



ФИЗИЧЕСКИЙ  
ФАКУЛЬТЕТ  
МГУ ИМЕНИ  
М.В. ЛОМОНОСОВА

*teach-in*  
ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

# КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ. ЧАСТЬ 1

СВЕШНИКОВ  
КОНСТАНТИН АЛЕКСЕЕВИЧ

ФИЗФАК МГУ

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

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



БЛАГОДАРИМ ЗА ПОДГОТОВКУ КОНСПЕКТА  
СТУДЕНТОВ ФИЗИЧЕСКОГО ФАКУЛЬТЕТА МГУ  
**ТЕРЕЩЕНКО ИРИНУ АЛЕКСАНДРОВНУ**  
**СОЛОВЫХ АЛЕКСАНДРА АЛЕКСЕЕВИЧА**

---

## Содержание

<b>1 Лекция 1. Введение в квантовую теорию</b>	<b>7</b>
1.1 Вводное слово . . . . .	7
1.2 Одномерный гармонический осциллятор . . . . .	7
1.2.1 Квантовомеханическое рассмотрение . . . . .	7
1.2.2 Классическое рассмотрение . . . . .	8
1.3 Нейтронный интерферометр как device для иллюстрации „странного“ поведения квантовых систем . . . . .	11
1.4 „Притча“ про монополю Дирака . . . . .	13
<b>2 Лекция 2. Первоосновы квантовой теории</b>	<b>18</b>
2.1 Спектральный анализ движения частицы в потенциальной яме в рам- ках классической механики . . . . .	19
2.2 Излучение электрона при его движении в потенциальной яме в рамках классической электродинамики . . . . .	20
2.3 Обобщение на условно периодическое движение электрона в атоме . . .	21
2.4 1925 г. Матричная механика Гейзенберга . . . . .	23
2.4.1 Каноническое квантование . . . . .	29
<b>3 Лекция 3. Теория измерений</b>	<b>33</b>
3.1 Квантово-механическая теория измерений . . . . .	33
3.2 Повторение пройденного . . . . .	36
3.3 Введение в теорию измерений . . . . .	41
3.3.1 Процесс ортогонализации Грамма-Шмидта . . . . .	44
3.3.2 Копенгагенская схема измерения . . . . .	45
3.3.3 Сканирующий электронный микроскоп . . . . .	46
3.3.4 Непрерывный спектр . . . . .	48
<b>4 Лекция 4. Эволюция во времени и законы сохранения в квантовой механике</b>	<b>51</b>
4.1 Временная эволюция квантовых систем . . . . .	51
4.1.1 Шредингеровское представление . . . . .	52
4.2 Законы сохранения . . . . .	55
4.3 Парадокс ЭПР . . . . .	58

4.4	Законы сохранения в шредингеровском представлении . . . . .	60
4.4.1	Дискретный спектр . . . . .	60
4.4.2	Непрерывный спектр . . . . .	61
4.5	Корпускулярно-волновой дуализм . . . . .	63
<b>5</b>	<b>Лекция 5. Описание электромагнитного поля с помощью квантовой теории. Корпускулярно-волновой дуализм (продолжение). Фононы</b>	<b>64</b>
5.1	Уравнения Максвелла на языке квантовой теории . . . . .	64
5.1.1	Свободное поле . . . . .	66
5.2	Переход от корпускулярной к волновой картине описания . . . . .	70
5.3	Колебания кристаллической решетки (фононы) . . . . .	76
<b>6</b>	<b>Лекция 6. Эффекты Казимира. Введение в матрицы плотности</b>	<b>80</b>
6.1	Эффект Казимира для двух параллельных проводящих пластин . . . . .	80
6.2	Другие примеры эффектов Казимира . . . . .	87
6.3	Матрицы плотности . . . . .	89
<b>7</b>	<b>Лекция 7. Матрица плотности. Координатное и импульсное представление</b>	<b>96</b>
7.1	Приведенные матрицы плотности . . . . .	96
7.1.1	Общий закон эволюции . . . . .	100
7.1.2	Характеристика разброса смешанного состояния . . . . .	100
7.2	Координатное и импульсное представление . . . . .	101
7.2.1	Координатное представление . . . . .	103
7.2.2	Импульсное представление . . . . .	104
7.2.3	Матрица плотности в координатном представлении . . . . .	110
7.3	Частица в потенциальном поле . . . . .	111
<b>8</b>	<b>Лекция 8. Свойства и следствия уравнения Шредингера</b>	<b>114</b>
8.1	Дополнение к координатно-импульсному представлению . . . . .	114
8.2	Следствия нестационарного уравнения Шредингера . . . . .	117
8.3	Волновые пакеты . . . . .	119
8.4	Свойства уравнения $H\psi = E\psi$ . Продолжение. . . . .	121

8.5	Задача на определение ВФ основного состояния одномерного квантового гармонического осциллятора в координатном представлении . . . . .	129
8.6	Одномерное уравнение Шредингера . . . . .	131
8.7	Непрерывный энергетический спектр . . . . .	136
8.8	Обратная задача рассеяния . . . . .	138
<b>9</b>	<b>Лекция 9. Основы физики твердого тела. Квазиклассическое приближение. ВКБ</b>	<b>141</b>
9.1	Одномерный кристалл . . . . .	141
9.2	Переход к квазиклассическому пределу . . . . .	148
9.3	Приближение ВКБ . . . . .	150
9.4	Прохождение потенциального барьера в приближении ВКБ . . . . .	158
<b>10</b>	<b>Лекция 10. Квазиклассическое приближение. Задача на „шляпу Лившица“ и приложения к ней</b>	<b>163</b>
10.1	Рождение пар в постоянном электрическом поле . . . . .	163
10.2	Финитное движение в потенциальной яме . . . . .	166
10.3	Обрезанный гармонический осциллятор . . . . .	168
10.4	„Шляпа Лившица“ (Mexican hat & Double well) . . . . .	170
10.5	Аммиачный мазер . . . . .	176
10.6	Вакуумные пузырьки (Шальников) . . . . .	178
10.7	Странная физика . . . . .	180
<b>11</b>	<b>Лекция 11. Трехмерная QM</b>	<b>185</b>
11.1	Центрально-симметричный потенциал . . . . .	185
11.1.1	Оценка Баргмана . . . . .	192
11.2	Квазиклассическое приближение для центрально-симметричного потенциала . . . . .	197
11.3	Группа вращений . . . . .	198
11.4	Оператор углового момента в квантовой механике . . . . .	204
<b>12</b>	<b>Лекция 12. Операторы угловых моментов. Конечные повороты. Неприводимые тензоры.</b>	<b>211</b>
12.1	Конечные повороты . . . . .	217
12.1.1	Опыт Штерна-Герлаха для частиц со спином $s = 1$ . . . . .	219

---

12.2 Сложение моментов . . . . .	221
12.3 Неприводимые тензоры . . . . .	225
12.3.1 Скаляр . . . . .	226
12.3.2 Вектор . . . . .	228
<b>13 Лекция 13. Неприводимые тензоры (продолжение). Квантовая телепортация</b>	<b>232</b>
13.1 Неприводимые тензоры . . . . .	232
13.1.1 Векторы (продолжение) . . . . .	232
13.2 Квадрупольный электрический момент . . . . .	233
13.3 Оператор четности . . . . .	238
13.4 Дипольный момент нейтрона . . . . .	244
13.5 Alice, Bob & Ancilla (Квантовая телепортация) . . . . .	246
<b>14 Лекция 14. Одномерный атом водорода. Парение атома водорода над плоскостью</b>	<b>253</b>
14.1 Одномерный атом водорода . . . . .	253
14.2 Парение атома водорода над жесткой плоскостью . . . . .	260

# Лекция 1. Введение в квантовую теорию

## Вводное слово

На сегодняшний день квантовая теория лежит в основе описания очень большого круга явлений, происходящих в окружающем нас мире (за исключением живых систем, космологии и, возможно, низкоэнергетической физики адронов). По своей сути, квантовая теория — это наука, устанавливающая способ описания и законы поведения физических систем, для которых величины, характеризующие систему и имеющие размерность действия, оказываются сравнимы с постоянной Планка  $\hbar = 1.0545887(57) \times 10^{-27}$  эрг  $\times$  сек. Этому условию, как правило, удовлетворяет движение микрочастиц (электронов в атомах, атомов в молекулах, нуклонов в ядрах и т.д.). В некоторых случаях специфически квантовые свойства проявляют и макроскопические системы (сверхпроводимость, сверхтекучесть, эффекты казимировского типа, нейтронные звезды, и т.д.). Законы квантовой теории составляют фундамент наук о строении материи и вещества.

Квантовая теория представляет собой систему базовых понятий и адекватный им математический аппарат, необходимый и достаточный для удовлетворительного описания большинства свойств соответствующих систем и их движения и/или эволюции во времени (при соответствующем уровне подготовки, желании и разумном упорстве в целях получить результат !!!).

## Одномерный гармонический осциллятор

Чтобы увидеть, где и как начинается водораздел между классической и квантовой физикой, начнем с простейшей физической системы под названием одномерный гармонический осциллятор. Эта система замечательна тем, что и в классическом, и в квантовом случаях она имеет явное точное решение, что позволяет однозначно ответить на вопрос, в чем же между ними главное различие.

### Квантовомеханическое рассмотрение

Как известно, гамильтониан гармонического осциллятора может быть записан в виде

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 q^2}{2}. \quad (1.1)$$

При этом для нахождения уровней энергий и волновых функций необходимо решить стационарное уравнение Шредингера

$$H\psi_n = E_n\psi_n . \quad (1.2)$$

В результате решения данного уравнения можно определить зависимость энергии уровней осциллятора в зависимости от номера уровня:

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) , \quad (1.3)$$

где  $n = 0, 1, \dots$  При этом для осциллятора, находящегося на  $n$ -ом энергетическом уровне, средние значения координаты и импульса будут нулевыми, а для их дисперсий получим

$$D_q = \frac{\hbar}{m\omega} \left( n + \frac{1}{2} \right) , \quad (1.4)$$

$$D_p = \hbar\omega m \left( n + \frac{1}{2} \right) . \quad (1.5)$$

Их произведение равно

$$D_q * D_p = \hbar^2 \left( n + \frac{1}{2} \right)^2 , \quad (1.6)$$

и удовлетворяет соотношению неопределенности Гейзенберга  $D_q * D_p \geq \hbar^2/4$ , причем знак равенства достигается для наинизшего энергетического уровня с  $n = 0$ .

Чтобы разобраться, в чем же в данном случае заключается чисто квантовый эффект, рассмотрим теперь классический одномерный гармонический осциллятор.

### Классическое рассмотрение

В классическом случае поведение осциллятора описывается следующим универсальным уравнением:

$$\ddot{x} + \omega^2 x = 0 . \quad (1.7)$$

Как известно, таким уравнением описываются самые различные колебательные системы, в частности:

- 1) математический маятник;
- 2) грузик на пружине;
- 3) колебательный LC-контур;

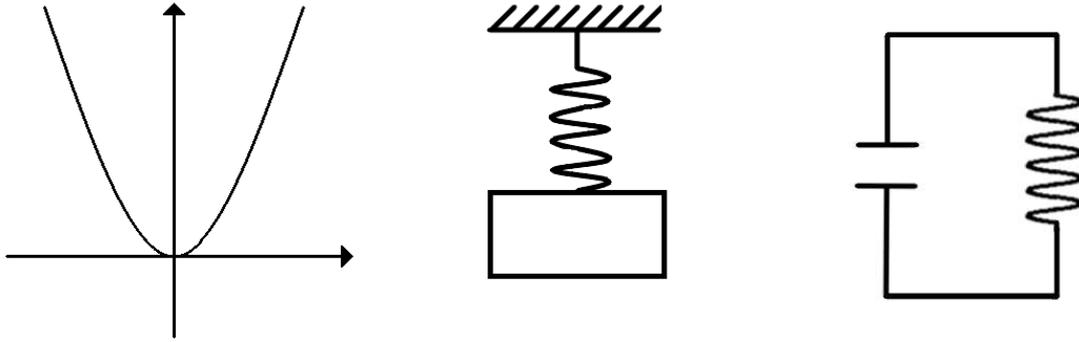


Рис. 1.1. Примеры систем, совершающих гармонические колебания

и т.д.

Поскольку гармонический осциллятор является консервативной системой, в которой энергия сохраняется, зафиксируем энергию в точности равной  $n$ -ому уровню квантового аналога  $E_n$ , и найдем соответствующие характеристики координаты и импульса. Средние значения координаты и импульса очевидно снова нулевые, а для вычисления дисперсий сначала запишем среднее по времени значение энергии осциллятора в виде

$$\bar{E} = \frac{\overline{p^2}}{2m} + \frac{m\omega^2 \overline{q^2}}{2} = E_n . \quad (1.8)$$

Отсюда, используя теорему Биркгофа (среднее по времени равно среднему по ансамблю) и теорему о равномерном распределении энергии для таких колебательных систем (средняя кинетическая энергия равна средней потенциальной), находим

$$D_p = \overline{p^2} = \hbar\omega m \left( n + \frac{1}{2} \right) , \quad (1.9)$$

т. к.  $\bar{p} = 0$ .

Аналогично и для  $D_q$ :

$$D_q = \overline{q^2} = \frac{\hbar}{m\omega} \left( n + \frac{1}{2} \right) . \quad (1.10)$$

Таким образом, при такой энергии значения дисперсий для классического и квантового случая совпали. Тогда что же отличает квантовую и классическую систему в этом случае?

Вот здесь-то и начинается водораздел. Дело в том, что в классическом случае имеется возможность уточнения эксперимента по измерению координаты и импульса, а именно, помимо энергии мы можем зафиксировать еще и фазу колебания (или

любую другую величину, не сводящуюся к функции от энергии), что позволяет найти координату и импульс с любой наперед заданной точностью, т.е. практически с нулевой дисперсией. А в квантовом случае это сделать принципиально невозможно. Конкретно для данного случая одномерного гармонического осциллятора нельзя указать физическую величину, функционально независимую от энергии, которая одновременно с энергией принимала бы точное значение, и тем самым позволила бы уточнить эксперимент, как фаза в классическом случае. И дело не только в том, что для квантового осциллятора вообще нельзя ввести содержательное понятие фазы (об этом мы узнаем несколько позже), а в том, что так работает один из главных законов квантовой теории — не у всех величин могут одновременно быть зафиксированы точные значения. Последнее утверждение составляет суть соотношения неопределенностей Гейзенберга. Именно поэтому при фиксированной энергии (в частности, при предельно низкой температуре, тем самым в состоянии с наименьшей энергией) ионы кристаллической решетки все равно совершают нулевые колебания, электроны являются точечными частицами с зарядом  $e$ , но в атомах, находясь в состояниях с фиксированной энергией, не имеют определенной координаты (ее дисперсия оказывается порядка боровского радиуса) и в результате образуют электронные оболочки, которые с хорошим приближением можно описывать как непрерывную зарядовую плотность, вакуумные флуктуации фотонных мод приводят к эффекту Казимира — притяжению проводящих плоскопараллельных пластин в отсутствие реальных фотонов, и т.д.

В связи с этим нельзя не упомянуть один исторический факт. К 1932 году квантовая механика уже получила полное признание как наиболее адекватный способ описания как структуры атомов и молекул, так и основных свойств твердого тела, и поэтому за ее создание В. Гейзенберг, П. Дирак и Э. Шредингер были удостоены Нобелевской премии. Председателем Нобелевского комитета по физике в то время был Э. Резерфорд, помимо А. Эйнштейна один из наиболее уважаемых физиков в мире в то время. И Резерфорд, адекватно оценивая вклад Гейзенберга, который первый четко сформулировал основные принципы квантовой теории, в частности, соотношение неопределенностей, пользуясь своим авторитетом, сумел добиться, чтобы Нобелевский комитет выделил под одну формулировку две денежные премии — одна полная Гейзенбергу как фактическому творцу квантовой теории, а вторая была поделена пополам между Дираком и Шредингером, поскольку их результаты (несколько не умаляя их значимости) уже являлись второстепенными. И когда Гей-

зенберг попытался возражать, Резерфорд, как человек очень прямой и решительный, новозеландец, сходивший на своей яхте в кругосветку (это в те годы, когда не то, что GLONASS, нормальной радиосвязи еще не было), ему ответил ясно и просто: "Заслужил — получай!". Тем самым Нобелевский комитет фактически официально признал именно В. Гейзенберга фактическим создателем квантовой теории, что вполне справедливо, потому что Шредингер, написав свое уравнение, не смог сразу понять смысла волновой функции, а работы Дирака вообще имели более математический, нежели физический, статус. Хотя за свое знаменитое уравнение 1928 года П. Дирак безусловно заслужил как минимум еще одну Нобелевскую премию, но по правилам Нобелевского комитета по одной теме двух премий не присуждают.

## Нейтронный интерферометр как device для иллюстрации „странного“ поведения квантовых систем

Теперь рассмотрим один простой, но эффектный пример того, насколько непривычно для нас выглядит поведение квантовых систем. Это будет амплитудный нейтронный интерферометр, которым оснащены практикумы ведущих университетов планеты типа MIT или Berkeley. Такой интерферометр мог бы быть даже в ядерном спецпрактикуме физического ф-та МГУ, но этому воспрепятствовала Чернобыльская авария. Следует отметить, что амплитудный интерферометр — это простейший демонстрационный прибор для студентов, существуют и настоящие двухплечевые, но их можно найти лишь в высокоспециализированных ядерных центрах.

Основной компонентой простейшего амплитудного нейтронного интерферометра является достаточно большой (до  $\sim 10-15$  см в длину вдоль кристаллических плоскостей) монокристалл кремния с расстоянием между кристаллическими плоскостями  $a \sim 1 \text{ \AA}$ , технологии выращивания которых появились в 60-70-ые годы прошлого века. В нем на высокоточном механическом станке вырезают 3 одинаковых „уха“ таким образом, чтобы их боковые грани были перпендикулярны к кристаллическим плоскостям монокристалла. Источником излучения выступает маломощный источник нейтронов с интенсивностью не более 1 нейтрон/сек и раствором конуса  $\delta\theta \sim 10^{-6}$  рад. За интерферометром устанавливаются два детектора нейтронов. На одной из траекторий пучка устанавливается клин с ненулевым показателем поглощения нейтронов. Из источника пучок направляется под углом Брэгга к кристаллическим плоскостям интерферометра. Схема установки нейтронного интерферометра

представлена на рис. 1.2.

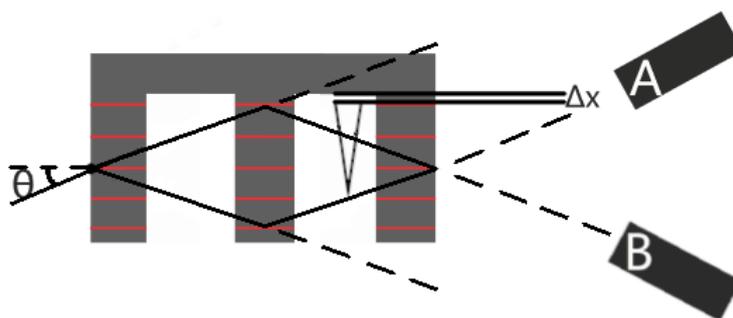


Рис. 1.2. Схема установки нейтронного интерферометра

В стандартных условиях энергия нейтронов составляет  $\sim 0.02$  эВ, де-бройлевская длина волны  $\lambda \sim 1 \text{ \AA}$ . Из оптики известно, что угол Брэгга  $\theta$  определяется соотношением  $\lambda = 2a \sin \theta$ . Для наших условий это дает  $\theta \simeq 20 - 30 \text{ \AA}$ . Если принять ось  $z$  за направление главной оси интерферометра, то вдоль оси проекция волнового числа нейтрона  $k_z = k \cos \theta$ , где  $k = 2\pi/\lambda$ . Поэтому  $\delta k_z = (2\pi/\lambda) \sin \theta \delta \theta \sim 300 \text{ см}^{-1}$ , откуда следует  $\delta z \sim (\delta k_z)^{-1} \sim 0.03 \text{ мм}$ . Такова ширина волнового пакета, соответствующего проходящим через интерферометр нейтронам. В стандартных условиях поперечное сечение пучка составляет порядка  $1 \text{ см}^2$ , поэтому такой волновой пакет имеет геометрические размеры почтовой марки. Но это не нейтрон расплылся в почтовую марку!!! Нейтрон был, есть и будет компактным материальным объектом почти шарообразной формы размерами порядка  $0.8 \text{ фм}$  и весом  $\sim 10^{-24} \text{ г}$ , составной частицей, образованной комбинацией  $udd$  составляющих кварков в фазе конфайнмента, и временем жизни порядка 15 минут. И все экспериментальные данные свидетельствуют, что ни при каких условиях, ни в почтовую марку, ни в объект другой формы таких размеров он не превращается. Это при прохождении через монокристалл кремния пучок нейтронов проявляет свойства волнового пакета с указанными выше характеристиками.

Проявляются эти свойства в данном случае так. Нейтроны не имеют электрического заряда, ни сколько-нибудь значимого дипольного момента, поэтому взаимодействуют только с ядрами кремния, расположенными на кристаллических плоскостях в узлах кристаллической решетки. Каждый нейтрон, сталкивающийся с узлом решетки под углом Брэгга, будет либо отражаться, либо проходить через кристаллические плоскости так же, как это сделает оптическая волна. То же самое будет происходить на среднем и на последнем „ухе“ интерферометра (на среднем „ухе“

часть нейтронов покинет интерферометр). Нейтроны детектируются приемниками А и В, поставленными под нужными углами. При этом результирующая картина будет иметь полную оптическую аналогию, которая будет прежде всего зависеть от того, с какими фазами (оптическими длинами пути) нейтроны будут приходить на третье „ухо“ интерферометра. Оптическая длина пути может изменяться путем перемещения клина, в результате чего будет наблюдаться интерференционный эффект, который приведет изменению интенсивности пучка нейтронов, регистрируемому на каждом из детекторов и тем самым к изменению числа их отсчетов (рис. 1.3).

