для некоторых частиц энергия их взаимодействия зависит от модуля расстояния между ними и попарных расстояний.

В первую очередь нас интересуют модели, в которых содержатся заряженные частицы:

$$U = \frac{e_i e_j}{r_{ij}} \quad \text{-- кулоновский потенциал}$$

Поскольку в данном случае существует перспектива сравнения с экспериментом, то интересны решения задач, в которых правая часть имеет реалистический характер. Простейшая задача – число частиц  $n = 2 \{-1, +1\}$  (атом водорода).

Эта задача сводится к движению центра масс + движению частицы в центральном поле разделением переменных. Оказывается, что задача рассмотренного ранее первого класса имеет смысл, если решить её для центрального поля.

Рассмотрим следующие модели:

- 1)  $n = 3$  ( 1 положительная частица и 2 отрицательные) – атом гелия. Атом гелия впервые был приближенно рассчитан в 1926 г.
- 2)  $n = 3$  ( 2 положительные и 1 отрицательная) – электрон в поле двух протонов (молекулярный ион водорода). Впервые был приближенно рассчитан в 1927 г.
- 3)  $n = 4$  ( 2 положительные и 2 отрицательные) – молекула водорода. Впервые была приближенно рассчитана в 1927 г.

Точность микроскопических решений составляла 6 знаков после запятой, точность, с которой работала модель атома водорода - 4 знака, точность приближенных решений моделей молекулярного иона водорода и молекулы водорода - 2 знака. Данные модели описывали случаи дискретного спектра в системе зарядов разных знаков с точностью до  $10^{-4} - 10^{-2}$ . Графическая иллюстрация представлена на рисунке 6.4.

Если точности не хватает, делаем следующие выводы:

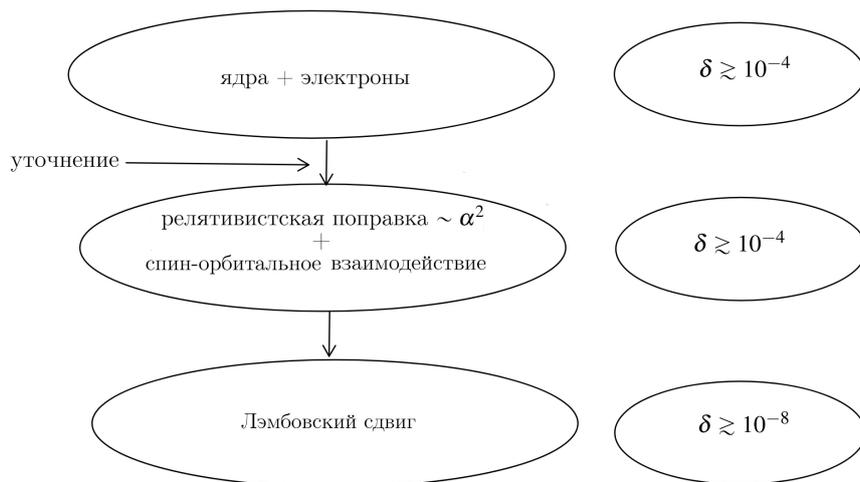


Рис. 6.4. Уточнения второго класса моделей

- 1) Гамильтониан включает квадратичную зависимость кинетической энергии от импульса (нерелятивистское выражение), следовательно, можно думать что погрешность выражения будет второго порядка по отношению к  $\frac{v}{c}$ .

$$v \sim \frac{e^2}{\hbar}$$

$$\frac{v}{c} = \frac{e^2}{\hbar c} = \alpha = \frac{1}{137} \text{ --- постоянная тонкой структуры}$$

- 2) Есть эффекты, связанные со взаимодействием электрона с вакуумом электромагнитного поля, которое приводит к тому, что уровни энергии приобретают ширину порядка  $\alpha^3$  и сдвиг уровней (Лэмбовский сдвиг) того же порядка.
- 3) Также для уточнения можно учесть взаимодействие магнитного момента электрона и ядра (сверхтонкая структура), а также, что ядро имеет конечные размеры и его потенциал отличается от кулоновского.

Рисунок 6.4 показывает, что не существует такого набора утверждений, что модель, построенная по данным правилам, даст описание, которое опишет все явления с неограниченной точностью. Этого не происходит по причине того, что малейшее усложнение постановки задачи приведет к резкому усложнению математической стороны модели, что даже грубое решение будет требовать высоких вычислительных затрат.

## Ядерное взаимодействие

На данный момент был рассмотрен только кулоновский потенциал, но также существует и другой потенциал. Рассмотрим ядро, в состав которого входят протоны и нейтроны. Следовательно, ядро – это система взаимодействующих частиц и можно построить теорию дейтрона из взаимодействия с определенным потенциалом  $U$ . На тот момент были известны энергия связи и радиус потенциала. Было предложено взять потенциал, представленный на рисунке 6.5.

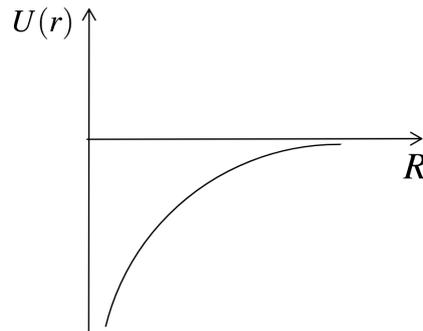


Рис. 6.5. Потенциал ядра

$$U = -U_0 \frac{e^{-\alpha r}}{r}$$

$$U_0 \sim 20 \text{ МэВ}$$

$$\alpha^{-1} = 2 \cdot 10^{-13} \text{ см}$$

Выражение 6.5 работает не только для систем с электростатическим взаимодействием, но и для систем с ядерным взаимодействием. Также данные правила подходят и для гравитационного взаимодействия.

Рассматривая потенциал ядра, путем измерения магнитного момента (опыт Штерна-Герлаха), было выяснено, что магнитный момент, такой же как у протона и нейтрона с параллельно направленными спинами (триплетное состояние). Поиск состояний дейтрона с противоположными спинами не удался, из чего следует, что потенциал взаимодействия – это не только функция от радиуса, но и от ориентации спинов.

$$U_1(r) + U_2(r) \vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2$$

Произведение  $\vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2$  описывает спин первой и второй частиц.

Обнаруживается, что дейтрон обладает ненулевым квадрупольным моментом, возникающим в результате не сферически-симметричного распределения заряда. Если сила взаимодействия частиц зависит только от расстояния, то квадрупольного

момента быть не может. Следовательно, должна существовать ещё одна поправка, учитывающая направление спина по отношению к расстоянию между двумя частицами.

$$U_1(r) + U_2(r)\vec{\sigma}_1\vec{\sigma}_2 + U_3$$

$$U = U_0 [0.965 + 0.035\vec{\sigma}_1\vec{\sigma}_2 + 0.775 [3(\vec{\sigma}_1, \vec{n})(\vec{\sigma}_2, \vec{n}) - (\vec{\sigma}_1\vec{\sigma}_2)]]$$

— потенциал Рариты-Швингера

$$r_0 = 2.8 \cdot 10^{-13} \text{ см} - \text{граница, за которой исчезает потенциал}$$

$$U_0 = 13.8 \text{ МэВ} - \text{глубина ямы}$$

### Частица в электромагнитном поле

Если заряженная частица находится в электромагнитном поле, состояние которого описывается векторным и скалярным потенциалами, зависящими от пространственных координат и времени, то функция Гамильтона этой системы имеет следующий вид:

$$H = \frac{1}{2m} \left( \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}, t) \right)^2 + e\varphi(\vec{r}, t) \quad (6.7)$$

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left( \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}(\hat{r}, t) \right)^2 + e\varphi(\hat{r}, t) - \text{квантовый оператор}$$

## Лекция 7. Квантовые системы

При построении систем квантовых частиц была использована модель молекул, в которой частицами, не подлежащими делению и бесструктурными, являются атомные ядра и электроны. Данная конструкция была выбрана в связи с теми задачами, которые стояли в перед квантовой теорией на основе экспериментов, доступных во время её построения.

Возможны уточнения этих моделей: релятивистские поправки, магнитные взаимодействия электронов и ядер, взаимодействие с вакуумом электромагнитного поля, описание ядер как системы кварков. В таком случае ядро будет иметь конечные размеры и будет откликаться на внешнее поле. Учёт конечности размеров ядра и его поляризуемости за счёт сложной структуры даёт поправки в районе 10-го знака в положении энергетических уровней (существенно меньше, чем погрешность фундаментальных констант).

*Существуют ли в квантовой теории модели более грубые, чем те, которые получены со времен Н.Бора ?*

Данные модели существуют, среди них системы атомов, которые могут быть преобразованы в пучки. В опыте Штерна-Герлаха атомы серебра двигались в неоднородном магнитном поле и вели себя в соответствии со значениями магнитного момента, происходило расщепление пучка.

*Атом серебра – это достаточно сложная система с несколькими десятками электронов, которая была упрощена до частицы, имеющей массу и магнитный момент.*

Атомы описываются как нерасчленимые частиц, взаимодействие которых между собой происходит с помощью потенциала (статистическая или молекулярная физика).

После работы Ван-дер-Ваальса возникла концепция, что взаимодействия имеют притягивающий характер на больших расстояниях и отталкивающий на малых расстояниях. Если рассматривать благородные газы, то можно определить закон притяжения, опираясь на квантовую теорию, и, опираясь на экспериментальные данные, подобрать закон отталкивания.

$$U(r) = -U_0 \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} \right] - \text{потенциал Леннарда-Джонса} \quad (7.1)$$

Леннард подбирал свои коэффициенты под экспериментальные данные по зависимости теплоемкости и вязкости инертных газов от температуры и давления. Леннард делал расчеты используя классическую статистическую физику в то время, когда квантовая теория ещё не была сформирована.

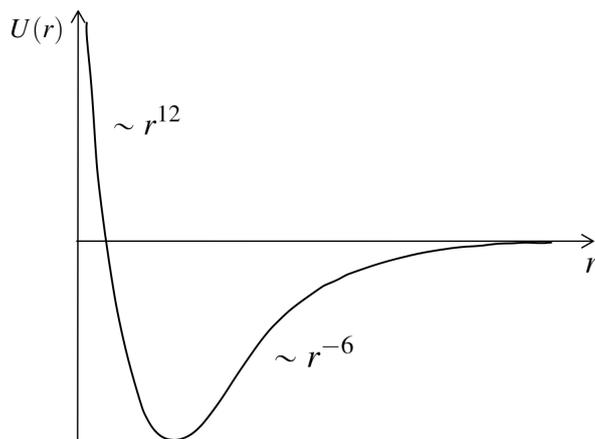


Рис. 7.1. Потенциал Леннарда-Джонса

На базе данной модели были построены квантовые модели, которые отвечали на вопросы о количестве связанных состояний и устройстве дискретного спектра. Квантовую теорию можно хорошо применять в случаях, когда частицы большие, составные (разложение атома на ядро и электроны) и массивные (тяжелые атомы, массы которых в 200 раз больше масс атомов водорода).

*Можно ли применять квантовую теорию к частицам, которые имеют большие размеры и массу?*

Данный вопрос относится к нахождению предела применимости квантовой теории и начала классической. Существует универсальный опыт интерференции частиц, проходящих через 2 щели в непроницаемой перегородке. Если тела описываются классической механикой и у них волновые свойства, связанные с их распространением, не проявляются, то распределение имеет гладкий вид. В квантовой системе есть интерференционная картина и наблюдается система полос. Для определения предела описания квантовой теорией нужно направить поток частиц на щель, при наблюдении интерференционной картины объект будет описываться квантовой теорией.

Отметим следующие эксперименты:

1) Эксперимент Цайленгера с молекулами фуллерена 1999 г.

*Фуллерены* – группы углеродных атомов, содержащие кластеры  $C^{60}$  и  $C^{70}$ .

В оболочке из 70 углеродных атомов есть несколько сотен колебательных степеней свободы. Такую систему можно рассматривать как систему с непрерывным колебательным спектром. При попадании пучка молекул на щель возникала интерференционная картина, что доказало поведение молекул фуллерена как квантовых объектов.

- 2) Эксперимент в 2011 г. с органическими молекулами. Молекула имела до 430 атомов с поперечным сечением 60 Å и массой до 6910 молекулярных единиц.

Система, построенная из нескольких сотен атомов продолжает вести себя как квантовый объект, будто это одна квантовая частица. Вопрос о нахождении предела до сих пор открыт. Возможны случаи, что предела вовсе не существует (можно охлаждать систему из большого количества атомов до того момента, когда будет активно небольшое число степеней свободы), но также не исключен факт существования фундаментальной константы, при переходе через значение которой квантовые свойства исчезают скачкообразно.

### Задачи четвертого постулата

- 1) Построение гамильтониана для частицы во внешнем поле 6.5
- 2) Задачи о взаимодействии частиц 6.6
- 3) Гамильтониан заряженной частицы в электромагнитном поле 6.7

Операторы обладают следующим свойством:

$$[\hat{x}_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}$$

Если правая часть гамильтониана, касающаяся потенциала внешнего воздействия на частицу, достаточно проста, то можно алгебраическими методами определить его собственные значения.

Существует 2 подхода:

- 1) Построение алгебраического уравнения или рекуррентного соотношения, из которых будет получен ответ. Такой подход распространяется на простейшие задачи.
- 2) Представление волновой функции, как функции от координаты.

$$|\psi\rangle \rightarrow \psi(x)$$

$$\hat{x}_i \psi = x_i \psi$$

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

Коммутационное соотношение выполняется и выбранный набор операторов удовлетворяет всем постулатам.

Простейшие операторы умножения на переменную и дифференцирования по переменной не обладают дискретным спектром и собственными функциями, нормируемыми пространством  $L_2$ . Следовательно, невозможно приготовить состояние системы, в которой у частицы была бы определенная координата и импульс.

$$p\psi = -i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial x}$$
$$\varphi = Ae^{-ip\frac{x}{\hbar}}$$

$\varphi$  – функция, у которой и вещественная и мнимая часть представлены в виде плоских волн, неограниченно протяженных в пространстве.

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\varphi|^2 dx \rightarrow \infty$$

Построенные по принципам соответствия гамильтонианы и правила построения операторов показывают, что переменные  $x$  и  $p$  сохраняют свою форму, как и классические величины. Это приводит к необходимости введения векторов состояния, которые были бы похожи на состояния в классической механике. Нужно выделить тип состояний, в которых можно было бы говорить о значениях координаты и импульса.

$$\Delta p \Delta x \geq \frac{\hbar}{2} \text{ — соотношение неопределенности}$$

В любом состоянии неопределенность (корень из дисперсии импульса и координаты) будет превосходить  $\frac{\hbar}{2}$ . Существует вопрос построения состояния, которые описывались бы волновыми функциями и для которых реализовывался минимум неопределенности.

## Лекция 8. Решение задач с помощью уравнения Шредингера. Часть 1

Существуют 2 задачи:

- 1) По проведённым измерениям определить результат последующих измерений (при известном начальном состоянии и гамильтониане системы можно математически предсказать состояние системы в любой момент времени).

Замечание: узнать начальное состояние непросто, так как сначала следует провести измерение, а измерение влияет на начальное состояние. Иногда удается узнать состояние, а иногда мы узнаем суперпозицию состояний.

- 2) Задача об определении возможных наблюдаемых значений (с оговорками). У координаты и импульса значения могут пробегать всю шкалу от  $-\infty$  до  $\infty$ , что не дает новой информации в решении задачи о спектре.

Гейзенберговская схема полезна тем, что копирует классическую, но решать уравнение в общем случае для данной схемы гораздо сложнее, чем в классической теории.

*Картина Шредингера* – представление, вектор состояния которого зависит от времени  $t$ , эволюция которого описывается уравнением 8.1.

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi \quad (8.1)$$

Скорость изменения вектора состояния пропорциональна результату воздействия гамильтониана на этот вектор, а коэффициент пропорциональности, поставленный в левой части уравнения, есть  $i\hbar$ .

### Типы гамильтонианов

- 1) При первом типе гамильтониана  $U(\vec{r})$  практически никогда не рассматривается задача зависимости потенциала от времени  $U(\vec{r}, t)$ .
- 2) Второй тип представлен в виде сил, в которых потенциал устроен следующим образом:

$$\frac{1}{2} \sum_{ij} U(r_{ij})$$

Данный потенциал также не зависит от времени.

- 3) В третьей группе задач рассматривается переменное электромагнитное поле, данная группа относится в особую область.

$$12m \left( \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}, t) \right)$$

На первый план выходят задачи, в которых гамильтониан не зависит от времени. Задачи о структуре атома, молекулы, ядра, твердого тела. В таком случае решение уравнения Шредингера будет в виде произведения функции, зависящей только от времени, на функцию, зависящую, например, от координаты (или любой другой величины). Решение системы будем искать, используя функцию  $\phi$ , удовлетворяющую уравнению Шредингера 8.2.

$$\Psi(t) = \theta(t)\phi(\vec{r})$$

$$\hat{H}\phi(\vec{r}) = E_n\phi_n(\vec{r}) \quad (8.2)$$

*Гильбертово пространство* место, в которое помещается вся информация.

*Базис* – инструмент упорядочивания информации.

Базис удобнее выбирать как систему собственных функций оператора с дискретным спектром. Случай, когда гамильтониан имеет только дискретный спектр: частица в потенциале гармонического осциллятора, частица между жесткими стенками.

Найдем систему решений уравнения 8.2, запишем решения с начальными условиями:

$$\tilde{\Psi}_n(t, r) = \phi_n(\vec{r})e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} \quad (8.3)$$

Важно: уравнение Шредингера описывает *эволюцию*, стационарное уравнение Шредингера описывает *собственные функции гамильтониана*.

$$H\phi_n = E_n\phi_n \quad \text{стационарное уравнение Шредингера} \quad (8.4)$$

*Спектр гамильтониана* – совокупность собственных значений  $E_n$ .

Спектр может быть непрерывный в одной области и дискретный в другой.

Важно: нумеруются не уровни энергии, а состояния. Спектр невырожден в том случае, когда каждому уровню отвечает одно состояние. При вырожденном спектре каждому уровню отвечают несколько состояний. Модели атомов и молекул имеют с необходимостью вырожденные спектры.

$E_0$  – основное состояние, все остальные состояния – *возбужденные*.

*Всегда ли существует основное состояние, расположенное на конечном расстоянии от границы непрерывного спектра ?*

Имеет смысл говорить о нахождении  $E_0$ , только если уровень к чему-либо прикреплен. Например, к границе непрерывного спектра т.е. граница непрерывного спектра выступает началом отсчета энергии. Данное правило не универсально, существуют модели, в которых указаны неограниченно-убывающие уровни энергии.

Согласно второму постулату Бора, система может совершать переход между двумя уровнями. Тогда если поместить систему в верхнее состояние, то она перейдет на основное состояние с испусканием энергии в виде излучения.

Выписываем общее решение уравнения Шредингера, описывающего эволюцию произвольного состояния в любой системе, гамильтониан которой не зависит от времени. Необходимо знать значение функции в начальный момент времени.

Решаем уравнение Шредингера и определяем набор функций базиса  $\{\phi_n(\vec{r})\}$ .

Раскладываем по базису  $\{\phi_n(\vec{r})\}$  функцию  $\Psi$ :

$$\Psi(0, \vec{r}) = \sum a_n \phi_n(\vec{r}) \text{ — начальное условие}$$

$$a_n = \int \phi_n^*(\vec{r}) \Psi(0, r) dr$$

С течением времени каждая функция будет изменять только свою фазу и решение для произвольного момента времени имеет вид:

$$\Psi(t) = \sum a_n \phi_n(r) e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} \text{ — решение нестационарной задачи} \quad (8.5)$$

Решив стационарную задачу можно получить решение любой нестационарной задачи об эволюции. Гильбертово пространство – это линейное пространство, что дает возможность разложения по базису. Каждая компонента, представляющая стационарное состояние эволюционирует во времени за счет изменения фазы. С физической точки зрения состояние не меняется, так как компонента остается на том же луче (состояние в гильбертовом пространстве), но происходит изменение фазы. В выражение для структуры системы можно включить любой параметр без её изменения.

## Задачи, связанные с исследованием временной эволюции

$$\phi_n(\vec{r}) e^{-i \omega_n t} \text{ — неизменный луч}$$

$$\frac{E_n}{\hbar} = \omega_n$$

$$\Psi(t) = \alpha |\psi_k\rangle e^{-i \omega_k t} + \beta |\phi_n\rangle e^{-i \omega_n t} \quad (8.6)$$

Ответим на вопрос как сильно изменится функция по отношению к своему начальному состоянию.

$\omega(t) = |\langle \Psi(t) | \Psi(0) \rangle|^2$  — вероятность сохранения системы в начальном состоянии

Данная вероятность зависит от времени. При перемножении  $\varphi_k$  на  $\varphi_n$ , которые являются ортогональными векторами, получим:

$$\sqrt{\omega} = |\alpha|^2 e^{i\omega_k t} + |\beta|^2 e^{i\omega_n t}$$

$$\omega = |\alpha|^4 + 2|\alpha|^2|\beta|^2 \cos \omega_{kn} t + |\beta|^4 \quad (8.7)$$

$$\omega_{kn} = \frac{E_k - E_n}{\hbar} = \omega_k - \omega_n \text{ — частота перехода} \quad (8.8)$$

Для системы, которая находится в суперпозиции 2-х стационарных состояний с амплитудами  $\alpha$  и  $\beta$ , её вероятность нахождения в начальном состоянии меняется по гармоническому закону и частота соответствующих гармонических колебаний описана выражением 8.8.

Система была помещена в суперпозицию двух стационарных состояний и состояние этой системы изменилось. В данном случае система совершает переходы, из-за изменения фазовых множителей система может быть в состояниях близких или далеких относительно начальных. Частный случай:

$$|\alpha|^2 = |\beta|^2 = \frac{1}{2}$$

$$\omega = \frac{1}{2} (1 + \cos \omega_{kn} t)$$

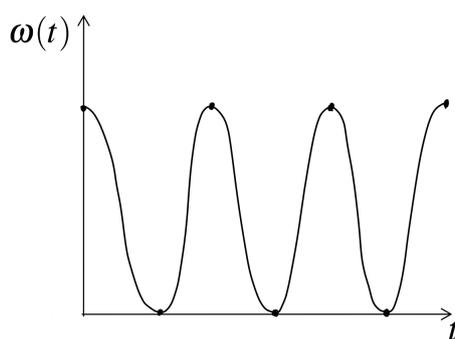


Рис. 8.1. Изображение фазовых переходов системы

Пояснение: система будет находиться в начальном состоянии, потом скатится в противоположное и вернется в исходное и т.д.

С одной стороны, все процессы измерения показывают как система уходит из начального состояния и возвращается в него. С другой стороны, вероятности результатов измерений со временем не меняются относительно энергий.

Выражение для  $\omega_{kn}$  появилось еще в старой квантовой теории и имело смысл частоты излучения, которая испускалась системой, совершающей переход из начального состояния в конечное, в соответствии со вторым постулатом Бора.

В современной квантовой теории величина  $\omega_{kn}$  показывает изменение внутреннего состояния, представляющего суперпозицию двух стационарных состояний, при отсутствии переходов в системе, энергия системы постоянна и равна начальной.

В нескольких начальных состояниях система будет осциллировать относительно своих начальных состояний. Осцилляции будут происходить с разными частотами.

*Система, находящаяся в суперпозиции разных состояний, будет возвращаться к начальному состоянию с неограниченно высокой точностью за предельно большое время.*

### Случай непрерывного спектра

$$\Psi(\xi, 0) = \int C(E) \psi_E(\xi) dE$$

где  $C(E)$  – неизвестная амплитуда.

При возведении в квадрат модуля  $C(E)$  данная величина будет выступать в качестве вероятности.

$$\Psi(\xi, t) = \int C(E) \psi_E(\xi) e^{-i\frac{Et}{\hbar}} dE$$

Рассмотрим как будет вести себя величина квадрата модуля скалярного произведения функции на её начальное выражение.

$$\hat{F}(t) = \left| \int |C(E)|^2 e^{-i\frac{Et}{\hbar}} dE \right|^2 \quad (8.9)$$

Закон эволюции состояний с непрерывным спектром энергии зависит только от функции энергии в этом состоянии и выражается формулой 8.10.

*Если система представляет собой суперпозицию бесконечно большого числа состояний из области непрерывного спектра, то вероятность того, что система останется в начальном состоянии будет меняться со временем так, что при  $t \rightarrow \infty$  вероятность обратится в ноль.*

Данная ситуация может быть охарактеризована как **распад начального состояния**.

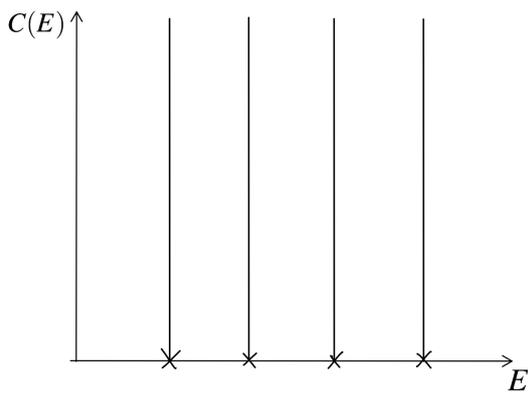


Рис. 8.2. Зависимость  $C(E)$  выражена дискретным спектром

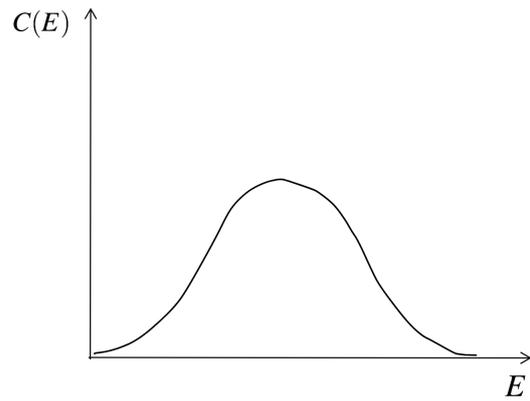


Рис. 8.3. Зависимость  $C(E)$  выражена непрерывным спектром

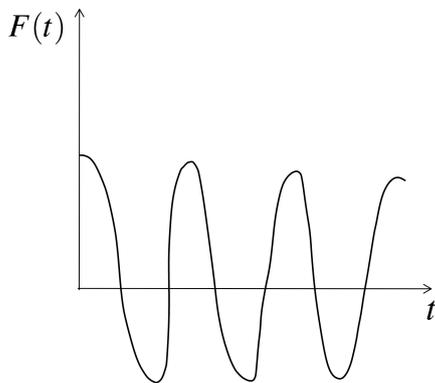


Рис. 8.4. Вид  $F(t)$  при дискретном спектре

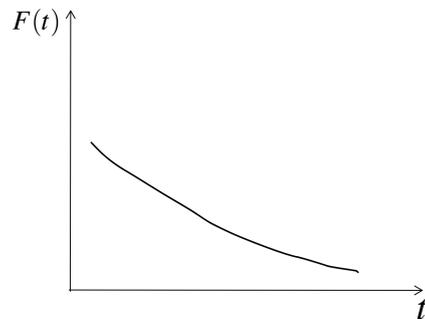


Рис. 8.5. Вид  $F(t)$  при непрерывном спектре

Пример задачи

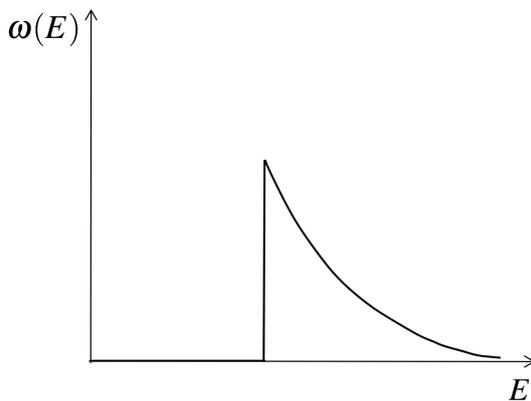


Рис. 8.6. Вид функции  $\omega(E)$

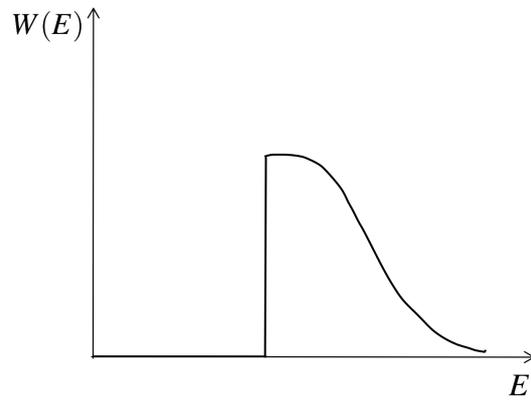


Рис. 8.7. Вид функции  $W(E)$

$$\omega(E) = \frac{1}{A} e^{\frac{E}{A}}$$

После интегрирования получим:

$$W(t) = \frac{1}{1 + \left(\frac{t}{\tau}\right)^2}$$
$$\tau = \frac{\hbar}{A}$$

*Фурье-образ от экспоненциальной функции – это функция Лоренца.*

Чем шире непрерывное распределение энергии (больше  $A$ ), тем меньше величина  $\tau$  и тем быстрее происходит распад.

Известны системы, в которых закон распада – экспоненциальная функция.

$$W(t) = e^{-\Gamma t}$$

Данные распады распространены в ядерной физике.

$$\frac{d\Omega}{dt} = -\Gamma\Omega$$

Распределение, соответствующее радиоактивному распаду

$$\omega(E) = \frac{1}{\pi} \frac{\frac{\Gamma}{2}}{(E - E_0)^2 + \left(\frac{\Gamma}{2}\right)^2} \quad (8.10)$$

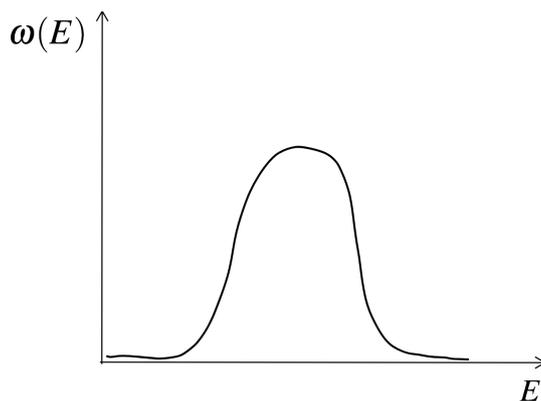


Рис. 8.8. Распределение системы радиоактивного распада

*Фурье-образ от функции Лоренца – это экспоненциальная функция.*

В эксперименте 1995 г. проверялась точность с которой сохраняется экспоненциальный закон распада ядер калия. В выводе указано, что за последние 4.5 млрд. лет величина  $\Gamma$  изменилась не более чем на 11 %.

Замечания:

- 1) Закон распада в точности экспоненциальным быть не может. Так как, для систем, существующих в природе, всегда есть основное состояние с конечной энергетической глубиной. Это значит, что невозможно существование состояний с бесконечно большой отрицательной энергией.
- 2) Точность экспоненциального закона распада может быть велика, но абсолютной быть не может. На данный момент остается нерешенной задача о нахождении экспоненциального закона распада при очень малых и очень больших временах.

*Является ли процесс испускания фотона нагретым телом или процесс радиоактивного распада совершенно случайным?*

Между излучением последовательных фотонов есть корреляция, тенденция к группировке. В случае радиоактивного распада никаких корреляций не найдено.

### Вывод

При вычислении интеграла Фурье от  $\omega(E)$  наиболее удобный метод – метод вычетов. У функции 2 полюса с энергиями  $E_0 + i\frac{\Gamma}{2}$ . Это значение энергии комплексно и не может быть использовано, так как собственные значения эрмитового оператора всегда представляют собой вещественные числа. Был найден альтернативный способ описания.