Следует отметить, что помимо такого простейшего интерференционного эксперимента, на таком приборе можно продемонстрировать еще целый ряд специфически квантовых эффектов. См. D. Greenberger. The neutron interferometer as a device for illustrating the strange behavior of quantum systems. *Rev. Mod. Phys.* 55 (1983) 875-905.

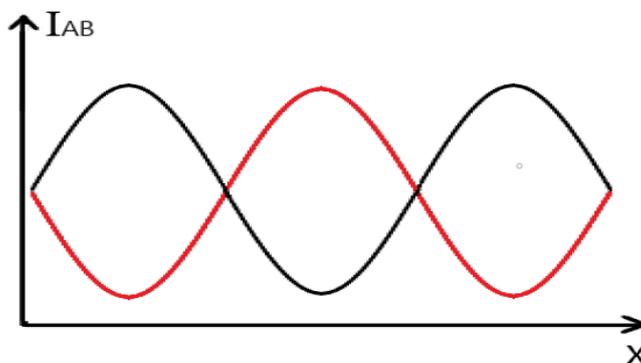


Рис. 1.3. Интенсивность пучка нейтронов на детекторе А (чёрная кривая) и В (красная кривая) в зависимости от координаты клина. Обратим внимание, что точного нуля отсчета детекторов не получается. Это связано с принципиальной невозможности добиться полной когерентности интерферирующих пучков. Прежде всего, кристаллические плоскости такого большого монокристалла не идеально плоскопараллельны, а пучки нейтронов при прохождении сквозь кристалл, хотя и очень слабо, но неизбежно расплываются и искажаются.

### „Притча“ про монополю Дирака

Теперь же покажем, какие новые возможности открывает квантовая теория, а именно ее базовые понятия и математический аппарат, для описания окружающего

мира. Очень ярким примером такого нового способа проникновения в „суть вещей“, хотя так и оставшегося без ответа, является история про магнитный монополю Дирака.

Как известно, изначальная формулировка электродинамики Максвелла симметрична относительно магнитной и электрической компонент поля. Однако уравнения Максвелла, которыми мы пользуемся для описания электродинамических явлений в окружающем нас мире, могут иметь ненулевые правые части только для электрических зарядов и токов, а для магнитной компоненты они тождественно равны нулю. И хотя эксперимент однозначно свидетельствует, что в надежно контролируемой нами части окружающего мира магнитных монополей нет или их очень мало (современная оценка на количество магнитных монополей  $< 10^{-32} \times \text{сек}^{-1} \text{см}^{-3}$ ), задача про монополю Дирака является хорошей демонстрацией того, что может квантовая теория и к каким нетривиальным выводам она приводит.

Допустим, что магнитные заряды все-таки существуют и пусть один такой заряд (магнитный монополю) покоится в начале координат. Это приводит к наличию отличной от нуля правой части уравнения Максвелла для дивергенции магнитной напряженности:

$$\text{div} \vec{H} = 4\pi\mu \delta(\vec{r}) . \quad (1.11)$$

Тогда напряженность магнитного поля будет иметь вид, аналогичный электрической напряженности точечного заряда:

$$\vec{H} = \mu \frac{\vec{r}}{r^3} . \quad (1.12)$$

При описании магнитного монополя в терминах электромагнитных потенциалов  $A_\mu$ , что необходимо для корректного описания поведения заряженных частиц в его поле через подстановку  $p_\mu \rightarrow p_\mu - \frac{q}{c} A_\mu$ , возникает проблема струнной сингулярности (так называемой струны Дирака) в векторном потенциале монополя  $\vec{A}$ , который связан с магнитной напряженностью стандартным соотношением  $\text{rot} \vec{A} = \vec{H}$ . Струнная сингулярность оказывается ничем не сложнее координатной сингулярности при стереографической проекции (рис. ??а). При этом все точки сферы проецируются на плоскость путем проведения хорд из северного полюса через проецируемую точку.

Северный полюс при такой проекции отображается на пространственную бесконечность, что приводит к необходимости введения атласа карт для описания сферы. В математике такой способ описания многообразия называется красивым и не очень понятным термином "расслоенные пространства" ("fibre bundles"), хотя, по

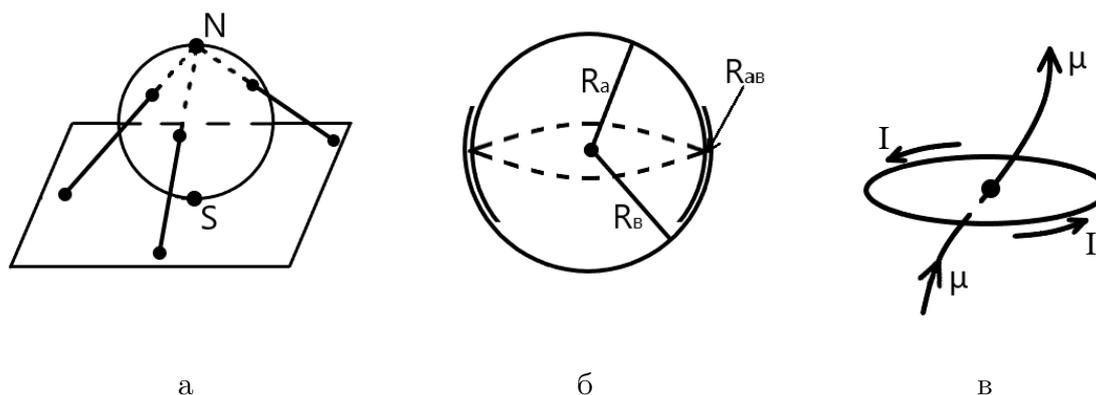


Рис. 1.4. Стереографическая проекция (а), атлас карт для описания сферы (б), изображение сверхпроводящего кольца (в)

существу, это ничем не отличается от школьного географического атласа карт для описания поверхности Земли. В случае монополя пространство разбивается на две пересекающиеся области (рис. ??б)  $R_a$  и  $R_b$  ( $R_{ав} = R_a \cap R_b$ ). При таком подходе для описания вектор-потенциала монополя  $\vec{A}$  необходимо задавать его по-отдельности в  $R_a$  и  $R_b$ , которые гладко сшиваются в экваториальной области, что обеспечивает непрерывный переход от карты  $R_a$  на карту  $R_b$ . В математике последняя операция также имеет специальный термин "связность" .

В  $R_a$  векторный потенциал монополя имеет вид

$$\left(\vec{A}\right)_a = \mu \frac{1 - \cos \theta}{r \sin \theta} \hat{\varphi}, \quad (1.13)$$

где  $\hat{\varphi}$  - орт направления  $\varphi$  в сферической системе координат.

Этот потенциал полностью регулярен в  $R_a$  и поэтому задает в  $R_a$  непрерывное поле монополя, однако он сингулярен в  $R_b$  при  $\theta = \pi$ .

В  $R_b$  векторный потенциал монополя задается уже другим выражением:

$$\left(\vec{A}\right)_b = -\mu \frac{1 + \cos \theta}{r \sin \theta} \hat{\varphi}. \quad (1.14)$$

При этом  $\left(\vec{A}\right)_b$  полностью регулярен в  $R_b$ , но сингулярен в  $R_a$  при  $\theta = 0$ .

В экваториальной области (область  $R_{ав}$ ) должен происходить гладкий переход от одной карты к другой через градиентное=калибровочное преобразование (поскольку магнитная напряженность не меняется):

$$\left(\vec{A}\right)_a = \left(\vec{A}\right)_b + 2\mu \vec{\nabla} \varphi = \left(\vec{A}\right)_b + \frac{i}{q} S_{ав} \vec{\nabla} S_{ав}^{-1}, \quad (1.15)$$

где  $S_{ав} = \exp[2i\mu q\varphi]$ ,  $q$  - заряд пробной частицы в поле монополя.

Волновая функция пробной частицы с электрическим зарядом  $q$  в поле монополя также должна быть определена в каждой из областей по-отдельности, а в  $R_{ав}$   $\psi_a$  и  $\psi_b$  должны быть связаны соответствующим преобразованием, обеспечивающим локальную калибровочную инвариантность.

$$\psi_a = S_{ав} \psi_b = e^{2i\mu q\varphi} \psi_b \quad (\hbar = c = 1) . \quad (1.16)$$

Поскольку  $\psi_{a,b}$  в  $R_{ав}$  регулярны и однозначны, то значит должно быть однозначным и  $S_{ав}$  при изменении аксиального угла  $\varphi \rightarrow \varphi + 2\pi$ , откуда

$$4\pi \mu q = 2\pi n \quad \Rightarrow \quad \mu q = \frac{n}{2} , \quad (1.17)$$

где  $n$  - целое.

Если восстановить  $\hbar$  и  $c$ , то выражение (1.17) примет вид:

$$\mu q = \frac{n}{2} \hbar c , \quad (1.18)$$

где  $n$  - целое.

Перепишем его в виде:

$$q = \frac{\hbar c}{2\mu} n . \quad (1.19)$$

Полученное выражение представляет собой условие квантования Дирака, устанавливающее связь между электрическими и магнитными зарядами. Из него вытекает, что если существует хотя бы один монополю, то заряды всех частиц должны подчиняться данному условию. Это бы дало ответ на вопрос, почему все наблюдаемые электрические заряды кратны модулю заряда электрона.

Это далеко не единственный удивительный результат применения квантовой теории к описанию магнитного монополя Дирака. Существуют и другие эффекты, в частности, возникновение у заряженной частицы в поле монополя добавочного углового момента, который может оказаться как целым, так и полуцелым в зависимости от значения произведения  $\mu q$  (эффект Тамма). Про все эти эффекты в свое время было написано сотни статей, информацию по которым можно получить из следующих работ: 1. P. A. M. Dirac. The Monopole Concept. Int. Journ. of Theor. Phys., 17 (1978) 235-247. 2. T. T. Wu and C. N. Yang. Concept of nonintegrable phase factors and global formulation of gauge fields. Phys. Rev. D, 12 (1975) 3845. 3. Y. Kazama. Dynamics of Electron-Monopole System. Int. Journ. of Theor. Phys., 17 (1978) 249-265.

Для экспериментальной проверки существования магнитного монополя может быть использовано сверхпроводящее кольцо с циркулирующим по нему током  $I$  (рис. ??в). В случае пролета магнитного монополя через него магнитный поток изменится на величину

$$\Delta\Psi = 4\pi\mu = 4\pi \frac{\hbar c}{2q} n = \frac{2\pi\hbar c}{q} n \quad (1.20)$$

и это изменение для сверхпроводника высокого качества может сохраняться весьма длительное время, до нескольких лет. Поэтому такого типа эксперименты привлекли внимание как возможные регистраторы монополей с высокой чувствительностью.

В случае, когда в качестве сверхпроводящего кольца выступает сверхпроводник БКШ-типа, получаем следующее:

$$q = 2e, \quad \Delta\Psi = n\Psi_0, \quad \Psi_0 = \frac{2\pi\hbar c}{2e} = 2 \times 10^{-3} \text{Гс} \times \text{м}^2, \quad (1.21)$$

где  $\Psi_0$  - квант магнитного потока в таких сверхпроводниках. Заряд  $q$  соответствует заряду куперовской пары в сверхпроводнике.

Для детектирования такого изменения  $\Delta\Psi$  могут использоваться высокочувствительные магнитометры. Такие эксперименты интенсивно проводились в 70-80-ые годы прошлого века. Единственный положительный результат был зафиксирован именно этим способом в одной из лабораторий в США. Результат получен 01.04.1982 (по другим данным, 14.02.1982, но это не принципиально) в  $\approx 4 - 5$  часов утра, когда в лаборатории никого не было. При этом изменение магнитного потока  $\Delta\Psi$  в точности соответствовало наблюдаемому заряду электрона. После этого все ведущие научные журналы типа Phys.Rev., Phys.Lett. и др. приняли решение не принимать более к рассмотрению работы, посвященные поискам магнитного монополя Дирака в силу их полной бесперспективности, и, к сожалению, некоторой спекулятивности.

## Лекция 2. Первоосновы квантовой теории

Хотя официальным началом квантовой механики как науки о физике микромира принято считать 1925 г., когда В.Гейзенберг сформулировал свою матричную механику, на самом деле первые результаты, имеющие прямой квантовомеханический статус и содержание, были получены за 40 лет до этого, а именно в 1885 г. Помимо того, что именно в этом году родился знаменитый датский физик Нильс Бор, главным результатом следует считать работу швейцарского физика-оптика немецкого происхождения И.Бальмера, который по результатам обработки полученных им и другими оптиками-спектроскопистами того времени данных установил свою знаменитую бальмеровскую спектральную серию линий атома водорода

$$\omega_{mn} = R \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad (2.1)$$

где  $m = 2$ ,  $n = 3, 4, 5, 6$ , а  $R$  — постоянная Ридберга. Точность, с которой была найдена эта формула, существенно превосходила все другие спектроскопические результаты того времени. Обратите внимание, что еще не возникла проблема излучения черного тела, нет формулы Планка и его постоянной, законов Столетова для фотоэффекта и их объяснения, данного А.Эйнштейном в терминах фотонов, а в формуле Бальмера уже манифестирует квантовая механика атома водорода. На самом деле формула Бальмера (2.1) — это ни что иное, как записанная в неявном виде формула Бора для электронных уровней энергии в атоме водорода  $E_n = -m e^4 Z^2 / 2 \hbar^2 n^2$ .

Между прочим, сам Бальмер выражал серьезные сомнения, что эта формула будет справедлива и для других  $n$ . Однако, вскоре после серии Бальмера последовали серии Лаймана, Пашена и др, а дальнейшее быстрое развитие немецкой оптики, прежде всего на заводах Карл-Цейсс (Йена), и тем самым спектроскопии привело к тому, что в 1908 году Ритц на основе анализа всего массива накопившихся к этому времени данных показал, что любую спектральную линию любого атома можно записать в виде следующей формулы:

$$\omega_{mn} = f(m_1, \dots, m_s) - f(n_1, \dots, n_s), \quad (2.2)$$

где  $m, n$  представляют собой теперь мульти-индексы, т.е.  $m$  и  $n$  представляют собой:  $m = \{m_1, \dots, m_s\}$ ,  $n = \{n_1, \dots, n_s\}$ , при этом все  $m_i, n_i$  — целые числа. Для каждого элемента функция  $f(x_1, \dots, x_s)$  и наборы  $\{m_i, n_i\}$  — свои собственные. Данное равенство представляет собой универсальный и точный закон природы, соответствующий

любым атомам в любых условиях поглощения или излучения. Из соотношения (2.2) непосредственно следует знаменитый закон Ритца композиции частот:

$$\omega_{mp} + \omega_{pn} = \omega_{mn} . \quad (2.3)$$

Принципиальная важность этого соотношения в том, что оно полностью противоречит всем выводам классической механики и классической электродинамики касательно спектрального состава излучения атомов.

## Спектральный анализ движения частицы в потенциальной яме в рамках классической механики

Для того, чтобы осознать, насколько значим данный закон, исторически ставший „развилкой“ между классической и квантовой физикой, сделаем шаг назад и в рамках классической механики рассмотрим колебания частицы в потенциальной яме. Такая система является простейшей классической аналогией движения атомного электрона по замкнутой орбите вокруг ядра, тем самым совершающего колебательное периодическое движение. Гамильтониан такой системы имеет вид

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(q) = \varepsilon_0 n , \quad (2.4)$$

где  $\varepsilon_0$  - это параметр размерности энергии,  $n$  - непрерывная безразмерная величина.

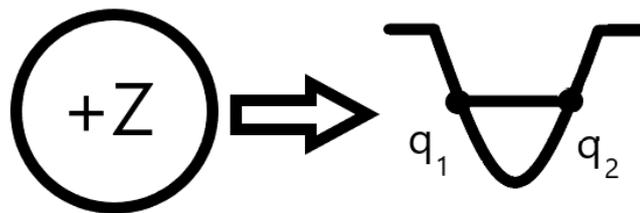


Рис. 2.1. Переход к классической аналогии движения атомного электрона по замкнутой орбите вокруг ядра

Найдем период движения частицы в такой системе:

$$T(n) = 2m \int_{q_1}^{q_2} \frac{dq}{\sqrt{2m(\varepsilon_0 n - V(q))}} . \quad (2.5)$$

В силу того, что движение частицы периодически, как для самой координаты, так и для любой другой характеристики частицы, выполняется условие периодичности:

$$q(t + T) = q(t) . \quad (2.6)$$

Как известно, любую периодическую функцию можно представить в виде соответствующего ряда Фурье:

$$q(t) = \sum_m q_m e^{i\omega_{mn}t} , \quad (2.7)$$

где  $\omega(n) = 2\pi/T(n)$  - основная (несущая) частота,  $\omega_{mn} = m\omega(n)$  - обертоны, а  $q_m$  - спектральные компоненты координатной функции. Очевидно, что для частот обертонов выполняется следующее соотношение:

$$\omega_{m_1,n} + \omega_{m_2,n} = \omega_{m_1+m_2,n} . \quad (2.8)$$

Данное соотношение кардинально отличается от закона композиции Ритца. Тем не менее, оно является совершенно корректным, потому что именно оно в терминах спектральных компонент обеспечивает достаточно очевидное условие: если функция  $q(t)$  периодична, то  $q^2(t)$  так же является периодической функцией с тем же периодом и тем самым с тем же набором спектральных частот:

$$\begin{aligned} q^2(t) &= \sum_{m_1, m_2} q_{m_1} q_{m_2} e^{i(\omega_{m_1 n} + \omega_{m_2 n} t)} = \\ &= \sum_m \underbrace{\left( \sum_{m_1+m_2=m} q_{m_1} q_{m_2} \right)}_{\substack{\text{новая спектральная} \\ \text{компонента}}} e^{i\omega_{mn} t} = \sum_m (q^2)_m e^{i\omega_{mn} t} . \end{aligned} \quad (2.9)$$

Из (2.9) по индукции следует, что такое же утверждение будет верно и для любой степени координаты  $q^n(t)$ , а тем самым и для любой функции  $f(t)$  и вообще для любой характеристики такого колебательного движения частицы в яме. Причем в основе этого утверждения лежит именно закон композиции частот обертонов (2.8).

## Излучение электрона при его движении в потенциальной яме в рамках классической электродинамики

Продолжим теперь рассмотрение классической аналогии исходной задачи об излучении атомов и перейдем к имитации движения электрона вокруг атомного ядра в виде его осциллирующего движения в потенциальной яме. Согласно законам

классической электродинамики Максвелла совершающий колебательное движение электрический заряд будет излучать. Для описания излучения будем использовать лоренцеву калибровку  $\partial_\mu A^\mu = 0$ . Тогда уравнения Максвелла в терминах потенциалов  $A_\mu$  будут иметь вид

$$\square A_\mu = 4\pi j_\mu, \quad (2.10)$$

где заряды и токи в правой части порождаются координатой и скоростью движения электрона в яме, а решение ур. (2.10) будет записываться через запаздывающие потенциалы:

$$\varphi(\vec{r}, t) = \int d\vec{r}' \cdot \frac{\rho(\vec{r}', t - \frac{\|\vec{r} - \vec{r}'\|}{c})}{\|\vec{r} - \vec{r}'\|}, \quad \vec{A}(\vec{r}, t) = \frac{1}{c} \int d\vec{r}' \cdot \vec{j} \left( \frac{\vec{r}', t - \frac{\|\vec{r} - \vec{r}'\|}{c}}{\|\vec{r} - \vec{r}'\|} \right). \quad (2.11)$$

Но если координата и импульс электрона являются периодическими функциями времени типа (2.6), то такими же функциями времени будут порождаемые его движением заряды и токи в правой части ур. (2.10). Но тогда из ур. (2.11), а по существу в силу линейности уравнений Максвелла, электромагнитные потенциалы  $A_\mu$  также будут периодическими функциями времени с тем же периодом, и следовательно, иметь такое же спектральное разложение с тем же набором частот и законом композиции (2.8). Далее по потенциалам можно определить напряженности полей и все остальные характеристики излучения. В результате закон композиции (2.8) становится классическим законом излучения для спектральных частот, кардинально не совпадающим с законом Ритца. Таким образом, уже из этого простейшего модельного примера следует, что классическая механика и классическая электродинамика противоречат экспериментально установленным и надежно проверенным спектральным закономерностям излучения атомов.

## Обобщение на условно периодическое движение электрона в атоме

В рамках классической механики для наиболее общего описания движения электрона в атоме следует перейти на язык условно периодического движения, когда координата и импульс, а тем самым токи и заряды, скалярный и векторный потенциалы и все другие характеристики излучения задаются через более сложное спектральное разложение вида

$$\rho(\vec{r}, t) = \sum_{\{l\}} \rho_{\{l\}}(\vec{r}) \times e^{i\Omega(l,n)t}, \quad \vec{j}(\vec{r}, t) = \sum_{\{l\}} \vec{j}_{\{l\}}(\vec{r}) \times e^{i\Omega(l,n)t}, \quad (2.12)$$

$$\varphi(\vec{r}, t) = \sum_{\{l\}} \varphi_{\{l\}}(\vec{r}) \times e^{i\Omega(l,n)t}, \quad \vec{A}(\vec{r}, t) = \sum_{\{l\}} \vec{A}_{\{l\}}(\vec{r}) \times e^{i\Omega(l,n)t}, \quad (2.13)$$

где  $\Omega(l, n) = \sum_j^k l_j \omega_j(n)$ ,  $\omega_j(n)$  — набор  $k$  базовых (несущих) частот, зависящих от непрерывного индекса  $n$ , который как и ранее параметризует энергию электрона через соотношение  $E = \varepsilon_0 n$ , а набор  $\{l\} = \{l_1, \dots, l_k\}$ , где все  $l_i$  — целые числа, обобщает обертоны в случае одной несущей частоты, включая еще и комбинационные частоты.