*Если функция – экспоненциально распадающаяся, то можно представить ее как состояние с комплексной энергией, где мнимая часть энергии будет связана со скоростью распада.*

При наличии мнимой части энергии закон эволюции содержит действительную часть, затухающую по экспоненциальному закону в точном соответствии с экспериментом.

С одной стороны есть бесконечный набор состояний спектра, с другой стороны, можно считать, что есть только одно состояние дискретного спектра, распадающееся по экспоненциальному закону.

### Описание постулатов Бора

Возбужденное состояние атома может быть описано как состояние с комплексной энергией. При этом мнимая часть энергии на 6 - 7 порядков меньше по величине, чем разность вещественных энергий.

Для избежания противоречия двух постулатов Бора друг другу следует добавить постулат, в котором говорится, что время жизни возбужденного состояния в типичных состояниях намного больше, чем частота излучения.

### Повторение

Если гамильтониан представлен в виде:

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\vec{r}) \text{ — координатное представление}$$

Ищем решение в пространстве функций, зависящих от координаты  $\Psi(x)$ .

$$\hat{H}\varphi = E\varphi$$

В случае описания функции  $\varphi(p)$  оператор координаты – это *оператор дифференцирования*.

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

Причина, по которой из двух представлений выбрана координатная, состоит в том, что чаще приходится сталкиваться с задачами, в которых потенциал описывается сложной формулой, а кинетическая энергия – простой.

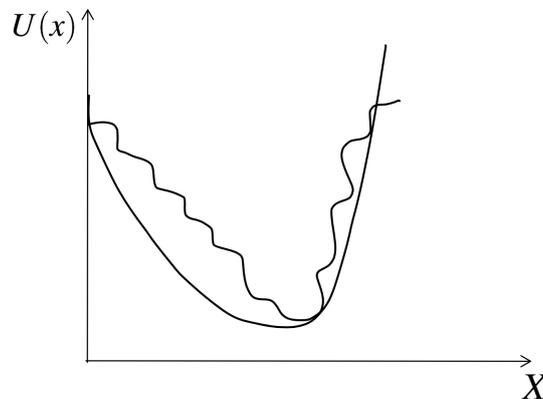


Рис. 8.9. Функция  $U(x)$

### Уравнения Шредингера в координатном представлении

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi$$

$(\vec{r}) = |\Psi(\vec{r})|^2$  — плотность вероятности нахождения частицы

Невозможно следить за поведением частицы непрерывно, так как *изменение координаты – это дискретный процесс, который происходит в ограниченной области пространства и занимает ненулевой интервал времени*. Траектория при малых промежутках времени может напоминать непрерывную прямую и мы можем сказать, что электрон движется в пространстве непрерывным образом.

Эволюция квантовой системы содержит информацию, позволяющую считать, что электрон, переходя из одного места в другое проходит через все промежуточные точки.

$$H = \frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{r})$$

Написанное соотношение говорит, что изменение вероятности частицы, находящейся в определенной области представляет собой следующую конструкцию:

$$\begin{aligned} \frac{dW}{dt} &= \frac{i}{\hbar} \int (-\psi^* \hat{H} \psi + \psi \hat{H}^+ \psi^*) dr \\ \frac{dW}{dt} &= - \int \operatorname{div} \frac{i\hbar}{2m} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi) dr - \text{дивергенция плотности потока} \\ \vec{j}(\vec{r}) &= \frac{i\hbar}{2m} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi) - \text{плотность потока вероятности} \\ \frac{d\rho}{dt} + \operatorname{div} \vec{j} &= 0 \end{aligned} \quad (8.11)$$

Формула 8.11 означает, что изменение пространственного распределения представляет собой поток неуничтожаемой жидкости. Изменение вероятности найти систему в одном из объемов связано с тем, что в этот объем что-то втекло через одну границу и вытекло через другую.

Уравнение Шредингера постулировано для того, чтобы дискретный энергетический спектр гамильтониана описывал картину излучения и не был привязан к построению пространственной структуры движения.

При анализе соответствующих выражений получили **теорему Эрэнфеста**.

**Определение 8.1.** Уравнения для средних значений скоростей изменения координат или импульсов получаются такими же, какие они должны быть по законам Ньютона.

*Побочным следствием выбранного способа построения оператора энергии и выбора конкретного координатного представления является то, что движение непрерывно в пространстве в силу того, что оно удовлетворяет уравнению непрерывности, выходящего из уравнения Шредингера.*

Это происходит несмотря на то, что нет физических средств следить непрерывно за эволюцией электрона.

## Лекция 9. Решение задач с помощью уравнения Шредингера Часть 2

Повторим две основных постановки задачи:

- 1) Поиск будущих состояний по результатам измерений, проведенных до начального момента времени;
- 2) Выяснение спектра соответствующего оператора.

Оговорено, что это довольно разные задачи. Можно определить возможные значения оператора не вычисляя уравнения движения. При выборе гейзенберговской теории, во-первых, наблюдаемые операторы должны зависеть от времени, что напоминает классическую картину.

Во-вторых, вторая часть выявления возможных значений хорошо коррелирует с уравнением Шредингера. Зная собственные значения гамильтониана, определяем спектр энергий, вычисляем набор значений частот переходов, и подтверждаем полученные результаты экспериментом.

Повторим: задача об эволюции – это Гейзенберговская картина, задача о спектре гамильтониана – картина Шредингера. Есть возможность из начального условия для уравнения Шредингера получить решение волновой функции для любого момента времени.

### Гейзенберговская картина

$$\frac{d\hat{L}}{dt} = \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{L}] \quad (9.1)$$

Эта картина не привязана к стационарным состояниям, которые в совокупности образуют начальные состояния системы.

*Можно ли в картине Гейзенберга найти стационарные состояния ?*

В частных случаях – да.

Рассмотрим поведение системы Гейзенберговских уравнений через матричные элементы операторов между стационарными состояниями системы.

$$\dot{Z} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{Z}]$$

При умножении данного выражения справа и слева на векторы  $n$  и  $k$  соответственно получим:

$$\begin{aligned}\dot{Z}_{nk} &= \frac{i}{\hbar}(E_n - E_k)Z_{nk} \\ \dot{Z}_{nk} &= \frac{i}{\hbar}\omega_{nk}Z_{nk}\end{aligned}\quad (9.2)$$

**Теорема 9.1.** *Какими бы ни были матричные элементы оператора  $\hat{Z}$ , вычисленные между волновыми функциями дискретного энергетического спектра, матричные элементы производного этого оператора между теми же состояниями получают-ся в результате умножения матричных элементов самого оператора на частоту перехода между этими состояниями.*

Согласно данной теореме мы можем получить уравнения, в которых будет стоять комбинация операторов. При однократном расчете матричных элементов оператора получим динамические производные.

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{p^2}{2m} + U(\vec{r}) \\ \dot{\hat{x}} &= \frac{\hat{p}}{m}\end{aligned}\quad (9.3)$$

$p_{nk} = im\omega_{nk}x_{nk}$  — матричный элемент импульса

Координаты и импульсы в совокупности дают полный набор динамических переменных в классической теории. В квантовых системах нужно строить операторы координат и импульсов.

*Как работают Гейзенберговские уравнения, если их применить к стационарным состояниям?*

Можем составить таблицу только матричных элементов координаты.

$$p = m \times v$$

Любая матрица конечного размера будет иметь поведение матричного элемента только в форме экспоненциального вращения фазы со скоростью равной частоте перехода.

**Важно:** *при увеличении разности квантовых чисел между двумя состояниями, матричные элементы уменьшаются. По мере увеличения  $k$ , увеличивается частота перехода  $\omega_{kn}$ .*

$$A_m = \sum |Z_{nk}|^2 \omega_{kn}^{2m+1} \quad (9.4)$$

где  $m$  — начальное состояние

В результате сложения сумма может как сходиться, так и расходиться.

$$\omega_{kn} = -\omega_{nk} \quad (9.5)$$

В выражении 9.4 частоты переходов в нечетной степени  $(2m + 1)$ . В степени стоит знак «+», следовательно, можем разделить данную степень на 2 множителя.

Используя соотношение 9.5 запишем:

$$A_m = -\frac{i}{2} \langle n | Z_{nk}^{m'} \times Z_{kn}^{(m+1)'} \left[ \frac{d^m Z}{dt^m}, \frac{d^{m+1} Z}{dt^{m+1}} \right] | k \rangle$$

*Если нужно вычислить для системы с дискретным энергетическим спектром сумму квадрата модуля матричного элемента из состояния  $n$  во все состояния  $k$ , то достаточно вычислить диагональный матричный элемент с начальным состоянием коммутатора  $t - \dot{t}$  и  $(t + 1) - \dot{t}$  производной по времени.*

В ходе преобразований была использована комбинация 9.6 матричных элементов  $nk$  и  $kn$ , в которых был показан оператор проектирования на векторы базиса.

$$\sum_k |k\rangle \dots |n\rangle \langle k| \dots |n\rangle \quad (9.6)$$

Вычислим два оператора и интеграл по функции

$$A_0 = \sum |x_{nk}|^2 \omega_{kn}$$

$$\frac{d^0 x}{dt^0} = x$$

$$\frac{d^1 x}{dt^1} = \dot{x} = \frac{p}{m}$$

$$A_0 = -\frac{i}{2} \left[ x, \frac{p}{m} \right] |n\rangle$$

Сумма квадратов матричных элементов координаты, умноженных на частоты переходов и просуммированных по всем значениям  $k$  пропорциональны коммутатору координаты и импульса.

$$A_0 = \frac{\hbar}{2m} \quad (9.7)$$

Важно: выражение 9.7 выполняется для любой системы.

В гамильтониан входят кинетическая и потенциальная энергии. Потенциальная энергия может быть представлена в виде осциллятора или горки. В данном случае результат оказывается универсальным.

Для каждого члена строилась следующая безразмерная величина – **сила осциллятора перехода**:

$$F_{kn}^x = \frac{2m}{\hbar} |x_{nk}|^2$$

**Теорема 9.2 (Теорема о суммах сил(теорема Томаса Рейхе Куна).** *Для любой квантовой системы с дискретным спектром и любого состояния  $n$ , сумма сил осцилляторов перехода из данного состояния во все остальные равна единице.*

Для любой системы, согласно данной теореме, можно оценить силу осциллятора. Сумма сил осциллятора подтверждает гипотезу о том, что чем больше разность квантовых чисел, тем меньше соответствующий матричный элемент. При умножении матричного элемента на частоту перехода полученная сумма сходится.

$$\begin{aligned} & kn \rightarrow \infty \\ x & \simeq o\left(\frac{1}{\sqrt{\omega}}\right) \end{aligned} \quad (9.8)$$

Матричные элементы перехода между далёким по энергиям состояниями убывают согласно 9.8.

При  $m = 1$

$$\begin{aligned} \frac{d^1x}{dt^1} &= \dot{x} = \frac{p}{m} \\ \frac{d^2x}{dt^2} &= -\frac{1}{m} \frac{\partial U(\vec{r})}{\partial x} \\ A_1 &= \frac{\hbar}{2m^2} \left\langle \left. \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \right| n \right\rangle \end{aligned}$$

*Величина комбинации для гармонического осциллятора – это жёсткость.*

Вторая производная или среднее значение более сложной функции  $U(\vec{x})$  также будет конечным. В представлении  $U(\vec{x})$  в виде кулоновского потенциала

$$U(\vec{r}) = \frac{1}{r}$$

Вторая производная по координате при условии, что функция находится в сферически симметричных состояниях (волновая функция зависит только от радиуса).

При сложении трех состояний, выраженных в виде частных производных второго порядка, получим оператор лапласиан.

*Лапласиан от кулоновского потенциала равен интегралу от дельта-функции по сферической поверхности.*

Показали: для любой системы у которой выполняются условия конечности средней жёсткости. Величина  $A_1$  оказывается конечна.

$$x_\delta \simeq o\left(\frac{1}{\omega^{\frac{3}{2}}}\right)$$

Степени  $\omega$  могут быть как четные, так и нечетные. Разница только в методах обработки. При четной степени  $\omega^{2m}$  разбивается на два множителя с  $m$  – производной по времени.

$$B_m = \sum |Z_{nk}|^2 \omega_{kn}^{2m}$$

$$B_m = \langle n | \left| \frac{d^m Z}{dt^m} \right|^2 | n \rangle$$

При  $m = 1$

$$\frac{d^1 x}{dt^1} = \dot{x} = \frac{p}{m^2}$$

$$B_1 = \frac{1}{2} \frac{\langle p^2 \rangle}{m^2} \quad (9.9)$$

Кинетическая энергия конечная при большом наборе условий.  $p^2$  – это также оператор дифференцирования по  $x$ . Следовательно имеем 2 направления кинетической энергии и лапласиан.

*Лапласиан - среднее значение волной функции.*

Приходим к выводу, что матричные элементы убывают достаточно быстро.

## Вывод

В типичных случаях чем больше конечное состояние отличается от начального, тем больше конечный матричный элемент и тем меньше соответствующая вероятность или скорость перехода.

## Разделение переменных

- 1) Потенциал зависит только от координаты. Движение по двум направлениям описывается как свободное движение. Примеры таких функций: слоистые системы;
- 2) Переменные в которых удаётся произвести разделения не всегда декартовы. Такие задачи преобразования, как частица в центральном поле. Преобразование приводит к одномерному движению в некотором искусственном потенциале;
- 3) Всегда нужно рассмотреть редуцированные до предела квантовые задачи т.е. максимально упрощённые задачи.

Рассмотрим действие кинетической энергии на волновую функцию в координатном представлении.

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

Функция  $U(x)$  должна быть произвольной.

### Схема решения нестационарного уравнения Шредингера

Для составления решения уравнения нужно знать спектр энергий и соответствующие стационарные функции.

Есть решения при которых функция, удовлетворяющая уравнению Шредингера, принадлежит пространству  $L_2$ , в котором следующий интеграл равен 1.

$$\int |\psi(x)|^2 dx = 1 \text{ — условие принадлежности дискретному спектру}$$

Плотность вероятности  $\psi(x)$  проинтегрированная по длине от  $-\infty$  до  $\infty$  позволяет сказать, что существует такой отрезок, на котором сосредоточена почти вся вероятность найти частицу.

Такое поведение аналогично **финитному движению частицы**, когда известно, что существует конечный интервал, на котором вероятность найти частицу равна 100 %.

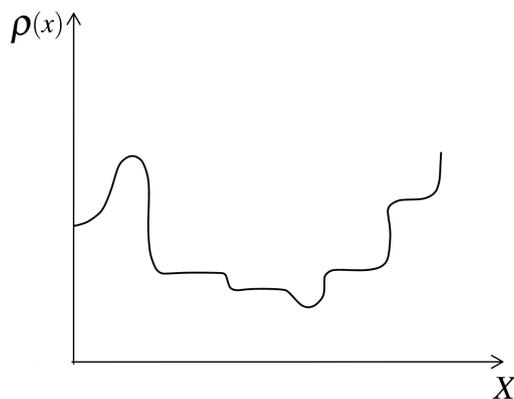


Рис. 9.1. Произвольное распределение плотности вероятности на всем интервале длины

*При каких значениях энергии частица будет совершать финитное движение?*

Для того, чтобы при заданных значениях энергии движение частицы было финитным, нужно, чтобы она совершала колебания. При колебаниях в точке пространства

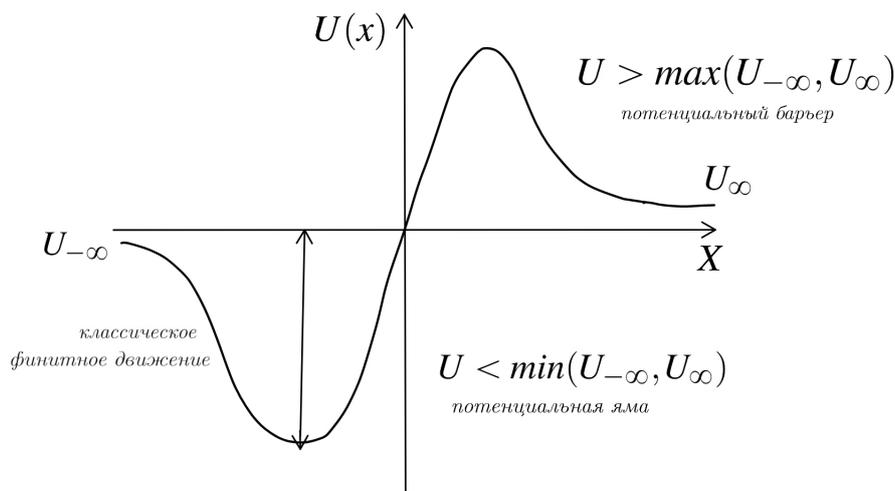


Рис. 9.2. Изображение потенциальной ямы и потенциального барьера

частица имеет как положительную, так и отрицательную скорость. Частица может поворачиваться, в точках поворота кинетическая энергия равна нулю и полная энергия равна потенциальной. Если точек две, то весь интервал между двумя точками – это область финитного движения классической частицы.

В квантовой системе финитность движения имеет вероятностный характер. В диапазоне классического финитного движения могут быть квантовые связанные состояния дискретного спектра, но с определённой вероятностью.

При локализации частицы в маленькой области пространства мы сообщаем ей неопределённость и импульс. Чем уже область, тем больше выталкивающая сила Гейзенберга - Шредингера.

В одномерном случае узнать наличие в системе связанных состояний достаточно просто. Если в системе есть только потенциальная яма  $U(x) < 0$ , то в таких системах есть хотя бы одно связанное состояние.

### Ключевые вопросы

*Что будет с ямой, если её глубину увеличить в 2 раза?*

*Что будет происходить с интервалами между уровнями состояний при повышении энергии?*

При повышении энергии (область энергии пересекает оси абсцисс) частица либо отразится от барьера либо пройдёт через него. Отметим, что в квантовой системе должна быть ситуация аналогичная классической, но с оговорками.

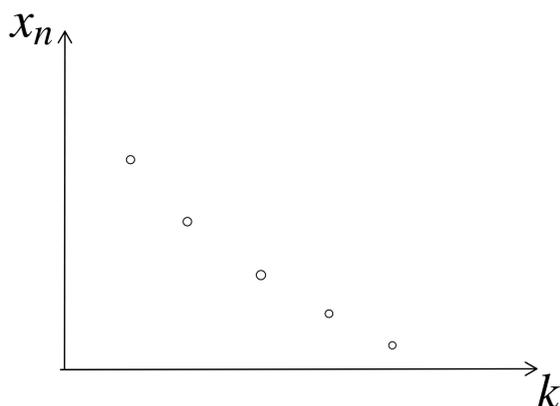


Рис. 9.3. Зависимость матричных элементов от k

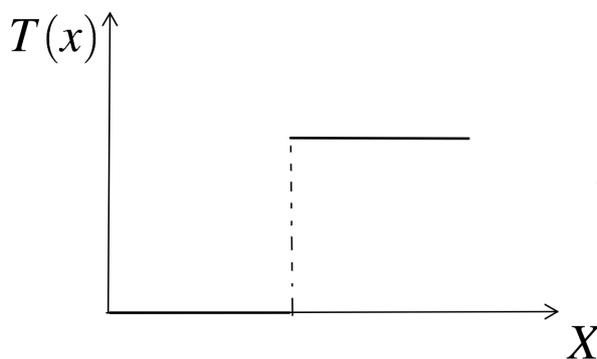


Рис. 9.4. Зависимость кинетической энергии от ширины ямы в классическом случае

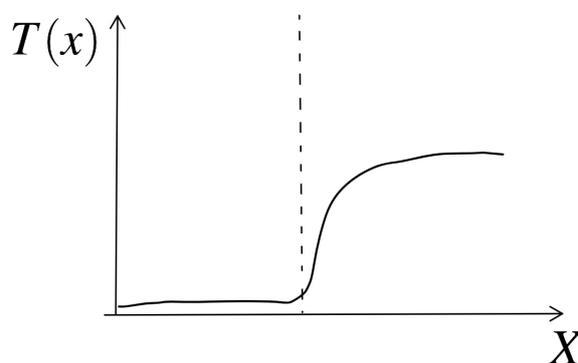


Рис. 9.5. Зависимость кинетической энергии от ширины ямы в квантовом случае

Мы имеем 2 параметра из уравнения Шрёдингера  $\hbar$  и  $m$ . 2 параметра, характеризующих яму: высота ямы  $U_0$  и ширина  $a$  и 3 масштаба: масса  $M$ , длина  $L$ , время  $T$ . Построим 3 квантовых масштаба и 1 безразмерный параметр.

При условии, что

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' - U_0\left(\frac{x}{a}\right)\psi = E\psi$$

$$y = \frac{x}{a}$$

Поделим все члены выражения на  $U_0$

$$\frac{\hbar^2}{2mU_0a^2}\frac{d^2\phi}{dy^2} - (y)\phi = \epsilon\phi$$

$$B = \frac{2mU_0a^2}{\hbar^2} \text{ -- Борновский параметр}$$

$$S = \frac{\sqrt{2mU_0a^2}}{\hbar} \quad (9.10)$$

- 1) Параметр  $S$  определяет меру классичности;
- 2) Формула 9.10 дает соотношение подобия. Если глубина ямы увеличилась в 4 раза, а ширина уменьшилась в 2 раза, число уровней в яме не поменяется.
- 3) Для случаев малых  $S$  мы имеем универсальную упрощённую модель, которая очень просто решается и ей можно заменить любой слабый потенциал. В противоположном случае мы имеем модель, которая может локально аппроксимировать потенциал. В промежутке между двумя этими моделями задачи решаются количественно.

Если потенциал достаточно быстро обращается в 0 на больших расстояниях.

$$\frac{\hbar^2}{2mU_0a^2} \frac{d^2\phi}{dy^2} = E\phi$$
$$\psi'' = \frac{2mE}{\hbar^2} \psi$$

Данное решение экспоненциальное и убывает по закону

$$\psi \simeq e^{-\kappa x}$$
$$\kappa = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Вне зависимости от того как устроена потенциальная яма, на достаточно большом расстоянии от неё волновая функция любого связанного состояния убывает по экспоненциальному закону и коэффициент скорости убывания пропорционален корню из энергии связи системы.

Мы можем предвидеть ситуацию, в которой потенциальная яма достаточно узкая, тогда скорость затухания представляет поперечник связанного состояния системы.

$$\kappa^{-1} \simeq \text{— поперечник}$$

Энергия связи может быть измерена по пороговым эффектам. Например, чтобы разорвать дейтрон на части нужно столкнуть его с энергией больше 2,2 МэВ. Чтобы узнать устройство дейтрона остаётся вычислить величину  $\kappa^{-1}$ . Это и будет эффективный поперечник дейтрона.

## Лекция 10. Исследование систем Часть 1

Запишем преобразованное уравнение Шредингера

$$-\frac{1}{B} \frac{d^2 \psi}{dy^2} = \epsilon \psi \quad (10.1)$$

$$B = \frac{2mU_0 a^2}{\hbar^2}$$

- 1)  $B \ll 1$  – ультраквантовые модели – то системы со слабым потенциалом (глубина и ширина ямы невелики);
- 2)  $B \gg 1$  – квазиклассические модели;
- 3)  $B \simeq 1$ . Как квантовые эффекты, так и классические.

### Исследование дискретного спектра с малым Борновским параметром

*Как меняется дискретный спектр при изменении параметра гамильтониана?*

В стационарном уравнении Шредингера гамильтониан зависит от параметра  $\lambda$  и, чтобы изменить параметр нужно взять производную от  $E(\lambda)$ .

$$\hat{H}(\lambda) \phi_n(\lambda) = E_n(\lambda) \phi_n(\lambda)$$

$$\frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} \phi_n + \hat{H} \frac{\partial \phi_n}{\partial \lambda} = \frac{dE_n}{d\lambda} \phi_n + E_n \frac{\partial \phi_n}{\partial \lambda} \quad (10.2)$$

$$\int \phi_n^* \phi_n dx = 1$$

$$\langle n | \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} | n \rangle$$

Оператор  $\hat{H}$  эрмитов и тогда комбинацию  $\phi_n + \hat{H} \frac{\partial \phi_n}{\partial \lambda}$  можем записать как

$$E_n \langle \phi_n | \frac{\partial \phi_n}{\partial \lambda} \rangle$$

Слагаемые в выражении 10.2 сокращаются и остается

$$\frac{dE_n}{d\lambda} = \langle n | \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} | n \rangle \quad (10.3)$$

где  $E_n$  – энергия дискретного уровня в системе с гамильтонианом, зависящим по параметру  $\lambda$ .

Уравнение 10.3 носит название **теоремы Гельмана - Фейнмана**. При изменении параметра  $\lambda$  можно сразу определить на какую величину поднимется или опустится уровень.

Продифференцируем уравнение 10.1 по  $B$

$$\frac{d\varepsilon_n}{dB} = \frac{1}{B^2} \langle n | -\frac{d^2}{dy^2} | n \rangle$$

$$\frac{d\varepsilon_n}{dB} = \frac{1}{B^2} \langle n | \left( -i \frac{d^2}{dy^2} \right)^2 | n \rangle$$

В любом мысленном состоянии среднее значение от произведения оператора на его эрмитово-сопряженные операторы неотрицательно.

$$\langle AA^+ \rangle \geq 0$$

$$\frac{d\varepsilon_n}{dB} \geq 0$$

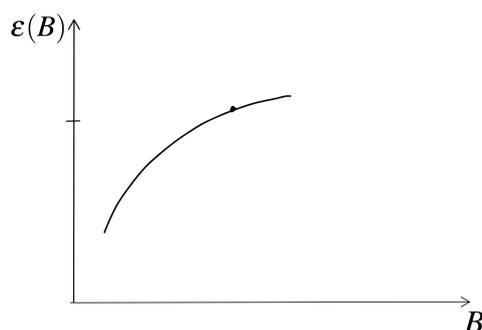


Рис. 10.1. Зависимость безразмерных уровней от параметра  $B$

Независимо от величины уровня, формы потенциальной ямы и значения Борновского параметра, при увеличении Борновского параметра величина энергии всегда возрастает. Чем больше ёмкость ямы (чем больше Борновский параметр), тем глубже уровень.

$\varepsilon_0$  – это энергия основного состояния, выступающая в виде произвольной монотонной функции, определённой в первом квадранте.

Существует 3 варианта поведения данной функции: функция выходит из начала координат, выходит из 0 при конечном значении аргумента и начинается из конечного значения при нулевом значении аргумента.

В каждом месте кривая может идти 3-мя способами: с нулевой, конечной и бесконечной производными.

Важно: если мы находимся в области где потенциалом можно пренебречь по отношению к величине энергии связи, то разрешено упростить уравнение Шредингера, оставив только члены со второй производной в левой части и с энергией, умноженной на волновую функцию, в правой части.

Волновая функция спадает по экспоненциальному закону.

$$e^{-\kappa x}$$

При уменьшении ширины и увеличении глубины ямы с условием, что  $U_0 a = const$ , борновский параметр будет стремиться к 0 (слабый потенциал). Представим, что все пространство находится в области вне ямы, тогда волновая функция дается выражением 10.4

$$\psi = \sqrt{\kappa} e^{\kappa|x|} \quad (10.4)$$

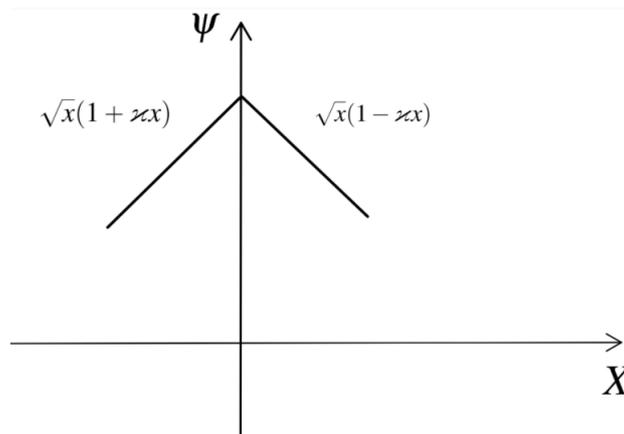


Рис. 10.2. Изображение первой производной волновой функции

Вторая производная выражается следующим соотношением:

$$\begin{aligned} \psi'' &= -\kappa 2x^{\frac{3}{2}} \delta(x) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} (-2x^{\frac{3}{2}} \delta(x)) + U(\vec{r}) x^{\frac{1}{2}} \\ U &= -\frac{\hbar^2 \kappa}{m} \delta(x) \end{aligned}$$

Потенциал имеет размерность энергии, умноженной на длину – это ёмкость дельта-ямы.

$$U = -q \delta(x) \quad (10.5)$$

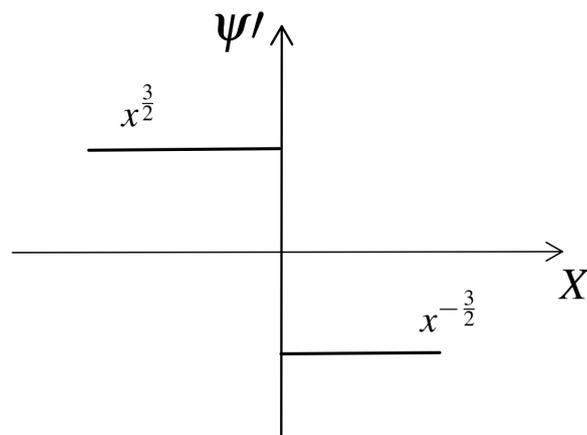


Рис. 10.3. Изображение второй производной волновой функции

При выборе потенциала в виде 10.5 в уравнении Шредингера будет единственное связанное состояние, в котором волновая функция будет иметь тот вид, в котором ее постулировали, а связь параметров  $\kappa$  и  $E$  станет:

$$\begin{aligned}
 q &= \frac{\hbar^2 \kappa}{m} \\
 q^2 &= \frac{\hbar^4 \kappa^2}{m^2} \\
 \kappa^2 &= \frac{2m|E|}{\hbar^2} \\
 \frac{\hbar^2 2m|E|}{m^2 \hbar^2} &= q^2 \\
 E &= -\frac{mq^2}{2\hbar^2}
 \end{aligned} \tag{10.6}$$

Данные выражения дают полное решение о дискретном спектре дельта-ямы. В потенциале ямы при любом положительном значении энергии существует только одно связанное состояние, энергия которого пропорциональна квадрату ёмкости ямы.

$$\begin{aligned}
 -q &= -\int U_0 \left(\frac{x}{a}\right) dx \\
 k &= U_0 a \int (y) dy \\
 E &= -\frac{mU_0^2 a^2 k^2}{2\hbar^2}
 \end{aligned}$$

Делим обе части выражения на  $U_0$

$$\varepsilon = \frac{-mU_0^2 a^2 k^2}{\hbar^2 4}$$
$$B = \frac{-mU_0^2 a^2}{\hbar^2}$$
$$\varepsilon_0 = B \frac{k^2}{4}$$

Какова бы ни была потенциальная яма, устроенная так, что сходящийся интеграл от потенциала по координате отрицателен, отношение энергии основного связанного состояния пропорционально величине Борновского параметра с коэффициентом пропорциональности  $\frac{k^2}{4}$ ,  $k$  – интеграл от формы потенциала по координате.

### Пример

$$f = e^{-\frac{y^2}{2}} \text{ -- Гауссова форма линии}$$
$$k = \sqrt{2\pi}$$
$$f = \frac{1}{1+y^2} \text{ -- Лоренцева форма}$$
$$k = \pi$$

### Вывод

Если Борновский параметр стремится к 0, то в одномерном случае остаётся одно единственное связанное состояние. В случаях  $B \simeq 1$  задача описывается качественно. При нахождении решения в ультраквантовой области классическая теория не применима.

Квантовый потенциал в одномерном случае достаточно силен, чтобы удержать частицу в области потенциальной ямы.