При таком движении частица не уходит на бесконечность, хотя может удаляться достаточно далеко от центра атома (атомного ядра), при этом всегда снова возвращается к центру, однако может никогда не вернуться в уже пройденную точку (в этом смысл термина условно-периодическое движение), если базовые частоты несоизмеримы. Чтобы последнее утверждение было понятно, приведем пример commensurate/incommensurate частот:

**Пример 2.1.** Пусть период, соответствующий первой частоте, равен  $T_1 = 3T_0$ , а период, соответствующий второй частоте, —  $T_2 = 5T_0$ . Тогда частица вернется в исходную точку за время  $\Delta t = 15T_0$ . Это стало возможно, поскольку отношение периодов (частот) — рациональное число. Если же отношение периодов (частот) — иррациональное, то частица в исходную точку за конечное время уже никогда не вернется, хотя может оказаться бесконечно близко.

Однако дело отнюдь не в соизмеримости-несоизмеримости частот условнопериодического движения, а в том, что классический закон композиции частот излучения (2.8) по сути не меняется

$$\Omega(l_1, n) + \Omega(l_2, n) = \Omega(l_1 + l_2, n), \quad (2.14)$$

где под  $l_1 + l_2$  следует понимать теперь прямую сумму мультииндексов  $\{l_1\}$  и  $\{l_2\}$ .

Поэтому в рамках классической механики-электродинамики закон композиции Ритца (2.3) объяснить невозможно, и надо либо менять либо законы Ньютона и уравнения Максвелла, что по понятным причинам сделать не удастся в силу их широчайшей области применимости с положительным результатом, либо изобретать совершенно новый способ решения задачи. Подчеркнем, что это не единственный способ придти к очевидному противоречию между классической физикой и экспериментом, в котором проявляются квантовые свойства окружающего нас мира. Вполне можно было бы стартовать с "канонического" введения через проблему излучения

черного тела и формулу Планка, законы Столетова для фотоэффекта и их объяснение Эйнштейна в терминах фотонов, через постулаты Бора или опыт Штерна-Герлаха, интерференцию типа Юнга электронов на двух щелях или их дифракцию в опытах Дэвиссона-Джермера и Томсона. Можно было бы вообще проигнорировать все эти основополагающие исторические факты и проиллюстрировать это противоречие на нейтронной интерферометрии или на совсем свежих экспериментах с несколькими фотонами, точнее, с их поляризациями, которые формируют так называемые "entangled states" по типу GHZ (Greenberger, Horne, Zeilinger). См., например, D. Bouwmeester, J.-W. Pan, M. Daniell, H. Weinfurter, and A. Zeilinger. Observation of Three-Photon Greenberger-Horne-Zeilinger Entanglement. Phys. Rev. Lett. 82 (1999) 1345. Но историю надо уважать, а выбранный способ через закон композиции Ритца привлекателен тем, что он имеет дело с одним из универсальных и точных законов природы — спектральным составом излучения-поглощения атомов в любых условиях, а чем большей общностью обладает исходная позиция, тем больше шансов "to have the ball at feet" при ее правильном объяснении. И это удалось сделать В. Гейзенбергу в 1925 году.

## 1925 г. Матричная механика Гейзенберга

Как именно В. Гейзенберг пришел к формулировке своей матричной механики, достоверно никто не знает и никогда не узнает. Никаких воспоминаний ни самого Гейзенберга, ни его ближайших друзей и коллег на эту тему нет. Но основную логику его рассуждений можно попытаться воспроизвести. А именно, эксперимент однозначно свидетельствует, что измеряя э-м излучение атома, мы получаем набор величин вида

$$F_{mn} e^{i\omega_{mn} t} \quad (2.15)$$

с двумя равноправными дискретными индексами  $m, n$ , хотя классическая теория предписывает индексу  $n$  быть непрерывным. Однако основная трудность связана с законом композиции частот. Теперь не имеет смысла величина

$$F(n, t) = \sum_m F_{mn} e^{i\omega_{mn} t}, \quad (2.16)$$

как характеристика некоторого (условно) периодического движения (электронов в атоме), так как в силу закона композиции Ритца величина  $F^2(n, t)$  уже не может

быть представлена в виде

$$F^2(n, t) = \sum_m (F^2)_{mn} e^{i\omega_{mn} t} \quad (2.17)$$

с тем же набором частот. Тем самым  $F^2(n, t)$ , а следовательно, и все другие функции от исходной величины  $F(n, t)$  уже не могут являться характеристиками того же движения, что было возможно в рамках классической теории с законами композиции частот (2.8) и (2.14).

Таким образом, измеряя характеристики э-м излучения атома, нельзя от них перейти к величинам, которые можно было бы интерпретировать в терминах движения атомных электронов вокруг ядра, не вступая в противоречие с классической механикой и электродинамикой. Иначе говоря, закон композиции Ритца, который является точным и надежно проверенным законом природы, требует пересмотра всей кинематической схемы классической механики начиная с ее первооснов.

А теперь давайте задумаемся над тем, что означает формальная возможность пересчитать результаты измерения с помощью двух дискретных и равноправных индексов? Какому математическому объекту это соответствует? Очевидно, что квадратной, возможно бесконечной, таблице, которая в современной терминологии называется матрица. Впервые это утверждение было высказано Гейзенбергом в 1925 году, причем именно в терминах таблиц. Матричной алгебры Гейзенберг тогда еще толком не знал, что, впрочем, ему не очень-то помешало при формулировке первооснов квантовой теории в терминах новых математических объектов, которыми следует описывать физические величины, и комбинационный принцип Ритца здесь оказался как раз там где надо.

Более конкретно, Гейзенберг предложил рассматривать монохроматическую составляющую излучения (2.15) как  $mn$ -ый матричный элемент матрицы  $F(t)$ . Применяя к спектральным частотам излучения атома закон Ритца в форме (2.2)

$$\omega_{mn} = \omega_m - \omega_n, \quad (2.18)$$

соотношение (2.15) можно переписать, разделив экспоненты. В результате получим

$$F_{mn} e^{i\omega_{mn} t} = e^{i\omega_m t} F_{mn} e^{-i\omega_n t} = (e^{i\Omega t} F e^{-i\Omega t})_{mn}, \quad (2.19)$$

где  $\Omega_{mn} = \omega_n \delta_{mn}$  — (пока) диагональная матрица частот. Далее от  $mn$ -ого матричного элемента переходим непосредственно в матричную форму:

$$F(t) = e^{i\Omega t} F e^{-i\Omega t}. \quad (2.20)$$

И такая матричная форма идеально ложится на всю нашу логику рассуждений, потому что для квадрата матрицы  $F^2(t)$  получаем такую же временную зависимость:

$$F^2(t) = e^{i\Omega t} F e^{-i\Omega t} e^{i\Omega t} F e^{-i\Omega t} = e^{i\Omega t} F^2 e^{-i\Omega t}. \quad (2.21)$$

Следовательно, и для любой степени  $n$  верно

$$F^n(t) = e^{i\Omega t} F^n e^{-i\Omega t}. \quad (2.22)$$

А это означает, что  $mn$ -ые матричные элементы матриц  $F^n(t)$  будут соответствовать той же монохроматической компоненте с частотой  $\omega_{mn}$ . Тем самым любые характеристики излучения, определенные теперь как матричные функции от исходной  $F(t)$ , будут содержать тот же спектральный состав, что и требуется в соответствии с нашими базовыми физическими представлениями о свойствах излучения. Более того, совершенно также в терминах матриц мы теперь можем проиграть переход через ур. Максвелла к токам и зарядам, и тем самым к величинам, которые можно было бы интерпретировать в терминах характеристик движения атомных электронов вокруг ядра.

Нельзя сказать, чтобы такой подход свалился на Гейзенбера с неба. Напротив, он во многом был подготовлен 40 предыдущими годами развития атомной спектроскопии, постулатами Бора, другими результатами в области атомной физики, в результате чего уже имелось четкое представление о стационарных состояниях электронов в атомах, характеризующихся своим уникальным набором квантовых чисел. Даже полуцелые квантовые числа уже были введены Паули для учета спиновых степеней свободы электронов, после чего Гейзенберг не удержался от едкого комментария (они с Паули были одновременно аспирантами у Зоммерфельда и друзьями): "Ну вот, у тебя уже возникли половинки, скоро появятся четвертинки, потом осьмушки, и мы снова со свистом вернемся в классическую физику, где все непрерывно." Но дальше полуцелых квантовых чисел дело не пошло, и вся эта структура атома в виде набора квантовых чисел даже получила специальное название — атомистика. Непонятно было только самое главное — какова природа этих дискретных квантовых чисел.

Именно в этом и состоит значимость того, что предложил Гейзенберг. Не выходя за рамки классических представлений, природу дискретных квантовых чисел объяснить нельзя. Хотя со времен Ньютона мы привыкли считать, что все физические величины должны описываться действительными функциями времени, и значения

этих функций в данный момент времени прямо или косвенно определяют наблюдаемые в эксперименте значения физических величин, для атомистики такого способа описания действительности оказалось мало. Необходимо было перейти к определению физических величин в терминах других математических объектов, более сложному и далеко не очевидному, но этого требовала сложившаяся ситуация, из которой надо было искать выход. Таким выходом оказалась матричная механика Гейзенберга.

Следующий ход конем заключается в том, чтобы, используя соотношение Бора для частот излучения атома через разность энергий стационарных состояний атома

$$\omega_{mn} = (E_m - E_n) / \hbar , \quad (2.23)$$

переписать матричное выражение (2.20) как динамическое соотношение, задающее эволюцию во времени величины  $F(t)$ :

$$F(t) = e^{itH/\hbar} F(0) e^{-itH/\hbar} , \quad (2.24)$$

где  $H_{mn} = E_n \delta_{mn}$  — (пока) диагональная матрица энергетических уровней атома. Выражение (2.24) представляет собой интегральную форму матричного дифференциального уравнения

$$\dot{F} = \frac{i}{\hbar} [H, F] , \quad (2.25)$$

известного с тех пор всему миру как уравнение Гейзенберга. Уравнение (2.25) — это вершина квантовой теории включая и современную теорию квантованных полей, которое с 1925 года и по н/вр является основой для описания временной эволюции в квантовой теории.  $F$  в этом уравнении представляет собой любую физическую величину, относящуюся к данной системе, а  $H$  — ее гамильтониан. Все остальное — это либо подъем на эту вершину, который мы уже осуществили вышеописанным способом, либо спуск. И как в серьезных горах, в данном случае спуск оказывается значительно сложнее, чем подъем, но спустившись без серьезных травм и не сломав себе по дороге шею, вы оказываетесь в благодатной долине, полной чудес и открытий.

Поэтому начинаем спуск и сразу понимаем, что одного только ур.(2.25) пока явно не достаточно. По построению матрица  $H$  в этом уравнении является диагональной матрицей энергетических уровней системы, а задача как раз и состоит в том, чтобы их найти. И самое главное — наиболее эффективный в настоящее время подход к описанию физических систем предполагает, что они задаются как набор исходных элементарных независимых степеней свободы, и динамика системы формулируется

прежде всего на их уровне, а уже далее через их динамику выводятся остальные свойства системы в целом. Простейшим примером такого рода является классическая механика, в основе которой лежит набор обобщенных координат и импульсов  $\{q_1, \dots, q_n, p_1, \dots, p_n\}$ . Все величины задаются как их функции, включая и гамильтониан

$$H = H(q_1, \dots, q_n, p_1, \dots, p_n) , \quad (2.26)$$

а динамическое описание системы основано на уравнениях Гамильтона

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} , \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} . \quad (2.27)$$

В гамильтоновой механике все сводится к обобщенным координатам и импульсам, однако в квантовых системах возникают и другие типы степеней свободы, такие как спиновые или изоспиновые, поэтому в качестве исходного набора степеней свободы самого общего вида примем совокупность  $\{F_1, \dots, F_s\}$ . Считая  $F_i$  матрицами, ответим на вопрос: можно ли в терминах  $F_i$  воспроизвести описанную выше схему восстановления динамики всей системы в целом через динамику элементарных степеней свободы? Оказывается, можно. Но для этого сначала упростим себе дальнейшую жизнь с помощью следующего базового утверждения, хорошо известного в линейной алгебре. Квадратные матрицы, конечномерные или бесконечномерные, но со счетным числом строк и столбцов, всегда можно сопоставить линейным операторам, действующим в соответствующем векторном пространстве. Причем это сопоставление имеет статус изоморфизма — всем действиям над матрицами можно сопоставить соответствующие действия над операторами и наоборот. Далее мы увидим, как конкретно реализуется данное утверждение в терминах гильбертова пространства, а пока просто перейдем от матриц к операторам, избавившись тем самым от необходимости использовать матричные индексы. Одно это уже сильно упростит все дальнейшие выкладки, хотя в принципе на языке матриц можно было бы прокрутить все базовые положения квантовой теории, ничего при этом не потеряв.

Перейдя на язык линейных операторов, начнем со следующего базового алгебраического соотношения:

$$[AB, C] = ABC - CAB = ABC - ACB + ACB - CAB = A[B, C] + [A, C]B , \quad (2.28)$$

из которого по индукции следует, что

$$[A_1 \dots A_n, B] = \sum_{l=1}^n A_1 \dots A_{l-1} [A_l, B] A_{l+1} \dots A_n . \quad (2.29)$$

Действуя далее таким же образом, легко показать, что коммутатор типа

$$[A_1 \dots A_n, B_1 \dots B_m] \quad (2.30)$$

также может быть расписан в виде суммы слагаемых, каждое из которых будет содержать коммутатор вида  $[A_i, B_j]$  на соответствующем месте.

Отсюда немедленно следует, что коммутатор в правой части уравнения Гейзенберга (2.25), в котором гамильтониан  $H$  и величина  $F$  теперь должны определяться как степенные функции от элементарных операторных степеней свободы  $\{F_1, \dots, F_s\}$  типа

$$H = \sum_{i_1 \dots i_s} h_{i_1 \dots i_s} F_1^{i_1} \dots F_s^{i_s}, \quad F = \sum_{i_1 \dots i_s} f_{i_1 \dots i_s} F_1^{i_1} \dots F_s^{i_s}, \quad (2.31)$$

будет также представлять собой сумму слагаемых, каждое из которых будет содержать только по одному базовому коммутатору вида  $[F_k, F_l]$  на соответствующем месте. Таким образом, для вычисления правой части уравнения Гейзенберга (2.25) необходимо и достаточно задания совокупности коммутаторов  $[F_k, F_l]$  между отдельными членами исходного набора  $\{F_1, \dots, F_s\}$ .

Далее легко показать, что для производной по времени от произведения операторов справедливо правило Лейбница:

$$\frac{d}{dt} (A_1 \dots A_n) = \sum_{l=1}^n A_1 \dots A_{l-1} \frac{dA_l}{dt} A_{l+1} \dots A_n. \quad (2.32)$$

Из (2.32) немедленно следует, что если все величины  $A_l(t)$ ,  $l = 1, \dots, n$  удовлетворяют уравнению Гейзенберга

$$\dot{A}_l = \frac{i}{\hbar} [H, A_l], \quad (2.33)$$

то

$$\frac{d}{dt} (A_1 \dots A_n) = \sum_{l=1}^n A_1 \dots A_{l-1} \left( \frac{i}{\hbar} [H, A_l] \right) A_{l+1} \dots A_n = \frac{i}{\hbar} [H, A_1 \dots A_n]. \quad (2.34)$$

А последнее соотношение означает, что уравнение Гейзенберга для любой величины  $\varphi(F_1, \dots, F_s)$

$$\dot{\varphi}(F_1, \dots, F_s) = \frac{i}{\hbar} [H, \varphi(F_1, \dots, F_s)], \quad (2.35)$$

будет всегда выполняться, если выполняются ур. Гейзенберга для каждой величины из исходного набора  $\{F_1, \dots, F_s\}$

$$\dot{F}_i = \frac{i}{\hbar} [H, F_i]. \quad (2.36)$$

Иными словами, описание эволюции системы сводится к решению системы уравнений Гейзенберга (2.36) для всех величин  $F_i$  из исходного набора  $\{F_1, \dots, F_s\}$ , и в этом смысле основные уравнения квантовой механики ничем не отличаются от классической механики. Но чтобы решить систему (2.36), надо знать полный набор базовых коммутаторов  $[F_k, F_l]$ . Для этого попробуем как можно дальше провести аналогию между ур. Гейзенберга (2.36) и уравнениями гамильтоновой механики (2.27), поскольку и те и другие — уравнения первого порядка по времени. И здесь сразу возникает проблема, насколько мы понимаем квантовую динамику на уровне структуры гамильтониана. Для квантовых систем, которые прежде всего относятся к микромиру, где прямые измерения зачастую проблематичны, вполне можно было бы предположить существование специфических квантовых взаимодействий, зависящих от  $\hbar$  таким образом, чтобы на классическом уровне никак не проявляться. Запретить такой способ рассуждений невозможно, и так неоднократно пытались делать, вводя, в частности, так называемые скрытые параметры (Д. Бом и др.). Но в таком подходе теряется одна из главных составляющих любой настоящей науки — предсказательная сила. Скрытым параметрам в силу их принципиальной ненаблюдаемости можно приписать любую динамику, и тем самым подогнать ответ под любой эксперимент. Но именно подогнать, а не вывести из первых принципов, как предполагает истинно научный подход. Поэтому для дальнейших действий примем принцип форм-инвариантности, когда основу динамики квантовых систем составляют те же уравнения классической механики и электродинамики, переведенные на матричный=операторный язык. Этот принцип мы фактически уже использовали при построении самой матричной механики, которая возникла именно как способ совместить форм-инвариантность классических уравнений движения в комбинационном принципе Ритца.

### Каноническое квантование

Рассмотрим сначала простейший случай частицы в потенциальном поле:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(q) . \quad (2.37)$$

Соответствующие уравнения Гамильтона имеют вид

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m} , \quad (2.38)$$

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} = -\frac{\partial V}{\partial q} . \quad (2.39)$$

Принцип форм-инвариантности гласит, что к таким же по форме уравнениям должно приводить система операторных уравнений Гейзенберга (2.36). Для этого постулируем так называемый одновременной (его также называют каноническим) коммутатор

$$[q(t), p(t)] = i\hbar . \quad (2.40)$$

Проверка элементарна:

$$\dot{q}(t) = \frac{i}{\hbar} [p^2(t)/2m, q(t)] = (-i\hbar) \frac{i}{\hbar} p(t)/m = p(t)/m , \quad (2.41)$$

$$\dot{p}(t) = \frac{i}{\hbar} [H, p(t)] = \frac{i}{\hbar} [V(q), p(t)] = i\hbar \frac{i}{\hbar} \frac{\partial V}{\partial q} = -\frac{\partial V}{\partial q} . \quad (2.42)$$

Сразу отметим, что одновременной коммутатор (2.40) выполняется для любого момента времени  $t$  вне зависимости от конкретной динамики системы, поскольку с помощью интегральной формы ур.Гейзенберга (2.24) операторы  $q(t')$  и  $p(t')$  можно представить в следующем виде:

$$q(t') = e^{iH(t'-t)/\hbar} q(t) e^{-iH(t'-t)/\hbar} , \quad p(t') = e^{iH(t'-t)/\hbar} p(t) e^{-iH(t'-t)/\hbar} , \quad (2.43)$$

откуда немедленно следует

$$[q(t'), p(t')] = i\hbar . \quad (2.44)$$

Последний результат имеет принципиально важное значение, поскольку по существу отражает инвариантность во времени. А именно, если канонический коммутатор устанавливается в момент времени  $t$ , то он автоматически будет выполняться и в любой момент времени  $t'$ .

Коммутатор (2.40) естественным образом обобщается на большее число степеней свободы на основе принципа канонического квантования. Для этого используем формализм скобок Пуассона для классической гамильтоновой механики:

$$\{A, B\} = \sum_{l=1}^n \left( \frac{\partial A}{\partial q_l} \frac{\partial B}{\partial p_l} - \frac{\partial A}{\partial p_l} \frac{\partial B}{\partial q_l} \right) . \quad (2.45)$$

Между скобками Пуассона и коммутаторами имеется много общего, в частности, антисимметричность относительно перестановки „участников“ скобки:

$$\{A, B\} = -\{B, A\} , \quad [A, B] = -[B, A] , \quad (2.46)$$

тождество Якоби:

$$\{A, \{B, C\}\} + \{C, \{A, B\}\} + \{B, \{C, A\}\} = 0, \quad (2.47)$$

$$[A, [B, C]] + [C, [A, B]] + [B, [C, A]] = 0, \quad (2.48)$$

а также возможность записи уравнений движения для любой величины в классической механике через скобку Пуассона:

$$\dot{\varphi} = \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \{\varphi, H\}. \quad (2.49)$$

Причем в данном случае мы считаем, что величина  $\varphi$  помимо зависимости от  $q$  и  $p$ , может также иметь частную зависимость от  $t$ . Далее легко видеть, что операторная формулировка через коммутаторы эквивалентна записи в терминах скобок Пуассона при следующем отождествлении:

$$\{ \quad , \quad \} \Rightarrow \frac{1}{i\hbar} [ \quad , \quad ]. \quad (2.50)$$

Это выражение может быть легко проверено с помощью следующей подстановки:

$$\{q, p\} = 1 \Rightarrow [q, p] = i\hbar. \quad (2.51)$$

Из этого правила немедленно следует то, что и называется каноническим квантованием, а именно набор исходных ненулевых коммутаторов для произвольного числа степеней свободы

$$\{q_a, p_b\} = \delta_{ab} \Rightarrow [q_a, p_b] = i\hbar \delta_{ab}. \quad (2.52)$$

Следует специально отметить, что каноническое квантование с помощью правила (2.50) является корректной процедурой только на уровне исходных степеней свободы, включающих обобщенные координаты, импульсы, спиновые/изоспиновые переменные, но оно не применимо к произвольным функциям от них. В частности, для классических координат и импульсов  $\{q^2, p^2\} = 2qp = qp + pq = 2pq$ , где все три выражения в правой части имеют равноправный статус, а соответствующий коммутатор имеет строго фиксированный вид  $[q^2, p^2] = 2i\hbar (qp + pq)$ .