### Задача о двух дельта-ямах

Если в уравнении Шредингера стоит дельта-функция, то волновая функция слева и справа от дельта-функции имеет одинаковые значения, а её производная испытывает скачок, пропорциональный интегралу от дельта-функции.

$$U = -q\delta(x+a) - q\delta(x-a)$$

В любом месте функции представляют комбинацию вида

$$\psi = \alpha e^{\kappa x} + \beta e^{-\kappa x}$$

Потенциал  $U(x)$  является четным, а следовательно волновые функции в данном потенциале являются либо четными, либо нечетными. Причем волновая функция в основном состоянии является четной и не имеет узлов.

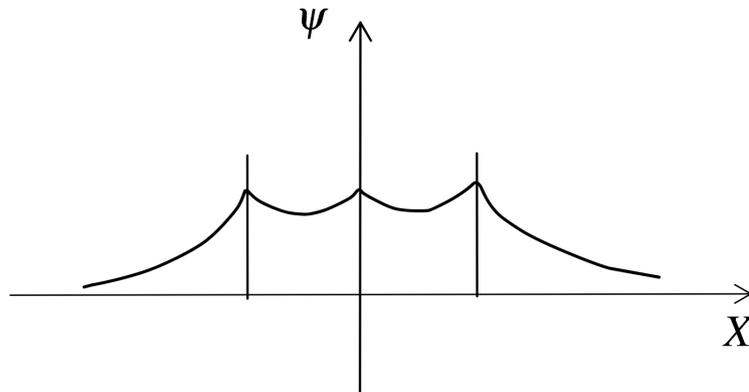


Рис. 10.4. Изображение волновой функции в случае двух потенциальных ям при  $n = 0$

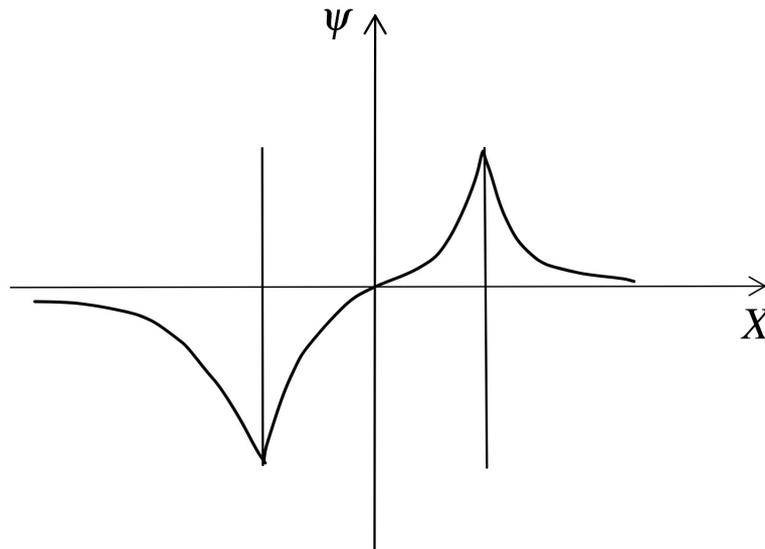


Рис. 10.5. Изображение волновой функции в случае двух потенциальных ям при  $n = 1$

Запишем величину, коррелирующую с величиной Борновского параметра

$$Q = \frac{2mqa}{\hbar^2}$$

Физический смысл – если  $Q$  мало, то ямы "наедут" друг на друга и сольются в одну яму и будет один уровень, при больших значениях  $Q$  ямы "разведутся" и уровней будет 2.

Независимо от расстояния между ямами возможны только состояния с двумя или одним энергетическим уровнем.

Пусть функция выражается  $\text{ch } \kappa x$  во внутренней области и  $Ae^{-\kappa x}$  во внешней. И выполняется соотношение (условие сшивания):

$$\begin{aligned} \text{ch } \kappa x &= Ae^{-\kappa x} \\ \psi'_R - \psi'_L &= \frac{2mq}{\hbar^2} \psi \\ -\kappa Ae^{\kappa q} - \kappa \text{sh} &= -\frac{2mq}{\hbar^2} \text{ch } \kappa a \end{aligned}$$

Получили систему из двух трансцендентных уравнений.

$$\begin{aligned} \kappa a &= z \\ z &= Q - z \text{th } z \end{aligned} \tag{10.7}$$

При любом значении параметра  $Q$  уравнение 10.7 имеет только 1 корень, что означает, что в задачах о двух  $\delta$  ямах с одинаковыми параметрами  $Q$  всегда существует связанное состояние, соответствующее четной волновой функции.

Возьмем случай малых  $Q$  и решим уравнение методом итераций, согласно которому сначала значение корня угадывается, а на последующих этапах угаданное значение подставляется в уравнение.

$$\begin{aligned} z_0 &= Q \\ z_1 &= Q - Q^2 \end{aligned}$$

При  $Q \ll 1$

$$E_0 = -2 \frac{mq^2}{\hbar^2}$$

Для нечетного случая

$$z = Q - z \text{cth } z \tag{10.8}$$

Уравнение 10.8 и его нечетное решение позволяют создать второй уровень дискретного спектра только в случае, когда  $Q > 1$ .

Рассмотрим поведение корня при  $Q \approx 1$ .

$$E = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} (Q - 1)^2$$

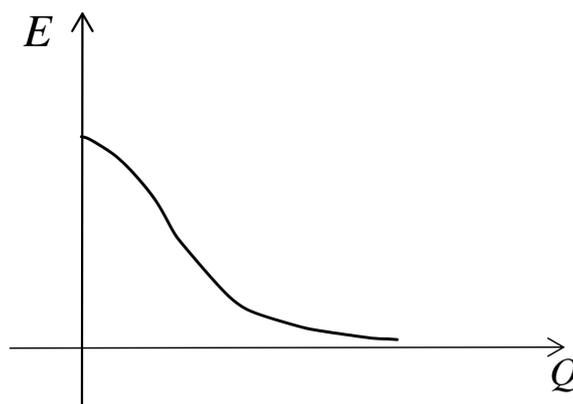


Рис. 10.6. Зависимость уровней энергии двух потенциальных ям от расстояния друг от друга (четный случай)

Оценим поправку с помощью следующего соотношения

$$\operatorname{th} z = \frac{e^z - e^{-z}}{e^z + e^{-z}}$$

$$\operatorname{th} z = \frac{1 - e^{-2z}}{1 + e^{-2z}}$$

$$\operatorname{th} z = (1 - 2e^{-2z})$$

Уровни будут сближаться и, расстояние между ними будет убывать по экспоненциальному закону.

Волновая функция, убывающая по экспоненте, дойдя до потенциальной ямы, трансформируется на ней с изменением на очень малую величину.

Точное решение уравнение Шредингера для модели двух далеких друг от друга потенциальных ям показывает, что стационарным состоянием системы является то состояние, в котором частица с равными вероятностями находится в левой и правой ямах.

Важно: если две системы одинаковые (уровни в них в точности совпадают), то с точки зрения радиофизики системы находятся в точном резонансе. Система в точном резонансе обладает бесконечной восприимчивостью.

В нашем случае две ямы в точности одинаковые, у них в точности согласованы уровни, и даже очень слабого экспоненциального взаимодействия между системами достаточно, чтобы перестроить функцию на 50%.

## Лекция 11. Исследование систем. Часть 2

### Случай дискретного спектра в системах с малым Борновским параметром

$$B \ll 1$$

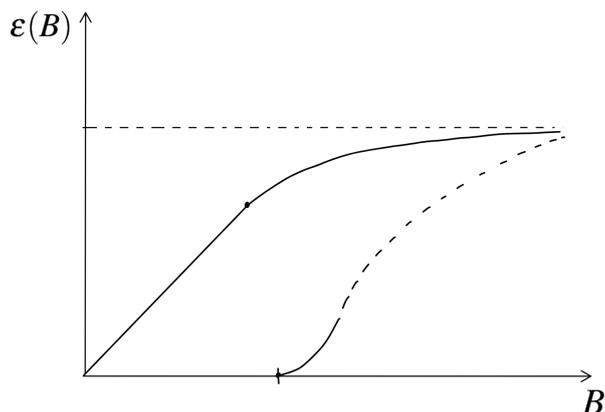


Рис. 11.1. Зависимость отношения уровня к глубине ямы от Борновского параметра

При малых  $B$  отношение уровня к глубине ямы растёт по линейному закону. Также доказано, что при любых  $B$  отношение продолжает расти. Этот рост ограничен единицей, так как уровень не может находиться под дном ямы.

На примере модели двух дельта ям, второй уровень появляется пороговым образом при превышении критического значения  $B_c$ . В окрестности этого значения глубина уровня растёт по квадратичному закону, а потом продолжается монотонный рост, ограниченный линией  $\epsilon_0$ .

### Случай дискретного спектра в системах с большим Борновским параметром

$$B \gg 1$$

Потенциал описывается гладкой функцией и имеет квадратичный минимум. Заменяем потенциал  $U(x)$  его разложением.

$$U(x) = U(x_0) + \frac{U''(x_0)}{2}x^2 \quad (11.1)$$

Модель гармонического осциллятора.

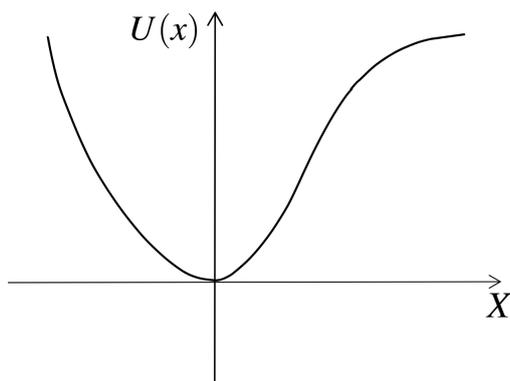


Рис. 11.2. Зависимость  $U(x)$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2} \quad (11.2)$$

В данной системе 3 размерных параметра :  $m$ ,  $\omega$  и  $\hbar$ . Мы можем построить систему масштабов:  $M$ ,  $L$ ,  $T$ . Эти величины изменяются с помощью масштабов, построенных из  $m$ ,  $\omega$  и  $\hbar$ .

$$L = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \text{ — осцилляторная длина} \quad (11.3)$$

Посчитаем соответствующую длину

$$\hbar \sim 10^{-27}$$

$$m \sim 10^{-23}$$

$$\omega \sim 10^{13}$$

$$L \sim 4 \cdot 10^{-9}$$

*Область, в которой локализуется состояние частицы, находящейся в таком потенциале при выбранных параметрах, оказывается в несколько раз меньше ширины характерной ямы.*

$L$  – это наименьшая возможная амплитуда колебаний в данной системе. Введём безразмерные операторы координаты и импульса.

**Осцилляторная система единиц**

$$\hat{x} = \hat{x} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \quad (11.4)$$

$$\hat{p} = \hat{p} \frac{1}{\sqrt{\hbar m\omega}} \quad (11.5)$$

На первом этапе выбираем 3 величины за эталон, чтобы построить систему масштабов. Если величин больше 3-х, то фиксируем набор безразмерных параметров.

*Вид ответа для любой задачи – это шаблон, составленный из систем единиц модели, умноженный на функцию от всех оставшихся величин, зависящую от безразмерных параметров.*

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

Выражение для коммутатора:

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

Коммутатор этих операторов:

$$\begin{aligned} [\hat{a}, \hat{a}^+] &= 1 \\ n &= \hat{a}^+ \hat{a} \end{aligned}$$

Задача решилась алгебраическими средствами. Мы взяли уравнение Шредингера в предположение, что найдена хотя бы одна собственная функция, умножили это уравнение слева на оператор  $\hat{a}$ . Получили собственную функцию с собственным значением на единицу меньше. И умножая слева на  $\hat{a}^+$  получили значение на 1 больше.

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{a}^+ \hat{a} + \frac{1}{2} \\ E_n &= \left( n + \frac{1}{2} \right) \end{aligned}$$

В осцилляторных единицах

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad (11.6)$$

Для того, чтобы оборвать цепочку преобразований, когда из функции получается та, значение которой на единицу меньше, введём допущение: *существует состояние, которое под действием оператора  $\hat{a}$  превращается в 0*. Среднее значение двух эрмитово-сопряженных операторов должно быть неотрицательно.

$$\hat{a}\psi_0 = 0 = \psi_{-1}$$

$$x\psi_0 = -\frac{d\psi_0}{dx}$$

$$\psi_0 = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-x^2/2}$$

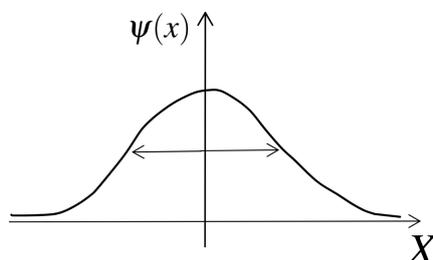


Рис. 11.3.  $\psi(X)$

Нужно нормировать функцию, т.е. добавить такой множитель, что при возведении в квадрат и последующем интегрировании по всей области была единица.

$$\hbar\omega \sim \sqrt{\frac{U_0\hbar^2}{ma^2}} \text{ — нормированная функция}$$

*Сколько уровней энергии находятся в потенциальной яме на 11.3?*

Коэффициент  $\frac{U''(x_0)}{2}$  — это вторая производная от потенциала, взятая в точке минимум, по порядку величины равна  $\frac{U_0}{a}$

$$m\omega^2 \sim U_0^2$$

Узнаем число уровней  $N$  в яме глубиной  $U_0$ , если в ней лежат уровни величины  $\hbar\omega$ .

$$N \simeq \frac{U_0}{\hbar\omega} \simeq \sqrt{\frac{ma^2U_0}{\hbar^2}}$$

Видим, что в аргументе уровня стоит Борновский параметр с отсутствием коэффициента 2.

$$N \simeq \sqrt{B} \tag{11.7}$$

Решение конкретной задачи дискретного спектра уравнения Шрёдингера для частицы, находящейся в потенциале известной формы, ширины и безразмерными параметрами это не проблема. Вопрос состоит в том, чтобы выбрать параметры и форму

неизвестного потенциала. В данном курсе не затрагиваются вопросы о нахождении точной формы потенциала, рассмотрим картину потенциала в целом.

В потенциальной яме потенциал должен убывать достаточно быстро на больших расстояниях. Применяя к этой системе модель гармонического осциллятора, мы получили, что количество уровней энергии спектра пропорционально корню из Борновского параметра.

Для молекулы азота  $B \simeq 200$  и  $N \simeq 14$  (14 уровней энергии).

Для схождения задачи нужно, чтобы  $L$  была мала по сравнению с шириной ямы.

$$L = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \ll a$$

$$\omega \simeq \frac{U_0}{\hbar\sqrt{B}}$$

$$\frac{L}{a} = \sqrt{\frac{\hbar\hbar\sqrt{B}}{mU_0a^2}} = \sqrt{\frac{\sqrt{B}}{B}} = \sqrt{\frac{1}{\sqrt{B}}}$$

$$\frac{L}{a} = B^{-\frac{1}{4}} \quad (11.8)$$

*Отношение пространственной области локализации основной функции (или амплитуды наименьшего колебания квантованного осциллятора) к характерной частоте ямы даётся с точностью до коэффициента Борновского параметра со степенью  $-\frac{1}{4}$ .*

Отметим, что значения Борновского параметра в задачах о колебаниях частиц лежат в диапазоне от нескольких сотен до нескольких десятков тысяч. Данные системы различны по своим свойствам, так как  $B$  выступает в качестве управляющего параметра.

## Задача трёхмерного движения заряженной частицы в постоянном однородном магнитном поле

Гармонический осциллятор обладает свойством изохронности. Это пример системы, у которой частота движения не зависит от начальных условий.

На заряд в магнитном поле действует сила Лоренца, направленная по результирующему вектору произведения вектора скорости и вектора напряжённости магнитного поля. Сила, действующая на заряд, направлена в горизонтальной плоскости.

$$z(t) = z_0 + v_{0z}t$$

По вертикали частица движется равномерно и прямолинейно

$$x(t) = x_0 + \frac{v_{0x}}{\omega} + R \cos \omega t + \varphi$$

По горизонтали действует сила, величина которой пропорциональна  $\hbar$ , скорости и заряду, возникает движение по окружности.

$$y(t) = y_0 + \frac{v_{0y}}{\omega} + R \sin \omega t + \varphi$$

$$\varphi = \arctan \left( \frac{v_{0x}}{v_{0y}} \right)$$

$$R = \frac{mc}{e\mathcal{H}} v_{0r}$$

$$\omega = \frac{e\mathcal{H}}{mc} \quad (11.9)$$

- 1) Частота движения по горизонтальной плоскости не зависит от начальных условий. Это позволяет говорить, что квантовое решение дает соотношение, где будет работать модель гармонического осциллятора.
- 2) Картина описывающая пространственное движение представляет собой спираль. Движение равномерно по окружности в плоскости  $XY$ , на которое наложено равномерное движение в вертикальном направлении.

Вдоль направления  $z$  частица не локализована, но в направлениях  $x$  и  $y$  движение классической частицы остаётся ограниченным. Получается, что магнитное поле, направленное вдоль  $z$  создаёт сжимающую силу, которая заставляет двигаться частицу по прямой линии, проходящей через центр орбиты.

Замечание: мы не имеем выделенной точки (магнитное поле всюду имеет одинаковую напряжённость и направление). Следовательно, нельзя выбрать точку, вокруг которой будет закручиваться орбита. Мы думаем, что орбита локализована, но не понятно почему она локализована именно в выбранной точке пространства, которая ничем не отличается от любой другой точки. Отметим, что невозможно определить центр орбиты, так как координаты  $x$  и  $y$  одновременно коммутируют.

В задаче 3 степени свободы и 6 динамических уравнений, 6 начальных условий, 3 компоненты координаты и 3 компоненты скорости. Данная задача была решена Ландау в 1930 г.

Величину  $\omega$  принято называть **циклотронной частотой**.

$$\omega \sim 10^8 \text{ Гц}$$

Создание полей с такой частотой было распространено в 1930 г. Американский физик Лоренц использовал свойство, что в однородном постоянном магнитом поле с высокой степенью точности частота даётся выражением 11.9.

Четвёртый постулат говорит нам как строить квантовые модели по их классическим аналогам, в классе задач о движении заряженных частиц во внешнем переменном электромагнитном поле, которое задаётся векторным и скалярным потенциалами, зависящими от координат и времени.

Взаимодействие с магнитным полем описывается через построение гамильтониана, который включает в себя векторный потенциал от расстояния и времени.

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left( \hat{\vec{p}} - \frac{l}{c} \vec{A}(\vec{r}, t) \right)^2$$

Нужно построить  $H$  так, чтобы эта векторная величина соответствовала картине напряжённости поля, но это соответствие не позволяет описать функцию однозначно.

$$\vec{\mathcal{H}} = (\text{rot} \vec{A})$$

$$A_x = -\mathcal{H} y$$

$$A_y = A_z = 0$$

У ротора одна компонента по  $x$ . Раскрываем скобки:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1}{2m} \left( \hat{p}_x + \frac{e\mathcal{H}}{c} y \right)^2 + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m} \\ \hat{H} &= \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \omega \hat{p}_x \hat{y} + \frac{m\omega^2}{2} y + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m} \end{aligned} \quad (11.10)$$

Гамильтониан заряженной частицы в однородном постоянном магнитом поле с напряжённостью, имеющей вертикальное направление, может быть представлен как сумма кинетических энергий, члена, зависящего от  $y$  линейным образом и члена, зависящего от  $y$  квадратичным образом.

В классическом случае была выделена вертикальная компонента и однородное пространство вокруг неё. Оси  $x$  и  $y$  были неразличны, от их поворота картина не менялась. Сейчас мы видим, что оси  $x$  и  $y$  потеряли свою симметрию. Это возникло, когда был выбран векторный потенциал таким образом, что свойства вдоль  $x$  и  $y$  различаются.

Согласно полученной формуле у нас есть потенциал, пропорциональный квадрату  $y$ , который создаёт стенку, обжимающую движение вдоль оси  $y$ . Вдоль оси  $x$  потенциальных ограничений нет.

В данном случае можно сделать компромиссный потенциал, зависящий и от  $x$  и  $y$ , и который при повороте не будет изменять свои свойства. Но это означает, что, решая задачу, мы привлекаем дополнительные сведения о начальных условиях, у которых нет классического аналога.

$$\psi = e^{i\frac{p_x x}{\hbar}} e^{i\frac{p_z z}{\hbar}} \varphi(y)$$

В случае движения по оси  $y$  есть потенциал, который содержит квадратичную компоненту и линейную компоненту, а по оси  $x$  и  $z$  движение свободное. Подставляем это в уравнение Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \varphi'' + \frac{m\omega^2}{2} (y - y_0)^2 \varphi + \frac{p_z^2}{2m} \varphi = E \varphi$$

$$y_0 = -\frac{cp_x}{e\mathcal{H}}$$

*Движение по оси  $y$  – это движение в гармоническом осцилляторе, центр которого находится в точке с координатами  $y_0$ .*

Частица движется свободно вдоль оси  $x$ , но чем больше её импульс тем дальше сдвинут центр в сторону отрицательных значений.

$$E_{n,p_z} = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) + \frac{p_z^2}{2m}$$

Движение по оси  $x$  свободное, а следовательно инфинитное. Так как выбранные форма потенциала и постановка решения привели к суперпозиции круговых движений по  $x$  и  $y$  с разными положениями центров вдоль оси  $x$ . Вдоль оси  $y$  движение финитное.

Энергетический спектр в данном случае складывается из непрерывной и дискретной компонент. Уровни энергии дискретной компоненты называются **уровнями Ландау**.

### Координаты центра орбиты в классической задаче

$$x_0 = \frac{1}{m\omega} p_y$$

$$y_0 = -\frac{1}{m\omega} p_x$$

Если по правилу соответствия заменить величины  $x$  и  $y$  их операторами, то их коммутатор будет выражен формулой:

$$[\hat{x}_0, \hat{y}_0] = -i\frac{\hbar}{m\omega} \quad (11.11)$$

$$L = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} = a_H$$

Вспомним, что если 2 оператора не коммутируют, то можно найти соотношение неопределённости, которое показывает как корень из дисперсии связан со средним значением коммутатора.

$$\Delta x_0 \Delta y_0 \geq \frac{1}{2} \frac{\hbar}{m\omega}$$

$$a_H = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} = \sqrt{\frac{\hbar c}{e\mathcal{H}}}$$

Можем взять векторный потенциал с двумя компонентами.

$$A = \left\{ -\frac{1}{2}\mathcal{H}_y + \frac{1}{2}\mathcal{H}_x, 0 \right\} \quad \text{магнитное поле с напряжённостью } H \text{ вдоль оси } z$$

Видим, что в выражении есть квадратичный потенциал вдоль  $x$  и  $y$ , это означает, что возможные состояния локализованы в двух направлениях, а величина области локализации есть  $a_H$ .

$$\omega = \frac{e\mathcal{H}}{mc} = 1.7 \cdot 10^{11} \text{ 1/c}$$

Подставляем выражение для  $H$  и найдём  $a_H$ .

$$a_H = 2.5 \cdot 10^{-6} \text{ см}$$

Размер атома водорода (размер электронного облака) равен половине ангстрема. Причиной этого является то, что на электрон действует сила электрического поля с напряжённостью  $H = 6 \cdot 10^{-9}$ .

Поле в 1000 раз слабее атома и радиус локализации в 1000 раз больше. Чем больше сила, действующая в системе, тем меньше радиус локализованных состояний.

Рассмотренная модель, в которой заряженная частица движется в однородном магнитном поле, некорректна. Так как электрон и протон, кроме заряда, обладают также магнитным моментом.

Для того, чтобы учесть наличие магнитного момента и его взаимодействие с полем нужно к гамильтониану прибавить гамильтониан, описывающий магнитный момент.

$$H_{e,p} = H_{charge} + H_{Pauli}$$

$$H_p = -\mu \hat{\sigma}_z \mathcal{H}$$

$\sigma_z$  – третья из матриц Паули.

$$\mu = \frac{e\hbar}{2mc} \quad \text{магнетон Бора}$$

$$\Delta E = 2\mu\mathcal{H} = \frac{e\hbar}{mc}\mathcal{H} = \hbar\omega \quad \text{разность верхнего и нижнего уровней}$$

Расстояние между двумя энергетическими уровнями электрона, находящегося в заданном пространственном состоянии с напряжённостью  $\mathbf{H}$ , равно разности энергий между двумя уровнями Ландау.

Отношение магнитного момента электрона к магнитному моменту магнетона Бора есть величина с двумя поправками.

$$\frac{\mu_{el}}{\mu_B} = 1 + \frac{\alpha}{2\pi}$$

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \quad \text{постоянная тонкой структуры}$$

- 1) Система представляет собой более гармонический осциллятор, чем тот, что был показан в начале.
- 2) Спектр сильно отличается от того, который есть у гармонического осциллятора, после того, как число уровней превысило несколько десятков.

$$\omega \sim 10^{11} \quad 1/c$$

$$\hbar\omega \sim 10^{16} \quad 1/\text{эрг}$$

*При какой энергии начнёт проявляться ангармонизм в задаче в движении частицы в однородном постоянном магнитном поле?*

Мы можем пользоваться этой моделью пока скорость намного меньше  $c$ . Энергия электрона движущегося со скоростью порядка  $c$  равна  $mc^2 = 10^{-6}$  эрг. Следовательно, номер уровня, на котором начнутся расхождения будет порядка  $N \sim 10^{10}$ . При увеличении  $B$  уровни будут приближаться к предельно возможным.

## Вывод

Если яма мала, то нужно заменить её дельта-ямой.

Если ям несколько, то нужно заменить каждую яму дельта-ямой и решение будет представляться с помощью волновых экспоненциальных функций.

Если потенциальная яма большая, то нужно нарисовать гармонический осциллятор, который аппроксимирует её дно. Утверждение о квантовании уровней гармонического осциллятора продолжает работать, но сужается до области где  $B \gg 1$ .

В случае центральной полосы работают модели ступенчатого потенциала или подбор тонких моделей.



## Лекция 12. Свойства решений одномерного стационарного уравнения Шредингера Случай дискретного спектра

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

Преобразовав уравнение к виду:

$$-\frac{1}{B} \frac{d^2\phi}{dy^2} - f(y)\phi = -\varepsilon\phi$$

$$B = \frac{2mU_0a^2}{\hbar^2} \text{ -- Борновский параметр}$$

Данный параметр характеризует силу потенциала.

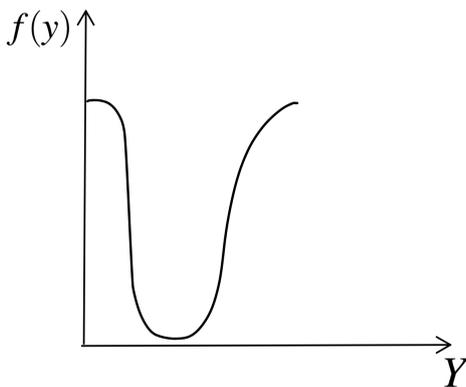


Рис. 12.1. Изображение функции, описывающей форму потенциальной ямы

$$\varepsilon = \frac{|E|}{U_0}$$

$$\frac{d\varepsilon}{Bt} > 0$$

Чем больше параметр  $B$ , тем глубже положение уровня связанного состояния.

Было выделено 3 класса задач:

1)  $B \ll 1$

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

2)  $B \sim 1$

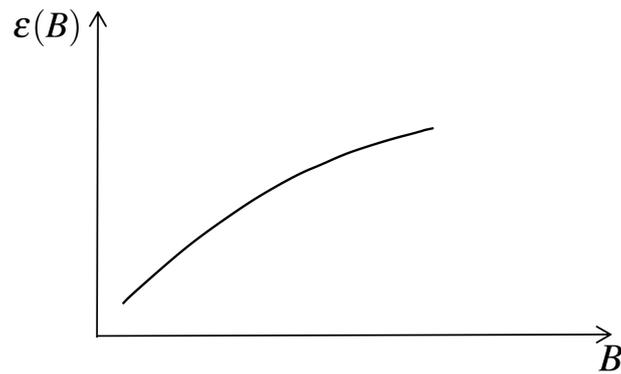


Рис. 12.2. Зависимость  $\varepsilon(B)$

3)  $B \gg 1$

$$U(x) \simeq +\frac{U(x_0)''}{2}x^2$$

$N \sim \sqrt{B}$  — число связанных состояний

Рассмотрим второй случай  $B \simeq 1$ .

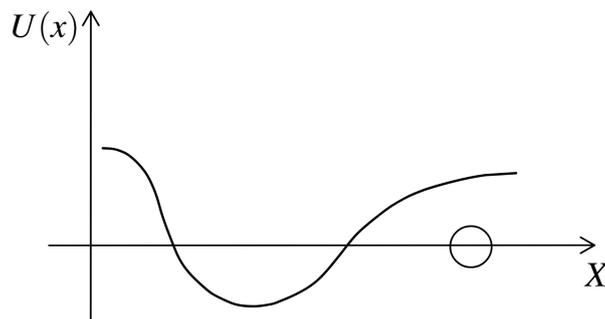


Рис. 12.3. Форма потенциальной ямы при  $D \simeq 1$

При рассмотрении потенциальной ямы в решении, где  $|U(x)| \ll |E|$ , величиной потенциала можно пренебречь и уравнение Шредингера превращается в линейное дифференциальное уравнение с постоянными коэффициентами. Решением таких уравнений являются экспоненциальные функции.

$$\psi \sim e^{-\kappa x}$$

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

Возьмём потенциал, у которого все значения кусочно-постоянные.

$$-\frac{1}{B} \frac{d^2 \phi}{dy^2} - f(y)\phi = -\varepsilon \phi \quad (12.1)$$

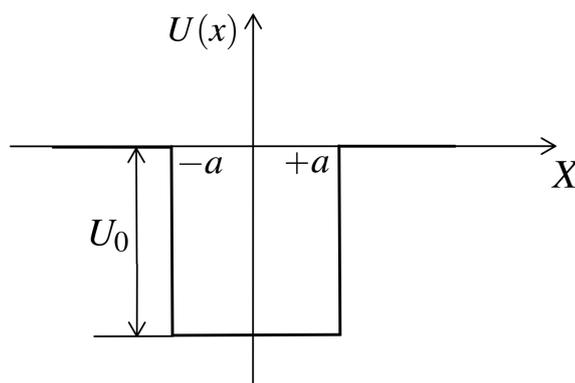


Рис. 12.4. Потенциальная яма, значения которого кусочно постоянные

Функция  $f(y)$  принимает значения 0 и 1. При дифференцировании функции, имеющей вид двух экспонент, мы заметили, что сама функция – непрерывная, её производная меняется скачком (величина скачка пропорциональна значению функции) и вторая производная даёт дельта-функцию.

Для нашей схемы, вторая производная всюду конечна и следовательно первая производная и сама функция должны быть всюду непрерывны.

В тех точках, где потенциал испытывает скачок возьмём решение уравнения и приравняем их друг к другу, подберём коэффициенты так, чтобы они сшивались гладко (сама функция и её производная непрерывны). Согласно 12.4 будем искать волновую функцию в виде:

$$\varphi \sim e^{iky}$$

Функция - экспоненциальная, будем строить вещественную функцию, так как задача одномерная.

$\varphi \cos ky$  – – нижний уровень

$\varphi = Ae^{-iky}$  – – за границей потенциальной ямы

Параметр  $\varepsilon$  нужно подобрать так, чтобы функции стыковались гладко.

$$\operatorname{tg} \sqrt{B(1-\varepsilon)} = \sqrt{\frac{\varepsilon}{1-\varepsilon}}$$

Данное трансцендентное выражение будем исследовать приближенными методами. Если  $B \ll 1$ , то аргумент тангенса не превосходит  $\sqrt{B}$  и можно тангенс малого угла заменить самим углом.

$$\sqrt{B(1-\varepsilon)} = \sqrt{\frac{\varepsilon}{1-\varepsilon}}$$

Возводим в квадрат

$$\begin{aligned} B(1-\varepsilon) &= \frac{\varepsilon}{1-\varepsilon} \\ \varepsilon &= B(1-\varepsilon)^2 \end{aligned} \tag{12.2}$$

Если  $B$  мало, то получаем нулевое решение:

$$\varepsilon_0 \approx B$$

Подставляем нулевое решение и получаем первое решение:

$$\varepsilon_1 \approx B(1-B)^2 = B - 2B^2$$

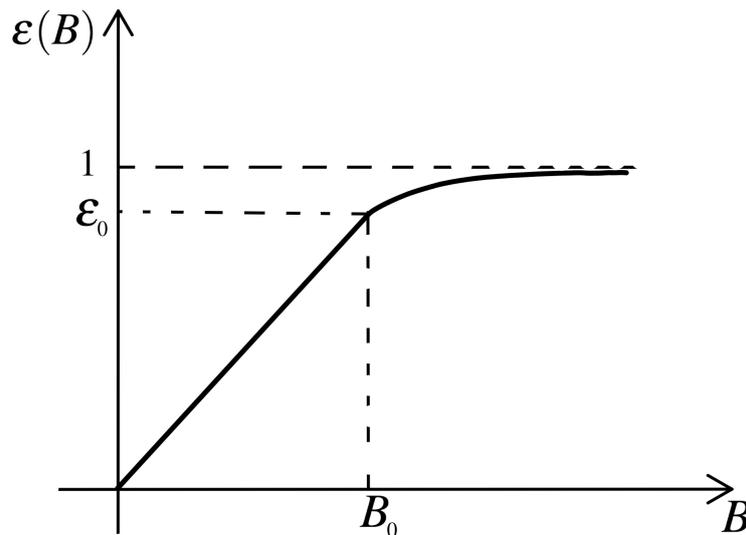


Рис. 12.5. Зависимость глубины уровня, отнесенная к глубине потенциальной ямы

При малых  $B$  данная зависимость имеет линейный характер, при увеличении аргумента происходит замедление скорости роста. Прямоугольная яма попадает в класс микроям, у которых имеется только 2 параметра - глубина и ширина.

Если  $B \gg 1$

На рисунке 12.6 видим, что при малых значениях  $\varepsilon$  зависимость коренная, при больших  $\varepsilon$  - сингулярность  $\frac{1}{\sqrt{1-\varepsilon}}$ .

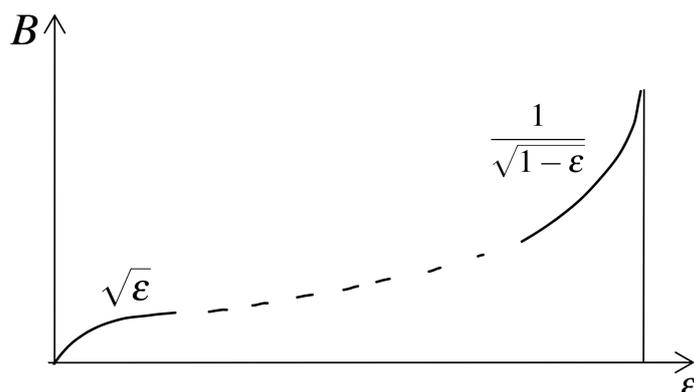


Рис. 12.6. Зависимость Борновского параметра от глубины уровня потенциальной ямы

Пока  $\varepsilon$  пробегает значения от 0 до 1, аргумент тангенса пробегает значения от 0 до  $\sqrt{B}$ . Тангенс изображается последовательностью ветвей, каждая из которых занимает полосу шириной  $\pi$ . На каждом изменении аргумента от  $x$  до  $x + \pi$  будет одна линия.

Количество ветвей равно количеству четных решений порядка  $\sqrt{B}$ , деленное на ширину соответствующей полосы. Точность выше, чем у осцилляторной модели. Найденное решение относится к случаю чётных волновых функций.

$$N_g \simeq \frac{\sqrt{B}}{\pi} \quad (12.3)$$

*Число уровней дискретного спектра в потенциальной яме с большим Борновским параметром пропорционально корню из Борновского параметра.*

Такой тип зависимости существенно не связан с формой потенциальной ямы. Соотношение 12.3 справедливо для потенциальных ям произвольной формы.

$$\operatorname{tg} \sqrt{B(1-\varepsilon)} = \sqrt{\frac{1-\varepsilon}{\varepsilon}} \text{ — трансцендентное уравнение при нечетной функции}$$

Если  $\varepsilon \rightarrow 0$ , то числитель стремится к 1 и возникает сингулярность  $\frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}$ . При  $\varepsilon \rightarrow 1$  кривая обращается в 0.

При  $B \ll 1$ , будет только 1 связанное состояние. При увеличении  $B$  первое нечетное значение, соответствующее второму связанному состоянию, появится когда  $\sqrt{B} = \frac{\pi}{2}$ .

$B_c = 2.47$  — критический Борновский параметр. Получили картину, которая напоминает задачу о двойной дельта-яме.

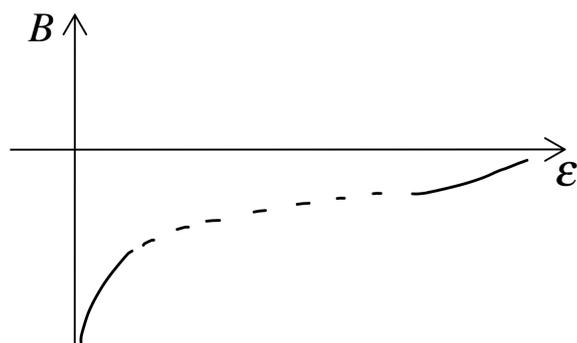


Рис. 12.7. Вид линии зависимости второго уровня

Заключение: детали формы потенциальной ямы не влияют на решение функции. Описание короткодействующих потенциалов, которые убывают быстрее  $\frac{1}{r}$ , можно заменить прямоугольной потенциальной ямой.

Пример: потенциал взаимодействия нуклонов. У двух нуклонов существует единственное связанное состояние. Волновая функция такой системы состоит из  $\cos x$  и  $\exp(x)$ .

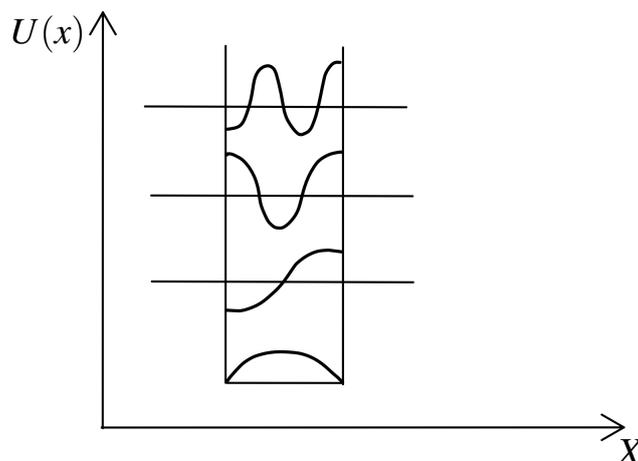


Рис. 12.8. Вид волновой функции при повышении стенок потенциальной ямы

*При возрастании высоты барьера будет происходить рост Борновского параметра. Волновая функция за пределами области потенциальной ямы будет становиться круче, но в потенциальной яме она будет иметь тот же вид.*

При бесконечно высоких стенках можем наложить условие  $\varphi(a) = 0$ .

При увеличении высоты будет увеличиваться количество полуволен у функции. Все полученные полуволены будут обращаться в 0 на границе ямы. Для этого необходимо, чтобы коэффициент  $k$  был пропорционален обратной длине интервала между стенками. Энергия будет расти пропорционально квадрату целого числа полуволен.

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8 m a^2} n^2 \quad (12.4)$$

*Примеры описания частицы в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками.*

Знаем, что внутри ямы частица ведёт себя как свободная, а за её пределы частица не выходит. Пример такой свободной частицы - электрон.

Предположим, что металл - система в которой присутствуют свободные электроны (модель Друде). При появлении квантовой теории, было предложено рассматривать металлы как системы свободных невзаимодействующих электронов, которые не могут выйти за границы этого тела. Вместо куба, через стенки которого нельзя проникнуть, удобно представлять куб, на границах которого наложено условие периодичности волновой функции.

$$e^{ikx} = e^{ik(x+L)}$$

где  $L$  – размер куба.

$$\begin{aligned} kL &= 2\pi n \\ k &= \frac{2\pi}{L} n \\ E &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{4\pi^2 \hbar^2}{L^2 2m} n^2 \end{aligned}$$

Для куба с граничными условиями спектр такой же, как для электрона в непроницаемом кубе.

Описанная структура называется **кубом квантования**. Увеличивая величину  $L$ , можно получить сколь угодно плотный спектр, полученный в кубе квантования. Такой спектр можно приближенно считать непрерывным спектром. Но также имея возможность непрерывный спектр представить дискретным можно "выиграть" в технике расчётов.

Для того чтобы уверенно описать свойства системы в бесконечном пространстве нужно предположить, что система заперта в ограниченном пространстве, провести расчёты и увеличить размер до бесконечности.

Существует 2 способа решения уравнение Шредингера для  $B \simeq 1$ . Первый мы уже разобрали, рассмотрим второй способ.

Для удобства возьмём четный потенциал.

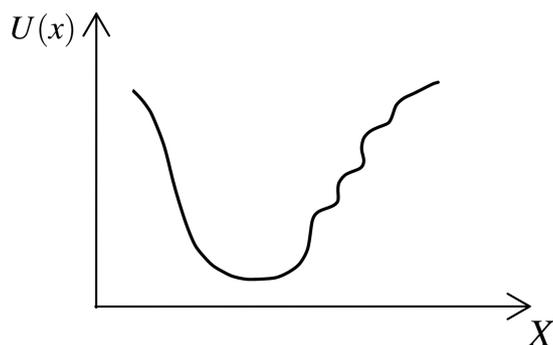


Рис. 12.9. Произвольная форма потенциальной ямы

$$U = U_0 e^{-\frac{x^2}{2a^2}}$$

$$-\frac{1}{B} \frac{d^2 \varphi}{dy^2} - e^{-\frac{y^2}{2}} \varphi = -\varepsilon \varphi$$

Разобьем данное дифференциальное уравнение на несколько уравнений первого порядка.

$$\psi' = \varphi$$

$$\varphi' = B(-e^{-\frac{x^2}{2}} + \varepsilon)\psi$$

Получили 2 дифференциальных уравнения первого порядка. Для численного решения зададим начальные условия. Поскольку потенциал честный, то в таком потенциале волновые функции дискретного спектра обладают определённой четностью.

Честность определяется выражением  $(-1)^n$ , где  $n$  – это главное квантовое число. Основное состояние описывается четной волновой функцией, следующее нечетной и т.д.

$$\psi'(0) = 0$$

$$\psi(0) = 1$$

Данные начальные условия выбраны вследствие линейности уравнения Шрёдингера. Решение уравнения невозможно без указания величины  $\varepsilon$ . Будем подбирать  $\varepsilon$ , зная что  $\varepsilon$  не может быть отрицательным (не существует ямы с отрицательной энергией) и  $\varepsilon$  не может быть больше 1 (уровень не может находиться под дном ямы). Следовательно, будем угадывать  $\varepsilon$  так, чтобы численное решение пошло как показано на 12.10.

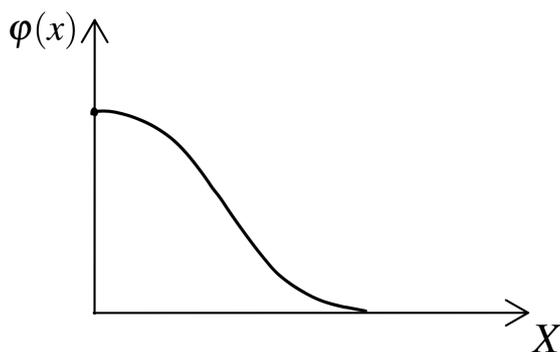


Рис. 12.10. Зависимость  $\varphi(x)$

Если  $\varepsilon$  выбрано неправильно, то асимптотика решения на больших значения координаты будет содержать одну функцию с правильной асимптотикой и одну функция с неправильной асимптотикой. При изменении параметра  $\varepsilon$  асимптотический коэффициент будет меняться, проходя через 0.

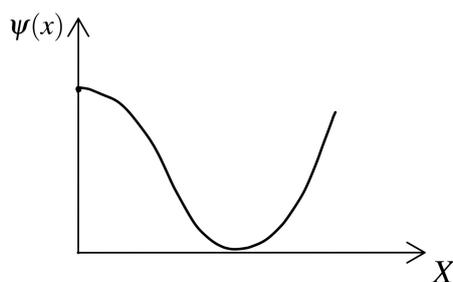


Рис. 12.11. Вид волновой функции при значениях параметра  $\varepsilon_1$

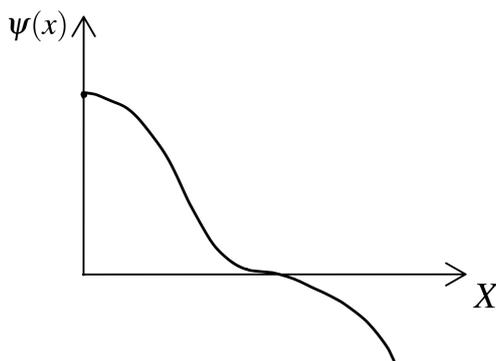


Рис. 12.12. Вид волновой функции при значениях параметра  $\varepsilon_2$

Если при значениях параметра  $\varepsilon_1$  функция имеет вид на рисунке 12.11, а при значениях параметра  $\varepsilon_2$  функция имеет вид на рисунке 12.12, то нужно взять  $\varepsilon_3$ , равную  $\varepsilon_3 = \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2}$  и проследить ход кривой. Если функция при усреднении  $\varepsilon$  не

превратилась в 0, то повторить усреднение относительно новых полученных кривых. Данный метод носит название **метод стрельбы**.

Данный метод подходит и для симметричных и для асимметричных потенциалов. Есть ещё один метод решения задачи о спектре системы, описывающего частицу в потенциале. Данный метод состоит в том, чтобы построить матрицу гамильтониана. Для данной матрицы нужно взять базис, который выбирается из соображения удобства.

Из известных базисов выделяют базис собственных функций гармонического осциллятора и базис функций Фурье. Для рассмотренной задачи потенциальная яма была погружена между двумя стенками так, что расстояние между ними равно 10 единиц. Даже при рассмотрении только двух функций ( $\cos$  и  $\sin$ ) и гамильтониана с матрицей  $2 \times 2$ , получено 2 собственных значения дискретного спектра с погрешностями 46 и 134 %.

При удвоении размерности матрицы, получены погрешности 11 и 39 %. При восьми кратном увеличении размера матрицы получаем величину погрешности  $3 \cdot 10^{-3}$  %, что соответствует спектроскопической точности.

*Метод прямой диагонализации выгодней метода стрельбы.*

При необходимости найти спектр численно, нужно определить параметр  $B$ . При малом параметре его можно найти с помощью модели дельта-ямы. Для большей точности нужно добавить выкладки из теории возмущений. Если  $B \simeq 1$  можно воспользоваться методами стрельбы или методами прямой диагонализации. Отметим, что метод стрельбы не работает в случае, если в задаче нет разделения переменных (если потенциал по разному зависит от  $x$  и  $y$ ).

## Аналогия с непрерывным спектром

Если дискретный спектр есть, то он расположен на интервале, выделенном на (Рис. 12.13). Если энергия находится на положительной полуоси, то решение уравнения Шредингера будет при любом выбранном значении энергии.

Замечание: существует значение  $E'$ , которое представляет собой асимптотику потенциала при  $x \rightarrow \infty$ .

При интегрировании от 0 до  $E'$  мы видим, что потенциал  $U$  больше значения энергии  $E$ , что означает отрицательную кинетическую энергию. Данное утверждение противоречит классической механике, значит эта область, в которой не выполняются соотношения классической механики (классически недоступная область).

$$U > E \Rightarrow T < 0$$

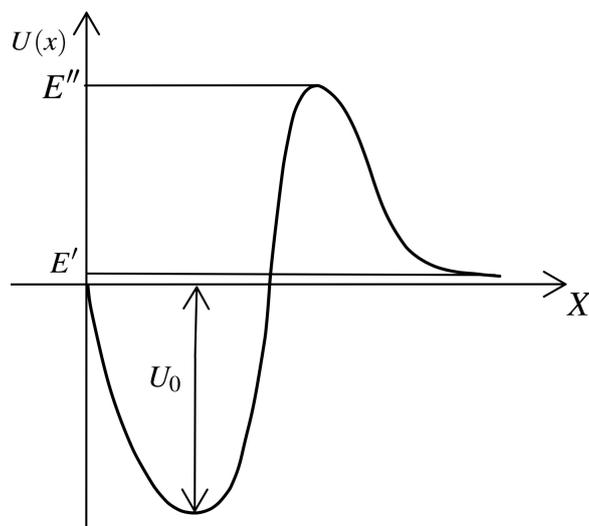


Рис. 12.13. Зависимость  $U(x)$

Волновая функция в этой области ведёт себя экспоненциально убывающим образом. В потенциале общего вида для состояний непрерывного спектра присутствуют 2 случая:

- 1) В асимптотике присутствует классически недоступная область. Поведение описывается единственной экспоненциально убывающей функцией. Только одна функция при каждой энергии (невырожденный непрерывный спектр).

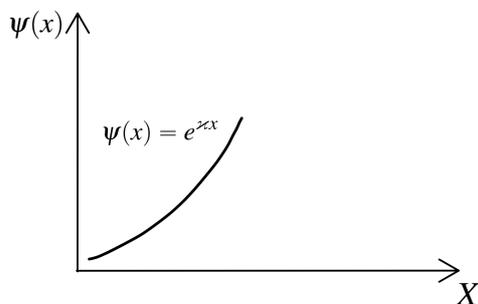


Рис. 12.14. Вид экспоненциально-возрастающей функции  $\psi(x)$

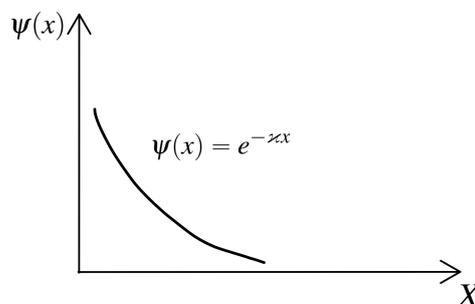


Рис. 12.15. Вид экспоненциально-убывающей функции  $\psi(x)$

- 2) При значении энергии в диапазоне  $E > E'$  получаем, что  $E > U$ , что соответствует свободному движению частицы.

Список задач:

- 1) В состояниях непрерывного спектра выделить область в которой непрерывный спектр невырожден. В данной области решаются только приближенные задачи;

2) В остальной области где спектр вырожден нужно поставить задачу рассеяния.

В задаче с непрерывным спектром можно, задавая начальные условия, задавать любую энергию. Рассмотрим поведение задачи рассеяния в классике.

Опускаем на потенциал слева частицу с энергией  $E$ . Также поставим счётчик, фиксирующий все частицы, прошедшие через потенциал. Увеличивая энергию от 0 до  $E'$ , видим, что частица не может пройти через барьер. Повышая энергию до значения  $E''$  видим, что коэффициент прохождения будет в точности нулевым. При энергии превосходящей  $E''$  частица спокойно перелетает через барьер и регистрируется счётчиком, коэффициент прохождения в данном случае будет 1.

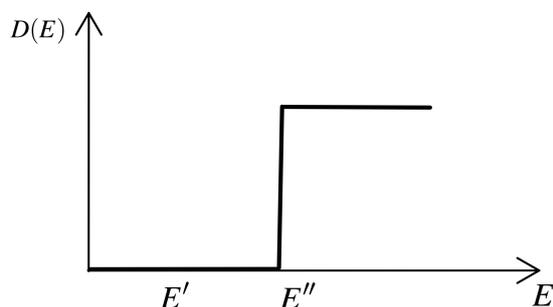


Рис. 12.16. Зависимость коэффициента прохождения частицы  $D$  от значения её энергии в классической задаче

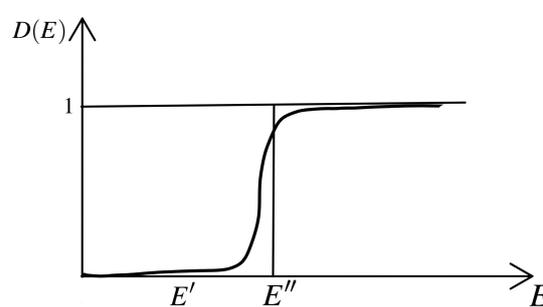


Рис. 12.17. зависимость коэффициента прохождения частицы  $D$  от значения её энергии в квантовой задаче

Рассмотрим квантовую задачу:

Если  $B \gg 1$ , то картина практически не отличается от классической. Отличия в квантовой механике также присутствуют. Энергия частицы может быть меньше высоты барьера, но при этом коэффициент прохождения будет отличен от 0 – **подбарьерное прохождение**. Если величина энергии больше максимума потенциала, то может возникнуть явление, когда частица отразится от барьера – **надбарьерное отражение**. Если  $B \gg E$ , то область надбарьерного отражения очень мала и коэффициент практически равен 1.

В модели тяжёлых ядер ядро может быть представлено как газ альфа-частиц. Потенциал в такой системе соответствует Кулоновскому. Процесс альфа-распада может интерпретироваться как подбарьерное прохождение частицы через барьер из прямоугольного потенциала и кулоновской внешней огибающей. Скорость альфа-распада можно определить как частоту соударений с барьером, умноженную на вероятность прохождения через барьер.

## Лекция 13. Задачи теории рассеяния

### Повторение

Для ситуации прохождения частицы через потенциальный барьер, если энергия частицы не достигает максимума потенциала, то на её пути встретится точка поворота и коэффициент отражения равен 0. Если энергия превосходит максимум потенциала, то коэффициент прохождения равен 1.

Мы понимаем, когда в случае ситуации близкой к классической (Борновский параметр велик в сравнении с единицей), кривая зависимости будет проходить вблизи положения близкого к классической.

С одной стороны есть процесс прохождения там, где его не было в классической системе. С другой стороны существует процесс отражения, там где его нет в классической теории. Подбарьерное прохождение и надбарьерное отражение.

Чем больше Борновский параметр, тем ближе ситуация к классической и тем меньше количественные отклонения. Количественные отклонения не должны скрывать того, что качественные отличия квантовой задачи от классической имеют место. При этом мы не понимаем что мы увидим при малых и умеренных значениях Борновского параметра. Рассмотрим эти модели.

### Модели с малым и умеренным значением Борновского параметра

Выберем потенциал, для которого можно легко найти решения, далее сшиваем решения в точках, где потенциал испытывает скачок.

#### Пример 1: Скачок потенциала

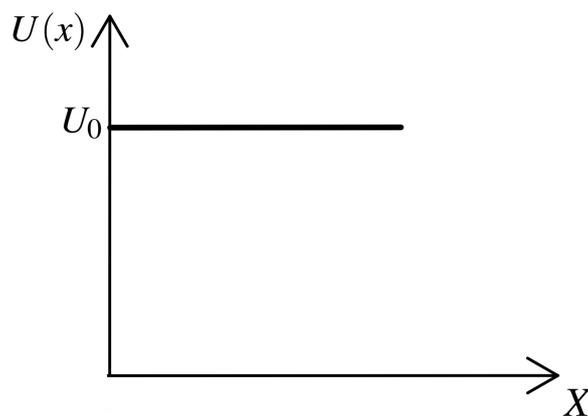


Рис. 13.1. Скачок потенциала

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$\Psi_L = e^{ikx} + Ae^{-ikx}$  — волновая функция в левой части потенциала

$A$  — амплитуда волны, идущей влево.

Квадрат модуля амплитуды называется **коэффициентом отражения**.

$$R = |A|^2 \text{ — коэффициент отражения} \quad (13.1)$$

$\Psi_R = Be^{iqx}$  — волновая функция в правой части потенциала

В задаче 3 параметра: величина ступеньки, масса частицы и константа, отвечающая за квантовые масштабы теории.

$$q = \frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar}$$

В точке, где потенциал меняется скачком, волновая функция и её производная меняться не должны (*условия сшивания*).

### Условия сшивания

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

$$1 + A = B \quad (13.2)$$

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

$$ik - ikA = iqB$$

$$1 - A = \frac{q}{k}B \quad (13.3)$$

Складываем уравнения 13.2 и 13.3.

$$2 = B \left(1 + \frac{q}{k}\right)$$

$$B = \frac{2}{1 + \frac{q}{k}} = \frac{2k}{k + q}$$

$R^{\text{reflection}}$  — коэффициент отражения

$D = T^{\text{transmission}}$  — коэффициент прохождения

$$D = \frac{q}{k}|B|^2$$

Получили волновую функцию у которой слева волна единичной амплитуды и волна неизвестной амплитуды, движущейся в противоположном направлении. Справа волна с амплитудой  $B$ .

**Коэффициент прохождения** – это отношение плотности потоков вероятности.

**Плотность потока** – это плотность того что течёт, умноженная на скорость того, что течёт.

Плотность потока – это квадрат амплитуды, идущей вправо. Отношение скоростей есть отношение  $\frac{q}{k}$ .

$$D = \frac{q}{k} \frac{4k^2}{(k+q)^2} = \frac{4qk}{(k+q)^2}$$

Поскольку в числителе стоит среднее геометрическое величин  $q$  и  $k$ , а в знаменателе стоит среднее арифметическое, то при любых значениях  $m$ ,  $\hbar$  и  $U_0$ , эта величина никогда не превзойдет 1, кроме случая когда  $U_0 = 0$  (ступеньки нет).

Введём замену:

$$\varepsilon = \frac{E}{U_0}$$

$$k \sim \sqrt{\varepsilon}$$

$$q \sim \sqrt{\varepsilon - 1}$$

$$D(\varepsilon) = \frac{4\sqrt{\varepsilon - 1}\sqrt{\varepsilon}}{(\sqrt{\varepsilon} + \sqrt{\varepsilon - 1})^2}$$

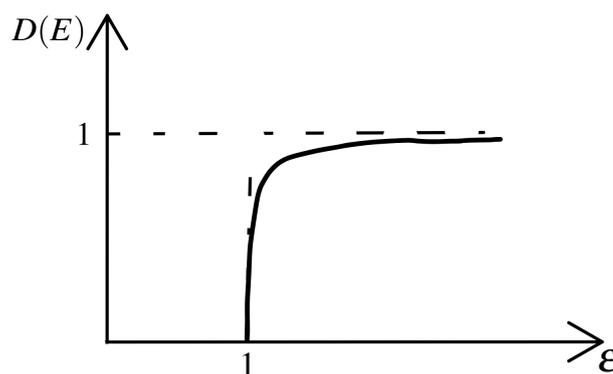


Рис. 13.2. Явление надбарьерного отражения

Если  $\varepsilon \rightarrow 1$  (частица выше барьера), то коэффициент прохождения равен  $D \simeq \frac{4\sqrt{x}}{1}$ .

Если  $\varepsilon \rightarrow \infty$ , то  $D \rightarrow 1$ .

Коэффициент прохождения равен  $\frac{1}{2}$  в случае, когда  $4\sqrt{\epsilon - 1} \simeq \frac{1}{2}$  или  $\epsilon - 1 = \frac{1}{64}$ .

$$\begin{aligned} \hbar k &\simeq mv_L \\ k &\simeq \frac{2mE - \frac{mv_L^2}{2}}{\hbar} \\ \hbar q &\simeq mv_R \\ D &= \frac{4qk}{(k+q)^2} = \frac{4v_L v_R}{(v_L + v_R)^2} \end{aligned} \quad (13.4)$$

В формулу 13.4 входят только начальные скорости и не входит постоянная Планка, что означает, что при бесконечном увеличении массы частицы результат не изменится.

Мы не можем сказать при каких условиях задача близка к классической, а при каких далека. В квантовой задаче появляется ответ, который не содержит постоянной Планка. Однако, если структура получена из уравнений и квантовой теории и не содержит постоянной планка, это не означает, что она совпадает с результатами классических задач.

Модель ступенчатого потенциала хорошо работает в задачах, где толщина переходного слоя много меньше всех других характерных длин. В области электронных задач скачкообразная модель не пригодна.

Существуют несколько моделей, для решения уравнения Шрёдингера, допускающих точное решение задач о дискретном и непрерывном спектрах.

### 1) Первая модель

$$U(x) = \frac{U_0}{1 + e^{-\frac{x}{a}}}$$

В данной модели 4 параметра:  $m$ ,  $U_0$ ,  $\hbar$  и  $a$ . Модель описывает гладкую ступень. При  $V = 1$ , модель имеет вид близкой к классической.

### 2) Вторая модель

$$\int U(x) dx = -q \quad (13.5)$$

В любой потенциальной яме, в которой интеграл 13.5 сходится, существует единственное состояние, эквивалентное ямам с малым Борновский параметром.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi' + q\delta(x)\psi = E$$

Слева и справа нет потенциала – волновая функция аналогична классической.

$$\Psi_L = e^{ikx} + Ae^{-ikx}$$

$$\Psi_R = Be^{iqx}$$

Волновая функция слева должна равняться волновой функции справа и производная должна испытывать скачок. Величина скачка должна быть пропорциональна величине скачка в этой точке.

$$1 + A = B$$

$$ik(A + B - 1) = \frac{2mq}{\hbar^2}B - \text{— величина скачка}$$

$$A = \frac{\varkappa}{ik + \varkappa}$$

$$B = \frac{ik}{ik + \varkappa}$$

$$\varkappa = \frac{mq}{\hbar^2}$$

Величина  $\varkappa$  связана со скоростью затухания волновой функции связанного состояния. Значение  $\varkappa$  растёт и волновая функция начинает совпадать быстрее, коэффициент прохождения начинает уменьшаться по модулю. Рассчитаем коэффициент прохождения:

$$D(E) = |B|^2 = \frac{k^2}{k^2 + \varkappa^2} = \frac{E}{E + E_0} \quad (13.6)$$

$$E_0 = \frac{m^2 q^2}{2\hbar^2} \quad (13.7)$$

Коэффициент прохождения ведёт себя как монотонно-возрастающая функция, приближающаяся к единице, а роль характерного масштаба играет глубина ямы в одиночном потенциале дельта-ямы. Чем выше энергия, тем больше коэффициент прохождения.

В формулу 13.7 входит коэффициент  $k$ , который может принимать как положительные (надбарьерное отражение), так и отрицательные значения (подбарьерное прохождение).

$$D_- = D_+$$

При обращении к классическим моделям, для выявления поведения квантовых моделей, нужно построить Борновский параметр. И если параметр велик, то можно обратиться к классическому аналогу. В случае малого Борновского параметра работает **модель дельта-ямы**:

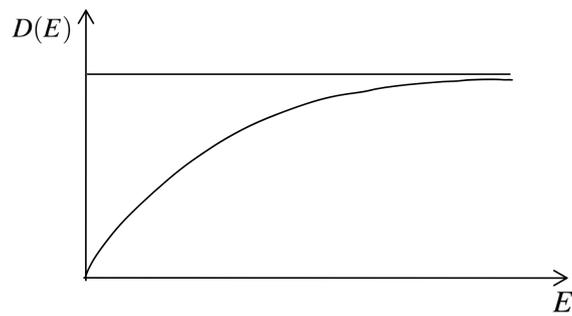


Рис. 13.3. Зависимость коэффициента прохождения от энергии частицы

- 1) Чем больше энергия, тем больше коэффициент прохождения;
- 2) Поменяв знак потенциала коэффициент прохождения не изменится. Исходя из данных результатов делаем вывод, что мы имеем дело с искусственной атипичной моделью.