Окончательное обобщение базового уравнения гамильтоновой динамики (2.49) приводит нас к финальному виду уравнения Гейзенберга:

$$\dot{F} = \frac{i}{\hbar} [H, F] + \frac{\partial F}{\partial t}. \quad (2.53)$$

Итак, матричная=операторная формулировка динамики системы по сути ничем не отличается от классической, однако если в классическом случае координаты, импульсы, э-м поля и другие характеристики системы могут быть одновременно измерены в любой момент времени и с любой точностью, определяемой только погрешностью измерительной аппаратуры, то когда вместо них возникают операторы, то все становится не так. Одно дело, когда координаты, импульсы и другие величины являются вещественными функциями времени, значения которых напрямую или косвенно сопоставляются результатам их фактического измерения в эксперименте, но когда вместо них возникают матрицы, представляющие собой в ряде принципиально важных случаев бесконечные квадратные таблицы, то возникает глобальный вопрос, как из них извлекать физическую информацию, которую можно сопоставлять с результатами измерения.

## Лекция 3. Теория измерений

### Квантово-механическая теория измерений

Заметим, что исходное уравнение в терминах матриц инвариантно относительно матриц преобразования подобия:

$$\dot{F} = \frac{i}{\hbar} [H, F] . \quad (3.1)$$

Преобразование подобия — это широко известная в матричном анализе операция, заключающаяся в „подкрутке“ исходной матрицы с помощью следующей комбинации:

$$A \longrightarrow A' = S^{-1} A S , \quad (3.2)$$

$$\det S \neq 0 . \quad (3.3)$$

Уравнение Гейзенберга, которое верно для любой степени свободы и величины, оказывается инвариантным относительно преобразования подобия. Если перевести  $F$  и  $H$  в формы  $F'$  и  $H'$  соответственно, то

$$\begin{aligned} F &\longrightarrow F' = S^{-1} F S , \\ H &\longrightarrow H' = S^{-1} H S . \end{aligned} \quad (3.4)$$

Матрица  $S$  в обоих выражениях (3.4) одна и та же. Если теперь подставить в (2.25)  $F'$  и  $H'$ , то оно будет аналогично исходному уравнению Гейзенберга, поскольку будет являться прямым его следствием:

$$\dot{F}' = S^{-1} \dot{F} S = S^{-1} \frac{i}{\hbar} [H, F] S = \frac{i}{\hbar} [H', F'] . \quad (3.5)$$

Как только такое преобразование было сделано, гамильтониан  $H$ , который изначально был введен как диагональная матрица энергии, потерял свою диагональную структуру, став такой же регулярной матричной величиной, как и все остальные. Таким образом, теория измерений может быть рассмотрена как в матричном виде, так и в операторном, поскольку квадратные матрицы эквивалентны операторам в гильбертовом пространстве. Абсолютно аналогичная конструкция, выполненная на уровне матриц, может быть проделана и для операторов в силу изоморфизма всех действий.

Сформулируем теперь базовый принцип, не требующий доказательства: измеримые значения любой величины - это спектр соответствующего оператора, при этом

при каждом отдельном измерении величина принимает произвольное значение из спектра собственных значений (СЗ). Так, для гамильтониана измеримые значения могут быть легко найдены, поскольку он был изначально задан в виде диагональной матрицы энергий, а её диагональные элементы являются набором СЗ.

Результат измерения любой величины представляет собой вещественное число (как известно, таким свойством обладают все эрмитовы операторы), в результате чего возникает жесткое ограничение: для описания наблюдаемых величин необходимо использовать эрмитовы операторы. Стоит отметить, что строго математически должны использоваться именно самосопряженные операторы, поскольку существуют случаи, когда эрмитовы операторы имеют комплексные собственные значения. Так, автоматически сужается тип преобразований подобия, поскольку он должен сохранять эрмитовость, поэтому преобразование должно осуществляться с использованием унитарных матриц:

$$F \longrightarrow F' = U^+ F U , \quad (3.6)$$

где  $U$  - унитарная матрица:

$$U^+ U = 1 . \quad (3.7)$$

Эрмитовы и унитарные операторы - это главный набор операторов, который будет использоваться в дальнейшем.

Рассмотрим теперь реальный физический эксперимент, связанный с измерениями. Физика - это не просто измерения, это установление закономерностей между различными величинами. Так, например, в результате эксперимента устанавливается взаимосвязь между измеряемой величиной и заданными условиями. Аналогично и для квантово-механической теории измерений. Введем теперь одну дополнительную величину - величину с чисто дискретным невырожденным спектром (ВЧДНС). Каждому СЗ этой величины соответствует один собственный вектор (СВ). Пусть  $F$  - ВЧДНС, которому в гильбертовом пространстве соответствует СВ  $u_l$  и СЗ  $f_l$ :

$$F|u_l\rangle = f_l|u_l\rangle . \quad (3.8)$$

Будем использовать выбранное СЗ  $f_l$  в качестве исходных данных процедуры измерения, т. е. поставим эксперимент, в котором ВЧДНС принимает точное значение. Это означает, что дисперсия  $D_F = 0$ . Проверить это можно следующим образом:

$$F^2|u_l\rangle = f_l^2|u_l\rangle \longrightarrow D_F = \langle u_l|F^2|u_l\rangle - (\langle u_l|F|u_l\rangle)^2 . \quad (3.9)$$

После того, как была задана величина  $F$ , можно применить следующий базовый принцип: измерение любой другой величины  $T$ , которой соответствует эрмитов оператор ( $T = T^+$ ), в общем случае дает ответ в виде среднего значения

$$\bar{T} = \langle u_l | T | u_l \rangle , \quad (3.10)$$

где  $\bar{T}$  - диагональный элемент матрицы оператора  $T$  в базисе собственных векторов исходной величины  $F$ .

Предположим, что в результате набора статистики дисперсия величины  $T$  тоже оказывается равной нулю, тогда по определению дисперсии

$$D_l(T) = \langle u_l | (T - \bar{T})^2 | u_l \rangle . \quad (3.11)$$

**Лемма 3.1.** *Если величина  $T$  строится как  $T = W^+ W$ , то она эрмитова, причем  $W$  само по себе не эрмитово.*

Величина  $T = W^+ W$  по построению очень похожа на квадрат модуля комплексного числа

$$z^* z = |z|^2 \geq 0 . \quad (3.12)$$

Тогда для величины  $T$ , которая будет являться неотрицательной, будет выполняться условие

$$\langle u | T | u \rangle \geq 0 , \quad (3.13)$$

где

$$\langle u | T | u \rangle = \langle u | W^+ W | u \rangle = \sum_n \langle u | W^+ | e_n \rangle \langle e_n | W | u \rangle = \sum_n |\langle e_n | W | u \rangle|^2 \geq 0 . \quad (3.14)$$

Выражение  $\langle u | T | u \rangle = 0$  тогда и только тогда, когда  $W | u \rangle = 0$  (все матричные элементы равны нулю).

Вернемся теперь к дисперсии оператора  $T$ :

$$D_l(T) = \langle u_l | (T - \bar{T})^2 | u_l \rangle = 0 \longrightarrow (T - \bar{T})^2 | u_l \rangle = 0 , \quad (3.15)$$

откуда следует, что  $\bar{T}$  - СЗ оператора  $T$ , а СВ  $u_l$  является СВ и для  $T$ :

$$\begin{aligned} T | u_l \rangle &= \bar{T} | u_l \rangle , \\ T | u_l \rangle &= t_l | u_l \rangle . \end{aligned} \quad (3.16)$$

Далее сделаем более сильное утверждение:

**Утверждение 3.1.** В результате проведения экспериментов для определения всех возможных значений  $f_l$  из спектра исходной величины  $F$ , для величины  $T$  будет всегда наблюдаться нулевая дисперсия. Тогда величина  $T$  будет иметь тот же самый набор СВ, что и  $F$ . Это означает, что  $T$  в базисе СВ  $u_l$  является диагональной (так же, как и сама величина  $F$ ):

$$\langle u_l | T | u_{l'} \rangle = t_l \delta_{ll'} . \quad (3.17)$$

Две диагональных величины коммутируют:

$$[T, F] = 0 . \quad (3.18)$$

Построим теперь график, на котором по оси  $x$  будут откладываться СВ величины  $F$ , которым будут соответствовать различные СВ, а по оси  $y$  - различные СВ величины  $T$ , при этом одному и тому же значению  $t$  могут соответствовать различные  $f$ .

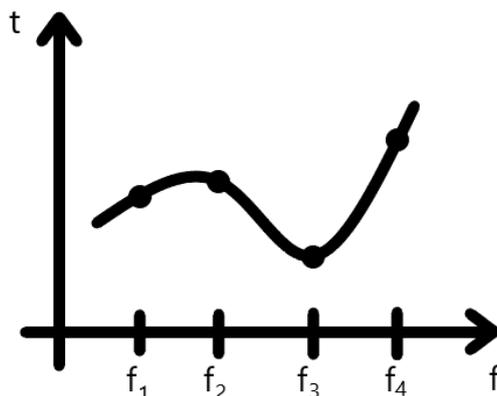


Рис. 3.1. График зависимости  $t$  от  $f$

Поскольку величина  $F$  является ВЧДНС, величина  $T$  может быть записана как функция от  $F$ . Таким образом, нет особенной необходимости задания величины  $T$ , поскольку она автоматически принимает абсолютно точные значения, так как является функцией от  $F$ .

## Повторение пройденного

**Упражнение 3.1.** Провести диагонализацию  $n$ -мерной эрмитовой ( $A = A^+$ ) конечной матрицы.

Термин диагонализация означает приведение матрицы к диагональному виду и нахождение ее собственных значений. Из курса линейной алгебры известно, что с помощью унитарного поворота любую эрмитову матрицу размерности  $n \times n$  можно привести в диагональную форму

$$A \longrightarrow A' = U^\dagger A U . \quad (3.19)$$

Так, матрица  $A'_{nm}$  будет иметь диагональный вид с собственными значениями  $a_n$ , такими, что

$$A'_{nm} = a_n \delta_{nm} . \quad (3.20)$$

Свойства унитарного преобразования заключаются в том, что унитарная матрица  $U$ , диагоналирующая матрицу  $A$ , состоит из столбцов, которые являются собственными векторами исходной матрицы  $A$ . Из чего это следует? Запишем матрицу  $U$  через совокупность ее столбцов, где каждый столбец представляет собой кет-вектор:

$$U = (|u_1\rangle \dots |u_n\rangle \dots |u_N\rangle) , \quad (3.21)$$

где  $N$ -число строк и столбцов матрицы. Перепишем выражение (3.19) следующим образом

$$U A' = A U . \quad (3.22)$$

Далее в левой и правой частях уравнения (3.22) раскроем структуру матрицы  $U$  по столбцам:

$$(a_1|u_1\rangle \dots a_n|u_n\rangle \dots a_N|u_N\rangle) = (A|u_1\rangle \dots A|u_n\rangle \dots A|u_N\rangle) . \quad (3.23)$$

В левой части (3.22) матрица  $U$  была умножена на матрицу  $A'$ , у которой столбцы представляют собой нули и единицы, стоящей на  $n$ -ой строке, в результате чего при умножении каждый столбец  $U$  умножается на собственное значение  $a_n$ . Именно отсюда и следует, что

$$A|u_n\rangle = a_n|u_n\rangle . \quad (3.24)$$

Теперь перейдем к более детальному рассмотрению диагональной матрицы  $A'$ . Запишем  $A'$  в следующем виде:

$$A' = a_1 \begin{pmatrix} 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 \end{pmatrix} + \dots + a_N \begin{pmatrix} 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 1 \end{pmatrix} . \quad (3.25)$$

Каждый из блоков с единицей является проектором на соответствующий вектор. Удобно записывать проекторы в вариационном виде. Для этого введем столбцы  $|1_n\rangle$ , такие, что

$$|1_n\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1_n \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (3.26)$$

тогда в терминах данных столбцов можно переписать матрицу  $A'$  в следующем виде

$$A' = a_1 |1_n\rangle \langle 1_n| + \dots + a_N |1_N\rangle \langle 1_N|. \quad (3.27)$$

Тогда восстановим исходную матрицу  $A$  с учетом данного разложения  $A'$

$$A = U A' U^+ = a_n |u_n\rangle \langle u_n|. \quad (3.28)$$

В силу того, что единичные столбцы с очевидностью обладают следующим свойством:  $\langle 1_n | 1_m \rangle = \delta_{nm}$ , в силу унитарности преобразования столбцы  $|u_n\rangle$  будут удовлетворять такому же условию

$$\langle u_n | u_m \rangle = \delta_{nm}. \quad (3.29)$$

Таким образом, нам удалось представить  $A$  в виде проекторов

$$\Pi_n = |u_n\rangle \langle u_n|; \quad \Pi_n \Pi_m = \Pi_n \delta_{nm}. \quad (3.30)$$

Тогда запишем окончательное разложение матрицы по соответствующим проекциям, являющееся так называемой стартовой позицией:

$$A = \sum_n a_n \Pi_n. \quad (3.31)$$

Далее если мы будем использовать свойства Гильбертова пространства, то имеет место следующая теорема:

**Теорема 3.1.** *Любой самосопряженный оператор в Гильбертовом пространстве может быть получен как предел обрезанного Гильбертова пространства до подпространства, где он может быть сведен к эрмитовой матрице. Такой предел существует и определяет некоторый самосопряженный оператор во всем Гильбертовом пространстве.*

Данная теорема показывает то, что самосопряженный оператор обязательно имеет вещественное СЗ в силу того, что они получаются как сходящийся предел последовательности конечных эрмитовых матриц, которые всегда характеризуются вещественными СЗ. Более того, физическим величинам по исходному постулату об измерениях должны быть сопоставлены именно самосопряженные операторы, в то время как эрмитовы операторы представляют собой более широкий „класс“. Эрмитовы операторы могут не быть самосопряженными. Различие данных операторов состоит в областях определения и в области значений. Так, у самосопряженного оператора по определению область определений и область значений совпадает с Гильбертовым пространством, в случае же эрмитовых операторов это не так. Известно, что существуют операторы, оказывающиеся эрмитовыми, но не самосопряженными, и характеризующиеся комплексными СЗ.

Отметим также и теорему Гильберта:

**Теорема 3.2.** *У каждого эрмитового оператора всегда существует самосопряженное расширение, то есть всегда можно доопределить эрмитов оператор так, чтобы он стал самосопряженным и таким образом избежать комплексных СЗ.*

И хотя данная теорема утверждает, что такое расширение всегда существует, однако она не фиксирует расширение однозначно. Так, самосопряженных расширений бесконечно много, в связи с чем возникают проблемы с конкретным выбором. Примером несамосопряженности является одномерный атом водорода. Кулоновский потенциал находится в одном измерении и приводит к эрмитовому, но самосопряженному гамильтониану в силу наличия сингулярности, с которой не справляется краевая задача. Для решения этой проблемы необходимо думать над модификацией потенциала.

Тема одномерного атома водорода возникла в литературе уже в конце 50 годов 20-ого века, поскольку она имеет множество приложений. Например, если поместить атом в сильное однородное магнитное поле, то это поле сожмет электронные орбиты в плоскости, ортогональной направлению поля. Чем сильнее поле, тем больше радиус уровней Ландау, тем более ограничен атомный электрон в своем движении в атомной плоскости, однако электрон можно зажать так, что задача станет эффективно одномерной. В силу того, что зависимость сжатия от величины поля является логарифмической, в результате чего необходимо очень сильное поле, в данный момент не достижимое для нас, чтобы так сжать электрон, чтобы масштаб его координаты

в ортогональной магнитному полю плоскости был порядка комптоновской длины.

Запишем общую структуру самосопряженного оператора при разложении по проекторам:

$$A = \sum_n a_n \Pi_n . \quad (3.32)$$

От формулы (3.31) данное выражение будет отличаться неограниченным суммированием. Так, в случае конечномерных матриц спектр СЗ обязательно будет дискретным (все  $a_n$  -различны), если же работать с предельным случаем, то может возникать эффект под названием сгущение. В этом случае сумма (3.32) может либо разбиваться, либо дополняться и непрерывной частью:

$$A = \sum_n a_n \Pi_n + \int da \Pi_a , \quad (3.33)$$

причем для интегральной части характерно следующее условие непрерывности спектра

$$\Pi_a \Pi_b = \Pi_a \delta(a - b) . \quad (3.34)$$

Выражение (3.33) представляет собой общую схему, конкретным же примером может являться гамильтониан с кулоновским потенциалом, где дискретные уровни будут находится при отрицательных  $n$ , а непрерывный спектр будет начинаться с нулевого значения.

Любые вектора дискретного спектра будут ортогональны векторам непрерывного:

$$\langle u_n | a \rangle = 0 . \quad (3.35)$$

Тем не менее, с точки зрения СЗ может возникать эффект наложения. Как уже было сказано, в большинстве задач дискретный спектр располагается снизу (если он есть), однако и существуют и такие примеры, в которых дискретный уровень оказывается вложен в непрерывный спектр. Так, можно отметить пример фон Нэймана-Вигнера с потенциалом, который убывает на бесконечности и осциллирует:

$$U(r) \longrightarrow A \frac{\sin \lambda r}{r} . \quad (3.36)$$

За счет осцилляций потенциал обладает свойствами удержания, в результате чего возникает дискретный уровень, хотя ямы нет.

Проверим следующее утверждение:

**Утверждение 3.2.** Если два оператора  $F_1$  и  $F_2$  являются самосопряженными и коммутируют, то они могут быть одновременно приведены в диагональный вид с помощью одного и того же набора параметров.

Зададим набор собственных векторов оператора  $F_1$ :

$$\Phi_1|u_n\rangle = f_n^{(1)}|u_n\rangle; \quad (\langle u_n|u_m\rangle = \delta_{nm}) . \quad (3.37)$$

В базисе векторов  $|u_n\rangle$  вычислим коммутатор  $[F_1, F_2]$ :

$$\langle u_n|[F_1, F_2]|u_m\rangle = (f_n^{(1)} - f_m^{(1)}) \langle u_n|F_2|u_m\rangle = 0 . \quad (3.38)$$

Последнее равенство нулю объясняется тем, что изначально в условии было сказано, что операторы коммутируют. Если  $f_n^{(1)} \neq f_m^{(1)}$ , то равен нулю должен быть матричный элемент. В данных условиях он не равен нулю только когда  $f_n^{(1)} = f_m^{(1)}$ , и если у  $F_1$  спектр не вырожденный, то оператор  $F_1$  в данном базисе автоматически имеет диагональный вид. Однако наш случай не предполагает невырожденный спектр. Пусть  $F_1$  имеет вырожденное СЗ

$$F_1|u_{k\alpha}\rangle = f_k^{(1)}|u_{k\alpha}\rangle , \quad (3.39)$$

где  $\alpha$  нумерует СВ подпространства вырождения.

Тогда для следующих матричных элементов отсутствует условие, что матричный элемент должен равняться нулю, потому что соответствующие СЗ будут равны.

$$\langle u_{k\alpha}|F_2|u_{k\beta}\rangle = D_{\alpha\beta} . \quad (3.40)$$

В результате мы получаем нетривиальную конечномерную эрмитову матрицу, которую дополнительно диагоналируем, поворачивая вектора унитарным способом (то есть „крутим“ базис подпространства вырождения). Тогда и  $F_2$  в подкрученном базисе будет полностью диагонально.

## Введение в теорию измерений

Прделаем следующий базовый эксперимент: зададим точное значение некоторой величины с чисто дискретным невырожденным спектром, устроенным аналогично разобранным выше. В условиях, когда величина  $F$  имеет значение  $f_n$ , которому на уровне операторной формулировки соответствует свой СВ.

$$F|u_n\rangle = f_n|u_n\rangle . \quad (3.41)$$

Для любой другой величины можно записать ответ в виде среднего

$$\bar{T} = \langle u_n | T | u_n \rangle . \quad (3.42)$$

Если  $T$  и  $F$  коммутируют, то можно получить одно точное значение из спектра с нулевой дисперсией. Это также можно понять из того, что  $F$  в нашем случае оператор с невырожденным спектром, и  $[T, F] = 0$ , следовательно,  $T$  имеет разложение по тем же проекторам. Таким образом, имеем дело с матричным элементом по некоторому СВ оператора, который выдаст СЗ  $t_n$  с нулевой дисперсией.

Введем величину  $G$  с чисто дискретным невырожденным спектром, обладающую другим набором СВ, и такую, что  $[G, F] \neq 0$ .

Тогда среднее значение величины  $G$  может быть записано в виде разложения по проекторам:

$$\bar{G} = \langle u_n | \left( \sum_m g_m |v_m\rangle \langle v_m| \right) | u_n \rangle . \quad (3.43)$$

В Гильбертовом пространстве матричный элемент и сумма разложения по проекторам перестановочны, тогда

$$\bar{G} = \sum_m g_m |\langle u_n | v_m \rangle|^2 . \quad (3.44)$$

Величина  $G$  при измерении может принимать одно из спектра СЗ оператора, в результате чего выражение (3.44) может было трактовано как сумма произведения СЗ  $g_m$  оператора  $G$  на вероятность измерения данного СЗ:

$$P_{nm} = |\langle u_n | v_m \rangle|^2 . \quad (3.45)$$

Проверим выполнение условия равенства единице суммы вероятностей  $P_{nm}$ :

$$\sum_m P_{nm} = \sum_m \langle u_n | v_m \rangle \langle v_m | u_n \rangle = \langle u_n | \left( \sum_m |v_m\rangle \langle v_m| \right) | u_n \rangle = \langle u_n | u_n \rangle = 1 . \quad (3.46)$$

Зададим теперь в эксперименте точное значение величины  $G$  с СЗ  $g_m$ , фиксируя тем самым СВ  $v_m$ :

$$G |v_m\rangle = g_m |v_m\rangle , \quad (3.47)$$

тогда среднее значение величины  $F$  с использованием разложения по проекторам можно записать, как

$$\bar{F} = \langle v_m | F | v_m \rangle = \sum_n f_n |\langle v_m | u_n \rangle|^2 , \quad (3.48)$$

где  $|\langle v_m | u_n \rangle|^2$  - вероятность измерить величину  $f_n$  при условии, что величина  $G$  является фиксированной.