### Пример 2: Прямоугольный барьер

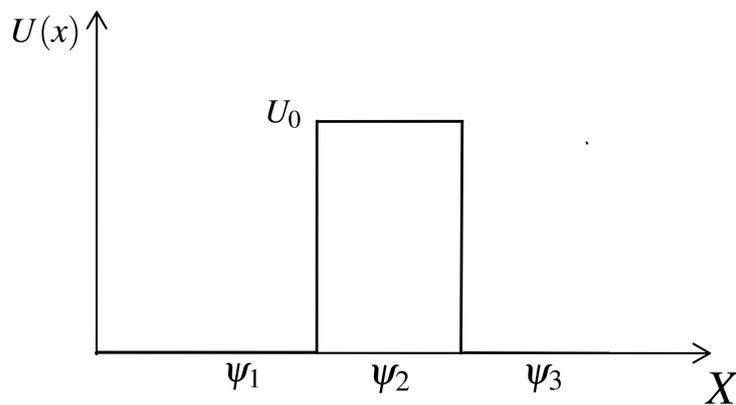


Рис. 13.4. Форма прямоугольного потенциального барьера

$$\Psi_L = e^{ikx} + Ae^{-ikx}$$

$$\Psi_M = B_1 e^{iqx} + B_2 e^{-iqx}$$

$$\Psi_R = Ce^{ikx}$$

На каждой границе сшиваются функция и её производная. Из условий сшивания получаются 4 неизвестных уравнения для 4 неизвестных величин.

$$D(E) = \frac{4k^2 q^2}{(k^2 - q^2) \sin^2 qa + 4k^2 q^2}$$

$$D(E) = \frac{1}{1 + \frac{B^2}{4} \left( \frac{\sin qa}{kqa^2} \right)^2}$$

Важно: в случаях, когда величина  $qa$  равна  $n\pi$  коэффициент прохождения  $D = 1$ .

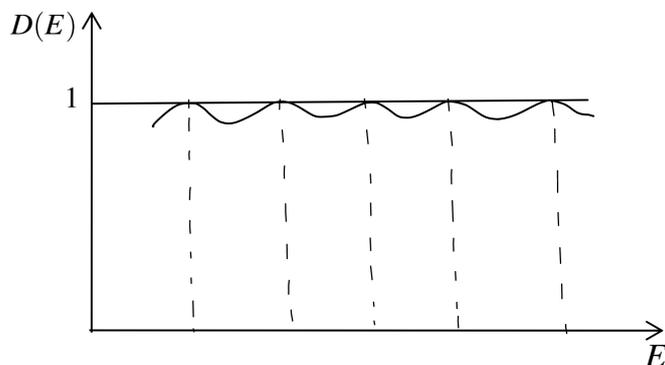


Рис. 13.5. Изображение осцилляций коэффициента прохождения

Если энергия мала по сравнению с высотой барьера ( $\epsilon$  мало по сравнению с 1), то  $\sin x$  переходит в  $shx$  и коэффициент прохождения превращается в следующий вид:

$$D \simeq 16\epsilon(1 - \epsilon)e^{-2\sqrt{B(1-\epsilon)}}$$

Коэффициент прохождения частицы с малой энергией под барьером имеет экспоненциально малую величину и очень круто нарастает.

$$B = \left( \frac{S}{\hbar} \right)^2$$

$$e^{-2\frac{S}{\hbar}}$$

$e^{-\frac{\Delta E}{kT}}$  — термодинамическая экспонента

При низких температурах вероятность того, что система будет в возбужденном состоянии ничтожна.

Величина Борновского параметра классифицирует системы на устойчивые и неустойчивые. Вероятность пройти из квазисвязанного состояния наружу может оказаться настолько незначительной, что нужно будет рассматривать нестабильный динамический объект как абсолютно устойчивую систему.

Поведение  $D$  при очень больших значениях энергии.

$$D \simeq 1 - \frac{1}{4} \left( \frac{U_0}{E} \right)^2 \sin^2 qa$$

Возьмем яму со следующими условиями:

$$\begin{aligned}U_0 &\rightarrow \infty \\ a &\rightarrow 0 \\ U_0 a &= q = \text{const}\end{aligned}$$

Произведём предельный переход для коэффициента  $D$ .

$$D = \frac{1}{1 + \frac{m^2 Q^2 \hbar^2}{\hbar^2 2mE}}$$

Коэффициент аналогичен коэффициенту для дельта-ямы и для дельта-барьера.

При построении теории мы отталкивались от того, что основные представители состояний квантовых систем это лучи в гильбертовом пространстве (состояния, которые выражаются нормируемыми векторами). Если частица свободна, то её волновая функция будет иметь вид  $e^{ikx}$ , это означает что вероятность найти её в пространстве даётся интегралом от квадрата модуля.

Физически реализуемые состояния непрерывного спектра описываются волновыми пакетами. Например, задача о движении частицы в однородном магнитом поле. Можно выбрать векторный потенциал так, чтобы была одна компонента волновой функции по  $x$  и другая по  $y$  и волновая функция состояния с наименьшей энергией будет представлена в виде Гауссова двумерного пакета. Дальше мы можем исследовать движение пакета во внешнем потенциале.

Решим задачу прохождения пакета через барьер. При  $x < -a$

$$\psi_E = (e^{ikx} + A(k)e^{-ikx})e^{-i\frac{Et}{\hbar}}$$

При  $x > a$

$$\psi_E = B(k)e^{ikx}e^{-i\frac{Et}{\hbar}}$$

Организуем из нашей функции пакет  $\Psi$  нескольких функций с энергией от  $-\Delta$  до  $\Delta$ .

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{2\Delta} \int_{E-\Delta}^{E+\Delta} \psi_E(x, t) dE$$

Произведем 2 упрощения:

1) при интегрировании по энергии в зависимости  $k(E)$  ограничимся линейными членами;

$$k = k_0 + (E - E_0) \left( \frac{dk}{dE} \right) \simeq k_0 + \frac{E - E_0}{\hbar v}$$

2)  $A$  и  $B$  не зависят от энергии.

Тогда при  $x < -a$

$$\Psi = \Phi^+(x, t) + A(k_0)\Phi^-(x, t)$$

При  $x > a$

$$\Psi = B(k_0)\Phi^+(x, t)$$

$$\Phi^\pm \simeq e^{i(\pm k_0 x \mp \frac{E_0}{\hbar v} x)} e^{-i \frac{E_0 t}{\hbar}} \frac{\sin \Delta \alpha}{\Delta \alpha}$$

$$\alpha = \frac{x \mp vt}{\hbar v}$$

Пакеты представляют собой форму  $\frac{\sin x}{x}$  центральная часть которой соответствует центральному параметру  $\alpha$ .

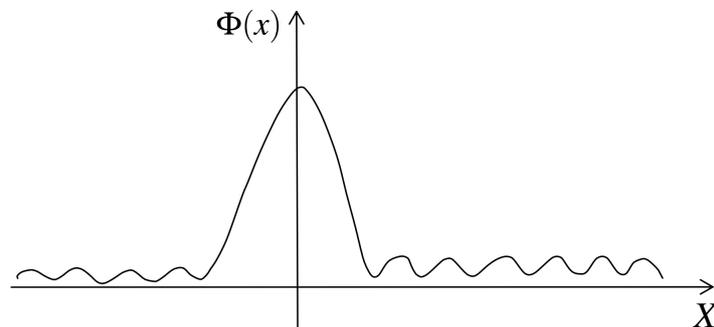


Рис. 13.6. Изображение центральной части пакета

Данная формула была написана, основываясь на очень грубых приближения для простоты подсчёта. При рассмотрении задачи с высокой точностью нужно взять удалённый пакет имеющий координату  $x_0$ , импульс  $p_0$ ,  $\delta$  и решить задачу как будет эволюционировать функция  $\Psi(x, t)$  с течением времени.

Эволюция, согласно описанной схеме, представляет процесс разделения волнового пакета на части одинаковой формы. В любой момент времени можно рассчитать расстояние между прошедшим и отразившимся пакетами. Из расчётов можно получить оценку продолжительности прохождения пакета через барьер.

## Прямое решение задачи о прохождении пакета через потенциальный барьер

Время прохождения частицы через барьер с высотой порядка 1 эВ равно  $\tau_0 \sim 10^{-4} c$ . В ходе такого прохождения форма пакета сильно изменяется.

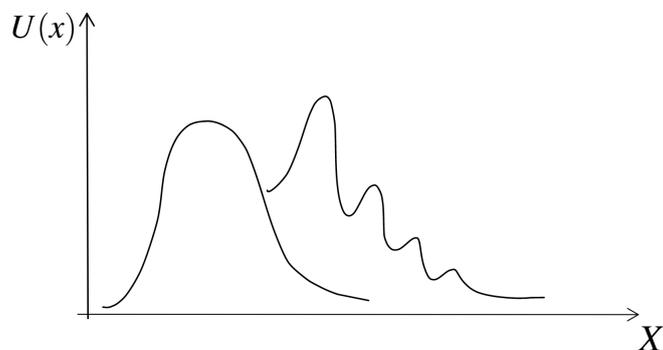


Рис. 13.7. Пакет, прошедший через потенциальный барьер

Из рисунка 13.7 видим, что невозможно определить момент прохождения и координату вышедшего на свободу пакета.

Задача о времени прохождения через барьер имеет множество решений. В одномерной задаче прошедшая волна может быть описана с помощью амплитуды, которая может быть описана следующим образом:

$$B = |T(E, U_0)| e^{i\theta(E, U_0)}$$

$$D \simeq e^{-2\sqrt{B(1-\varepsilon)}}$$

Из характеристик  $\theta$  и  $T$  можно получить величину с размерностью времени, которая будет характеризовать процесс. Время прохождения пакета должно быть связано с производной, по величине имеющей размерность энергии.

$$\tau = \hbar \frac{\partial(\text{безр})}{\partial(\text{энер})}$$

$$\tau = \frac{d\theta}{dE} \text{ — формула Бома-Вигнера}$$

$$\tau = -\frac{d\theta}{dU_0} \text{ — формула Лармора}$$

$$\tau = -\frac{\partial \ln|T|}{\partial U} \text{ — формула Бюттикера-Ландауэра}$$

$$\tau = \frac{\partial \ln|T|}{\partial E} \text{ — формула Полака-Миллера}$$

При исследовании простейшей задачи (например, прохождение частицы через барьер), разные формулы дают похожие величины.

Для дельта барьера время прохождения по формуле Бома-Вигнера равно:

$$\tau = \frac{m}{\hbar} \frac{\varkappa}{k(\varkappa^2 + k^2)}$$

Для дельта барьера время прохождения по формуле Полака-Миллера равно:

$$\tau = \frac{m}{\hbar} \frac{\varkappa^2}{k^2(\varkappa^2 + k^2)}$$

Чем больше энергия, тем больше величина  $k$  и время прохождения уменьшается. Если подобрать значение энергии уровня порядка 1 эВ, то оценки равны  $\tau = 3 \cdot 10^{-15}$  с.

Если в место, где находится атом водорода пустить обычный свет, то внешнее поле лазерного излучения, действующего на электрон можно описать как поле линейно зависящее от координаты.

$$\Delta \simeq e\sigma x$$

Если атом поместить в однородное электрическое поле, то у него не будет состояний дискретного спектра.

Как только на атом накладывается большое переменное световое поле появляется возможность следить за атомом как за системой, в которой направление вылета электрона из атома будет меняться периодически с периодом в половину периода поля.

*Процесс описания выхода электронов из атомов в сильных полях носит название **автоионизации**.*

## Лекция 14. Задача о прохождении потенциального барьера

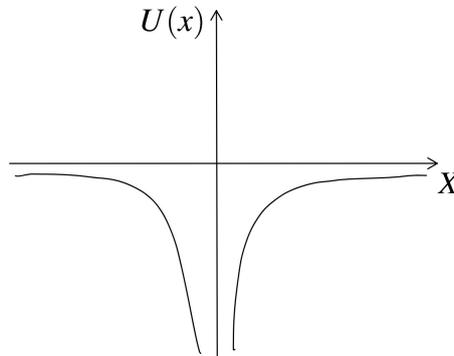


Рис. 14.1. Потенциальный барьер атома водорода в разрезе, на который не действует внешнее поле

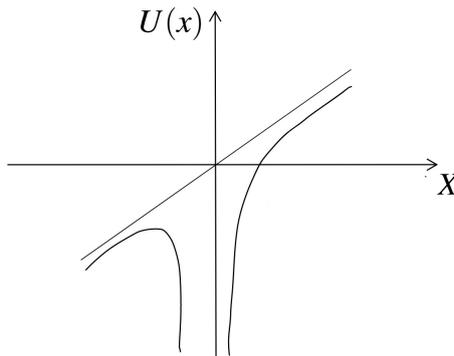


Рис. 14.2. Потенциальный барьер атома водорода в разрезе, на который действует внешнее поле

Барьер отделяющий область локализации атома имеет конечную ширину, значит за конечное время электрон пройдёт через барьер и будет двигаться под действием внешнего поля.

Для оценки времени прохождения, внешнее поле можно сделать с переменным потенциалом.

$$U = e\xi x \cos \omega t \quad (14.1)$$

Если барьер изменится до того, как частица успела пройти, то построенный закон должен измениться. Эксперимент перестанет совпадать с заранее полученной

формулой скорости туннелирования, что будет означать переход от одного уровня к другому.

Для упрощения модели вместо атома водорода удобно взять модель дельта-ямы, в которой есть один уровень связанного состояния  $\hbar\omega_0$ , на которое наложено поле 14.1.

Рассматриваемые в теоретической физике модели характеризуются числом параметров системы. Если параметров 3, то из них можно построить систему единиц и установить основные масштабы, этого достаточно, чтобы грубо оценить характерные величины задач (гармонический осциллятор). Если параметров 4, то 3 величины будут представлены масштабами, а четвёртый параметр будет безразмерным. Если параметров 5, то 3 параметра уходят на систему, и 2 безразмерные. Результаты представляются в виде профиля двумерной поверхности.

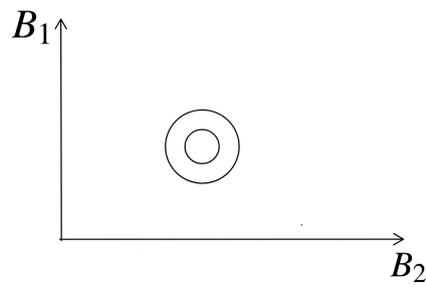


Рис. 14.3. Изображение профиля двумерной поверхности

Анализ задачи из 6 параметров выполнить до конца является трудоёмкой задачей.

$$\gamma = \frac{\omega}{e\xi} \sqrt{2m\hbar\omega_0} \text{ — параметр адиабатичности}$$

Адиабатичный процесс может означать как медленный процесс, так и быстрый. Будем рассматривать такой параметр в виде двух характерных времен:

$$T_1 = \omega^{-1}$$

$$T_2 = \frac{\sqrt{2m\hbar\omega_0}}{e\xi}$$

Пусть мы имеем дельта-яму, в которой есть уровень с глубиной  $\hbar\omega_0$  и, мы наложили на эту систему однородное поле  $e\xi x$ , то возникает барьер длины  $a$ .

$$a = \frac{\hbar\omega_0}{e\xi} \text{ — длина барьера}$$

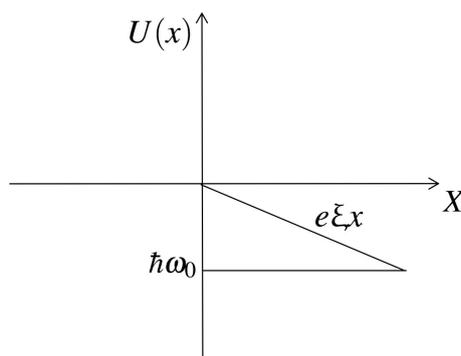


Рис. 14.4. Изображение дельта-ямы в однородном поле  $e\xi x$

Чтобы ответить на вопрос за какое время электрон, находящийся в связанном состоянии, пройдет расстояние порядка длины барьера введём несколько величин:

$\Delta x \simeq \kappa^{-1}$  — локализация электрона

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

$$\Delta p \sim \frac{\hbar}{\Delta x} \simeq \sqrt{m\hbar\omega_0}$$

Чем больше энергия связи, тем уже пакет, в котором сидит электрон, чем уже пакет, тем больше характерный импульс.

$$v \simeq \frac{\Delta p}{m} \text{ — характерная скорость}$$

$$T_2 = \frac{a}{v} = \frac{\sqrt{2m\hbar\omega_0}}{e\xi} \text{ — характерное время}$$

**Характерное время** — время в течении которого электрон, находящийся в связанном состоянии с энергией  $\hbar\omega_0$ , пройдет барьер в однородном электрическом поле.

Граница между медленно меняющимся и быстро меняющимся полем связана со значением  $\gamma = 1$ .

В мире атомов могут существовать отрицательные ионы (к атому водорода прилипает электрон) и у атома водорода есть одно связанное состояние в котором могут быть два электрона с энергией связи 0.7 эВ. Конфигурации таких атомов имеют энергии ионизации на уровне 2 эВ.

Считаем, что  $\hbar\omega_0 = 2 \text{ эВ}$ .

При выборе  $\omega_0$  будем придерживаться, что  $\frac{\omega_0}{\omega} \gg 1$ .

Для условия сшивания нужно, чтобы внешнее поле было слабое (низкочастотное).

$$\omega = \frac{\omega_0}{10} = 3 \cdot 10^{14} 1/c$$

$\gamma = 1$  при напряженности поля, равной  $\xi = 4.7 \cdot 10^4 \text{ Гс}$ .

*Атомный масштаб напряжённости поля* – величина напряжённости поля, действующего со стороны ядра атома водорода на электрон в атоме водорода в основном состоянии, у которого среднее расстояние до ядра  $a_0$ .

$$\xi = \frac{e}{a_0^2} = 2 \cdot 10^7 \text{ Гс}$$

Явление изменения характера туннелирования при воздействии переменного поля на объект с потенциалом ионизации 2 эВ потребует полей, которые в 1000 раз меньше атомных.

Если бы понадобилось поле порядка атомного, то оно бы разорвало объект за время одного периода изменения поля. В случае малого потенциала есть возможность изменить скорость, пропуская скачок и фиксируя время нахождения в лазере.

$$I = \frac{c\xi^2}{e\pi} - \text{интенсивность излучения лазера}$$

$$I = 2 \cdot 10^{11} \frac{\text{Вт}}{\text{см}^2}$$

Получили оценку для времени прохождения через барьер.

### Вывод

Частица, находясь под барьером, ведёт себя так, как будто у неё есть та скорость, которой невозможно ее лишить из-за соотношений неопределённости. При локализации её в начальном состоянии частице даётся средняя кинетическая энергия, а следовательно и скорость, с которой она движется под барьером.

## Сингулярные возмущения

Была решена задача о двух дельта-ямах

$$U(x) = \delta(x+a) - q\delta(x-a)$$

Рассмотрим влияние возмущений системы на вид волновой функции. Если мы имеем 3 ямы, то между каждой из ям будет возникать сингулярная связь и, амплитуда будет передаваться с одной ямы на другую и т.д.

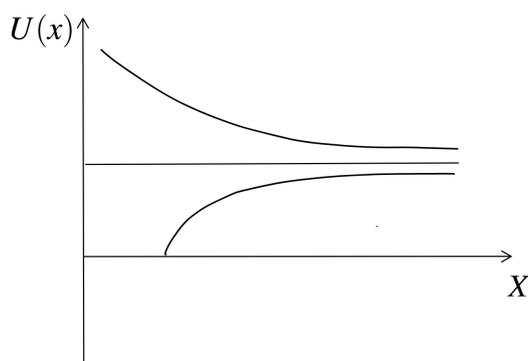


Рис. 14.5. Зависимость уровней в двух дельта-ямах при рассмотрении их друг относительно друга

Гипотеза. Если ям больше 3, то мы можем ожидать, что состояния будут распределены по всем ямам.

Делаем вывод, что частица, несмотря на наличие притягивающих её потенциалов, будет одновременно находиться в нескольких потенциальных ямах. Одна яма способна связать частицу и не дать ей уйти на бесконечность, при увеличении количества ям притяжение увеличивается и ослабевает локализация, частица может уйти на бесконечность.

Данная задача сводится к задаче о рассмотрении решения уравнения Шрёдингера в периодическом потенциале.

### Теорема Блоха

Если существует одномерное уравнение Шрёдингера, в котором потенциал периодический в пространстве с периодом  $a$ , то в уравнении Шрёдингера существует такое решение, которое можно записать в виде экспоненциальной функции, умноженной на  $u_k(x)$ .

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

$$U(x+a) = U(x)$$

$$\psi(x) = e^{ikx}u_k(x)$$

$$u_k(x+a) = u_k(x)$$

Из формы функции видно, что  $u_k(x)$  чисто периодическая функция. При разделении потенциала на ячейки на каждой ячейке частица сидит с одной и той же вероятностью.

$$|\psi(x)| = |u_k(x)|$$

Например, при  $t = 0$  частица находится в одной определённой яме. Постепенно частица будет переходить на соседние уровни, профиль со временем будет расплываться.

$$\operatorname{Re}\psi(x) = \cos Kx = u(x) \text{ — профиль реальной части } \psi(x)$$

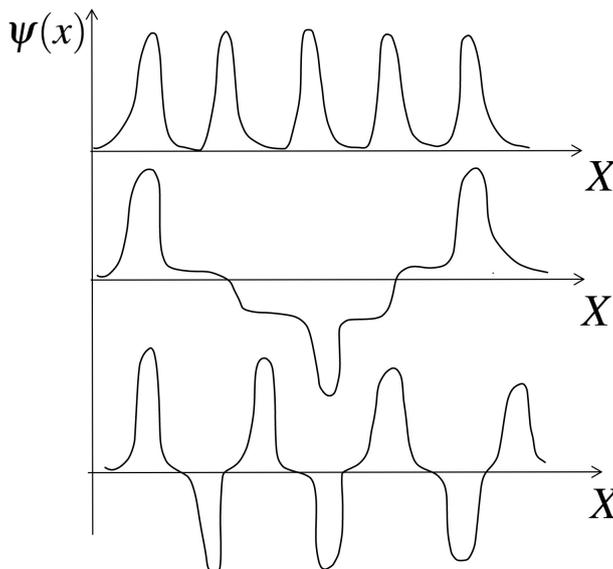


Рис. 14.6. Зависимость волновой функции от параметра  $k$

Пусть есть 2 функции, которые представляют собой линейно независимые решения уравнения Шрёдингера. При выделении двух функций как функций базиса, любые другие решения будут представлены как комбинации функций базиса.

$$\varphi_1(x+a) = C_{11}\varphi_1 + C_{12}\varphi_2$$

$$\varphi_2(x+a) = C_{21}\varphi_1 + C_{22}\varphi_2$$

Нам интересны решения, в которых при сдвиге аргумента волновая функция умножается на какое-то число.

$$\psi(x+a) = \lambda\psi(x)$$

Если сдвиг эквивалентен умножению на число, то мы можем представить этот множитель в экспоненциальной форме (функция возрастает) и экспонента будет или вещественной или мнимой (поворот функции на фазу).

$$\psi = A\varphi_1 + B\varphi_2$$

$$\psi(x+a) = (AC_{11} + BC_{21})\varphi_1 + (AC_1 + BC_2)\varphi_2$$

Для того чтобы решения уравнений существовали, нужно, чтобы  $\psi = \lambda A$

$$\psi(x+a) = \lambda B$$

$$\text{Det} \begin{vmatrix} C_{11} - \lambda & C_{12} \\ C_{21} & C_{22} - \lambda \end{vmatrix} = 0$$

Двум корням характеристического уравнения соответствуют 2 решения.

$$\lambda_1 = \varphi_1(x)$$

$$\lambda_2 = \varphi_2(x)$$

$$W = \text{Det} \begin{vmatrix} \varphi_1 & \varphi_2 \\ \varphi_1' & \varphi_2' \end{vmatrix} \text{ -- Вронскиан}$$

Вронскиан при сдвиге аргумента перемножается на  $\lambda_1, \lambda_2$ , также для уравнения Шрёдингера Вронскиан должен быть равен константе:

$$\lambda_1 \lambda_2 = 1$$

Если решение представлено в виде  $e^\alpha e^{-\kappa}$ , то волновые функций будут расти по экспоненте. Эти функции не подходят для квантовой механики так как не выполняется условие нормировки.

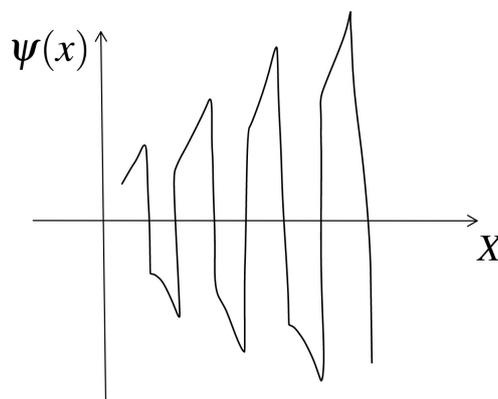


Рис. 14.7. Волновые функции, растущие по экспоненте

$$e^{i\beta} e^{-i\beta} = 1$$

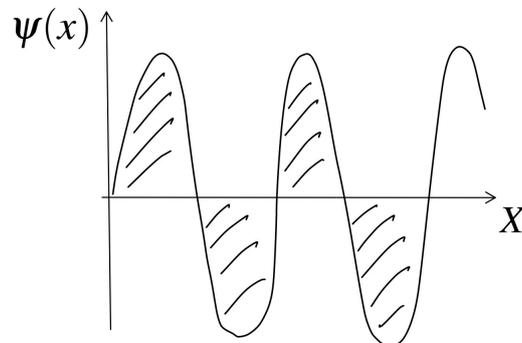


Рис. 14.8. Осциллирующая волновая функция

Если сдвигать величину аргумента на  $n$  ступенек, то множитель  $\exp(ika)$  возникает  $n$  раз.

$$\psi(x + na) = e^{ikna} \psi(x)$$

Это возможно только в случае, если функция имеет структуру согласно теореме Блоха.

$$\psi(x) = e^{ikx} U(x)$$

Разберём следующий потенциал:

$$U(x) = U_0 \cos 2\pi \frac{x}{a}$$

Решим уравнение Шредингера для частицы, помещенной в этот потенциал

$$\psi'' + B[\varepsilon + \cos 2\pi y] \psi = 0$$

Решение уравнения Шредингера в периодическом потенциале – это одна из задач о движении в системе, в котором возникает  $\vec{r}-t$  дуализм.

Введём следующие обозначения

$$\psi \rightarrow x$$

$$y \rightarrow t$$

$$p\varepsilon = \omega_0^2$$

$$B = \omega_0^2 \hbar$$

$$\gamma = 2\pi$$

$x + \omega_0^2(1 + h \cos \gamma t)x = 0$  — уравнение Мотье

**Уравнение Мотье** — уравнение колебаний гармонического осциллятора, квадрат частоты которого промодулирован по гармоническому закону.

Пространство параметров оказывается разрезано на части, в которых может наблюдаться квазипериодическое двухчастотное движение. При этом решения остаются ограниченными по величине при сколь угодно больших  $t$ . Квазипериодические двухчастотные режимы соответствуют отсутствию параметрического резонанса.

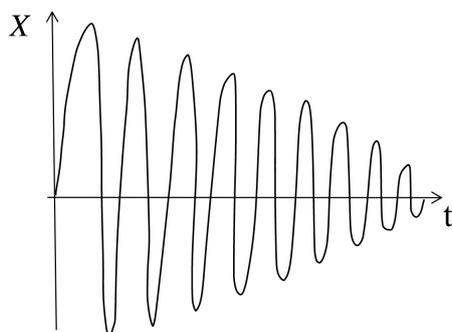


Рис. 14.9. Функция гармонического осциллятора

Согласно теореме Блоха линейная система с одной степенью свободы, находящаяся под гармоническим воздействием будет либо совершать квазичастотное двухчастотное движение либо попадёт в параметрический резонанс. Для того чтобы найти функции, о которых идёт речь в теореме Блоха будем использовать модель Дирака. Согласно этой модели в каждой точке отнесенной на  $a$  будет находиться один и тот же потенциал.

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

В левой области волновая функция будет иметь вид уравнения

$$\psi_L = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

$$a < x < 2a$$

$$\psi_R = e^{ika} \left[ Ae^{ik(x-a)} + Be^{-ik(x-a)} \right] \text{ — функция в правой области}$$

Теперь наложим условие, чтобы в точке нахождения дельта-функции волновая функция слева равнялась волновой функции справа, а также равнялись её производные.

$$(A + B)e^{ika} = Ae^{ika} + Be^{-ika}$$

$$ik(Ae^{iKa} - Be^{iKa} - Ae^{ika} + Be^{-ika}) = \frac{2mq}{\hbar^2}(Ae^{ika} + Be^{-ika})$$

Получили систему двух линейных уравнений для переменных  $A$  и  $B$ . Данная система однородная. Для того чтобы существовало нетривиальное решение нужно, чтобы определитель был равен нулю, или чтобы выполнялось следующее условие:

$$\cos Ka = Q \frac{\sin ka}{ka} + \cos ka$$

$$Q = \frac{mqa}{\hbar^2}$$

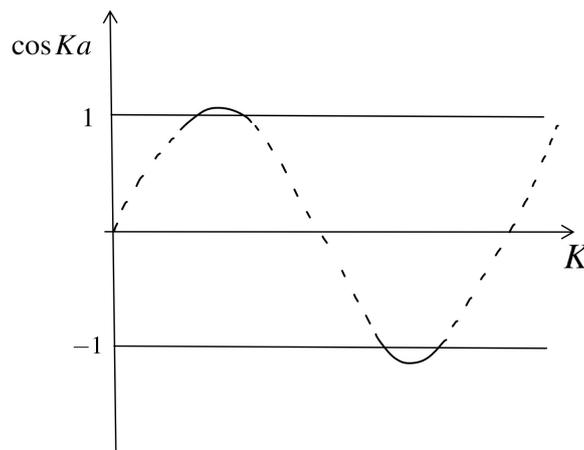


Рис. 14.10. Функция зависимости  $\cos Ka$

Уравнение показывает, что спектр значений распадается на области, представляющие чередование интервалов, в которых существуют вещественные решения для  $K$ , что означает существование Блоховских функции и следовательно реализуемых физических состояний.

Состояния отделены друг от друга интервалами и образуют запрещённые зоны. Пусть есть потенциальная яма с двумя уровнями, поставим рядом вторую потенциальную яму. Знаем, что на больших расстояниях у двух не взаимодействующих ям, в случае вырожденного уровня, возникает узкий дуплет порядка  $e^{-q}$ . Если добавить

ещё одну яму возникнет триплет. При увеличении количества ям будет увеличиваться число уровней, ширина полосы спектра останется неизменной.

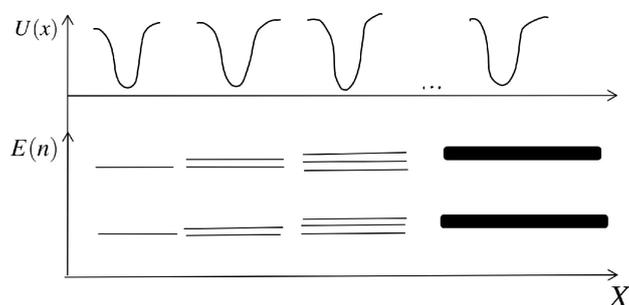


Рис. 14.11. Зависимость количества уровней энергии от количества рядом расположенных потенциальных ям

## Вывод

Спектр в периодических системах зональный.

Важно: воздействие очень малых флуктуаций параметров волновых ям, меняет характер волновых функций. Сколь угодно малые флуктуации вызовут превращения волновой функции.