Легко можно убедиться в том, что сумма вероятностей, определенных выражением (3.48), равняется единице. Очевидно также, что вероятности определенные выражениями (3.44) и (3.48) совпадают.

Далее введем термин чистого состояния.

**Определение 3.1.** *Чистое состояние - это состояние, в котором величина с чисто дискретным невырожденным спектром принимает точное значение. Измерение всех величин, которые на уровне операторов коммутируют с данной (то есть которые могут быть представлены как функции от точной величины), является излишним, в то время как измерение любой другой величины, коммутатор которой с точно заданной величиной отличен от нуля, имеет вероятностный характер.*

В таком случае вероятности, получаемые для двух не коммутирующих величин, в общем случае могут быть записаны в виде

$$P_{12} = |\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle|^2 . \quad (3.49)$$

Формула (3.49) симметрична относительно перестановок местами  $\psi_1$  и  $\psi_2$ . Условие, при котором сумма вероятностей нормирована на единицу:

$$\langle \psi_1 | \psi_1 \rangle = \langle \psi_2 | \psi_2 \rangle = 1 . \quad (3.50)$$

Количество величин с чисто дискретным невырожденным спектром ограничено. Например, одним из самых ярких примеров, в которых фигурируют такие величины, является одномерный гармонический осциллятор, а также любая одномерная потенциальная яма с бесконечно высокими стенками.

Сымитируем теперь действие величины с чисто дискретным невырожденным спектром так, чтобы вектор гильбертова пространства был однозначно зафиксирован. Для этого необходимо задать полный набор наблюдаемых, то есть конечный набор самосопряженных операторов, коммутирующих между собой.

$$\{F_1, \dots, F_s\} = \text{ПНН}; \quad [F_i, F_j] = 0 . \quad (3.51)$$

$F_1$  не обязательно должна быть величиной с чисто дискретным невырожденным спектром. В случае если  $F_1$  является таковой, только данная величина будет включена в полный набор наблюдаемых. Если же  $F_1$  не является величиной с чисто дискретным невырожденным спектром, то у этой величины есть подпространство вырождения. Тогда к  $F_1$  необходимо добавить величину  $F_2$ . Они могут быть одновременно

приведены к диагональному виду. В таком случае, каждому СВ  $F_1$  и  $F_2$  будет соответствовать набор СВ  $f_l^{(1)}$  и  $f_l^{(2)}$ :

$$F_1, F_2 \longrightarrow |u_l\rangle \longrightarrow \left( f_l^{(1)}, f_l^{(2)} \right). \quad (3.52)$$

Если  $F_2$  не хватит для описания системы, необходимо добавить величину  $F_3$  и так далее до тех пор, пока не будет выполнено свойство уникальности. Полный набор наблюдаемых всегда конечный, поскольку подпространство вырождения всегда конечно. Бесконечное пространство вырождения может быть лишь в том случае, если оператор кратен единичному оператору.

**Пример 3.1.** Кулоновское состояние электрона в атоме - это состояние, которое фиксируется квантовыми числами  $|n, l, m_l, s, m_s\rangle$ . Символу  $n$  (главному квантовому числу) соответствует СВ гамильтониана  $E_n$ , при этом система имеет степень вырождения -  $2n^2$ . Для снятия вырождения необходимо дополнительно добавить величины  $l, s, s_z$  и  $l_z$ . Можно проверить, что все перечисленные величины коммутируют между собой и задают полный набор наблюдаемых, который полностью фиксирует состояние атомного электрона в виде соответствующей волновой функции, являющейся вектором чистого состояния.

Далее ответим на вопрос о количестве чистых состояний. Оказывается, что каждый нормированный вектор Гильбертова пространства может быть интерпретирован как вектор чистого состояния.

### Процесс ортогонализации Грамма-Шмидта

Пусть изначально задано  $n$  линейно независимых векторов  $|v_1\rangle, \dots, |v_n\rangle, \dots$ , которые не обязательно должны образовывать в Гильбертовом пространстве всюду плотное множество быть ортогональными. Тогда для ортогонализации системы векторов необходимо выполнить следующие операции:

$$|e_1\rangle = \frac{|v_1\rangle}{\|v_1\|}, \quad (3.53)$$

$$|\omega_2\rangle = |v_2\rangle - |e_1\rangle\langle e_1|v_2\rangle, \quad (3.54)$$

где вектор  $\omega_2$  по построению оказывается ортогональным вектору  $e_1$ :

$$\langle e_1|\omega_2\rangle = 0, \quad (3.55)$$

$$|e_2\rangle = \frac{|\omega_2\rangle}{\|\omega_2\|}. \quad (3.56)$$

Остальные вектора строятся по аналогичному принципу. Таким образом, итогом процедуры ортогонализации Грамма-Шмидта является построенный базис в Гильбертовом пространстве.

В этом базисе построим величину  $T$ , которая будет определяться следующей формулой:

$$T = \sum_l t_l |e_l\rangle\langle e_l| = \sum_l t_l \Pi_l. \quad (3.57)$$

$T$  является самосопряженным оператором, первому СЗ  $t_1$  которого будет соответствовать вектор  $v_1$ , который может быть взят в виде любого вектора Гильбертова пространства.

Поскольку Гильбертово пространство линейно, то линейная комбинация двух чистых состояний также является чистым состоянием (принцип суперпозиции):

$$|\psi\rangle = c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle. \quad (3.58)$$

**Пример 3.2.** Вектор состояния орбитального электрона с фиксированными набором наблюдаемых  $|n, l, j, m_j\rangle$  является чистым состоянием. Данный вектор может быть разложен по двум другим чистым состояниям с другим полным набором наблюдаемых  $|n, l, m_l, s, m_s\rangle$ :

$$\begin{aligned} |n, l, j, m_j\rangle = & \sqrt{\frac{l+m_j+1/2}{2l+1}} |n, l, m_l = m_j - \frac{1}{2}, m_s = \frac{1}{2}\rangle + \\ & + \sqrt{\frac{l-m_j+1/2}{2l+1}} |n, l, m_l = m_j + \frac{1}{2}, m_s = -\frac{1}{2}\rangle. \end{aligned} \quad (3.59)$$

### Копенгагенская схема измерения

**Пример 3.3.** Рассмотрим траекторию на фазовой плоскости, начало которой задается точкой  $A$  (считаем при этом, что начальных данных достаточно для задания траектории), а в точке  $B$  производится измерение. В случае если взаимодействие измерительного прибора с системой мало, траектория останется практически неизменной. В противном же случае траектория изменится, при этом в точке  $B$  за счет измерения будут заданы новые начальные данные для системы, искажающие исходные начальные данные.

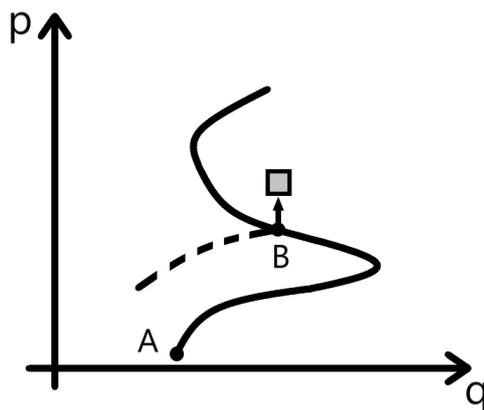


Рис. 3.2. Траектория на фазовой плоскости

### Сканирующий электронный микроскоп

Рассмотрим на примере сканирующего электронного микроскопа систему, в которой измерительный прибор вместе с измерительной системой образует единое целое.

**Пример 3.4.** Пусть есть некоторая поверхность, имеющая неровности на масштабах атомов (рис. 3.3). Микроскоп имеет атомную иглу, построенную по принципу последнего атома, для того чтобы на её конце обладать напряженностью  $10^8$ , что по порядку величины сравнимо с атомной напряженностью. С использованием классического прибора измеряются значения туннельного тока. Этот ток сильно зависит от расстояния до поверхности материала, поскольку при туннельном эффекте зависимость носит экспоненциально убывающий характер с увеличением расстояния:

$$t \sim \exp \left[ -\frac{S_{tunn}}{\hbar} \right], \quad (3.60)$$

$$S_{tunn} = \int \sqrt{2m(V - E)} dx. \quad (3.61)$$

Когда экспериментатор передвигает иглу по поверхности материала, любая его неоднородность приводит к резкому изменению тока на приборе. В данном случае очень важно учитывать классическую часть прибора, так как на конце иглы необходимо учитывать один атом, в вышележащем же слое - десятки атомов, далее - сотни, тысячи и т.д. При переходе к сотням тысяч атомов систему оптимально рассматривать систему в рамках классического подхода. Стоит также учитывать, что система является открытой и обязательно имеет блок питания или подключенную в розетку вилку. Тем самым для описания такой системы в тер-

минах квантовой теории в лучшем случае можно использовать матрицу плотности, однако ее размерность будет таковой, что ни одна вычислительная машина не сможет справиться с таким объемом данных. Поэтому самым оптимальным вариантом в процессе измерения будет являться регулирование высоты иглы над поверхностью с помощью пьезопривода так, что ток всегда будет оставаться постоянным. Таким образом, в работе можно использовать только классическое описание.

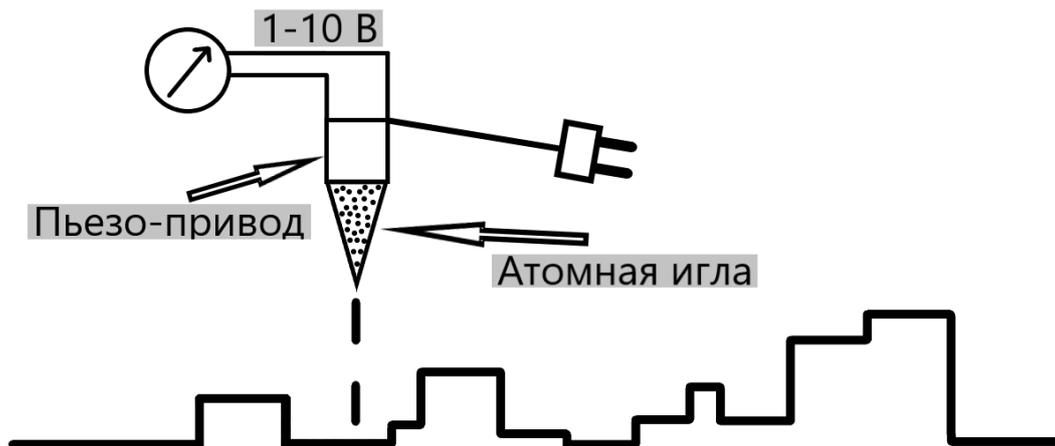


Рис. 3.3. Схема сканирующего электронного микроскопа

Стоит понимать, что большинство вопросов, касающихся квантовых измерений, возникают уже на классическом уровне. Так, если на данном уровне учитывать, что изготовление системы с нужным набором начальных данных возможно и задать предполагаемую траекторию, то в случае проведения измерения в какой-либо другой точке траектории, результат будет таким же, как и ожидалось. В квантовом же случае аналогично: если задать чистое состояние тем или иным способом и не испортить его в процессе эволюции, результат измерения получится таким же, как и предсказывает теория.

## Непрерывный спектр

Если оператор  $F$  имеет непрерывный спектр, то в его спектральном разложении присутствует дополнительное слагаемое с интегралом по обобщенному базису:

$$F = \sum_n f_n |u_n\rangle\langle u_n| + \int_a^b f |f\rangle\langle f| df . \quad (3.62)$$

**Пример 3.5.** Если взять координату и импульс в матричном виде и разложить их по осцилляторному базису, то с ростом размерности матрицы дискретный спектр, который в силу конечности матрицы изначально был дискретен, будет расширяться по диапазону и уплотняться, в пределе переходя в случай непрерывного спектра.

Векторы  $f$  не принадлежат Гильбертову пространству и нормированы на дельта-функцию:

$$\langle f|f'\rangle = \delta(f - f') , \quad (3.63)$$

при этом эти вектора обязательно ортогональны векторам дискретного спектра:

$$\langle u_n|f\rangle = 0 . \quad (3.64)$$

Вектора  $f$  являются СВ оператора  $f$ , но не могут образовывать чистое состояние, поскольку  $f$  в случае непрерывного спектра занимает интервал  $(a, b)$  (рис. 3.4), и в таком спектре невозможно „выколоть“ одну фиксированную точку. Также всегда необходимо учитывать, что у измерительных приборов есть конечная разрешающая способность.



Рис. 3.4. Интервал, занимаемый величиной  $f$

Если рассматривать непрерывный спектр как предельный случай дискретного (пример 3.5), то величины с непрерывным спектром являются элементами базиса, и выполняется следующее равенство:

$$1 = \sum_n |u_n\rangle\langle u_n| + \int_a^b |f\rangle\langle f| df . \quad (3.65)$$

Представим вектор  $\psi$  в виде разложения по базису с учетом наличия непрерывной части, тогда

$$|\psi\rangle = \sum_n a_n |u_n\rangle + \int_a^b \psi(f) |f\rangle df, \quad (3.66)$$

где  $a_n = \langle u_n | \psi \rangle$ ,  $\psi(f) = \langle f | \psi \rangle$ .

Далее рассмотрим случай, когда исходное чистое состояние принадлежит только непрерывному спектру:

$$|\psi\rangle = \int_a^b \psi(f) |f\rangle df. \quad (3.67)$$

Для непрерывного спектра сохраняется утверждение о том, что среднее значение величины  $F$  - это диагональный матричный элемент вида

$$\langle \psi | F | \psi \rangle = \int_a^b \int_a^b \psi^*(f) \psi(f) \langle f | F | f' \rangle df df' = \int_a^b f |\psi(f)|^2 df. \quad (3.68)$$

Величина  $|\psi(f)|^2$  задает плотность распределения по различным значениям  $f$ .

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1 = \int |\psi(f)|^2 df. \quad (3.69)$$

Плотность распределения может быть локализована на интервале различной ширины (рис. 3.5) и определяется исходно изготовленным состоянием.

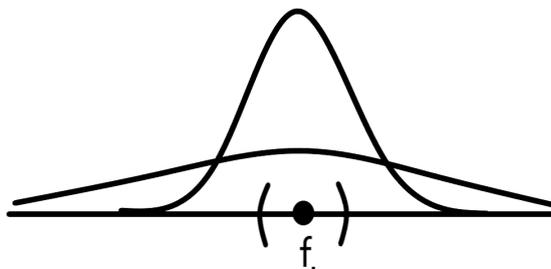


Рис. 3.5. Плотность распределения величины  $f$

Для непрерывного спектра выполняются все соотношения, сформулированные для случая дискретного спектра. Пусть  $A$  и  $B$  - это самосопряженные величины, коммутатор которых отличен от нуля:

$$[A, B] = iC \longrightarrow C = C^+. \quad (3.70)$$

Теперь переобозначим матричные элементы:

$$\langle \psi | A | \psi \rangle = \overline{A_\psi} \langle \psi | B | \psi \rangle = \overline{B_\psi} , \quad (3.71)$$

где  $\psi$  - вектор чистого состояния.

Произведем замену переменных:

$$A_1 = A - \overline{A_\psi}; \quad B_1 = B - \overline{B_\psi} . \quad (3.72)$$

Тогда исходный коммутатор (3.70) может быть переписан в следующем виде:

$$[A_1, B_1] = i C . \quad (3.73)$$

Построим операторы  $M$  и  $M^+$ :

$$M = A_1 + i \lambda B_1 \quad M^+ = A_1 - i \lambda B_1 . \quad (3.74)$$

Операторы, определенные выражением (3.73), не являются эрмитовыми. С их помощью проведем построение эрмитового оператора  $T = M^+ M$ . По свойству неотрицательности будет выполнено соотношение  $\langle \psi | T | \psi \rangle \geq 0$ . Распишем оператор  $T$ , раскрыв операторы  $M$  и  $M^+$ :

$$T = (A_1 - i \lambda B_1) (A_1 + i \lambda B_1) = A_1^2 + \lambda^2 B_1^2 + i \lambda [A_1, B_1] = A_1^2 + \lambda^2 B_1^2 - \lambda C . \quad (3.75)$$

Тогда матричный элемент оператора  $T$  по вектору чистого состояния  $\psi$  приводит к неравенству:

$$D_\psi(A) + \lambda^2 D_\psi(B) - \lambda \overline{C_\psi} \geq 0 , \quad (3.76)$$

где  $D_\psi(A) = \langle \psi | A_1^2 | \psi \rangle$ ,  $D_\psi(B) = \langle \psi | B_1^2 | \psi \rangle$ ,  $\overline{C_\psi} = \langle \psi | C | \psi \rangle$ .

Преобразуем (3.76) к квадратному уравнению для нахождения значений  $\lambda$ :

$$\lambda^2 D_\psi(B) - \lambda \overline{C_\psi} + D_\psi(A) \geq 0 . \quad (3.77)$$

Дискриминант квадратного уравнения должен быть меньше либо равен нулю для удовлетворения условию неравенства

$$D \leq 0 \longrightarrow C_\psi^2 - 4 D_\psi(A) D_\psi(B) \leq 0 . \quad (3.78)$$

С помощью преобразования (3.78) получим принцип неопределенности Гейзенберга для дисперсий:

$$D_\psi(A) * D_\psi(B) \geq \frac{C_\psi^2}{4} . \quad (3.79)$$

## Лекция 4. Эволюция во времени и законы сохранения в квантовой механике

### Временная эволюция квантовых систем

Для изучения вопроса эволюции величин во времени рассмотрим два следующих случая: консервативная система, в которой отсутствуют внешние воздействия, а гамильтониан при этом является интегралом движения и система, в которой присутствуют внешние воздействия, в частности, внешние поля, благодаря чему гамильтониан может иметь явную зависимость от времени.

Перейдем к рассмотрению первого случая. Запишем гамильтониан консервативной системы в виде:

$$H = \text{Const} = H(q(t), p(t), s_i(t)) . \quad (4.1)$$

Изменения величин  $q(t)$ ,  $p(t)$ ,  $s_i(t)$  подчиняются уравнению Гейзенберга. Рассмотрим эволюцию величины  $F$  во времени. Для удобства выбираем начальный момент времени за нуль. С точки зрения коммутационных соотношений все моменты времени являются равноправными, и для любого выбранного  $t$  коммутационные соотношения сохраняются. Тогда закон эволюции величины  $F$  может быть записан в виде

$$t = 0 : F(t) = e^{\frac{i}{\hbar}Ht} F(0) e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} . \quad (4.2)$$

Введем теперь оператор эволюции  $U(t)$ :

$$U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} , \quad (4.3)$$

тогда соотношение (4.2) может быть приведено к виду:

$$F(t) = U^+(t) F(0) U(t) . \quad (4.4)$$

Очевидно, что действие оператора эволюции на вектор не меняет его нормы, тогда для него выполняется

$$U^+ U = 1 . \quad (4.5)$$

Далее переведем задачу на язык изменения вектора состояния, т. е. перейдем к шредингеровскому представлению.

## Шредингеровское представление

Среднее значение любой физической величины в чистом состоянии - это диагональный матричный элемент оператора, величина которого определяется по фиксированному, по условиям задачи, вектору чистого состояния

$$\overline{F}_\psi = \langle \psi | F | \psi \rangle . \quad (4.6)$$

Далее подставим в (4.6) оператор  $F$  как функцию времени, тогда выражение для среднего преобразуется следующим образом:

$$\overline{F}(t) = \langle \psi | F(t) | \psi \rangle = \langle \psi | U^\dagger(t) F(0) U(t) | \psi \rangle = \langle \psi(t) | F(0) | \psi(t) \rangle . \quad (4.7)$$

Из выражения (4.7) видно, что теперь зависимость от времени содержится в векторе состояния, который может быть представлен в виде

$$|\psi(t)\rangle = U(t) |\psi(0)\rangle , \quad (4.8)$$

при этом при эволюции вектора состояния во времени в силу унитарности  $U$  норма не изменяется:

$$\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \langle \psi(0) | \psi(0) \rangle . \quad (4.9)$$

Далее продифференцируем  $|\psi(t)\rangle$  по времени, в результате чего получим

$$\frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar} H |\psi(t)\rangle . \quad (4.10)$$

Перенесем коэффициент, стоящий перед гамильтонианом, в левую часть и получим известное дифференциальное уравнение для консервативного случая:

$$i \hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = H |\psi(t)\rangle . \quad (4.11)$$

Далее рассмотрим неконсервативную систему, характеризующейся наличием явной зависимости гамильтониана от времени.

$$H(t) = H(q(t), p(t), \vec{s}_i(t), t) , \quad (4.12)$$

тогда в общем случае гамильтонианы не будут коммутировать между собой в разные моменты времени:

$$[H(t_1), H(t_2)] \neq 0 . \quad (4.13)$$

Выберем два момента времени:  $t = 0$  и  $t \neq 0$ . Разобьем полученный интервал  $(0, t)$  на малые отрезки. В таком случае

$$\sum_{i=1}^n \Delta t_i = t. \quad (4.14)$$

Стоит отметить, что отрезки разбиения необязательно являются одинаковыми. Единственное требование для этих отрезков - это стремление их длины к нулю при  $n \rightarrow \infty$ .

На первом временном шаге  $\Delta t_1$  гамильтониан можно считать постоянным в силу малости  $\Delta t_1$ . Тогда ответ для  $F(\Delta t_1)$  можно представить в виде, аналогичном (4.2):

$$F(\Delta t_1) = e^{\frac{i}{\hbar} \Delta t_1 H(\Delta t_1)} F(0) e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t_1 H(\Delta t_1)}. \quad (4.15)$$

Стоит отметить, что в качестве аргумента гамильтониана в выражении (4.15) может выступать любое значение  $t$  из интервала  $(0, t_1)$ , поскольку гамильтониан изменяется пренебрежимо мало по сравнению с главным порядком.

Далее делаем следующий шаг: в качестве аргумента величины  $F$  используем сумму  $\Delta t_1$  и  $\Delta t_2$ . При этом гамильтониан уже нельзя считать таким же как в случае аргумента  $\Delta t_1$  величины  $F$ . Тогда

$$F(\Delta t_1 + \Delta t_2) = e^{\frac{i}{\hbar} \Delta t_2 H(\Delta t_1 + \Delta t_2)} F(\Delta t_1) e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t_2 H(\Delta t_1 + \Delta t_2)}. \quad (4.16)$$

Далее перейдем к суммированию  $n$ -ого числа временных интервалов и получим выражение для оператора  $U(t)$ :

$$U(t) = \prod_{i=1}^n \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \Delta t_i H(\Delta t_1 + \dots + \Delta t_i) \right] = \underset{\rightarrow}{\text{Texp}} \left[ -\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau H(\tau) \right], \quad (4.17)$$

где  $\text{Texp}$  - символ, который обычно вводится при переходе от суммирования к интегрированию (при переходе к пределу  $n \rightarrow \infty$ ).

Таким образом, выражение для оператора  $F(t)$  может быть представлено в виде  $F(t) = U^+(t) F(0) U(t)$ . При этом оператор  $U$  обладает свойствами унитарности. Для него выполняется равенство  $U^+ U = 1$ .

Для того чтобы получить второе свойство оператора  $U$  воспользуемся разбиением интеграла на сумму интегралов:

$$\int_0^t = \int_0^{t_1} + \int_{t_1}^t. \quad (4.18)$$

Тогда из (4.18) следует, что

$$U(t) = U(t_1) U(t_1, t) . \quad (4.19)$$

Можно легко убедиться в том, что равенство (4.19) выполняется и в случае консервативной системы.

В дополнении к уже описанным свойствам оператора  $U$  стоит выделить ещё одно, а именно

$$U(-t) = U^{-1}(t) . \quad (4.20)$$

Как уже было показано ранее, при переходе к шредингеровскому представлению вектор состояния может быть записан в виде:  $|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle$ .

Запишем уравнение эволюции в дифференциальной форме, используя представление Шредингера:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = U(t) H(t) |\psi(0)\rangle = U(t) H(t) U^+(t) U(t) |\psi(0)\rangle . \quad (4.21)$$

Используя выражение (4.8), окончательно получаем, что

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \underbrace{U(t) H(t) U^+(t)}_{H_{\text{шр.}}(t)} |\psi(t)\rangle . \quad (4.22)$$

Далее сформулируем и докажем следующее утверждение:

#### Утверждение 4.1.

$$U(t) H(q(t), p(t), t) U^+(t) = H(q(0), p(0), t) . \quad (4.23)$$

#### Доказательство.

$$\begin{aligned} U(t) H(q(t), p(t), t) U^+(t) &= H(U(t) q(t) U^+(t), U(t) p(t) U^+(t), t) = \\ &= H(q(0), p(0), t) . \end{aligned} \quad (4.24)$$

Покажем выполнение утверждения (4.23) на примере гамильтониана вида:

$$H = \frac{p^2(t)}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} q^2(t) + f(t) q(t) . \quad (4.25)$$

Используем свойство унитарности оператора ( $U^+ U = 1$ ), в результате чего получим, что

$$\begin{aligned} U(t) H(t) U^+(t) &= \frac{1}{2m} U(t) p(t) U^+(t) U(t) p(t) U^+(t) + \dots = \\ &= [p(t) = U^+(t) p(0) U(t), q(t) = \dots] = \frac{p^2(0)}{2m} + \dots . \end{aligned} \quad (4.26)$$

В выражении (4.25) опущены слагаемые с  $q^2(t)$  и  $q(t)$ . Для них схема доказательства аналогична доказательству для  $p^2(t)$ . ■

Обозначим преобразованный гамильтониан как

$$H_{\text{шр.}}(t) = H(q(0), p(0), t) . \quad (4.27)$$

Следовательно, для случая, например, движения частицы во внешнем поле, зависящем от времени, (4.22) может быть переписано в виде

$$i \hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x, t) \right] \psi(x, t) . \quad (4.28)$$

## Законы сохранения

Как правило, ни одна задача квантовой механики не решается без использования законов сохранения, которые имеют очень большое значение для консервативных систем. В случае, когда на систему оказывается внешнее воздействие, могут возникать динамические законы сохранения, которые связаны с типом внешнего воздействия. Так, рассмотрим случай консервативных систем. Важным определением для описания таких систем является определение интеграла движения.

**Определение 4.1.** *Интеграл движения - это физическая величина, оператор которой не зависит от времени.*

При этом важно учитывать, что соответствующий данной величине оператор должен коммутировать с оператором Гамильтона:

$$F(t) = F(0) \iff [F, H] = 0 . \quad (4.29)$$

Из выражения (4.29) следует следующее соотношение:

$$\dot{F}(t) = \frac{i}{\hbar} [H, F] = 0 . \quad (4.30)$$

Как известно из классической физики, большинство законов сохранения так или иначе связаны с определенной группой симметрии, однако помимо этого существуют и динамические симметрии, возникающие в конкретных задачах.

Рассмотрим произвольную группу симметрии. По определению, группа симметрии в квантовой механике - это унитарное и зависящее от набора параметров преобразование, которое не изменяет гамильтониан:

$$S^+(\lambda_1, \dots, \lambda_s) H S(\lambda_1, \dots, \lambda_s) = H . \quad (4.31)$$

В данном случае ограничимся рассмотрением однопараметрической группой, для которой в силу унитарности оператора  $S$  выполняется  $S^+ S = 1$ .

Любой унитарный оператор можно записать в виде:

$$S(\lambda) = e^{i\lambda T}, \quad (4.32)$$

где  $T$  - оператор такой, что для него выполняется  $T = T^+$ .

Для рассматриваемого случая:

$$S^+(\lambda) H S(\lambda) = H. \quad (4.33)$$

Возьмем параметр  $\delta\lambda$  - бесконечно малый параметр, для которого выполняется:

$$\delta\lambda : S^+(\delta\lambda) H S(\delta\lambda) = H. \quad (4.34)$$

Помимо этого, поскольку параметр бесконечно малый, можно разложить экспоненту из выражения (4.32) в ряд в окрестности нуля:

$$S(\delta\lambda) = 1 + i\delta\lambda T + \dots \quad (4.35)$$

Аналогично для оператора  $S^+$ :

$$S^+(\delta\lambda) = 1 - i\delta\lambda T + \dots \quad (4.36)$$

Подставим выражения (4.35) и (4.36) в (4.33), пренебрегая вторым порядком малости по  $\delta\lambda$ :

$$(1 - i\delta\lambda T) H (1 + i\delta\lambda T) = H + i\delta\lambda [H, T]. \quad (4.37)$$

Для того чтобы правая часть выражения (4.37) совпадала с (4.33) необходимо, чтобы выполнялось коммутационное соотношение  $[H, T] = 0$ , что означает, что  $T$  - интеграл движения. В  $s$ -параметрическом случае рассматривается бесконечно-малое приращение по  $s$  переменным, в результате чего можно получить итоговое коммутационные соотношения на оператор  $T_i$ :  $[H, T_i] = 0$ . При этом групповое преобразование может быть записано в следующем виде:

$$S(\lambda_1, \dots, \lambda_s) = \exp \left[ i \sum_{i=1}^s \lambda_i T_i \right]. \quad (4.38)$$

Операторы  $T_i$  коммутируют с гамильтонианом и являются интегралами движения, однако они необязательно должны коммутировать между собой ( $[T_1, T_2] \neq 0$ ).

**Утверждение 4.2.** Если в исследуемой системе существуют два или более не коммутирующих между собой интеграла движения, то спектр СЗ гамильтониана обязательно является вырожденным.

**Доказательство.**

Рассмотрим в качестве примера, с помощью которого можно доказать сформулированное утверждение, задачу на кулоновский потенциал. Гамильтониан системы в таком случае коммутирует с орбитальным моментом и любой его проекцией, поэтому кулоновский спектр является вырожденным (степень вырождения по орбитальному моменту -  $n^2$ , а с учетом спина -  $2n^2$ ).

Докажем теперь утверждение методом от противного. Предположим, что гамильтониан имеет невырожденный спектр. Тогда он является величиной с чисто дискретным невырожденным спектром. Любая другая величина, оператор которой коммутирует с гамильтонианом, является его функцией ( $T_1 = f_1(H)$ ,  $T_2 = f_2(H)$ ). Однако из этого следует, что, поскольку оба оператора коммутируют с гамильтонианом, данные операторы коммутируют и между собой, из чего можно сделать вывод, что гамильтониан обязательно должен иметь вырождение. ■

Далее рассмотрим двухчастичную задачу. Гамильтониан для данной системы запишем в следующем виде:

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) . \quad (4.39)$$

Введем оператор

$$S(\vec{a}) = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{a}} , \quad (4.40)$$

где  $a$  - произвольный вещественный вектор, а  $p$  - оператор полного импульса, для которого выполняется равенство  $\vec{p} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2$ .

Этот оператор можно записать через произведение отдельных экспонент, так как  $p_1$  и  $p_2$  коммутируют между собой как импульсы различных частиц. Тогда

$$S(\vec{a}) = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p}_1 \vec{a}} e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p}_2 \vec{a}} . \quad (4.41)$$

Главное свойство этого оператора заключается в том, что он является оператором трансляции, поэтому для него выполняется следующее:

$$S^+(\vec{a}) \vec{r}_i S(\vec{a}) = \vec{r}_i + \vec{a}, \quad i = 1, 2 . \quad (4.42)$$

Для того чтобы доказать данное утверждение опустим индексы при  $r_i$  и  $p_i$ , поскольку преобразовать, например,  $r_1$  может только  $p_1$ . Тогда от (4.42) перейдем к выражению  $e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{a}} \vec{r} e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{a}}$ , вспомнив при этом коммутационное соотношение  $[r_i, p_j] = i \hbar \delta_{ij}$ . Для каждой из проекций вектора  $r$  будет выполняться:

$$e^{\frac{i}{\hbar}pa} q e^{-\frac{i}{\hbar}pa} = q(a) . \quad (4.43)$$

Продифференцируем (4.43) по  $a$  и получим

$$\frac{dq}{da} = \frac{i}{\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}pa} [p, q] e^{-\frac{i}{\hbar}pa} = 1 . \quad (4.44)$$

В качестве начального условия используем  $q(0) = q$  и получим выражение для  $q(a)$ :

$$q(a) = q + a . \quad (4.45)$$

Полученное выражение учтем для преобразования координат частиц, а также примем во внимание то, что действие операторов  $S^+$  и  $S$  на импульсы не приводит к их изменению. Тогда преобразование гамильтониана запишется в виде

$$S^+(\vec{a}) H S(\vec{a}) = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + V(\vec{r}_1 + \vec{a} - \vec{r}_2 - \vec{a}) = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) . \quad (4.46)$$

Тогда очевидно, что коммутатор  $[H, \vec{p}] = 0$ .

## Парадокс ЭПР

В 1935 году Энштейном, Подольским и Розеном была выпущена серьезная работа, в которой было показано, насколько состоятельной является квантовая механика. Ученые рассматривали радиоактивное ядро, которое разлетается на две фрагмента. Очевидно, что в такой системе сохраняется полный импульс:

$$\vec{p} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2 = \text{Const} . \quad (4.47)$$

В работе с максимально возможной точностью измеряется координата одного из фрагментов ядра после распада, при этом также учитывается, что импульс этого фрагмента в силу соотношения неопределенностей может быть определен с очень большой дисперсией, из-за чего авторами дополнительно с максимальной возможной точностью проводится измерение и проекции на ось  $x$  импульса другого фрагмента. Напоминается также о необходимом учете выполнения ЗСИ для данной системы, в

результате чего, при условии знания проекции импульса первого фрагмента, можно определить проекцию импульса второго фрагмента. Следовательно, авторам удалось показать, что координата и импульс первого элемента могут быть измерены с минимальной дисперсией, что противоречит соотношению неопределенностей.

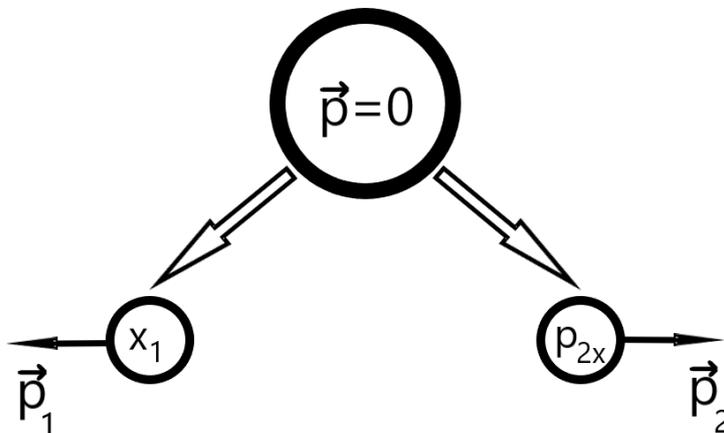


Рис. 4.1. Схема эксперимента парадокса ЭПР

Некорректность данного подхода объясняется необходимостью "перевода" классического закона сохранения на язык квантовой теории. Для этого необходим переход к операторным величинам. ЗСИ в терминах операторов может быть записан в следующем виде:

$$\vec{p}(0) = \vec{p}_1(0) + \vec{p}_2(0) = \vec{p}_1(t) + \vec{p}_2(t) = \vec{p}(t) . \quad (4.48)$$

Вычислим коммутатор  $i$ -ой проекции полного импульса в начальный момент времени и  $i$ -ой проекции радиус вектора первого фрагмента в момент времени  $t$ :

$$[p_i(0), r_{1i}(t)] = [p_{1i}(t) + p_{2i}(t), r_{1i}(t)] \Rightarrow [p_x(0), x_1(t)] = -i\hbar , \quad (4.49)$$

тогда обязательно будет выполняться следующее соотношение:

$$D(p_x) D(x_1(t)) \geq \frac{\hbar^2}{4} . \quad (4.50)$$

Стоит запомнить, что в случае описания квантовых систем нельзя пользоваться классическими соображениями, а также использовать смешанное описание систем.

## Законы сохранения в шредингеровском представлении

В случае консервативной системы ( $H = \text{Const}$ ) в шредингеровском представлении:

$$\overline{F_\psi}(t) = \langle \psi(t) | F(0) | \psi(t) \rangle . \quad (4.51)$$

Для того чтобы выражение (4.51) было аналогично интегралу движения необходимо, чтобы  $\overline{F_\psi}(t) = \overline{F_\psi}(0)$ , т. е. среднее величины  $F$  не должно зависеть от времени. При этом  $|\psi(0)\rangle$  обязательно должен быть СВ оператора Гамильтона:

$$H|\psi(0)\rangle = E|\psi(0)\rangle . \quad (4.52)$$

Тогда при условии выполнения описанных выше условий вектор  $|\psi(t)\rangle$  может быть записан в следующем виде:

$$|\psi(t)\rangle = U(t) |\psi(0)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} |\psi(0)\rangle . \quad (4.53)$$

При подстановке данного вектора в (4.50) легко убедиться в выполнении равенства  $\overline{F_\psi}(t) = \overline{F_\psi}(0)$ .

Далее решим задачу для гамильтониана, имеющего дискретный набор уровней и непрерывный спектр. Для такого случая гамильтониан системы запишем в виде

$$H = \sum_n E_n |u_n\rangle \langle u_n| + \int dE |E\rangle E \langle E| . \quad (4.54)$$

СВ гамильтониана  $u_n$  и  $E$  образуют полный базис, т. е. любой вектор пространства может быть разложен по СВ. Для данного базиса выполняются следующие условия:  $\langle u_n | u_m \rangle = \delta_{nm}$ ,  $\langle u_n | E \rangle = 0$  и  $\langle E | E' \rangle = \delta(E - E')$ .

Обратимся к вопросу изучения эволюции состояния во времени, которое представляет собой либо суперпозицию состояний дискретного спектра, либо состояний непрерывного спектра. Эти два случая принципиально различны, поскольку в первом случае состояние представляет собой суперпозицию чистых состояний, а во втором случае - волновой пакет.

### Дискретный спектр

Для случая суперпозиции состояний дискретного спектра волновая функция в начальный момент времени представима в виде суммы:

$$|\psi(0)\rangle = \sum_n a_n |u_n\rangle . \quad (4.55)$$

Тогда в момент времени  $t$  она будет иметь вид

$$|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle = \sum_n a_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} |u_n\rangle. \quad (4.56)$$

Таким образом, вероятность по результатам эксперимента обнаружить начальное состояние в момент времени  $t$  может быть представлена в виде

$$P(t) = |\langle\psi(0)|\psi(t)\rangle|^2 = \left| \sum_n |a_n|^2 e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \right|^2. \quad (4.57)$$

Стоит отметить, что базис является нормированным на единицу, поэтому выполняется равенство  $\langle\psi(0)|\psi(0)\rangle = 1$ .

В качестве примера рассмотрим комбинацию двух состояний  $a_1$  и  $a_2$  таких, что  $|a_1|^2 + |a_2|^2 = 1$ . В таком случае вероятность обнаружить начальное состояние в момент времени  $t$  будет определяться выражением:

$$\begin{aligned} P(t) &= \left| |a_1|^2 e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t} + |a_2|^2 e^{-\frac{i}{\hbar}E_2 t} \right|^2 = |a_1|^4 + |a_2|^4 + 2|a_1|^2 |a_2|^2 \cos \frac{E_1 - E_2}{\hbar} t = \\ &= 1 + 2|a_1|^2 |a_2|^2 \left( \cos \frac{E_1 - E_2}{\hbar} t - 1 \right) = 1 - 4|a_1|^2 |a_2|^2 \sin^2 \frac{E_1 - E_2}{2\hbar} t. \end{aligned} \quad (4.58)$$

Таким образом вероятность будет осциллировать во времени как синус с частотой, определяющей переход между уровнями дискретного спектра 1 и 2. В случае состояния, представляющего собой суперпозицию большего числа дискретных уровней, будет возникать ещё больше комбинационных частот, при этом вероятность так же, как и в случае комбинации двух состояний, будет осциллировать. Стоит отметить, что в случае состояний, состоящих из одного СВ дискретного спектра, вероятность обнаружить это состояние в любой момент времени  $t$  равняется 1, поэтому стационарные состояния оказываются выделенными объектами, обладающими свойством сохранения средних от величин во времени.

## Непрерывный спектр

Случай непрерывного спектра отличается тем, что при эволюцией во времени исходное состояние безвозвратно теряется. Волновая функция состояния непрерывного спектра может быть записана как

$$|\psi(0)\rangle = \int dE a(E) |E\rangle. \quad (4.59)$$

Нормировка для данного случая может быть записана в виде

$$\int dE |a(E)|^2 = 1 = \langle\psi(0)|\psi(0)\rangle. \quad (4.60)$$

В выражении (4.59) производится интегрирование, так как из непрерывного спектра невозможно с абсолютной точностью измерить СЗ, а также в силу того, что измеряемая величина определена с точностью до некоторого интервала. Нормировка интеграла от состояния непрерывного спектра на единицу означает нормирование на единицу огибающей пакета. Огибающая пакета является квадратично интегрируемой и всегда выделяет некоторую область в непрерывном спектре. Именно поэтому данный спектр и называется волновым пакетом по аналогии с классической волновой механикой.

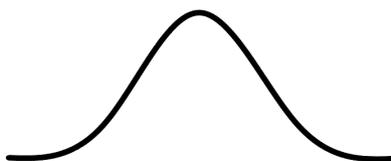


Рис. 4.2. Волновой пакет

Далее получим выражение для определения вероятности обнаружить изначальный волновой пакет в момент времени  $t$ :

$$P(t) = |\langle \psi(0) | \psi(t) \rangle|^2 = \left| \int dE |a(E)|^2 e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \right|^2 \xrightarrow{t \rightarrow \infty} 0, \quad (4.61)$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int_a^b f(x) e^{ixt} dx = 0. \quad (4.62)$$

По лемме Римана-Лебега, предел  $t \rightarrow \infty$  интеграла от функции  $f(x)$  такой, где  $f(x)$  - непрерывная функция будет стремиться к нулю. Без строгого математического вывода это легко аргументировать тем, что при стремлении  $t$  к бесконечности период колебаний синусов и косинусов устремляется к нулю, и тогда, если выделить малый интервал области интегрирования (рис. 4.3), то на нем в пределе функцию  $f$  можно считать константой, и два соседних полупериода синуса и косинуса будут давать значение интеграла с разными по знаку значениями.

Таким образом, по лемме Римана-Лебега в выражении (4.58) при стремлении  $t$  к бесконечности вероятность обнаружить исходный волновой пакет будет стремиться к нулю. Этот эффект называется распадом волнового пакета, а в отдельных случаях такие заготовленные состояния непрерывного спектра называются метастабильными состояниями.