## Лекция 15. Задачи теории рассеяния

### Функция Грина

Если волновая функция определяется дифференциальным уравнением второго порядка, то, отыскав функцию Грина, представим дифференциальное уравнение Шредингера в виде интегрального уравнения. Интегральные уравнения могут быть решены методом итераций.

$$\hat{L}\psi = \lambda\psi \text{ -- уравнение на собственные значения}$$

$$(\hat{L} - \lambda)G(x, x') = \delta(x - x') \text{ -- функция Грина}$$

Функция Грина называется функцией источника. Связано это с тем, что решение дифференциального уравнения ищется в условиях, когда в правой части уравнения находится источник.

*Дельта-функция* – ядро единичного оператора в интегральной форме, это симметричная функция.

Получаем, что  $x$  и  $x'$  симметричны и переменные, входящие в функцию  $G(x)$  являются взаимозаменяемыми величинами.

$$\psi'' - U(x)\psi = -k^2\psi$$

Поделили уравнение Шредингера на коэффициент  $-\frac{\hbar^2}{2m}$ .

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \text{ -- волновое число}$$

Запишем уравнение в виде:

$$\frac{d^2}{dx^2}G(x, x') + [k^2 - U(x)]G(x, x') = \delta(x - x')$$

Дельта функция должна быть непрерывна, а её производная испытывать скачок.

$$\psi = \sqrt{\kappa}e^{-\kappa|x-0|}$$

При рассмотрении волновой функции в окрестности точки  $x = x'$  составим волновую функцию из решений уравнения, которые будут различаться между собой направлением распространения.

$$\psi_1 = e^{-\kappa x}$$

$$\psi_2 = e^{\kappa x}$$

Для условия  $E > 0 \quad k^2 > 0$

$$\begin{aligned}\varphi_1 &= e^{ikx} \\ \varphi_2 &= e^{-ikx}\end{aligned}$$

Нужно чтобы в точке  $x'$  два решения были непрерывными и производная испытывала скачок единичной величины.

$$G(x, x') = \frac{i}{2k} e^{ik|x-x'|} - \text{решение для свободной частице}$$

Если уравнение неоднородное и написано в виде  $(\hat{L} - \lambda)\psi = Q(x)$ , то данное уравнение понимаем как уравнение Шредингера, которое описывает в левой части член со второй производной, с коэффициентом энергии и потенциалом, а в правой части стоит функция, выполняющая роль источника.

$$\psi(x) = \psi_0(x) + \int G(x, x') Q(x') dx$$

Решение неоднородного уравнения Шредингера, где неоднородность представляет собой заданную функцию может быть получено как сумма двух частей: решение однородного уравнения и сумма волн от каждого источника.

Важно: в полученной системе нет заданных источников, из которых бы выходила волновая функция.

$$\begin{aligned}(\hat{L}_0 - \lambda)\psi(x) &= U(x)\psi(x) \\ Q &= U(x)\psi(x)\end{aligned}$$

В левой части представлено уравнение, описывающее волновую функцию в отсутствии потенциала.

$$\psi(x) = \psi_0(x) + \int G(x, x') U(x') \psi(x') dx$$

Получили интегральное уравнение волновой функции для системы с потенциалом.

Оператор процедур дифференцирования выдаёт свойства функций в двух близких точках независимо от поведения функции на больших расстояниях (локальные свойства волновых функций). Нет методов, которые будут позволять решать дифференциальные уравнения методом итераций.

Будем считать, что при нулевом приближении  $\psi \simeq \psi_0 = e^{ikx}$

где  $\psi$  - волновая функция свободного движения.

Тогда первое приближение будет

$$\psi(x) = e^{ikx} + \int G(x, x') U(x') e^{ikx'} dx$$

В состояниях непрерывного спектра в той области параметров, где волновые функции двукратно вырождены, мы будем интересоваться построением волновых функций, которые при  $x \rightarrow -\infty$  вели бы себя как  $\psi \sim e^{ikx} + Ae^{-ikx}$ . А при  $x \rightarrow +\infty$  как  $\psi \sim Be^{ikx}$ .

### Устройство волновой функции справа

Потенциал  $U(x)$  привязан к началу координат. В области где  $x$  настолько большая в выражении для функции Грина можно опустить в показателе экспоненты величину модуля  $x - x'$ , так как в правой части  $x$  во всех точках будет больше  $x'$ .

$$\psi(x) = e^{ikx} \left( 1 - \frac{i}{2k} \int_{-\infty}^{\infty} U(x') dx \right)$$

Решение уравнения Шрёдингера, в котором присутствует потенциал произвольной формы, но интеграл в уравнении отличен от 0. Данный интеграл вещественный.

$$|A|^2 + |B|^2 = 1$$

Величину поправки в интеграл можно описать как:

$$u = \frac{2mU(x)a}{\hbar^2}$$

$$|B|^2 = 1 + \frac{1}{4k^2 a^2} B^2$$

Условие при котором можно запустить полученное решение интегрального уравнения для волновой функции состоит в том, что источник слабый. Источник будет слабый, когда  $\frac{B^2}{4} \ll (ka)^2$

Методом функции Грина можно пользоваться в случаях малой величины Борновского параметра, а также когда частицы движутся с большой энергией.

### Устройство волновой функции слева

$$\psi \simeq e^{ikx} + e^{-ikx} \left( -\frac{i}{2k} \int u(x') e^{2ikx'} dx' \right)$$

Амплитуда отраженной волны это Фурье компонента потенциала  $u(x)$ , взятая на частоте, равной удалённой пространственной скорости изменения волновой функции.

Для того чтобы узнать насколько сильно потенциал перебрасывает волну идущую в одном и другом направлениях, нужно посмотреть какой матричный элемент между начальной плоской волной и сопряженной волной идущей влево. Чем быстрее осциллирует экспонента под интегралом, тем меньше интеграл. Чем быстрее частица, тем меньше амплитуда перехода (меньше вероятность отражения).

Если функция, стоящая под Фурье интегралом непрерывна вместе со своими производными до порядка  $k$ , то Фурье образ убывает по закону  $\frac{1}{(\omega_k+1)}$ .

Если использовать выражение для амплитуды прошедшей в области потенциала волны и нормировать её на амплитуду падающей волны, то выражение для коэффициента прохождения имеет вид формулы 15.1

$$R(E) = \frac{m}{2E\hbar} \left| \int_{-\infty}^{\infty} U(x)e^{2ikx'} dx' \right|^2 \quad (15.1)$$

Правая часть выражения содержит Борновский параметр. Чем быстрее падающая частица, тем меньше похоже её начальное состояние на её конечное состояние. Чем больше энергия, тем меньше величина скачка.

### Пример 1. Дельта потенциал

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

Там где работает построенная теория потенциальные рассеяния на барьере и на яме эквивалентны.

$$R = \frac{mq^2}{2\hbar^2 E} = \frac{E_0}{E}$$

где  $E_0$  – энергия единственного связанного состояния в потенциале  $-q\delta x$ .

$$R_{ex} = \frac{E_0}{E_0 + E}$$

Если энергия  $E \gg E_0$ , то  $R_{ex} = R$ .

### Пример 2

$$R(E) = \frac{1}{4} \left( \frac{U_0}{E} \right)^2 \sin ka^2 - - \text{приближенное решение}$$

Частота осцилляций такая же, как при точном решении.

### Пример 3

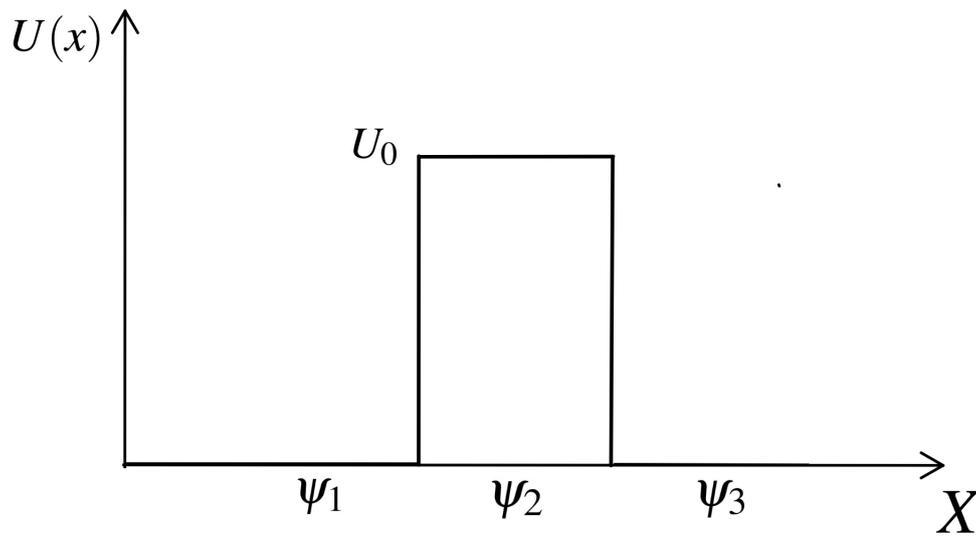


Рис. 15.1. Потенциальный барьер в виде ступени

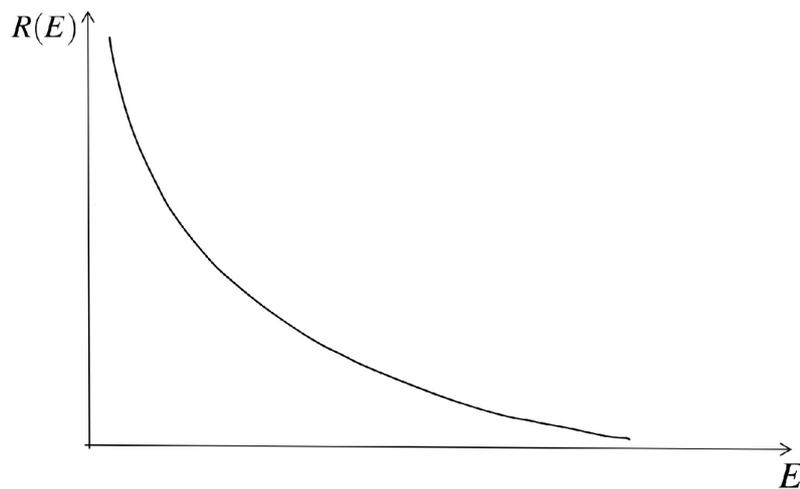


Рис. 15.2. Функция  $R(E)$  при больших значениях энергии

$$U(x) = -\frac{U_0}{ch^2\left(\frac{x}{a}\right)} \text{ — модифицированный потенциал Пешля-Теллера}$$

$$R(E) = \pi^2 B^2 \frac{1}{sh^2 \pi ka}$$

Если  $ka \gg 1$ , то частицы быстрые и коэффициент прохождения мал.

$$shz \simeq \frac{1}{2} e^z$$

## Основные выводы

Чем больше Борновский параметр, тем сильнее процесс рассеяния.

Чем больше энергия, тем процесс рассеяния менее эффективен.

## Другие представления функции Грина

$$(\hat{H} - E\hat{I})\hat{G} = \hat{I}$$

$$\hat{G} = (\hat{H} - E)^{-1}$$

- 1)  $E$  – это оператор, умноженный на единичный оператор;
- 2) Формула требует проверки знака. На практике встречаются интерпретации  $\hat{H} - E$  и  $E - \hat{H}$ .

Пусть мы знаем спектр и полный набор волновых функций гамильтониана. Если взять все волновые функции базиса как функции одной переменной и умножить их на функции базиса от другой переменной, взятой в комплексном сопряжении, и попарно сложить, то получим единичный оператор.

$$\sum |n\rangle\langle n| = \hat{I}$$
$$\hat{G}^{\pm} = -\sum \frac{\psi_n(x)\psi_n^*(x')}{E - E_n \pm i\epsilon}$$

Мнимая добавка к энергии в конце расчёта устремляется к нулю и служит для указания правила обхода полюса. Используем это выражение для построения функции Грина свободной частицы.

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{iqx}$$
$$\hat{G}^{\pm} = -\frac{1}{2\pi} \int \frac{e^{iq(x-x')}}{k^2 - q^2 \pm i\epsilon}$$

При  $x - x' > 0$  подынтегральное выражение убывает в верхней полуплоскости.

$$G(x, x') = -\frac{i}{2k}e^{ik|x-x'|}$$

Если полностью известен гамильтониан, то можем построить функцию Грина в виде интеграла и решить задачу рассеяния с нулевым и ненулевым потенциалом.

Рассмотрим поведение функции Грина при очень малых значениях  $\epsilon$ .

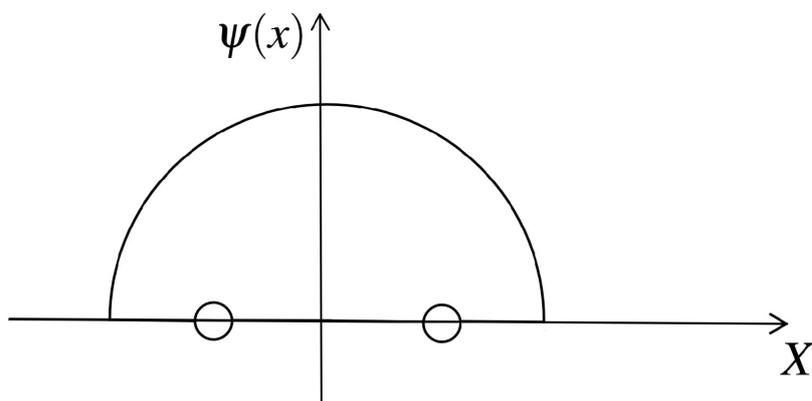


Рис. 15.3. Изображение контура интегрирования

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{x \pm i\varepsilon} = \mp i\pi\delta(x) + \Phi \frac{1}{x}$$

где  $\Phi$  – главное значение.

Каждый раз когда один из членов разложения будет проходить мимо дискретного уровня, мнимая часть выстрелит дельта-функцию с коэффициентов  $i\pi$ . Поэтому можем взять такую величину, которая описывает спектр так, чтобы в каждой линии спектра ставить дельта-функцию.

Определим плотность уровней энергетического спектра

$$\frac{1}{\pi} I_m S_\phi G(x, x'; E + i\varepsilon) = \sum \delta(E - E_n)$$

В случае сложных систем, будет решаться задача о поведении дискретного спектра в целом (зависимость плотности спектра от энергии).

### Квазиклассическое приближение

Данный метод относится к случаю  $\frac{S}{\hbar} \gg 1$ .

Чем ближе система к квазиклассической, тем больше Борновский параметр и сложнее устроена система.

Если в системе миллионы уровней, то не обязательно знать положение каждого уровня с высокой точностью.

Если потенциал равен константе, то волновая функция будет в виде  $\exp(ikx)$ . В случае непостоянного потенциала график волновой функции имеет вид 15.5.

*Метод ВКБ - приближение, которое заменяет функцию  $e^{ikx}$  на интеграл  $e^{i\int k_2(x)dx}$  что позволяет учесть изменение скорости в данной точке.*

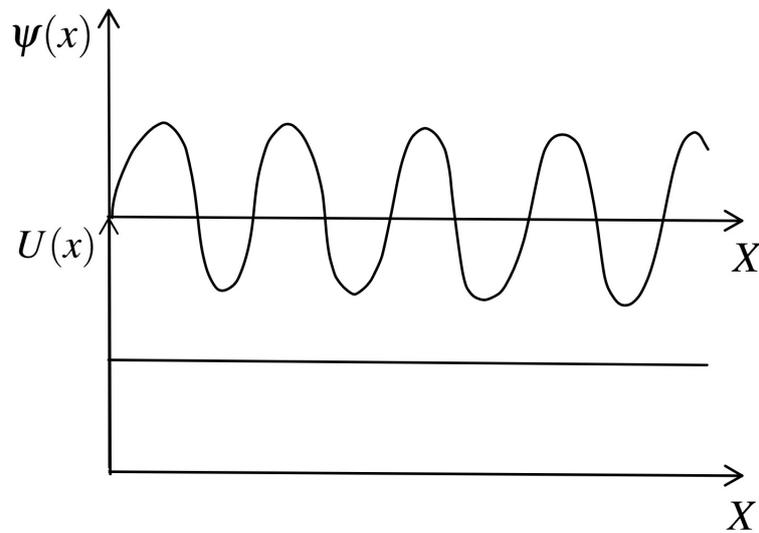


Рис. 15.4. Вид волновой функции при построенном потенциале

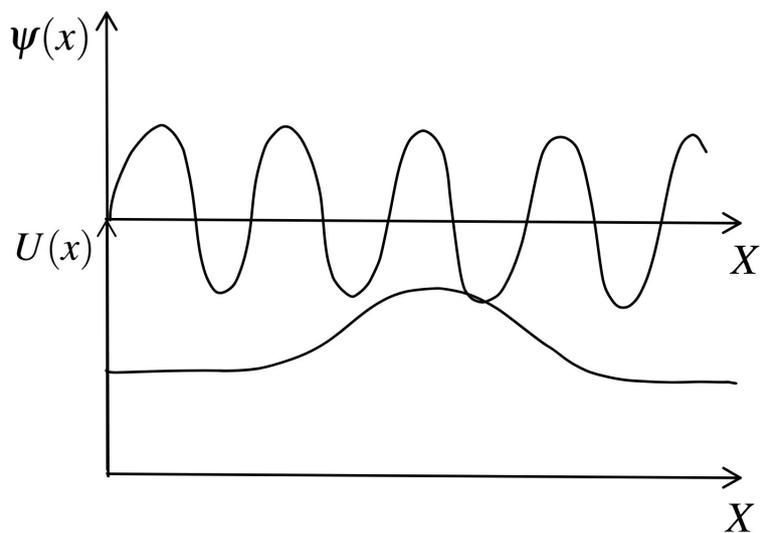


Рис. 15.5. Вид волновой функции при динамическом потенциале

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

$$\psi = e^{i\frac{S(x)}{\hbar}}$$

Начнем искать решение в форме экспоненты от отношения действия как функции от координаты к постоянной Дирака.

$$S = \int p dx$$

$$h = \sqrt{2m(E - U(x))}$$

Подставляя данную форму в уравнение Шредингера получим:

$$\frac{1}{2m}S'^2 - \frac{i\hbar}{2m}S'' + U(x) = E$$

Постоянная Планка мала по сравнению с масштабами действия, значит, мы можем пренебречь вторым слагаемым в левой части уравнения.

$$S' = \sqrt{2m(E - U(x))}$$

При сокращении члена, содержащего постоянную Планку, мы возвращаемся к чисто классическому выражению.

## Лекция 16. Правила квантования Бора-Зоммерфельда

В прошлой лекции начали рассматривать тему о методе решения одномерного уравнения Шрёдингера в квазиклассическом случае – когда характерное действие во много раз больше постоянной Планка. Квантовая теория применима в тех случаях, когда действие порядка постоянной Планка. Здесь не масса физических случаев, специальная математика, выстроенные для решения задач в этом углу пространства параметров. Основная идея состоит в том, чтобы построить приближённое решение уравнение Шрёдингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + U(x)\psi = E\psi \quad (16.1)$$

Решение, при котором можно вычислить значение функции в данной точке приближённо. Построить приближённую форму нетрудно, но сделать ее пригодной во всех точках интервала гораздо тяжелее. Нельзя терять из виду основные постановки задач квантовой теории. Конкретные формы волновых функций не так нужны, как интегральные выражения, которые дают матричные элементы.

Оператор — это матрица в данном базисе, базис удобно составлять из волновых функций стационарных состояний. Нужно получить возможность записывать операторы самых ходовых величин в виде матрицы с матричными элементами, вычисленными между этими состояниями. Основная идея подстановки — это использование экспоненциального приближения:

$$\psi = \exp\left(\frac{S}{\hbar}\right),$$

где  $S$  — искомая функция. После подстановки в уравнение Шрёдингера получается:

$$\frac{1}{2m}(S')^2 - \frac{i\hbar}{2m}S'' + U(x) = E$$

Если объявить постоянную Планка нулём, то второе слагаемое выпадает и остаются квадратные уравнения, которые можно легко разрешить:

$$S' = \pm\sqrt{2m(E - U(x))}$$

В теории квазиклассического приближения понимают, что эта величина с формальной точки зрения представляет собой импульс классической частицы, находящейся при энергии  $E$  в точке с координатой  $x$ , если  $E > U(x)$ . Если  $E < U(x)$ , то это

будет величина, по модулю равная импульсу, но содержащая мнимую единицу как фазовый множитель, то есть либо  $S' = \pm p(x)$ , либо  $S' = \pm |p(x)|$ .

Данное преобразование законно, если член  $\hbar S''$  (который был «выброшен») был мал по сравнению с тем, который сохранён:

$$\left| \frac{\hbar S''}{S'^2} \right| \ll 1$$

$S$  — это безразмерная величина. Такая комбинация получится, если брать следующий дифференциал:

$$\left| \frac{\hbar S''}{S'^2} \right| = \left| \frac{d}{dx} \left( \frac{\hbar}{S'} \right) \right| \ll 1$$

$S'$  — это импульс, а  $\frac{\hbar}{S'} = \lambda(x)$  — это величина с размерностью координаты, которую принято называть *длиной волны де Бройля*.

Сама идея описания с пространственных свойств частицы с помощью некоторой волны сыграла большую роль в развитии квантовой теории. После того, как Шрёдингер доложил на семинаре у Дебая работу де Бройля, которая предлагала связывать с каждой частицей, обладающей импульсом  $p$ , некую волну с длиной  $\frac{\hbar}{S'} = \lambda(x)$ .

В данном разделе тот же путь проходит в обратном направлении: сделанная процедура, при которой волновая функция теперь имеет вид:

$$\psi \sim \exp \left( \pm \frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x p(x') dx' \right)$$

Это нулевое приближение метода ВКБ. Теперь нужно учесть член, содержащий  $S''$ , как поправку. Идея состоит в том, что  $S$  будет записываться в виде суммы  $S_{(0)}$  и поправки  $S_{(1)}$ . Подставив это в уравнение, записанное выше, все члены, не содержащие  $S''$ , сокращаются, остаётся суммарный член  $2S'_{(0)}S'_{(1)}$  и следующий член  $-\frac{i\hbar}{2m}S''_{(0)}$ , получается уравнение:

$$S'_{(0)}S'_{(1)} - \frac{i\hbar}{2m}S''_{(0)} = 0$$

Для первой поправки получается дифференциальное уравнение с разделяющимися переменными:

$$S_{(1)}(x) = i\hbar \ln \sqrt{S'_{(0)}(x)}$$

Мы искали поправку к фазе волновой функции, которая стоит в экспоненте. Тогда в первом приближении ВКБ:

$$\psi = \frac{C_1}{\sqrt{p(x)}} \exp\left(+\frac{i}{\hbar} \int^x p(x') dx'\right) + \frac{C_2}{\sqrt{p(x)}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int^x p(x') dx'\right) \quad (16.2)$$

Во-первых, в одномерном случае все уровни не вырождены (в дискретном спектре), следовательно любую функцию стационарного состояния можно выбрать вещественной и умножить её на комплексное число. Какие бы не ставились граничные условия (физически разумные), должна получиться вещественная функция. В формуле (16.2) есть 4 произвольных параметра — это  $C_1$ ,  $C_2$  и нижние пределы в интегралах.

Общая идея следующая: можно написать частное решение уравнение Шрёдингера, иметь возможность построить целое семейство таких уравнений и из них подобрать то, которое будет нужно. Там, где потенциал больше, там импульс меньше, а скорость изменения фазы меньше, частица идет медленнее, но с другой стороны, вероятность найти частицу в этой области растёт как  $\frac{1}{p(x)}$  — в 2 раза меньше скорость, в 2 раза больше вероятность найти частицу на отрезке единичной длины (рис. 16.1).

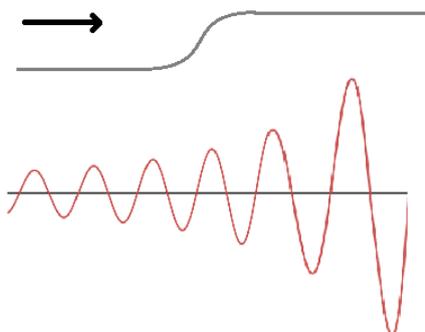


Рис. 16.1. Приближённый вид волновой функции

До этого момента задачи вида «по линейному дифференциальному уравнению второго порядка с переменным коэффициентом нарисовать общий вид его решения» были невозможными. Сейчас формула (16.2), рис. 16.1 и известный вывод о том, что там, где энергия меньше потенциальной, где квадрат импульса отрицателен, где импульс чисто мнимый, в показателе экспоненты и в первом, и во втором члене стоят вещественные величины, которые можно прочесть как скорость убывания волновой функции по закону  $-e^{\alpha x}$  и нарастание с такой же скоростью.

Ранее был сделан вывод о том, что если потенциал убывает достаточно быстро, то за пределами потенциальной ямы волновая функция будет убывать по экспонен-

циальному закону, а показатель экспоненты  $\kappa$  зависит только от энергии связанного состояния и массы частицы. Форма, глубина и ширина ямы не важны.

В формуле (16.2): если мы находимся на больших расстояниях от потенциала,  $U(x) = 0$ ,  $E$  — отрицательная величина, корень из  $E$  — чисто мнимая, тогда эти формулы дают закон затухания в точности такой же, какой был получен из точного уравнения Шрёдингера. Этот метод воспроизводит точно некоторые результаты. Никакого амплитудного множителя не будет, так как  $p$  постоянна.

Умение рисовать приближенные графики волновых функций нужно для оценки соответствующих интегралов. Наша задача, связанная с наблюдаемыми, затрагивает постулат Борна, который говорит, что наблюдаемые — собственные значения операторов. В первую очередь нас интересует оператор энергии и возможность получить те значения  $E_n$ , при которых волновая функция будет обращаться в 0 при стремлении к  $+\infty$  и к  $-\infty$  (рис. 16.2).

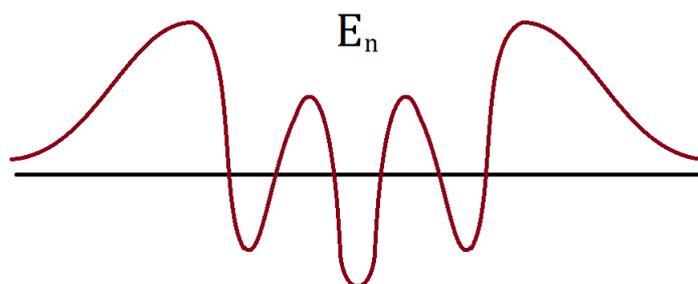


Рис. 16.2. Волновая функция обращается в 0 при стремлении к  $+\infty$  и к  $-\infty$

В предыдущем разделе можно было обратиться к осциляционной теореме, которая говорила, что для  $n$ -ого состояния снизу число нулей при конечных  $n$  равно  $n$ . Проблема в том, что можно выбрать любое  $E$ , можно договориться о фазе, чтобы в этой области волновая функция только убывала; используя функции с действительным импульсом, можно нарисовать вещественную часть, которая будет фазово неустойчивой. Нам нужна единственная функция та, которая при переходе из одной области в следующую стыкуется в точности с затухающей функцией.

В методе стрельбы мы рисовали функцию при данном значении  $E$ . Получалось, что к убывающей функции примешалась растущая. Если поменять параметр, то получится другое решение, а это означает, что к убывающей функции опять примешалась растущая, но с другим коэффициентом. Делим пополам интервал, пока не получается функция, в которой растущая компонента обнулена.

То же самое нужно сделать здесь. Суть метода состоит в использовании условий:

скорость изменения дебройлевской длины волны с изменением координаты должна быть мала по сравнению с единицей:

$$\left| \frac{d}{dx}(\lambda(x)) \right| \ll 1 \quad (16.3)$$

Если мы находимся вблизи точки, где потенциал сравнивается с уровнем энергии, то оказывается, что  $S'_{(0)}$  расписывается как:

$$S'_{(0)} = p(x) \cong \sqrt{2mU'}\sqrt{x_0 - x}$$

Квадрат импульса ведёт себя по линейному закону, импульс в одном случае растёт как корень, а в другом случае он чисто мнимый. Это выражение можно подставить в неравенство (16.3) и получится:

$$\frac{d\lambda}{dx} \sim \frac{1}{(x_0 - x)^{3/2}}$$

Эта формула показывает, что каким бы ни был потенциал, какой большой не была бы величина  $U_0$ ,  $a$ , борновский параметр, вблизи точки поворота классической теории, вблизи той точки, где осциллирующая квантовая функция сменяется монотонной, всегда нарушается требование (16.3). Величина, которую надо сделать малой по сравнению с единицей, не просто остается конечной, а стремится к бесконечности. Это означает, что можно пользоваться формулой (16.2) где угодно, кроме окрестности точек поворота — здесь наше приближение всегда даст неверный ответ. С формальной точки зрения получается, что волновая функция в окрестности точки поворота обращается в бесконечность.

Волновая функция при всех значениях координат не очень нужна, понадобится получение значения энергии, при котором получится функция такая, что она и вправо, и влево будет убывать по экспоненте. Во-первых, нужно придумать, как пройти через сингулярную точку, тогда можно будет построить формулы, которые говорят: из экспоненциально растущей слева (рис. 16.2) получается косинус с определённой фазой в центре; из экспоненциально убывающей справа появляется косинус с такой-то иной фазой в центре. Поскольку состояния не вырождены, оба выражения для косинуса внутри этого интервала должны совпадать, у них должна быть одинаковая фаза. Получается уравнение для этой фазы, которое говорит: некий интеграл от  $p(x)$  должен быть равен какому-то числу, из которого получатся одинаковые фазы.

Проблема заключается в том, как связать между собой два решения, если между ними находится точка, в которой наше приближение неприменимо. Методов такого прохода через запрещённую область на практике в квазиклассическом приближении

известно два. Первый из них описывает, что проблема с сингулярностью возникает из-за того, что компоненты волновых функций были выбраны спешно.

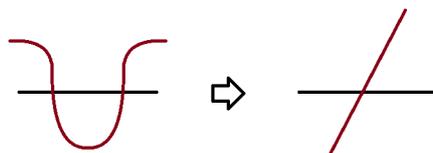


Рис. 16.3. Переход от левой зависимости к линейной (правой)

Можно построить в окрестности точки поворота поведение зависимости потенциала примерно линейным. Нужно «превратить» эту зависимость в зависимость, пригодную при всех значениях  $x$  (рис. 16.3).

Преимущество очевидно. Оказывается, что дифференциальное уравнение Шрёдингера, в котором стоит  $U(x)$  — линейная функция, входит в класс специальных функций — *функций Эйри*. Для этих функций известна любая асимптотика.

У системы с линейным потенциалом есть ряд преимуществ, одно из которых очевидно: когда меняется высота энергии, передвижение идёт по оси вправо и оказывается, что вид волновой функции при разных энергиях оказывается одним и тем же, но только со смещённым началом координат. Тогда нужно изучать не набор функций Эйри, свойственные разным значениям параметра  $E$ , а единственную функцию, которая соответствует, например, значению  $E = 0$ . Если убрать константы и величину силы, то система будет характеризоваться одним уравнением, в котором все величины безразмерны:

$$\frac{d^2\psi}{dy^2} = y\psi = 0 \quad (16.4)$$

которое и называется **уравнением Эйри**.

Уравнение линейно, можно взять функцию, которая записана в каких-то таблицах и умножить её на 17.5, что всё равно будет решением. Однако надо вспомнить, что речь идёт о системе с потенциалом, у которого нет уровней дискретного спектра. При любых значениях энергии есть единственное решение, убывающее в запрещённой области и осциллирующее в разрешённой, его обозначают как функцию  $Ai(y)$ . В квантовой механике нужны те решения, которые удовлетворяют соотношению:

$$\int_{-\infty}^{\infty} Ai(t+x)Ai(t+y)dt = \delta(x-y)$$

В предыдущих разделах говорилось о том, что в основу базиса непрерывного спектра должна быть положена функция, которая удовлетворяет правилам нормировки на дельта-функцию от параметра. Вид такого решения изображён на рис. 16.4.