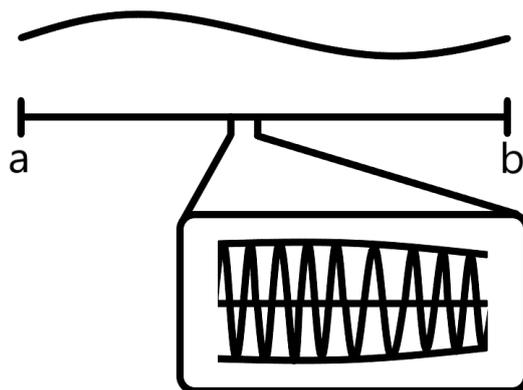


Рис. 4.3. Интервал интегрирования в лемме Римана-Лебега

## Корпускулярно-волновой дуализм

Как известно, волна не может превратиться в частицу и, наоборот, частица не может превратиться в волну. Очень часто, например, в задачах рассеяния наблюдаются эффекты, характерные для волновой механики: дифракция и интерференция. В ряде задач квантовой механики система может быть описана двумя способами, и в зависимости от ситуации надо использовать либо один подход либо другой.

Для последующего рассмотрения запишем макроскопические уравнения Максвелла:

$$\begin{cases} \operatorname{rot} \vec{\mathcal{H}} - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{\mathcal{E}}}{\partial t} = \frac{4\pi}{c} \vec{j} \\ \operatorname{div} \vec{\mathcal{E}} = 4\pi \rho \\ \operatorname{rot} \vec{\mathcal{E}} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{\mathcal{H}}}{\partial t} = 0 \\ \operatorname{div} \vec{\mathcal{H}} = 0 \\ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j} = 0 \end{cases} \quad (4.63)$$

Далее перейдем от величин  $\mathcal{H}$  и  $\mathcal{E}$  к векторному потенциалу  $\mathcal{A}$  и скалярному потенциалу  $\varphi$ :

$$\vec{\mathcal{E}} = -\vec{\nabla} \varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{\mathcal{A}}}{\partial t}, \quad (4.64)$$

$$\vec{\mathcal{H}} = \operatorname{rot} \vec{\mathcal{A}}. \quad (4.65)$$

При этом важно отметить, что потенциалы  $\mathcal{A}$  и  $\varphi$  определены с точностью до градиентного преобразования:

$$\begin{aligned} \varphi &\longrightarrow \varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial \chi}{\partial t} \\ \vec{\mathcal{A}} &\longrightarrow \vec{\mathcal{A}} + \vec{\nabla} \chi. \end{aligned} \quad (4.66)$$

# Лекция 5. Описание электромагнитного поля с помощью квантовой теории.

## Корпускулярно-волновой дуализм (продолжение).

### Фононы

#### Уравнения Максвелла на языке квантовой теории

Запишем уравнения Максвелла (на язык квантовой теории они переносятся без изменений) и разберемся с тем, как будут выглядеть классические уравнения:

$$\begin{cases} \operatorname{rot} \vec{\mathcal{E}} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{\mathcal{H}}}{\partial t} = 0 \\ \operatorname{div} \vec{\mathcal{H}} = 0 \\ \operatorname{rot} \vec{\mathcal{H}} - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{\mathcal{E}}}{\partial t} = 4\pi c \vec{j} \\ \operatorname{div} \vec{\mathcal{E}} = 4\pi \rho \end{cases} \quad (5.1)$$

Помимо уравнений Максвелла, обязательно необходимо записать уравнение непрерывности, поскольку без него невозможно описать потенциал электрического поля:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j} = 0. \quad (5.2)$$

Будем использовать кулоновскую калибровку. Выражения для  $\vec{\mathcal{E}}$  и  $\vec{\mathcal{H}}$  через скалярный потенциал  $\varphi$  и вектор-потенциал  $A$  запишем в виде:

$$\vec{\mathcal{E}} = -\vec{\nabla} \varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial A}{\partial t}, \quad (5.3)$$

$$\vec{\mathcal{H}} = \operatorname{rot} \vec{A}. \quad (5.4)$$

При этом для кулоновской калибровки необходимо, чтобы выполнялось следующее условие:

$$\operatorname{div} \vec{A} = 0. \quad (5.5)$$

Потенциалы  $\varphi$  и  $A$  при этом определены с точностью до градиентного преобразования, которое не меняет физического смысла. При подстановке в уравнения (5.1) для ротора напряженности магнитного поля  $\vec{\mathcal{H}}$  и дивергенции  $\vec{\mathcal{E}}$  выражений (5.3) и (5.4) получим:

$$\begin{cases} \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 A}{\partial t^2} - \Delta A + \frac{1}{c} \vec{\nabla} \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \frac{4\pi}{c} \vec{j} \\ \Delta \varphi = -4\pi \rho \end{cases}. \quad (5.6)$$

Потенциал  $\varphi$  в кулоновской калибровке может быть выражен через мгновенное распределение заряда  $\rho$ :

$$\varphi(\vec{r}, t) = \int \frac{\rho(\vec{r}', t)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}' . \quad (5.7)$$

Из этого следует, что  $\varphi$  в кулоновской калибровке не является динамической переменной.

Для дальнейшего рассмотрения и изучения динамики необходимо обратиться к рассмотрению первого уравнения из (5.6), поскольку оно содержит вторую производную по времени. Воспользуемся преобразованием Фурье в интегральной форме для величин  $\rho$  и  $j$ :

$$\rho(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int e^{i\vec{k}\vec{r}} \rho_{\vec{k}}(t) d\vec{k} , \quad (5.8)$$

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int e^{i\vec{k}\vec{r}} \vec{j}_{\vec{k}}(t) d\vec{k} . \quad (5.9)$$

Аналогично будут записаны и выражения для величин  $\varphi$  и  $\vec{A}$ . При их подставке в первое уравнение системы (5.6) получим следующее выражение:

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{A}_{\vec{k}(t)}}{\partial t^2} + \vec{k}^2 \vec{A}_{\vec{k}(t)} = \frac{4\pi}{c} \vec{j}_{\vec{k}}(t) - \frac{ik}{c} \frac{\partial \varphi_{\vec{k}}(t)}{\partial t} . \quad (5.10)$$

Далее необходимо также подставить Фурье-преобразованные величины во второе уравнение из системы (5.6):

$$k^2 \varphi_{\vec{k}}(t) = 4\pi \rho_{\vec{k}}(t) . \quad (5.11)$$

В дальнейшем будем использовать условие калибровки в импульсном пространстве следующего вида:

$$\vec{k} \vec{A}_{\vec{k}(t)} = 0 , \quad (5.12)$$

из равенства (5.12) следует, что в импульсном пространстве вектор-потенциал - поперечен, откуда следует, что он обладает только ортогональными к волновому вектору  $k$  ненулевыми компонентами:

$$A_{\vec{k}}(t) = A_{\perp \vec{k}}(t) . \quad (5.13)$$

Далее разложим  $j_{\vec{k}}(t)$  на поперечную и продольную компоненты так, что

$$j_{\vec{k}}(t) = j_{\parallel \vec{k}}(t) + j_{\perp \vec{k}}(t) . \quad (5.14)$$

Из разложения (5.14) следует, что уравнение (5.10) можно разделить на два уравнения следующего вида:

$$\begin{cases} \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 A_{\perp}}{\partial t^2} + k^2 A_{\perp} = \frac{4\pi}{c} j_{\perp} \\ \frac{4\pi}{c} j_{\parallel} = \frac{ik}{c} \frac{\partial \varphi_{\vec{k}}}{\partial t} \end{cases} \quad (5.15)$$

Рассмотрим величину  $j_{\parallel}$ , которая представляет собой компоненту  $j$ , направленную вдоль импульса, в результате чего её можно представить в следующем виде:

$$\vec{j}_{\parallel} = \frac{\vec{k} \left( \vec{k} \vec{j} \right)}{\vec{k}^2} . \quad (5.16)$$

Подставим выражение (5.16) во второе уравнение (5.15):

$$4\pi \left( \vec{k} \vec{j} \right) = i \frac{\partial}{\partial t} (k^2 \varphi_k) = i \frac{\partial}{\partial t} (4\pi \rho_k) . \quad (5.17)$$

Поделим правую и левую часть уравнения (5.17) на  $4\pi$  и перенесем все слагаемые в одну сторону. Тогда

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + i \vec{k} \vec{j}_k = 0 . \quad (5.18)$$

Выражение (5.18) представляет собой преобразованное уравнение непрерывности.

### Свободное поле

Далее перейдем к рассмотрению перпендикулярных компонент  $j_{\perp}$  и  $A_{\perp}$ . Поскольку на данный момент основной интерес представляет свободное поле, то  $j_{\perp} = 0$ , а первое уравнение из (5.15) может быть записано в виде:

$$\frac{\partial^2 \vec{A}_{\perp}}{\partial t^2} + \omega_k^2 \vec{A}_{\perp} = 0 , \quad (5.19)$$

где  $\omega_k = c |\vec{k}|$ .

Выражение (5.19) идентично уравнению для гармонического осциллятора с круговой частотой  $\omega_k$ .

Случай свободного поля интересен потому, что с помощью его рассмотрения можно понять, что представляет собой поле в терминах фотонов, а также понять и объяснить природу корпускулярно-волнового дуализма. В экспериментах хорошо наблюдаются и световые волны, и фотоны, которые переносят импульсы. Именно поэтому необходимо уметь использовать два способа описания одного и того же явления, так как в какой-либо конкретной ситуации могут проявляются либо одни свойства - волновые, либо другие - корпускулярные. Например, фотоэффект - это задача, которая решается в терминах фотонов, потому что красная граница фотоэффекта объясняется корпускулярными свойствами и законами Столетова, которые гласят, что главное не число фотонов, а их энергия.

Для того чтобы записать ответ уравнения (5.19), необходимо ввести две линейные по  $k$  поляризации, которые будут обеспечивать условие поперечности. Их определение осуществляется достаточно просто, поскольку будут образовывать правую ортогональную тройку векторов вместе с вектором  $k$  (рис. 5.1).

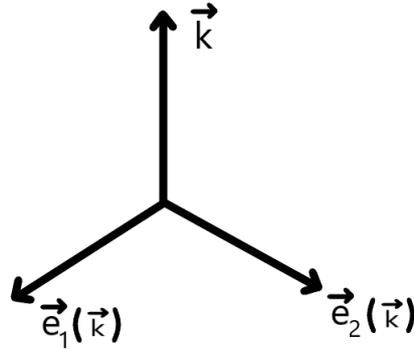


Рис. 5.1. Правая ортогональная тройка векторов

Направим ось  $z$  вдоль вектора  $\vec{k}$  и возьмем за ось  $x$   $\vec{e}_1$ , за  $y$  -  $\vec{e}_2$ . Тогда орты  $\vec{e}_1$  и  $\vec{e}_2$  будут задействованы в разложении, и ответ для  $\vec{A}_{\perp, \vec{k}}$  будет записан в виде

$$\vec{A}_{\perp, \vec{k}}(t) = \sum_{\lambda=1,2} \vec{e}_{\lambda}(\vec{k}) \times \left[ a_{\lambda}(\vec{k}) e^{-i\omega_k t} + a_{\lambda}^*(-\vec{k}) e^{i\omega_k t} \right], \quad (5.20)$$

где амплитуды  $a_{\lambda}(\vec{k})$  и  $a_{\lambda}^*(-\vec{k})$  - классические амплитуды, поскольку на данном этапе задача еще решается на классическом языке.

В силу того что исходный вектор-потенциал является вещественной величиной, необходимо ввести дополнительное условие его вещественности:

$$\vec{A}_{\vec{k}}(t) = \vec{A}_{-\vec{k}}^*(t). \quad (5.21)$$

Далее, после определения  $A_{\perp, \vec{k}}$  и ввода условия вещественности, можно восстановить исходный вектор потенциал  $\vec{A}$ :

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int d\vec{k} \sum_{\lambda=1,2} \vec{e}_{\lambda}(\vec{k}) c \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_k}} \left[ a_{\lambda}(\vec{k}) e^{-i\omega_k t + i\vec{k}\vec{r}} + a_{\lambda}^*(\vec{k}) e^{i\omega_k t - i\vec{k}\vec{r}} \right]. \quad (5.22)$$

Запишем гамильтониан нашей системы в терминах векторов  $\vec{\mathcal{E}}$  и  $\vec{\mathcal{H}}$ , выраженных через вектор-потенциал  $\vec{A}$ :

$$H = \frac{1}{8\pi} \int d\vec{r} \left[ \vec{\mathcal{E}}^2 + \vec{\mathcal{H}}^2 \right] = \frac{1}{2} \int d\vec{k} \sum_{\lambda=1,2} \hbar\omega_k \left[ a_{\lambda}(\vec{k}) a_{\lambda}^*(\vec{k}) + a_{\lambda}^*(\vec{k}) a_{\lambda}(\vec{k}) \right]. \quad (5.23)$$

Также запишем выражение для импульса:

$$\vec{p} = \frac{c}{4\pi} \int d\vec{r} \left[ \vec{\mathcal{E}} \times \vec{\mathcal{H}} \right] = \frac{1}{2} \int d\vec{k} \sum_{\lambda=1,2} \hbar \vec{k} \left[ a_{\lambda}(\vec{k}) a_{\lambda}^*(\vec{k}) + a_{\lambda}^*(\vec{k}) a_{\lambda}(\vec{k}) \right]. \quad (5.24)$$

Выражения для гамильтониана имеет структуру гармонического осциллятора, что позволяет сразу перейти к детальному анализу полученного результата. Ничего не изменяя в структуре уравнения (5.23), сопоставим величинам  $a_{\lambda}(\vec{k})$  и  $a_{\lambda}^*(\vec{k})$  операторы  $a$  и  $a^+$ . Тогда на введенные операторы будут выполняться следующие условия

$$\left[ a_{\lambda}(\vec{k}), a_{\lambda'}^+(\vec{k}') \right] = \delta_{\lambda\lambda'} \delta(\vec{k} - \vec{k}'), \quad (5.25)$$

$$\left[ a_{\lambda}(\vec{k}), a_{\lambda'}(\vec{k}') \right] = 0. \quad (5.26)$$

Из выражений (5.25) и (5.26) следует, что каждая степень свободы электромагнитного поля имеет свой волновой вектор и свою поляризацию.

Гамильтониан, представленный в виде (5.23), может быть переписан в каноническом виде. Тогда

$$H = \sum_{\lambda} \int \hbar \omega_k \left( a_{\lambda k}^+ a_{\lambda k} + \frac{1}{2} \right) d\vec{k}. \quad (5.27)$$

В тоже время импульс может быть переписан как:

$$\vec{p} = \sum_{\lambda} \int \hbar \vec{k} \left( a_{\lambda k}^+ a_{\lambda k} + \frac{1}{2} \right) d\vec{k}. \quad (5.28)$$

Любое состояние с определенной энергией и импульсом можно построить в терминах осцилляторных чисел заполнения по каждой моде, то есть можно ввести вектор  $\Omega$  следующего вида:

$$|\Omega\rangle = \bigotimes_{\text{тензорное произведение}} |0_{k\lambda}\rangle. \quad (5.29)$$

Выражение (5.29) представляет собой тензорное произведение основных состояний осциллятора по каждой моде. Каждая мода имеет свое нулевое состояние такое, что

$$a_{\lambda k} |0_{\lambda k}\rangle = 0. \quad (5.30)$$

**Замечание 5.1.** Для правильного обоснования построения вектора, приведенного в выражении (5.29), данный вектор необходимо вводить в рамках конечного объема, когда вместо интегралов в выражениях используется суммирование с предельным переходом к бесконечному объему.

Сформулируем следующее утверждение:

**Утверждение 5.1.** Если построить состояние с числами заполнения по каждой моде:

$$|n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = \prod_i \frac{(a_i^+)^{n_i}}{\sqrt{n_i!}} |\Omega\rangle, \quad (5.31)$$

то в результате для  $H$ , действующего на это состояние, получим ответ в виде:

$$H|n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = E(n_1, \dots, n_i, \dots) |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle. \quad (5.32)$$

Таким образом, при действии оператора  $H$  на каждую компоненту состояния, заданного выражением (5.31), будем получать собственное значение в виде

$$E = \sum_i \hbar\omega_i \left( n_i + \frac{1}{2} \right). \quad (5.33)$$

Аналогично и для импульса:

$$\vec{p} = \sum_i \hbar\vec{k}_i \left( n_i + \frac{1}{2} \right). \quad (5.34)$$

Если в одной из мод поменять число заполнения на единицу так, что

$$n_i \longrightarrow n_i + 1, \quad (5.35)$$

то энергия и импульс будут изменяться следующим образом:

$$\Delta E = \hbar\omega_i \quad \Delta\vec{p} = \hbar\vec{k}_i. \quad (5.36)$$

Таким образом, при изменении числа заполнения отдельной моды энергия системы повышается согласно выражению (5.36) и рождается фотон, приносящий энергию и импульс в возбуждение электромагнитного поля в терминах корпускулярной части. Это означает, что при „выключенных“ числах заполнения ( $n_i = 0$ ) ответ останется лишь для вакуумного состояния, который может быть записан в виде:

$$E_0 = \sum_\lambda \int \frac{\hbar\omega_k}{2} d\vec{k}. \quad (5.37)$$

В силу того, что  $\frac{\hbar\omega_k}{2}$  - положительная величина, интеграл в выражении (5.37) является расходящимся по верхнему пределу (ультрафиолетовая расходимость). Для импульса получим похожий ответ, который можно записать в следующем виде:

$$\vec{p}_0 = \sum_\lambda \int \frac{\hbar\vec{k}}{2} d\vec{k}. \quad (5.38)$$

Стоит отметить, что интеграл для импульса также оказывается расходящейся величиной. Такого рода ответы являются вполне нормальными, поскольку для описания реальности важно изменение энергии, а начало отсчета всегда может быть выбрано произвольно.

Таким образом, мы ввели концепцию фотонов в качестве квантов соответствующих осцилляторных мод. В варианте, когда они были введены в описание для свободного поля, ответы для энергии и импульса представлялись в виде сумм по соответствующим конкретным модам числам заполнения.

## Переход от корпускулярной к волновой картине описания

Прежде всего вспомним, как действуют операторы  $a$  и  $a^+$  на состояние  $|n\rangle$ :

$$\begin{cases} a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \\ a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \end{cases} \quad (5.39)$$

Также, поскольку состояние, заданное выражением (5.31), представляет собой тензорное произведение по состояниям отдельных полевых мод, скалярное произведение по двум различным состояниям, заданным аналогично представленному в (5.31), может быть записано в виде

$$\langle n_1, \dots, n_i, \dots | n'_1, \dots, n'_i, \dots \rangle = \delta_{n_1 n'_1} \dots \delta_{n_i n'_i} \dots \quad (5.40)$$

Рассмотрим вектор  $|n_1, \dots, n_i, \dots\rangle$  и попробуем извлечь из него физическую информацию о вектор-потенциале и, соответственно, о всем, что характеризует поле в терминах напряженности. Прежде всего вычислим диагональный матричный элемент, так как в случае свободного поля вся необходимая информация может быть получена именно из него:

$$\langle n_1, \dots, n_i, \dots | \vec{A}(\vec{r}, t) | n_1, \dots, n_i, \dots \rangle = 0. \quad (5.41)$$

Мы получили такой ответ, потому что при переходе к терминам операторов  $a$  и  $a^+$  в выражении (5.22), операторы будут действовать на состояние по правилу (5.39), изменяя числа заполнения, и, исходя из условия (5.40), все слагаемые обратятся в нуль. Следовательно, классическое поле уже не наблюдается, что неудивительно, так как выше рассматривался именно пучок фотонов, а не волна.

Для того чтобы перейти на „волновой язык“, необходимо учитывать, что любой свет порождается источником. Свободные фотоны не относятся к классическому свету, который может быть наблюдаем, однако отдельные фотоны человек все же может улавливать сетчаткой глаза (опыт Черенкова). Чтобы учитывать классическое поле в рассматриваемой задаче, необходимо включить в нее дополнительный внешний ток, который будет порождать классическое электромагнитное поле. В результате этого гамильтониан  $H$  будет преобразован к следующему виду:

$$H \longrightarrow H_0 + \int \vec{A} \vec{j}_{ext} d\vec{r}. \quad (5.42)$$

В свою очередь величина  $j_{ext}$  должна обладать только перпендикулярной компонентой, аналогично величине  $A$ . Тогда тогда фурье-разложение для этой величины может быть записано в виде:

$$\vec{j}_{ext} = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \sum_{\lambda} \int d\vec{k} \sqrt{\frac{\omega_k}{2\pi}} \vec{e}_{\lambda}(\vec{k}) \left[ j_{\lambda k} e^{i\vec{k}\vec{r}} + j_{\lambda k}^* e^{-i\vec{k}\vec{r}} \right]. \quad (5.43)$$

Далее перепишем гамильтониан с учетом полученного выражения (5.43):

$$H = \sum_{\lambda} \int d\vec{k} \left[ \hbar\omega_k \left( a_{\lambda k}^+ a_{\lambda k} + \frac{1}{2} \right) + \sqrt{\hbar} (j_{\lambda k} a_{\lambda k}^+ + j_{\lambda k}^* a_{\lambda k}) \right]. \quad (5.44)$$

Из анализа (5.44) становится понятным, что в каждой моде с фиксированными величинами  $\lambda$  и  $k$  имеет место запись гамильтониана в следующей форме:

$$H = \hbar\omega \left( a^+ a + \frac{1}{2} \right) + f a^+ + f^* a, \quad (5.45)$$

где  $f = \sqrt{\hbar} j_{\lambda k}$ .

Выражение (5.45) по виду совпадает с гамильтонианом для задачи на гармонический осциллятор с постоянно действующей внешней силой. Эта задача имеет известное решение в терминах когерентного состояния, основное состояние для которого выглядит следующим образом:

$$|\xi\rangle = e^{-\frac{|\xi|^2}{2}} e^{\xi a^+} |0\rangle, \quad (5.46)$$

где  $\xi = -f/\hbar\omega$ .