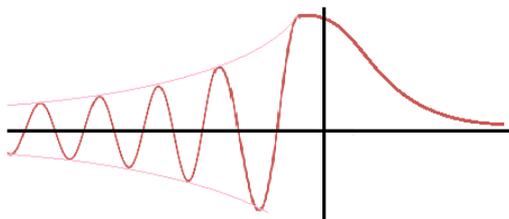


Рис. 16.4. Решение уравнения

Значения  $Ai(0) = 0.355$ , производная  $Ai'(0) = -0.259$ .

Фаза и амплитуда волновой функции, записанной в виде экспоненты от  $ip(x)$ , если мы находимся далеко от точки поворота, там, где переход от классически разрешенной области к классически запрещенной, функция Эйри даёт правила сшивки:

$$\frac{2}{\sqrt{p(x)}} \cos \left( \frac{1}{\hbar} \int_x^b p(x') dx' - \frac{\pi}{4} \right) \Leftrightarrow \frac{1}{\sqrt{p(x)}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_b^x |p(x')| dx'}$$

где  $b$  — точка поворота.

Число 2 в числителе первой дроби представляет собой то число, которое было нужно для ответа. Теперь мы знаем, как из убывающей справа функцию сделать осцилляцию и как эта осцилляция будет себя вести. Соответственно, там, где у нас будет левая граница классической области движения  $a$  слева будет стоять растущая экспонента:

$$\frac{1}{\sqrt{|p|}} \exp \left( -\frac{1}{\hbar} \int_x^a |p(x')| dx' \right) = \frac{2}{\sqrt{p(x)}} \cos \left( \frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' - \frac{\pi}{4} \right)$$

Функция, продлённая справа внутрь, и функция, продлённая слева внутрь, должны между собой совпадать, должны быть пропорциональны друг другу. Есть выражение для этих функций, можно записать условия пропорциональности как условия равенства вронскиана нулю:

$$W(\psi_1, \psi_2) = -\frac{C_1 C_2}{\hbar} \sin \left( \frac{1}{\hbar} \int_a^b p(x') dx' - \frac{\pi}{2} \right) = 0 \Rightarrow Arg = n\pi$$

Следовательно:

$$\int_a^b p(x') dx' = \pi \hbar \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad (16.5)$$

Это вторая из составляющих инструментарий формулы метода ВКБ. Она говорит: если решается задача, у которой есть участок, где потенциал лежит выше дна ямы, могут существовать уровни дискретного спектра, то, используя для описания волновой функции конструкцию метода ВКБ и требуя убывания волновой функции за пределами точек поворота, можно прийти к выводу, что такие уровни будут находиться в точках, где интеграл от импульса по координате будет кратен кванту действия  $\hbar$  с коэффициентом  $(n + \frac{1}{2})$ .

Чтобы найти спектр в потенциале, нужно научиться вычислять интеграл по импульсу от  $a$  до  $b$ , а потом крутить ручку до тех пор, пока этот интеграл не начнёт принимать полу-целое кратное от значения  $\pi \hbar$ .

Выписанная формула (16.5), которая является самой нагруженной в методе ВКБ, носит название *правила квантования Бора-Зоммерфельда*. Ни Бор, ни Зоммерфельд не имели отношения к методу ВКБ, но они установили правило квантования в старой квантовой теории. В теории Бора первой моделью, которой был атом водорода, рассматриваемый с классической точки зрения так, что его орбиты были круговыми, для них было установлено правило, что существуют только те орбиты, на которых выполняется:

$$\oint p_\varphi d\varphi = nh$$

Далее было вычислено, при каких энергиях могут выполняться эти соотношения, и появилась старая теория атома водорода. Зоммерфельд, который обобщил теорию бора на эллиптические орбиты, сформулировал правило таким образом: «фазовый интеграл для каждой координаты является целым кратным кванта действия» (1915 год). Формула следующая:

$$\oint p_i dq_i = n_i h$$

Правило отличается от того, с которым мы имеем дело. Добавка  $\frac{1}{2}$  произошла существенно позже уже в рамках метода ВКБ. Впервые это было сделано в 1928 году Нисоном, и на следующий год независимо от него и от друг друга это сделали Крамерс и Итман. К этому времени было уже известно, что основное состояние энергии гармонического осциллятора не есть 0, как было при старом правиле квантования, а есть величина  $\frac{\hbar\omega}{2}$ . Это обстоятельство впервые установил Гейзенберг в 1925 году, потому что он свою матричную версию квантовой теории обкатал на простейшей

модели гармонического осциллятора. Сама идея, что основное состояние квантовой системы не есть состояние покоя, в котором все координаты и все импульсы имеют неизменные значения, была выдвинута еще Планком в т. н. второй теории в 1911 году.

Есть старая квантовая теория, в ней есть свое правило квантования. Специалисты по уравнению Шрёдингера строят приближённый метод решения уравнения, и этот приближённый метод получает название по именам Вентцеля, Крамерса, Бриллюэна. Примерно в десяти процентах случаев к устойчивой аббревиатуре WKV присоединяется буква J, что означает фамилию Дефрис, который действительно развил такой метод построения приближенных решений волновых одномерных уравнений раньше чем Вентцель, Крамерс и Бриллюэн, потому что он это сделал в 1924 году, когда никакого уравнения Шрёдингера не было, и имел ввиду другую задачу — распространение волн в слоистых неоднородных средах.

Нужно помнить, что впервые подход к поиску решение одномерного уравнения для волны, распространяющейся в среде с изменяющимися параметрами, путём предположения, что форма решения — это тоже волна, у которой амплитуда меняется и частота меняется, было придумано ещё в первой половине XIX века. В частности, работы Лиувилля 1837 года содержат тот же подход, который был перероткрыт в рамках квантовой теории.

Во-первых, мы проверим, что теперь любой потенциал годится для исследования, проверим некоторые старые результаты.

Первая задача: пусть есть потенциальная яма. При каких условиях число связанных состояний в ней конечно? Нужно посмотреть на интеграл и понять, что когда мы приближаем энергию к нулю, получается:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{2m|u(x)|} dx < \infty$$

Становится понятным, что интеграл должен сходиться на больших расстояниях, убывать быстрее чем  $\frac{1}{x^2}$ , потому что тогда корень из него будет  $o\left(\frac{1}{x}\right)$ , а такие интегралы сходятся. То есть,  $x \rightarrow \infty$ ,  $U(x) = o\left(\frac{1}{x^2}\right)$ ,  $N$  конечно. Соответственно, если у нас есть бесконечный провал в яме, то получим, что интеграл  $\int_0^C \sqrt{U(x)} dx$  будет сходиться, если  $x \rightarrow 0$ ,  $U(x) = o\left(\frac{1}{x^2}\right)$ ,  $N$  конечно.

В предыдущих разделах рассматривался случай частицы в кулоновском потенциале: на больших расстояниях потенциал вёл себя как единица на  $R$ , интеграл расходился, у системы бесконечное число уровней и все они связаны с мелко лежащими

уровнями. Всё это полностью совпадает с тем, что установил Нильс Бор и что с тех пор известно. С другой стороны, мы уменьшаем  $x$ , оказывается, что яма бесконечно глубокая, но наши формулы говорят, что упасть в эту яму нельзя, так как у неё слишком медленно нарастает потенциал, интеграл от корня из потенциала сходится. Обязательно есть основное состояние, и снова это совпадает с борновской теорией.

Рассмотрим интеграл:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{2m \left| U_0 f\left(\frac{x}{a}\right) \right|} dx = \sqrt{2mU_0 a} \int p(z) dz = \pi \hbar \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad (16.6)$$

Учитывая, что  $N = n + \frac{1}{2}$ , отсюда получаем:

$$N \simeq \frac{1}{\pi} \sqrt{B}, \quad (16.7)$$

где  $B = \frac{2mU_0 a^2}{\hbar^2}$  — борновский параметр.

Во-первых, зависимость типа  $\sqrt{B}$  рассматривалась в предыдущих разделах, когда шла работа с гармоническим осциллятором. В потенциальной яме, которая раскрывается быстрее, чем растёт гармонический осциллятор, частота должна западать с ростом энергии, а значит, уровни должны быть расположены гуще, а значит, и число их должно быть больше чем то, которое мы считали в модели. Однако с точностью до числового коэффициента она работает и в том случае, когда яма прямоугольная.

Для разных потенциалов ответ получается один и тот же: полное число связанных состояний в таком потенциале будет расти пропорционально  $\sqrt{B}$ . Этот результат каждый раз при новом подходе оказывается имеющим более широкую область применимости.

Формула правила квантования Бора-Зоммерфельда (16.5) говорит, что для того, чтобы в яме нашлось хотя бы одно связанное состояние, нужно, чтобы интеграл из равенства (16.6), добрался хотя бы до значения  $\pi \hbar \frac{1}{2}$ . Если значение интеграла меньше этой величины, то правило Бора-Зоммерфельда говорит, что в этой яме уровней нет. У нас есть старый результат, который говорит, что если интеграл  $\int_{-\infty}^{\infty} U(x) dx = -q < 0$ , то работает модель  $\delta$ -ямы и в потенциале есть связанное состояние. Два разных приближенных методов дают полностью противоречащие друг другу ответы.

Этот вопрос, когда применимо квазиклассическое приближение, является очень спорным. Мы начинали с того, что  $\frac{S}{\hbar}$  много больше единицы. Всё время предполагается, что размер области, в которой движется система, велик по сравнению с длиной волны.  $\frac{S}{\hbar}$  это корень из борновского параметра. Если этот параметр велик по сравнению с единицей, можно включать метод ВКБ. Но если начать борновский параметр

устремлять к 0, то оснований верить методу, который построен для противоположной области, нет. Поскольку метод построен в предположении, что  $\sqrt{B} \gg 1$ , то опираться на его результаты в области, где  $B$  порядка единицы или меньше, нельзя.

Теперь надо взять несколько моделей (в идеале нужны те, для которых можно найти спектр точный) и сравнить с теми, у которых спектр методом ВКБ можно найти точно. Первый пример — гармонический осциллятор. Точный результат для такого примера:  $E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$ . Если решить это методом ВКБ, то  $U(x) = \frac{m\omega^2}{2}x^2$ . Тогда интеграл:

$$\int_{x_L}^{x_R} \sqrt{2m \left( E - \frac{m\omega^2}{2}x^2 \right)} dx = \pi\hbar \left( n + \frac{1}{2} \right)$$

Тогда:

$$J = \sqrt{2mE_n} \int_{x_L}^{x_R} \sqrt{1 - \frac{m\omega^2}{2E_n}x^2} dx = \pi\hbar \left( n + \frac{1}{2} \right)$$

Введём новую переменную  $y^2 = \frac{m\omega^2}{2E_n}x^2$ . Тогда  $dx = \sqrt{\frac{2E_n}{m\omega^2}}dy$ . Тогда получается:

$$\frac{2E}{\omega} \int_{-1}^1 \sqrt{1-y^2} dy = \pi\hbar \left( n + \frac{1}{2} \right)$$

Приведённый интеграл есть площадь половины круга единичного радиуса. Значит:

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right)$$

Результат: для модели гармонического осциллятора спектр, найденный методом ВКБ, в точности совпадает со спектром системы, найденным точно. Метод ВКБ является абсолютно точным: все уровни совпадают друг с другом с нулевой ошибкой. Совпадений в теории не бывает, это просто означает, что есть какое-то свойство, которое пока ещё не обосновано, но из которого следует много выводов. Например, гармонический осциллятор нами используется в первую очередь как модель для произвольного гладкого потенциала его нижних состояний. Оказывается, что чем больше борновский параметр, тем больше уровней у гладкого потенциала, тем больше область, в которой потенциал хорошо аппроксимируется гармоническим осциллятором, и возникает вопрос: если у нас есть какая-то гладкая яма, то какие уровни будут лучше аппроксимироваться?

Оказывается, что среди моделей-клише, которые допускают точное решение уравнение Грёдингера, есть несколько таких, которые позволяют решить и задачу о ВКБ-приближении: пусть  $U = -U_0 \frac{1}{\text{ch}^2(x/a)}$  — модифицированная модель Пёшля-Теллера. Окажется, что относительная глубина уровня (точное решение):

$$\varepsilon_n = \frac{1}{B} \left[ -\left(n + \frac{1}{2}\right) + \sqrt{B + \frac{1}{4}} \right]^2$$

Можно найти ВКБ выражение для спектра тоже в точном аналитическом виде: нужно правило квантования продифференцировать по параметру энергии, при этом интеграл в левой части сильно упрощается и в итоге можно записать формулу ВКБ в следующем виде:

$$\varepsilon_n = \left[ 1 - \frac{1}{\sqrt{B}} \left(n + \frac{1}{2}\right) \right]^2$$

Обе формулы работают, если выражение в квадратных скобках не отрицательно, то есть  $n$  ограничена сверху. В первой формуле особенно видно, что  $n$  не может быть больше чем  $\sqrt{B}$ , иначе знак внутри скобки переменится. С другой стороны, формулу сравнивать при заданном значении  $n$  очень неудобно. Удобно посмотреть случай, когда  $n$  очень маленькая и  $n$  близко к максимальному значению  $\sqrt{B}$ .

Если взять  $n$  близко к 0 и разложить вторую формулу, то получается:

$$\varepsilon_n^{WKB} \simeq 1 - \frac{2}{\sqrt{B}} \left(n + \frac{1}{2}\right)$$

В ВКБ-приближении нижние уровни описываются как модель гармонического осциллятора с частотой  $\frac{2}{\sqrt{B}}$ . Точное решение:

$$\varepsilon_n^{Exact} \simeq 1 + \frac{1}{4B} - \frac{2}{\sqrt{B}} \left(1 + \frac{1}{8B}\right) \left(n + \frac{1}{2}\right)$$

Оказывается, что в точном решении частота эффективного осциллятора оказывается чуть больше, то есть формулы не являются идентичными с точностью до тех членов, которые были учтены.

Таким образом, ВКБ-приближением аппроксимировали потенциальную яму гармоническим осциллятором с частотой, которая чуть меньше той, которая появляется в точном решении. На этом шаге не хватает точности для того, чтобы ответить, какое из этих выражений лучше. Можно добавить разложение корня, тогда при  $n = 0$  получаем:

$$\begin{aligned}\epsilon_0^{WKB} &\simeq 1 - \frac{1}{\sqrt{B}} + \frac{1}{4B} \\ \epsilon_0^{Exact} &\simeq 1 - \frac{1}{\sqrt{B}} + \frac{1}{2B} - \frac{1}{8\sqrt{B^3}} + \dots\end{aligned}$$

Оказывается, что метод ВКБ в случае большого борновского параметра даёт для значения энергии основного связанного состояния величину, которая отличается от точной только в порядке  $\frac{1}{B}$ . Значит  $\Delta^{WKB} \sim \frac{1}{B}$ .

Если взять  $n$  порядка  $\sqrt{B}$  (то есть порядка последнего уровня, который у нас есть), то окажется, что погрешность метода ВКБ будет  $\Delta^{WKB} \sim \frac{1}{\sqrt{B}}$ . Нижние уровни определяются точнее.

## Лекция 17. Квазиклассическое приближение (метод ВКБ)

Была разобрана формула 17.1

$$\psi = \sum_{i=1}^n \frac{C_i}{\sqrt{p(x)}} \cdot \exp\left(\pm \frac{i}{\hbar} \int p(x) dx\right) \quad (17.1)$$

Данная формула говорит о том, что можно приближенно представить решение уравнения Шредингера для одномерного движения частицы в поле с произвольным потенциалом  $U(x)$ .

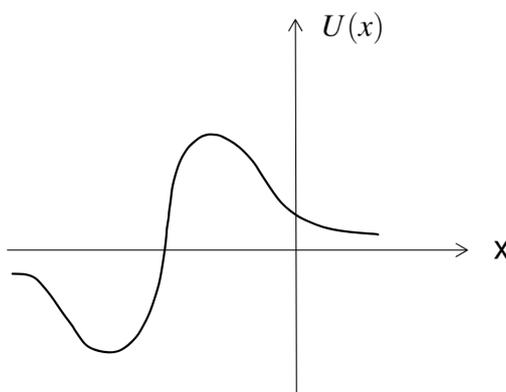


Рис. 17.1. Произвольное изменение потенциала  $U(x)$

Волновая функция частицы движущейся в плоском пространстве описывается плоской волной  $\exp\frac{ip(x)}{\hbar}$ . Если пространство неоднородное, то импульс  $p$  в разных точках пространства разный:

$$p = \sqrt{2m(E - U(x))}$$

Данная величина описывает скорость локального набора фазы. Если  $U(x)$  изменится, то происходит изменение импульса в пространстве, и скорость набора фазы изменяется.

Волновая функция, полученная в выражении 17.1, необходима для построения графика волновой функции вдали от точек поворота и составления общего представления об ее устройстве.

Данная функция применяется в двух случаях

- 1) определение дискретного спектра;

- 2) определение коэффициентов прохождения и отражения, входящих в задачу рассеяния и их зависимость от энергии.

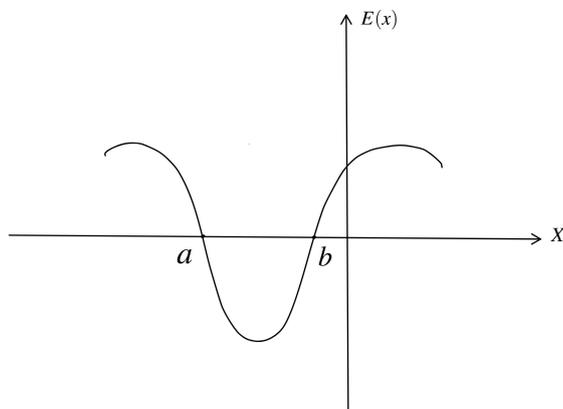


Рис. 17.2. Произвольное изменение энергии  $E(x)$

Рассмотрим второй случай

$$\int_a^b p(x) dx = \pi \hbar \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad (17.2)$$

Уровень энергии дискретного спектра с главным квантовым числом  $n$  отсчитывается так, что основному уровню приписывается  $n = 0$ .

### Правило квантования Бора-Зомерфельда

**Определение 17.1.** Значение  $E_n$  должно быть выбрано так, чтобы интеграл от импульса между двумя точками поворота равнялся кратному от постоянной планка с коэффициентом  $\pi$ , умноженному на число  $(n + \frac{1}{2})$ .

На основе данного утверждения сделаны следующие выводы

- 1) Для гармонического осциллятора приближенный спектр является точным. Данная ситуация необычная, так как волновая функция, которую рисует метод ВКБ, согласно формуле 17.2, не похожа на точную из-за того, что приходится делить на 0, в точках поворота функция сингулярна;
- 2) Чем ниже уровень и ближе потенциал к потенциалу параболы, тем выше точность и меньше погрешность дискретного спектра, найденного с помощью квантования Бора-Зомерфельда (Б-З). Следовательно, чем больше квантовое число (более классическая ситуация), тем хуже работает метод.

Одно из важнейших достоинств метода ВКБ – возможность обрабатывать массивы из очень большого числа уровней. Данное достоинство применяется для исследования свойств частиц, находящихся внутри макроскопических тел. Одна из простейших моделей – модель, описывающая металл как газ из свободных частиц (электронов), которые не могут выйти за его стенки, а внутри металла движутся свободно. Из данной модели важно получить информацию о количестве уровней, приходящихся на "полоску" энергии.

Для данных целей была введена функция плотности состояния:

$$\rho(E) = \sum_{i=1}^n \delta(E - E_n)$$

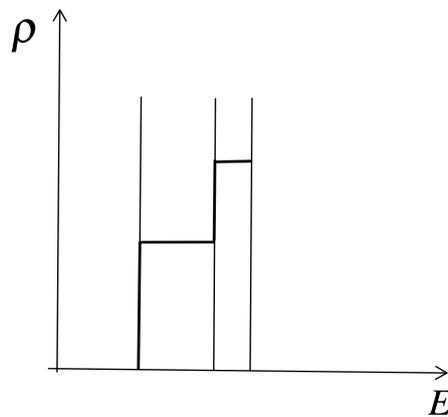


Рис. 17.3. График зависимости  $\rho(E)$

Каждый раз как появляется уровень (Рис. 17.3), на графике  $\rho(E)$  появляется столбик  $\delta$ -функции. Была установлена связь функции  $\rho(E)$  с функцией Грина. Однако, чтобы найти функцию Грина, нужно решить уравнение Шредингера, написать все волновые функции дискретного спектра основного базиса, что усложняет решение задачи. Попробуем применить более грубое описание:

$$N(E) = \int_{E_0-E}^E \rho(E') dE'$$

Данная функция описывает, сколько состояний дискретного спектра имеют энергию не превосходящую  $E$  и являются ступенчатой функцией. Если имеем дело с макросистемой (тысячи и миллионы уровней), а также если количество частиц стремится

к числу Авогадро, то точность, которая нужна для того, чтобы оправдать аккуратное решение уравнения Шредингера, намного выше той, которую может обеспечить эксперимент.

Например, взаимодействие нуклонов. Задача подсчета потенциала становится достаточно трудоемкой, так как нуклоны являются составными частицами, взаимодействие которых — достаточно сложный процесс, в котором рассматривается взаимодействие как кварков одного нуклона с кварками другого нуклона, так и кварков между собой.

Выход из данной ситуации состоит в том, чтобы использовать сглаженную функцию  $\tilde{N}(E)$ :

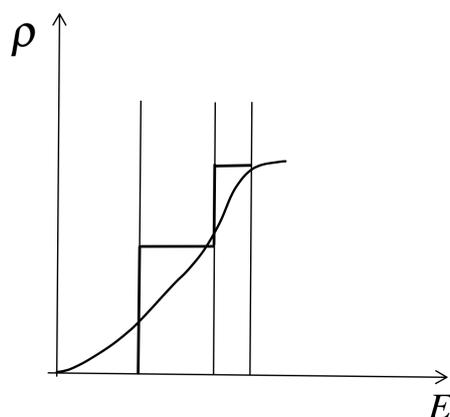


Рис. 17.4. Изображение сглаженной функции  $\rho(E)$

$$\tilde{\rho}(E) = \frac{\tilde{N}(E)}{dE}$$

где  $\tilde{\rho}(E)$  определяется как производная от сглаженной функции.

Поскольку в правиле Бора-Зомерфельда стоит в правой части  $n$ , перепишем формулу и вместо интегрирования на отрезке подставим интегрирование на фазовой плоскости:

$$N(E) = \frac{1}{2\pi\hbar} \oint \rho(E) dx$$

По описанным формулам можем вычислить плотность состояний, продифференцировав уравнение по  $E$ . Тогда

$$\rho(E) = \frac{1}{2\pi\hbar} \oint \sqrt{2m} \frac{1}{2\sqrt{E-U}} dx$$

$$\rho(E) = \frac{1}{\Omega(E)}$$

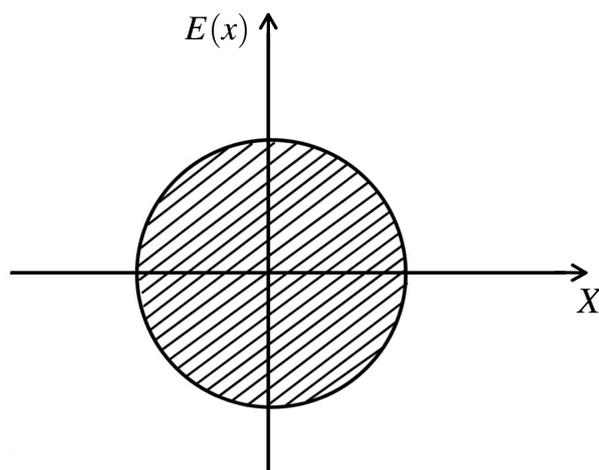


Рис. 17.5. Изображение фазовой плоскости

где  $\Omega(E)$  – частота классического движения.

На основе данных выражений приходим к следующему выводу.

*Если существует большая система, т.е. большая глубина и ширина, солидная масса и маленькая постоянная Планка, то частота перехода между соседними уровнями дискретного спектра будет близка к частоте классических колебаний частицы в этом потенциале при энергии, которая лежит в данной области*

$$\omega_{n+1,n} \simeq \Omega(E_{n+1,n}) \quad (17.3)$$

– одна из теорем соответствия.

Согласно формуле, следует, что данные величины совпадают между собой с точностью до  $\hbar^0$ . Модели, в которых движение происходит в многомерном потенциале и при этом переменные не разделяются, представляют собой исключительную сложность. На данный момент будем использовать только одномерный метод ВКБ, так как многомерный метод с неразделяющимися переменными очень сложен.

В квантовой теории принято считать, что для произвольных систем в пространстве любого числа измерений справедливо обобщение формулы для  $\rho(E)$ , которое устроено следующим образом.

$$N(E) = \frac{\phi(E)}{2\pi\hbar} \quad (17.4)$$

где  $\phi(E)$  – объем фазового пространства, доступного частице с энергией не больше  $E$ . Формула 17.4 носит название **Уравнение Вейля**.

Согласно рисунку сглаженной функции, границы траектории соответствуют энергии  $E$ , а всё, что внутри – траектории, соответствующие энергиям меньшим  $E$ . Данное

обобщение справедливо в случаях, когда  $d = 1, 2, 3$  т.д. (одномерного, двухмерного и трехмерного пространства).

В случае асимметричной области работает следующая гипотеза.

Число  $N(\lambda)$  – число собственных функций, соответствующих собственным значениям, не превосходящим  $\lambda$  для лапласиана  $\Delta$ .

В физике:  $\Delta$  – сумма вторых производных.

В квантовой механике:

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \Delta$$

**Теорема 17.1.** Собственные значения любого оператора есть произведение оператора на эрмитово сопряженный ему (а следовательно и для квадрата любого эрмитового оператора), которое всегда положительно.

Следовательно можем представить лапласиан как кинетическую энергию частицы, запертой в тело. Вспомним, что если существует бесконечно высокая стенка, то вблизи этой стенки волновая функция обращается в ноль. Запишем условия для волновой функции:

$$\Delta \psi = \lambda \psi \text{ — внутри области}$$

$$\psi = 0 \text{ — на поверхности}$$

Данные условия носят название **граничных условий Дирихле**.

Числа  $N(\lambda)$ , не превосходящие  $\lambda$  собственных значений оператора Лапласа с  $-\Delta$  для функций, отличных от нуля в полости и обращающихся в ноль на поверхности этой полости, не зависят от формы полости, а только от её объема и асимптотически равны

$$N(\lambda) \simeq \frac{V}{6\pi^2} \cdot \lambda^{3/2} \quad (17.5)$$

где  $N(\lambda)$  является безразмерной величиной.

Формула 17.5 носит название **Закон Вейля** и соответствует трехмерному случаю ( $d=3$ ). Для одномерного случая уравнение 17.5 будет иметь следующий вид:

$$N(\lambda) \simeq \frac{V}{4\pi} \cdot \lambda$$

Для закона Вейля (в трехмерной случае) была внесена в 1986 году поправка:

$$N(\lambda) \simeq \frac{V}{6\pi^2} \cdot \lambda^{3/2} \frac{S}{16\pi} \cdot \lambda$$

Посчитаем максимальный импульс по формуле Вейля и объем в импульсном пространстве:

$$\begin{aligned}\frac{p_+^2}{2m} &= E \\ p_+ &= \sqrt{2mE} \\ V &= \frac{4\pi p_+^3}{3\hbar} \\ \rho &= \frac{V}{4\pi^2} \cdot \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \cdot \sqrt{E} \\ \rho &\simeq 1 \cdot 10^{32} \frac{1}{\text{см}^3}\end{aligned}$$

Данная величина показывает какие значения имеют типичные междууровневые расстояния в системах 1 см какого-либо металла.

Умея использовать систему для состояния дискретного спектра, попробуем использовать ее для состояния непрерывного спектра. Вспомним, что при существовании потенциальной ямы в классической недоступной области волновая функция выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned}\varphi &\sim e^{-\kappa x} \\ \kappa &= \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}\end{aligned}$$

Вдали от потенциальной ямы волновая функция убывает по экспоненциальному закону и скорость убывания зависит только от разности энергий между потенциалом и состоянием, в котором находится частица. Если потенциал меняется, то величину  $\kappa$  можно заменить на  $\frac{|p|}{\hbar}$ :

$$\frac{|p|}{\hbar} = \frac{\sqrt{2m(E - U(x))}}{\hbar}$$

Если  $E \leq U(x)$ , то  $\kappa$  после извлечения корня чисто мнимая, после выписывания приставок  $\pm i$  она становится вещественной:

$$\varphi \sim e^{\int \frac{p(x)dx}{\hbar}}$$

Для решения задач прохождения частиц через барьер вычислим коэффициент прохождения (или коэффициент прозрачности)  $D(E)$ :

$$D(E) \simeq e^{-\frac{2}{\hbar} \int_a^b p(x)dx} \quad (17.6)$$

Проверка метода ВКБ возможна на задачах, решения которых уже найдены с высокой точностью. Примером такой задачи может случить прохождение частицы через потенциальный барьер. Согласно методу ВКБ получим следующее приближенное значение коэффициента прозрачности  $D$ :

$$D(E) = e^{-2\sqrt{B(1-\varepsilon)}}$$

где  $B$  – боровский параметр.

При нахождении точного решения получим следующее выражение:

$$D(E) \simeq 16\varepsilon(1-\varepsilon)e^{-2\sqrt{B(1-\varepsilon)}}$$

Если  $\varepsilon \rightarrow 0$ , то отношение точного решения к ВКБ решению стремится к нулю. Если  $\varepsilon \rightarrow 1$ , то отношение точного решения к ВКБ решению стремится к нулю. В данном случае говорят об экспоненциальной точности, так как совпадают экспоненциальные члены.

Мы описали выражение для коэффициента прохождения в правой области барьера, теперь запишем формулу коэффициента  $D$  для левой части:

$$D = \frac{1}{\left(e^\varphi + \frac{1}{4} \cdot e^{-\varphi}\right)^2}$$

## Формулы метода ВКБ

### 1) Волновая функция

$$\psi = \sum_{i=1}^n \frac{C_i}{\sqrt{p(x)}} \cdot \exp\left(\pm \frac{i}{\hbar} \int p(x) dx\right)$$

### 2) Квантование по методу Бора-Зомерфельда

$$\int_a^b p(x) dx = \pi\hbar \left(n + \frac{1}{2}\right)$$

### 3) Одна из теорем соответствия

$$\omega_{n+1,n} \simeq \Omega(E_{n+1,n})$$

### 4) Теорема Вейля

$$N(E) = \frac{\phi(E)}{2\pi\hbar}$$

### 5) Коэффициент прохождения через барьер

$$D(E) \simeq e^{-\frac{2}{\hbar} \int_a^b p(x) dx}$$

## Принцип соответствия

В старой квантовой теории принцип соответствия – настоящий принцип, который говорит, что единственным законом, определяющим интенсивность спектральной линии, является использование амплитуд классической механики. Старая квантовая теория будет согласовываться с классической. Правила квантовой теории – для каждой модели установлена однозначно квантовая модель. Однако, нельзя сказать наверняка, что результаты квантовой теории будут совпадать с классической. В основном блоке имеется сходство классической и квантовой теории. Отметим одну из причин такого сходства, опираясь на формулу 17.4.

Будем считать, что спектр эквидистантный. Возьмем разницу не на один уровень, а на несколько уровней  $p$ :

$$\omega_{n+p,n} \simeq p\Omega(E)$$

Уточним данную формулу с помощью следующего соображения: частота излучения перехода зависит от двух энергий (начальной и конечной), а частота классического движения зависит только от одной энергии. Частота перехода из уровня  $(n+p)$  на уровень  $n$  будет равняться следующему выражению:

$$\omega_{n+p,n} \simeq p\Omega\left(\frac{E_n + E_{n+p}}{2}\right)$$

$$\bar{E} \simeq E_n + \frac{p}{2}\hbar\Omega$$

**Теорема 17.2.** Частота квантового перехода в одномерной квазиклассической системе между состояниями с номерами  $n$  и  $n+p$ , где  $p \ll n$ , представляет собой  $p$ -кратную классическую частоту движения при энергии  $E$ , равной энергии  $E_n$  состояния плюс поправка первого порядка по  $\hbar$ . Данная поправка пропорциональна квадрату числа уровней, через которые происходит переход, пополам и умноженную на производную от частоты движения по энергии:

$$\omega_{n+p,n} \simeq p\Omega + \hbar \frac{p^2}{2} \Omega \frac{d\Omega}{dE}$$

Данная формула показывает, как по классическим характеристикам построить квантовую характеристику перехода.

Отметим, что существуют системы, в которых нет зависимости частоты колебаний от энергии. Например, для гармонического осциллятора частота перехода всегда  $p$ -кратное частоты малых колебаний:

$$\omega_{n+q,n+p} + \omega_{n+p,n} = \omega_{n+q,n}$$

– комбинационный принцип Ритца.

Аналогичная теорема для матричных элементов:

$$x_{n+p,n} = X_p + \hbar \frac{p}{2} \omega \frac{dX_p}{dE}$$

Также можем отметить систему, в которой амплитуда не зависит от энергии. Такой системой является прямоугольная яма.

## Лекция 18. Магнитный момент

На протяжении курса мы освоили одномерное уравнение Шрёдингера, установили классификацию моделей по величине борновского параметра, исследовали модели с малым, умеренным и большим борновским потенциалом, выделили асимптотически игрушечные модели  $\delta$ -ямы гармонического осциллятора и надстройки над ними, для задач с непрерывным спектром решили для нескольких простых моделей задачу рассеяния. Также мы запаслись мощным методом, который пригоден для больших борновских параметров квазиклассическим приближением — методом ВКБ, проверили, как он работает, убедились в достоверности, завели приближенный метод для задачи рассеяния — метод функции Грина.

Если у системы разделяются переменные, то мы сможем понять свойства системы и количественно их описать. Когда они разделяются, на первый план выходит задача о движении частицы в центральном поле. Эта задача возникает при упрощении задачи о движении двух частиц, взаимодействующих потенциалом, зависящим только от расстояния между частицами. Гравитационный потенциал (входной для классической механики) удовлетворяет этим свойствам. Взаимодействие двух заряженных частиц можно тоже описать потенциалом, который зависит только от расстояния между частицами.

При учёте релятивистских эффектов в третьем порядке по отношению скорости частиц к скорости света появляются эффекты излучения, система становится диссипативной, мы применяем методы статистической физики. Но в атомной системе, к примеру, атомы водорода (заряд  $1 - 1$  электрон) скорость движения электрона на орбите, подходящей под основное состояние, в 137 раз меньше скорости света. Релятивистские эффекты заметны, но всё таки очень малы.

Концепция частиц, взаимодействующих потенциалом  $U(R)$ , зависящим только от расстояния, была освоена в молекулярной физике в середине 19 века. Пробовались потенциалы разной формы, например, отталкивание по закону  $\frac{1}{r^4}$  позволило решить некоторые уравнения очень просто. Затем появилась известная идея Ван-дер-Ваальса: «Частицы притягиваются на больших расстояниях и отталкиваются на малых». Появляется представление, что ядро состоит из элементарных частиц.

### Задача о движении частицы в центральном поле

Главной целью является научиться решать задачу о движении частицы в центральном поле, потому как в мире выстроилась линейка из множества моделей, которые описывают самые разнообразные явления в субатомном мире. Основой разделения переменных является использование интегралов движения, в нашем случае для движения в центральном поле такими интегралами являются компоненты ве-

личины момента. Можно описать такое состояние, в котором компоненты момента будут сохранять своё постоянное значение. При одномерном движении в потенциальном поле сохраняется энергия, то вместо уравнения второго порядка мы пишем интеграл энергии

$$\int \frac{\dot{x}}{2} + U(x) = E$$

Решаем его относительно  $\dot{x}$ , получим уравнение первого порядка. Оно мгновенно интегрируется.

Если есть интегралы движения, то можно их использовать, чтобы записать более простую систему уравнений движения. Здесь встречаются тонкости и отличия: для такой процедуры нужны интегралы движения, находящиеся в инволюции. То есть нам нужно проследить за тем, чтобы скобки Пуассона выделенных нами интегралов обращались в 0. Из трёх компонент момента можно построить такие комбинации: одна из проекций момента и оператор квадрата момента. Как только построены операторы проекции момента и прилегающие к ним операторы квадрата момента, вступает в силу стандартная квантовая программа: увидев оператор, мы должны определить его спектр, его собственные функции или матричные элементы простейших связанных с нашей величиной операторов, а так же соотношения между матричными элементами.

*Оператор момента* — это векторное произведение координаты на импульс. Этот оператор билинейный по основным динамическим переменным. Мы можем найти гармонический осциллятор, где в центре всего стоял оператор Гамильтона.

$$H = a_+ \cdot a + \frac{1}{2},$$

где  $a$  и  $a_+$  — линейные по основным динамическим переменным операторы. Значит, сам гамильтониан билинейный по динамическим переменным оператор. Между гамильтонианом гармонического осциллятора и оператором углового момента есть большая аналогия, то есть его можно обработать такими же методами.

При определении спектра гармонического осциллятора мы решали задачу о собственных значениях оператора  $a_+a$ , где про коммутатор известно, что аккумулятор  $a$  и  $a_+$  равен единице. Манипулируя коммутационными соотношениями, мы нашли способ превращения функции с собственным значением  $\lambda$  в функцию с собственным значением  $\lambda \pm 1$ , из чего сделали вывод, что спектр — есть часть бесконечной эквидистантной последовательности, а во-вторых, привлекли элементарную лемму: *среднее значение произведения оператора на эрмитовский ему сопряжённый заведомо не отрицательно*. Это утверждение похоже на то, что квадрат модуля вещественного

числа не отрицателен. Из этой теоремы следует вывод: у нашей последовательности собственных значений должна быть граница.

Мы будем изучать пару операторов: оператор квадрата момента и оператор проекции момента. Соответственно функции, которые мы будем искать, — это функции, присущие одновременно двум этим операторам.

Если взять тривиальную задачу о движении в потенциале, в котором энергетические уровни очень сильно отстоят друг от друга, можно понять, что энергия данного уровня не зависит от того, чему равна проекция момента. Куда не направлять его вектор в изотропном пространстве, получится одна и та же энергия. Речь пойдёт о сильно вырожденных уровнях. Уровень, у которого фиксирован квадрат момента и могут быть разные компоненты, — это уровень, вырожденный с очень большой кратностью.

Вырождение — это не аномалия, а сущностная характеристика систем, погружённых в этот мир за счёт присущих ему обильных симметрий. Наша вселенная с огромной точностью является однородной, является изотропной, время является однородным, и всё это со многими десятичными знаками.

С другой стороны, мы видели очень своеобразную черту систем с выраженными состояниями (задача о двух  $\delta$ -ямах). Оказалось, что достаточно малейшего взаимодействия, чтобы волновая функция перемешалась и вместо состояния, когда частица сидит в одной яме, возникло стационарное состояние, когда она пополам сидит в левой и правой яме.

Вспомним, что вырождение делает систему в некоторых случаях бесконечно чувствительной к внешним воздействиям. Но к данному случаю необходимо применить тезис, что у нас всегда присутствует вырождение по проекции момента.

Если обратиться к задаче о движении в центральном поле, то после того, как проработана теория момента, задача решена на  $2/3$ . Становится известна зависимость волновой функции от угловых переменных, и становится ясно, как писать волновую функцию для того, чтобы выделить третью радиальную переменную. Волновая функция — это произведение части, которая зависит только от 2 сферических углов, на часть, которая зависит только от радиуса.

Уравнение для части, которая зависит только от радиуса, устроено так, что представляет собой одномерное уравнение Шрёдингера, в котором потенциал включает в себя еще некую дополнительную часть, зависящую от момента. Значит, что мы должны всегда сначала решить, чему равен момент системы, а потом для этого значения момента решить радиальную задачу. Но степень достижения трудно переоценить, так как  $2/3$  волновой функции нам становятся известны сразу после того, как мы описали значение квадрата момента и проекции.

Угловой момент заряженной частицы приводит к тому, что в этой системе появляется *магнитный момент*. Появление магнитного момента означает, что система, будучи помещена в однородное постоянное магнитное поле, меняет свою энергию. Воспользуемся постулатом номер 4, который учит, как строить операторы из классических динамических переменных.

Эффект, который связан с взаимодействием магнитного момента с магнитным полем, в терминах классической электродинамики называется **литическим эффектом 1 порядка**.

Эмпирический факт, который говорит, что у некоторых элементарных частиц (как заряженных — электрон, протон, так и нейтральных — нейтрон), может существовать собственный магнитный момент, который проявляет себя так же, как магнитный момент составной частицы.

$$E = -\vec{M} \cdot \vec{H},$$

где  $\vec{M}$  — магнитный момент,  $\vec{H}$  — напряженность электрического поля.

Здесь вступает в силу поправка к четвёртому постулату: если не хватает точности, если по исчерпанию правила построения псевдоклассического гамильтониана расчёты всё ещё отличаются своими результатами от наблюдений, то надо попробовать добавить, например, член, который описывает энергию магнитного момента и момента, присущего частице с внешним магнитным полем. Для электрона такое добавление придумал Паули. Оказалось, что по порядку величины она не является малой, а наоборот, расстояние между уровнями энергии оказалось почти в точности равным расстоянию между уровнями Ландау. Если нарисовать результат-лестницу уровней для системы, в которой мы не учитывали спин, а потом нарисовать два рисунка для спина, то окажется, что одна лестница съезжает по отношению к другой на ступеньку самой лестницы. Такой сдвиг малым назвать нельзя.

Раз есть магнитный момент, значит, есть собственный механический момент. Это свойство очень многих частиц, и наличие у них полуцелого спина даёт важный путь для классификации частиц в отношении свойств систем таких тождественных частиц. Есть атом как система зарядов. Допустим с помощью большой вычислительной мощности мы сосчитали его спектр. Сравниваем с экспериментом и выясняем, что согласие не очень хорошее.

С 20-х годов известно, что нужно учесть спиновой магнитный момент частиц в системе. Он есть у всех электронов и нуклонов. Решили уравнение и оказывается, что точность согласия является достаточно большой. Но самая важная роль спина заключается в том, что системы с полуцелым и системы с целым спином обладают

совершенно разными свойствами в отношении возможных состояний коллектива из таких частиц.

Магнитный момент порядка для электрона — это:

$$\mu_B \simeq \frac{e\hbar}{2mc} \sim 10^{-20} \frac{\text{эрг}}{\text{Гс}}$$

$$\Delta E = \mu H$$

Зейман открыл влияние магнитного поля на спектры паров натрия, используя катушку, дававшую напряженность магнитного поля  $10^4$  Гс. Тогда  $\Delta E = 10^{-16}$  эрг, сдвиг частоты  $\Delta\omega \sim 10^{11} \text{ с}^{-1}$ . Значит  $\frac{\Delta\omega}{\omega} \sim 3 \cdot 10^{-5}$ . Вышла маленькая величина, но вполне доступная наблюдению. На рубеже XIX и XX веков в хороших лабораториях достигались измерения с точностью до шестого знака в оптическом диапазоне, а рекорды достигали восьмого знака точности. Здесь важно, что мы сравниваем теорию с возможностями эксперимента, который примерно в то же время и производился.

Рассмотрим модель Паули Паули. Паули был первым физиком, который указал на то, что магнитный момент атомных систем пропорционален целому значению величины  $M_B$  и назвал эту величину *магнитомом Бора*. Во-вторых, Паули был первым физиком, который предположил, что у протона ядра атома водорода тоже может существовать магнитный момент. Это объясняло некоторые свойства спектров.

Магнитный момент нуклона оценивался как  $\mu_n = \frac{e\hbar}{2m_p c} \simeq \frac{10^{-20}}{2 \cdot 10^3}$ . Историческая отсылка: когда начались первые серии прецизионных измерений экспериментаторы попросили теоретиков написать на бумаге, что у них получится. Все люди написали одно и то же значение — ядерный магнетон. Они ошиблись, потому что эксперимент дал значения почти в 3 раза больше. Энергия взаимодействие двух магнитов есть:

$$\Delta E \simeq \frac{\mu_B \mu_n}{a_0^3} \sim 4 \cdot 10^{-19}, \quad \Delta\omega \sim 4 \cdot 10^8 \text{ с}^{-1},$$

где  $a_0 = 5 \cdot 10^{-9}$  — боровский радиус.

Грубая оценка говорит: положение энергетических уровней в атоме водорода, найденная с помощью модели, которая учитывает не только их заряды, но и присущие им магнитные моменты, даст сдвиги по отношению к примитивной модели по абсолютной величине порядка  $10^8$  —  $10^9$  обратных секунд (около 1 гигагерц) — тот диапазон, на котором работает значительная часть современной коммуникативной системы. В хороших оптических прецизионных измерениях этот сдвиг, который носит название *сверхтонкого расщепления*, тоже наблюдается.

Мы можем с помощью введения специальных форм в добавку в гамильтонианах, зависящих от спинового момента, получить выражения, которые дадут нам точность

существенно более высокую и который действительно согласуется с экспериментом. Когда вокруг протона вращается электрон, кроме его собственного момента спина у него есть ещё момент, связанный с орбитальным движением  $\vec{l}$ . Далее можно посчитать ту же самую величину: насколько сдвинется уровень, если мы будем здесь учитывать не собственный момент спина, а орбитальный момент.

Оказывается, что поскольку спин  $\vec{s} \sim \hbar$  и  $\vec{l} \sim \hbar$ , то величина сдвига оказываются той же самой: магнетон бора умноженный на магнитное поле, которое представляет собой магнетон бора делить на  $a_0^3$ :

$$\Delta E \sim \mu_B \cdot \left\{ \frac{\mu_B}{a_0^3} \right\} \sim \hbar 10^8 c^{-1}$$

По постулату P4:  $\hat{l} = (\vec{r} \times \vec{p})$ . До сих пор он всегда срабатывал, однако вносятся изменения. Мы работаем всегда в системе единиц СГС, у нас масштабами служат сантиметр, грамм и секунда, но гораздо изысканнее перейти в систему единиц, где используются основные масштабы той физической системы, с которой мы работаем. Например для атома это  $e$  (заряд электрона),  $m$  (масса электрона) и  $\hbar$  (постоянная Планка), но существуют и другие подходы. В частности, момент принято измерять  $\frac{1}{\hbar}$ . Тогда  $\hat{l}$  получается безразмерной.

Что нам нужно для вычисления спектров? Раньше в основе стоял коммутатор  $[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1$  и больше ничего. Теперь же нужны коммутационные соотношения компонент оператора момента:  $[\hat{l}_i, \hat{l}_j]$ . Эти величины можно вычислить разными способами, из которых самый простой: подставим вместо каждой компоненты соответствующую компоненту векторного произведения, а потом произвести алгебраические преобразования. При каждой перестановке у нас будет теряться одна степень динамической переменной, поэтому коммутатор как билинейная по  $l$  конструкция даст выражение, которое будет линейном по  $l$ . Это выражение представляет собой:

$$[\hat{l}_i, \hat{l}_j] = i\epsilon_{ijk}\hat{l}_k, \quad (18.1)$$

где  $\epsilon_{ijk}$  — антисимметричный единичный тензор, он же *символ Леви-Чивитты*.

При перестановке двух индексов это выражение меняет знак, а компонента  $\epsilon_{123}$  равна единице. У нас есть 3 компоненты и есть коммутационные соотношения. Задача состоит в том, что нам нужен спектр операторов  $\hat{l}^2$  и  $\hat{l}_z$ .

Некая не стандартная процедура смены обозначений. Коммутационные соотношения с операторами, обозначенными буквой  $l$ , появились вследствие постулата 4 и канонических соотношений для перестановки операторов координаты и импульса. Как ведут себя перестановочные соотношения для компонент оператора момента,

например, спинового? В точности так же. Это просто результат стыковки разных попыток с описанием эксперимента, откуда выяснилось, что та степень свободы, которая сидит на электроны, — это действительно дополнительный угловой момент.

Отдельная ветвь, которая не очень часто встречается, это какие изменения в структуру уравнений можно внести без того, чтобы повредить привычные физические инвариантности: однородность, пространство, изотропия пространства, однородность времени и т. д. Причина, по которой оператор имеет в точности такие же перестановочные соотношения вне зависимости от того, является ли он следствием описания орбитального момента при движении в пространстве, и поэтому может допустить классический предельный переход, в конечном счете воспроизвести всё то, что мы знаем в классической механике. Или это какая-то комбинация чего-то, что не имеет классического аналога.

Определяют оператор момента как оператор удовлетворяющий перестановочным соотношениям следующего вида (и не задавать никаких вопросов о физической природе оператора  $\hat{J}$ ):

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\epsilon_{ijk}\hat{J}_k$$

Всё, что удовлетворяет этим соотношениям, по определению есть угловой момент.

Надо проверить догадку о том, что можно взять в качестве двух операторов, имеющих общие собственные функции, операторы  $J^2$  и  $J_Z$ . Если это так, то коммутатор этих двух операторов должен быть равен нулю:  $[J^2, J_Z] = 0$ . Когда мы впервые рассматривали коммутаторы, мы понимали, что придётся отразить следующие свойства: чтобы две физических характеристики системы могли иметь точно определённые собственные значения. Под «точными значениями» подразумевается следующее: ставим эксперимент, получаем число 7, тут же ставим повторный эксперимент и получаем то же самое число 7 для первой величины. Измеряем вторую величину, получаем  $-3$ , тут же измеряем и снова получаем  $-3$ , тут же измеряем первую и получаем 7. В любом порядке проводим измерения и всё время получаем те же числа. Это возможно только тогда, когда эти операторы будут коммутировать.

Будем искать состояния, в которых величина  $J^2$  будет давать значение  $\gamma$ , а величина  $J_Z$  будет давать значение  $\mu$ :

$$J^2|\gamma, \mu\rangle = \gamma|\gamma, \mu\rangle$$

$$J_Z|\gamma, \mu\rangle = \mu|\gamma, \mu\rangle$$

У осциллятора меняется только одна идея: теперь состояний квантовых чисел стало вдвое больше.

Операторы  $\hat{a}$  и  $\hat{a}^+$  играли роль повышающего и понижающего, то есть, действуя на функцию с собственным значением  $\lambda$ , они превращали её или в функцию с собственным значением  $\lambda - 1$  (это оператор  $\hat{a}$ ), или  $\lambda + 1$  (это оператор  $\hat{a}^+$ ). Каждый из этих двух операторов представлял собой линейную комбинацию координаты и импульса.

Посмотрим, что будет, если взять комбинацию  $J_+ = J_X + iJ_Y$  и  $J_- = J_X - iJ_Y$ . Подействуем оператором  $J_+$  на равенство, выписанное ранее:

$$J_+ J_Z |\rangle = (J_X J_Z + iJ_Y J_Z) |\rangle$$

Переведём оператор  $J_Z$  налево. Получим:

$$J_+ J_Z = J_Z (J_X + iJ_Y) - (J_X + iJ_Y) = (J_Z - 1)(J_X + iJ_Y)$$

Оказывается, что оператор  $J_+$  меняет структуру таким образом, что собственное значение увеличивается на единицу. Если взять функцию с числами  $\gamma$  и  $\mu$ , подействовать на неё оператором  $J_+$ , то получится функция, у которой в правой части будет стоять  $\mu + 1$ . Оператор рождения действительно заслуживает знака  $J_+$ . Аналогично и свойства оператора  $J_-$ :

$$J_Z (J_- |\gamma, \mu\rangle) = (\mu - 1) \{J_- |\gamma, \mu\rangle\}$$

Операторы компонент момента эрмитовы. Следовательно операторы  $J_+$  и  $J_-$  эрмитовский сопряжены друг к другу за счет разных знаков при мнимой единице во втором слагаемом. Это означает, что среднее значение оператора  $J_-$  отличается от среднего значения оператора  $J_+$  только одним фазовым множителем. Можно подобрать коэффициенты в этих функциях такими, чтобы появилась соотношение:

$$J_+ |\gamma, \mu - 1\rangle = \alpha_\mu |\gamma, \mu\rangle$$

$$J_- |\gamma, \mu\rangle = \alpha_\mu |\gamma, \mu - 1\rangle$$

Величина  $\gamma$  — это значение оператора  $J^2$ , то есть:

$$\gamma = \langle \gamma, \mu | J^2 | \gamma, \mu \rangle = \langle \gamma, \mu | J_X^2 + J_Y^2 + J_Z^2 | \gamma, \mu \rangle$$

Можно заметить, что  $J_X^2$  по нашей лемме всегда даст какое-то неотрицательное число. Тогда (поскольку оператор действуя на функцию  $\gamma, \mu$  выдаст число  $\mu$ ):

$$\gamma = a + b + \mu^2,$$

где  $a > 0$  и  $b > 0$ .

Оказывается, что мы получили такое соотношение:  $\gamma \geq \mu^2$ . Вообще,  $\gamma$  — это среднее значение оператора квадрата момента.  $\mu$  — это значение проекции момента. Наше неравенство говорит, что сумма квадратов средних значений трёх компонент больше, чем квадрат одной из компонент. С другой стороны, из этого утверждения следует, что если мы зафиксировали  $\gamma$ , то величина  $\mu$  не может выйти за пределы  $+\sqrt{\gamma}$  и  $-\sqrt{\gamma}$ . Но это означает, что значение проекции момента лежит на конечном интервале.

Повторение той же темы, что для гармонического осциллятора: мы сначала, пошевелив перестановочными соотношениями, поняли, как получать повышенные и пониженные функции (операторами  $J_+$  и  $J_-$ ), а во-вторых, мы с помощью этого неравенства получили вывод, что наши значения должны лежать на ограниченном интервале. Тогда должны существовать предельные значения такие, которые нельзя повысить и понизить, а именно:

$$J_+|\gamma, \Lambda\rangle = 0$$

$$J_-|\gamma, \lambda\rangle = 0$$

Сравниваем с гармоническим осциллятором: у нас тогда находилась функция, которую нельзя понизить. Мы обозначили её индекс нулем, приписали соответствующие энергии значения и пришли к выводу, что спектр гармонического осциллятора является всегда дискретным и простирается от нулевого значения до бесконечности.

Для оператора момента мы видим, что ситуация похожая, но всё-таки заметно отличается: при заданном значении квадрата момента существует ограниченный диапазон значений проекции момента. Он сверху и снизу ограничен двумя волновыми функциями, в которых соответствующая попытка повысить проекцию момента или понизить её кончается тем, что мы получаем бессмысленные нулевые значения.

Используя операторные равенства  $J_-J_+ = J^2 - J_Z^2 - J_Z$  и  $J_+J_- = J^2 - J_Z^2 + J_Z$ , подставим наши квантовые числа и получим такое соотношение:

$$\gamma - \Lambda^2 - \Lambda = 0$$

$$\gamma - \lambda^2 - \lambda = 0$$

Отсюда получаем:

$$(\Lambda - \lambda + 1)(\Lambda + \lambda) = 0$$

Поскольку  $\Lambda > \lambda$ , то должно выполняться условие  $\Lambda - \lambda = J$ , тогда  $\gamma = J(J + 1)$ . При заданном собственном значении оператора квадрата момента проекция момента

принимает  $2J + 1$  значений, простирающихся от  $+J$  до  $-J$ . Поэтому разность наибольшего и наименьшего значений должна быть равна  $2J$ , где  $J$  должна быть целым числом.

Таким образом, собственные значения проекции момента  $J_Z$  занимают отрезок эквидистантной последовательности с единичным шагом, который может начинаться с целого или с полуцелого числа. Алгебраически это небольшое добавление, а физически — очень серьезная вещь. Оказывается, что наша алгебра, основанная на коммутационных соотношениях, в которой мы нигде и никак не использовали ничего кроме правил перемножения операторов, позволяет на выходе иметь операторы двух разных природ, у которых значения максимальной проекции целые или полуцелые.

Эмпирически всё оказывается красиво, потому что спиновой момент электрона, протона, нейтрона и т. д. полуцелый. У нас двукратно вырожденные состояния. Для орбитального момента у нас разрешены значения от  $+1$  до  $-1$ , значит это будут трёхкратно вырожденные состояния. Мы видим, что природа использует здесь все случаи, которые нам разрешила алгебра.

В своём собственном базисе матрица оператора  $J_Z$  диагональна:

$$(J_Z)_{ij} = M\delta_{ij},$$

где  $M = J - i + 1$  при  $1 \leq i \leq 2J + 1$ .

Ситуация знакомая: матрица два на два, у которой на диагонали стоят плюс и минус 1, мы ранее получили такие, когда искали матрицы одновременно эрмитовы и унитарные. Нам нужно научиться писать ещё матричные элементы оставшихся матриц  $J_X$  и  $J_Y$ :

$$\begin{aligned} J_- J_+ |J, M-1\rangle &= \alpha_M J_- |J, M\rangle \\ &= \alpha_M^2 J_- |J, M-1\rangle \end{aligned}$$

После того как мы на функцию такого вида подействовали сначала повышающим, потом понижающим оператором, у нас получилась та же самая функция, но с числовым коэффициентом. Поскольку  $J_- J_+ = J^2 - J_Z^2 - J_Z$ , то  $\alpha_M^2 = J(J+1) - (M-1)^2 - (M-1)$ . Тогда:

$$\alpha_M = \sqrt{(J+1)(J-M+1)}$$

Это единственный ненулевой матричный элемент оператора  $J_+$ . Он стоит в  $(J-M+1)$ -той строке в  $(J-M+2)$ -том столбце. Можно написать такую конструкцию:

$$(J_+)_{ij} = \sqrt{(J+M)(J_M+1)}\delta_{i,i+1}$$

Макроскопически мы работаем с представлением, в котором используется квадрат оператора момента и  $Z$ -компонента. В этом представлении  $Z$ -компонента — диагональная матрица. Видно, что у неё все элементы, у которых индексы имеют разные номера, нулевые, а на диагонали стоит последовательность ,эквидистантная от максимального до минимального значения.

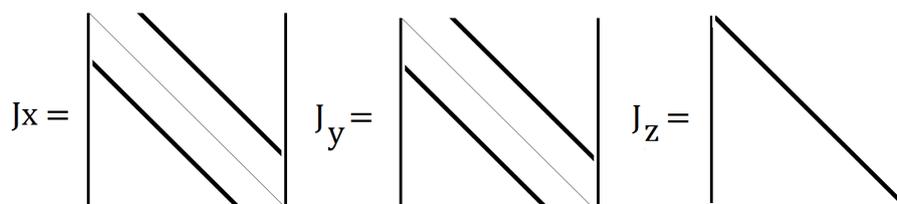


Рис. 18.1. Вид операторов  $J_X$ ,  $J_Y$  и  $J_Z$

Для операторов, которые рождают и уничтожают, оказывается, что отличны от нуля только матричные элементы на соседней субдиагонали: у  $Z$ -оператора только диагональные, у  $+$ -оператора только с соседними с диагональю. У  $J_-$  будут эрмитовски сопряженными и будут загружены только места, у которых отличны от нуля только соседние с диагональю (рис. 18.1).

$$J_X = \frac{1}{2} \sqrt{(J+M)(J-M+1)} (\delta_{i,i+1} + \delta_{i+1,i})$$

$$J_Y = -\frac{i}{2} \sqrt{(J+M)(J-M+1)} (\delta_{i,i+1} - \delta_{i+1,i})$$

Для  $k = 2$ :

$$J_X = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}, \quad J_Y = -\frac{i}{2} \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{vmatrix}, \quad J_Z = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix}$$

Перед нами три матрицы Паули. Когда мы знаем, какую роль играл Паули в построении теории спинового момента, это совсем не удивительно. С другой стороны, если вспомнить, что задачу мы ставили не по физике, а по математике (вопрос стоял такой: существуют ли операторы одновременно эрмитовы и унитарные), и ответ получился не просто да, но существует бесконечное семейства, зависящее от непрерывно меняющегося параметра, матрицы которого удовлетворяют этим требованиям, и можно вывести из этого множества матрицы, которые среди прочего удовлетворяют ещё коммутационным соотношениям для операторов момента.

Можно продвинуться дальше и построить матрицы для  $k = 3$  и посмотреть, как они устроены:

$$J_X = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{vmatrix}, \quad J_Y = -\frac{i}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{vmatrix}, \quad J_Z = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}$$

Всё время руководящим принципом была аналогия с задачей про гармонический осциллятор, где мы однако ни разу не рисовали матрицы ни для оператора координаты, ни для оператора импульса. Где у оператора координаты расположены не нулевые значения в матрице в базисе гармонического осциллятора? Мы пользовались этим соотношением и говорили, матрицы оператора координаты даёт только матричные от нуля элементы для перехода с  $n$  на  $n + 1$  или на  $n - 1$  уровень. Если есть идеальный гармонический осциллятор, он может поглотить только излучения с частотой, которая равна частоте движения гармонического осциллятора.

В предыдущем разделе мы доказывали теорему соответствия: для любой квазиклассической системы если осциллятор находится в состоянии  $n$ , то, действуя на него возмущением с частотой  $\omega$ , мы можем его перевести только в состоянии  $n + 1$  или  $n - 1$ . Оказывается, что эта структура операторов, в которой квазидиагонали играют основную роль, это структура (см. устройства матриц операторов  $x$  и  $\hat{p}_x$  для гармонического осциллятора).

Всё, что мы сейчас сделали, мы сделали чисто путем алгебраических преобразований матриц, построенных по их коммутационным соотношениям. Мы не использовали структуры координатного пространства, для которой нам пришлось бы потребовать однозначности волновой функцией во всём пространстве, для этого пришлось бы требовать целочисленности значений момента. С другой стороны, то, что мы двигались чисто алгебраически, показывает, что будь полный момент системы целым или полуцелым, алгебраическая структура операторов от этого не зависит и спектр оказывается одним и тем же.

Для вычисления многих вещей, относящихся к алгебраической теории момента, можно попробовать использовать найденную нами близость системы моментов и гармонических осцилляторов. Мы можем представить себе систему, которая описывает поведение точки в трёхмерном пространстве. У нас будут для неё три координаты  $x$ ,  $y$  и  $z$ , у нее будут три значения импульса по  $x$ ,  $y$  и  $z$ . Мы для такой системы можем построить оператор момента импульса так, как мы его делали в этом разделе с самого начала. А с другой стороны, для трех осей мы можем построить операторы рождения и уничтожения для трех гармонических осцилляторов и представить компоненты момента  $J_X$ ,  $J_Y$ ,  $J_Z$  через операторы рождения и уничтожения гармонических осцилляторов.

Таким образом, вся алгебра, которая использовалась в этом разделе, может быть

переформулирована на язык гармонических осцилляторов. Поскольку с последним приходится работать исключительно много, то такая техника, которая по существу сводит любую модель к модели гармонического осциллятора, нужно помнить. Если по физическим обстоятельствам видно, что перед нами, например, система, в которой две частицы, два момента, их надо складывать между собой или перемножать, то нужно помнить, что каждый из операторов момента может быть переписан как комбинация операторов рождения и уничтожения для соответствующих гармонических осцилляторов.



ФИЗИЧЕСКИЙ  
ФАКУЛЬТЕТ  
МГУ ИМЕНИ  
М.В. ЛОМОНОСОВА

*teach-in*  
ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