Обобщим ответ на случай системы, состоящей из совокупности фотонных мод, и зададим состояние  $|\Xi\rangle$  следующего вида:

$$|\Xi\rangle = \bigotimes_{\lambda k} |\xi_{\lambda k}\rangle = e^{-\frac{1}{2} \sum_{\lambda k} |\xi_{\lambda k}|^2} \bigotimes e^{\xi_{\lambda k} a_{\lambda k}^+} |\Omega\rangle, \quad (5.47)$$

где  $\Xi$  является совокупным вектором когерентного состояния, описывающим все поле в целом.

Величина  $\xi_{\lambda k}$  с учетом записанных выше соотношений может быть представлена в виде:

$$\xi_{\lambda k} = -\frac{j_{\lambda k}}{\sqrt{\hbar\omega_k}}. \quad (5.48)$$

При действии оператора уничтожения  $a_{\lambda k}$  на вектор состояния, заданный выражением (5.47), получим следующее равенство:

$$a_{\lambda k}|\Xi\rangle = \xi_{\lambda k}|\Xi\rangle. \quad (5.49)$$

После приготовления состояния  $\Xi$ , являющегося основным состоянием поля под действием внешнего тока, включим внешний источник для того, чтобы возбудить поле до когерентного состояния, а поскольку оно является состоянием с неопределенным числом квантов, то при рассмотрении диагонального матричного элемента вектор-потенциала получим выражение, отличное от нуля, т.е.:

$$\langle\Xi|\vec{A}(\vec{r}, t)|\Xi\rangle = \sum_{\lambda} \int c \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_k}} \vec{e}_{\lambda}(\vec{k}) \left[ \xi_{\lambda k} e^{i\vec{k}\vec{r}-i\omega_k t} + \xi_{\lambda k}^* e^{-i\vec{k}\vec{r}+i\omega_k t} \right] d\vec{k}. \quad (5.50)$$

Стоит отметить, что реальный свет соответствует случаю с неопределенным числом квантов, при этом компоненты света обязательно флуктуируют. Выражение (5.50) представляет собой структуру классического волнового пакета с огибающей  $\xi_{\lambda k}$ . Если подставить выражение (5.48) в (5.50), то можно заметить, что все множители с  $\hbar$  пропадают, что подтверждает классичность (5.50).

Теперь найдем дисперсию величины  $\vec{A}$ . Для этого необходимо вычислить матричный элемент от  $\vec{A}^2$ , преобразование которого запишем в виде:

$$\langle\Xi|\vec{A}^2|\Xi\rangle = \langle\vec{A}\rangle^2 + 2 \int c^2 \frac{2\pi\hbar}{\omega_k} \underbrace{\langle\Xi|\Xi\rangle}_{=1} d\vec{k}, \quad (5.51)$$

где при вычислении матричного элемента необходимо учитывать, что при подстановке выражения для  $\vec{A}$  в операторной форме возникнет произведение двух скобок  $(a + a^+)(a + a^+)$ , преобразование которые необходимо осуществлять, используя коммутационное соотношение между  $a$  и  $a^+$ .

Если подставить в (5.51)  $\omega_k$  и переписать  $d\vec{k} = 4\pi k^2 dk$  для трехмерного случая, то получится расходящийся интеграл. Для одномерного и двумерного случая интеграл также будет расходящимся. Это происходит из-за того, что, когда система имеет

бесконечное число степеней свободы, появляются бесконечные суммы, приводящие к расхождению.

Поскольку выражение (5.51) получено при рассмотрении классического света, то очевидно, что бесконечной дисперсии в данном случае быть не может. Для устранения данной неприятности обратимся к теореме Кантора. Использование данной теоремы необходимо, потому что при введении пространства состояний в виде чисел заполнения и при включении бесконечного числа степеней свободы состояния системы оказываются существенно более сложными, так как они представляют собой произведение по бесконечному числу отдельных компонент. Таким образом, возникает вопрос: принадлежит ли введенное таким способом множество Гильбертову пространству.

**Теорема 5.1.** Пусть есть последовательность со счетным числом элементов, у которых все числа заполнения могут принимать значения 0 или 1 (такие числа заполнения всегда возникают в системе фермионов за счет принципа Паули):

$$\{ |0, \dots, 0, 1, \dots, 0, \dots\rangle \}_{j \rightarrow}, \quad (5.52)$$

где  $j$  - натуральный счетчик, пробегающий по элементам строки.

Рассмотрим всю совокупность строчек такого типа со всеми возможными вариантами расстановок нулей и единиц.

Тогда множество последовательностей (5.52) нельзя перенумеровать.

**Доказательство.**

Будем вести доказательство от противного и предположим, что совокупность всех последовательностей типа (5.52) является счетной. Каждую последовательность переобозначим за  $|a_i\rangle$ . Тогда, поскольку их счетное множество, можно ввести второй индекс  $j$ , нумерующий это множество, что позволяет нам переписать данное множество в виде бесконечномерной матрицы следующего вида:

$$a_{ij} = \begin{matrix} & & & j \rightarrow \\ & & & \\ & & & \\ i & \left( \begin{array}{cccc} 0 & 1 & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & 1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{array} \right) & \\ \downarrow & & & \end{matrix} . \quad (5.53)$$

(5.53) представляет собой матрицу из нулей и единиц, разбросанных в произвольном порядке.

Выделим из (5.53) диагональ, которая также будет являться строкой с элементами  $\beta_i = a_{ii}$ . Также построим строчку вида  $\alpha = 1 - \beta$ .

**Утверждение 5.2.** *Строка  $\alpha$  не будет совпадать ни с одной строчкой из матрицы  $a$ .*

**Доказательство.**

Рассмотрим элемент  $\alpha_i$  строчки  $\alpha$ , который можно выразить как:

$$\alpha_i = 1 - \beta_i = 1 - a_{ii} . \quad (5.54)$$

При сравнении этого элемента с  $i$ -ым элементом строки  $a_i$  легко заметить, что элементы не будут равны друг другу. Поэтому для любого номера  $i$  равенство не будет достигнуто, что означает, что строка  $\alpha$  не совпадет ни с одной строкой из матрицы  $a$ . ■

Таким образом, строка  $\alpha$ , состоящая из нулей и единиц, должна принадлежать исходной совокупности строк (5.52), которая ранее была собрана в матрицу. Поэтому последовательность строчек из нулей и единиц является несчетной.

Если же позволить числам заполнения, принадлежащим к любым натуральным числам и отличным от нуля и единицы, существовать, то мощность данного множества увеличится, при этом оно также будет являться несчетным. ■

Все состояния с определенными числами заполнения являются ортогональными друг другу (см. (5.40)), и, тем самым, они линейно независимы, что означает, что пространство, строящееся в терминах чисел заполнения, по определению имеет несчетный базис, а, следовательно, и несчетное число независимых векторов. Таким образом, пространство не будет являться Гильбертовым. Однако вся квантовая механика построена в рамках Гильбертового пространства, более того, все теоремы доказываются только для Гильбертового пространства, так как в этом случае можно использовать матрицы конечного размера, а затем делать предельный переход. Для того чтобы устранить все противоречия, обусловленными введенным ранее подходом, будем использовать размышления Фока.

Далее вернемся к случаю, когда вектор состояния строился по формуле (5.47). Пока число слагаемых по параметрам  $\lambda$  и  $k$  конечно, суммы в выражении (5.47) также

являются конечными величинами. При переходе к случаю бесконечных сумм сразу же возникает вопрос сходимости, поскольку вектор состояния будет обращаться в нуль для расходящейся суммы, поэтому необходимо перейти к пространству Фока. Для того чтобы вектор  $\Xi$  существовал, необходимо ограничить сумму в выражении (5.47):

$$\sum_{\lambda k} |\xi_{\lambda k}|^2 < \infty . \quad (5.55)$$

Вспомним свойства когерентного состояния: величина  $|\xi|^2$  для одной осцилляторной моды является средним числом заполнения, поэтому условия Фока означают, что если ввести среднее число заполнения по всем модам, то оно будет равно сумме средних чисел заполнения по каждой моде, что совпадает с суммой в выражениях (5.47) и (5.55). Таким образом, условие (5.55) означает, что из всего пространства состояний должно быть выбрано такое подпространство, в котором выполняется условие конечности полного числа заполнения. Запишем данное условие следующим образом:

$$N = \sum_{\lambda k} \bar{n}_{\lambda k} = \sum_{\lambda k} |\xi_{\lambda k}|^2 < \infty . \quad (5.56)$$

При введении условия Фока базис автоматически становится счетным и пространство состояний становится Гильбертовым. Далее для описания классического света будем пользоваться соображениями Н. Н. Боголюбова. Классический свет - это состояние с большими числами заполнения, всегда являющееся конденсатом фотонов в некоторое количество мод. Фотоны являются бозонами, поэтому они могут накапливаться в моде. Такой эффект лежит в основе описания явлений сверхтекучести. Например, работа Н. Н. Боголюбова была основана на конденсате атомов гелия в одно единственное состояние.

Пусть в задаче задан некоторый набор мод, тогда условие Фока гласит, что число таких мод с макроскопическими числами заполнения обязательно будет конечным. Для описания части, ответственной за классический свет, необходимо оставить моды только с макроскопическим числом фотонов. Так, для них изначально можно заменить букву  $\xi$  на величину:

$$\xi_{\lambda k} \rightarrow \sqrt{\bar{n}_{\lambda k}} e^{i\Phi_{\lambda k}} . \quad (5.57)$$

Для того чтобы ограничить количество мод, необходимо ввести дополнительную функцию, которая называется *sampling function*, позволяющую задать моды, участвующие в образовании фотонного конденсата. При этом данная функция должна

быть квадратично интегрируемой. Обозначим функцию такого типа за  $g_{\lambda k}$ , тогда для нее должно выполняться условие:

$$\sum_{\lambda} \int g_{\lambda k} < \infty . \quad (5.58)$$

Таким образом, матричный элемент от величины  $\vec{A}$  может быть записан в виде:

$$\begin{aligned} \langle \Xi | \vec{A}(\vec{r}, t) | \Xi \rangle &= \sum_{\lambda} \int g_{\lambda k} c \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_k}} \vec{e}_{\lambda}(k) \times \\ &\times \left[ n_{\lambda k} \exp \left[ i \vec{k} \vec{r} - i \omega_k t + i \Phi_{\lambda k} \right] + \sqrt{n_{\lambda k}} \exp \left[ -i \vec{k} \vec{r} + i \omega_k t - i \Phi_{\lambda k} \right] \right] dk . \end{aligned} \quad (5.59)$$

Для того чтобы оценить дисперсию, не обязательно делать вычисления, подобные (5.59), поскольку заранее известно, как именно функционируют числа заполнения. Они являются большими за счет функции выборки, и для них работает закон больших чисел, следовательно, дисперсия по отклонению  $n$  от среднего будет равна  $n \pm \sqrt{n}$ . Тогда с учетом:

$$\sqrt{n \pm \sqrt{n}} = \sqrt{n} \sqrt{1 \pm \frac{1}{\sqrt{n}}} = \sqrt{n} \left( 1 \pm \frac{1}{2\sqrt{n}} + \dots \right) , \quad (5.60)$$

для флуктуаций классического поля получим выражение следующего вида:

$$\delta \vec{A} = \sum_{\lambda} \int g_{\lambda k} c \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_k}} \vec{e}_{\lambda} \left( \pm \frac{1}{2} \exp \left[ i \vec{k} \vec{r} - i \omega_k t + i \Phi_{\lambda k} \right] + c.c. \right) dk . \quad (5.61)$$

В случае отсутствия функции выборки в (5.61) интеграл будет являться расходящимся, однако функция выборки - квадратично интегрируемая функция, поэтому с её учетом будет получен конечный результат. В случае, если известна функция источника  $j$  и  $\Xi$ , а также, в дополнение к ним, функция выборки, то можно восстановить вектор-потенциал и относительные флуктуации. Также по результатам измерения можно получить полную информацию о световой волне и восстановить величины  $j$ ,  $\Xi$  и  $g_{\lambda k}$ .

Далее перейдем к задаче, также связанной с осцилляторами. Будем рассматривать колебания кристаллической решетки.

## Колебания кристаллической решетки (фононы)

Эффективный потенциал, в котором живут ионы кристаллической решетки, может быть представлен так, как показано на рис. 5.2.

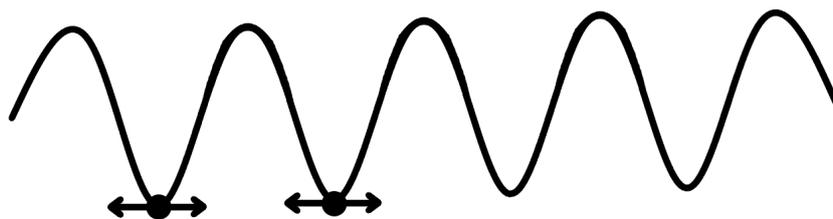


Рис. 5.2. Эффективный потенциал кристаллической решетки

В приближении малых флуктуаций ионов относительно положения равновесия эффективный потенциал решетки может быть записан в виде:

$$V(r) = V(0) + \frac{1}{2} \sum_{ij} V_{ij} r_i r_j, \quad (5.62)$$

где  $i$  и  $j$  - индексы суммирования по всем векторам отклонения ионов в данной точке и по всем ионам решетки, а  $V_{ij}$  может быть записано как:

$$V_{ij} = \left. \frac{\partial^2 V}{\partial r_i \partial r_j} \right|_0. \quad (5.63)$$

Линейный член выражения (5.63), очевидно, равен нулю, поскольку рассматриваются отклонения из положения минимумов. Для того чтобы перейти к рассмотрению фононов, необходимо выполнить преобразование системы координат к нормальным координатам. В рассматриваемом случае  $V_{ij}$  является симметричной и вещественной матрицей, поэтому она может быть приведена в диагональный вид ортогональным преобразованием. Ортогональное преобразование является унитарным преобразованием, ограниченным на вещественный случай, при этом для таких преобразований выполняется условие  $O O^T = 1$ . Тогда матрица  $V_{ij}$  может быть представлена в виде:

$$V_{ij} = O_{i\alpha} W_{\alpha\beta} O_{\beta j}^T, \quad (5.64)$$

где индексы  $\alpha$  и  $\beta$  пробегаются по нормальным координатам.

Матрица  $W_{\alpha\beta}$  является диагональной и содержит только неотрицательные собственные частоты:

$$W_{\alpha\beta} = m_\alpha \omega_\alpha^2 \delta_{\alpha\beta}. \quad (5.65)$$

В нормальных координатах  $r_i$  может быть записано как

$$r_i = O_{i\alpha} q_\alpha. \quad (5.66)$$

Тогда гамильтониан системы может быть записан в виде:

$$\begin{aligned} H &= \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} + \frac{1}{2} \sum_{ij} r_i V_{ij} r_j = \sum_{\alpha} \frac{p_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha} m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2 q_{\alpha}^2 = \\ &= \sum_{\alpha} \hbar \omega_{\alpha} \left( a_{\alpha}^+ a_{\alpha} + \frac{1}{2} \right), \end{aligned} \quad (5.67)$$

где  $m$  с индексом  $\alpha$  и  $m$  с индексом  $i$  - несовпадающие массы, поскольку  $m_{\alpha}$  является эффективной массой каждой моды фононного возбуждения.

Стоит отметить, что фотонная мода отвечает за колебание всего кристалла, а не отдельного иона решетки. Такое колебание образуется из суперпозиции колебаний всех ионов. Обратим внимание, что итоговое выражение в (5.67) записано в виде суммы гармонических осцилляторов, каждый из которых имеет свой индекс  $\alpha$ , который учитывает колебания ионов, и, в зависимости от сложности решетки, это может быть либо учет колебаний ближайших соседей, либо колебания некоторой совокупности соседних ионов.

**Замечание 5.2.** В случае рассмотрения более сложных возбуждений не удастся выполнить такое простое преобразование, поскольку все нелинейные эффекты уже не относятся к фононному спектру, а являются уже более сложными возбуждениями.

Каждая полученная фононная мода эквивалентна фотонной с той разницей, что эффективную массу и частоту каждого фонона определить сложнее. В электродинамике при записи уравнений Максвелла не возникает неопределенностей, в то время как эффективный потенциал решетки известен плохо, поскольку для того, чтобы найти его, необходимо решать уравнения типа Хартри-Фока с обменными слагаемыми, что на сегодняшний день является сложной задачей с точки зрения вычислительных мощностей. Так, можно только апеллировать к эксперименту. Простейшим примером апелляции к эксперименту, который приводит к физически значимому эффекту, является эффект Мёссбауэра, рассмотренный в семинаре 3, представляющий собой эффект бесфононного ядерного перехода. Он заключается либо в переходе ядра в возбужденное состояние с поглощением гамма кванта либо наоборот (рис. 5.3).

Ядерные переходы составляют по величине энергии перехода КэВы и МэВы. Пусть гамма квант поглощается ядром, находящимся в узле решетки. У ядра есть система возбужденных уровней. В нормальной ситуации гамма квант поглотится с возбуждением ядра, однако такие спектры всегда являются уширенными, поскольку,

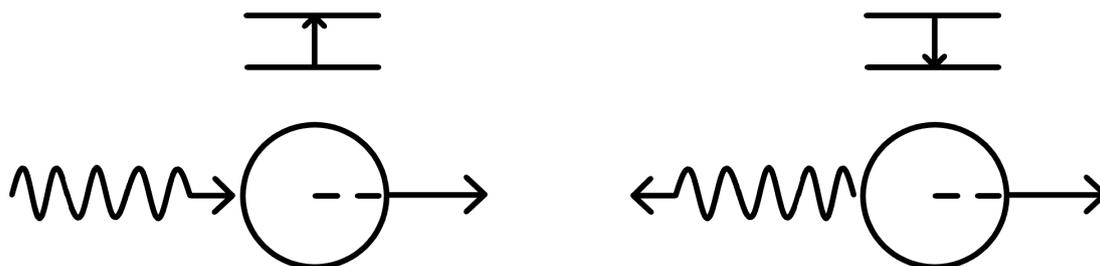


Рис. 5.3. Поглощение и испускание гамма кванта ядром

помимо энергии, ядро получает ещё и импульс отдачи от гамма кванта, вследствие чего возникает колебание решетки, представляющее собой совокупность фононных возбуждений. Вследствие этого энергия гамма кванта должна быть больше энергии ядерного перехода. Аналогично, если возбужденное ядро испускает гамма квант, и происходит переход в нижележащее ядерное состояние, то энергия гамма кванта не будет равна величине энергии перехода, поскольку этот гамма квант будет отлетать от ядра с некоторым импульсом, за счет чего ядро получит импульс отдачи. Таким образом, энергия гамма кванта будет меньше энергии перехода.

## Лекция 6. Эффекты Казимира. Введение в матрицы плотности

### Эффект Казимира для двух параллельных проводящих пластин

Эффекты Казимира прежде всего связаны с вакуумной энергией, выражение для которой было получено в лекции 5 (формула (5.37)).

Основная цель рассмотрения эффектов Казимира - показать, что если сама вакуумная энергия не имеет прямого смысла, потому что нет точки её отсчета, то изменение энергии в ряде случаев вполне осмыслено и приводит к эффектам, которые в ряде случаев удастся наблюдать.

В процессе рассмотрения эффекта Казимира возникает удельная сила, поэтому удобнее рассматривать задачу в конечном объеме. Для того чтобы это сделать, необходимо уметь с ним работать. В связи с этим предлагается выполнить следующее упражнение:

**Упражнение 6.1.** *Рассмотрим схему квантования для конечного объема со всеми необходимыми выкладками.*

В простейшем случае эффект Казимира рассматривается на примере двух параллельных идеально проводящих пластин, находящихся на расстоянии  $a$  друг от друга и имеющих линейные размеры  $L$  (рис. 6.1).

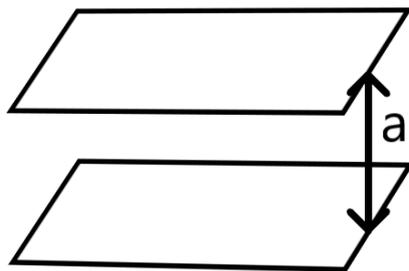


Рис. 6.1. Две параллельные идеально проводящие пластины

Эта задача требует знания формул квантования поля в конечном объеме. Рас-

смотрим самый простой случай, когда вся система помещается в куб с ребром длины  $L$ . Стоит отметить, что куб всегда можно заменить на любой другой объем.

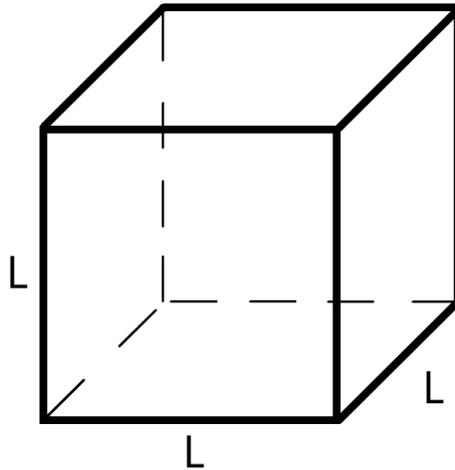


Рис. 6.2. Конечный объем с линейным размером  $L$

Введем периодические условия на волновые функции, которые будут рассматриваться далее. Данные условия запишем в следующем виде:

$$\psi(r_i + L) = \psi(r_i) . \quad (6.1)$$

где индекс  $i$  пробегается по проекциям радиус-вектора на оси  $x, y, z$ , а  $L$  - период получившейся кубической решетки.

Тогда для Фурье разложения можно использовать плоские волны, нормированные на объем  $V = L^3$ :

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{f}\vec{r}} , \quad (6.2)$$

где  $f$  - волновой вектор, обеспечивающий периодичность введенных в (6.2) экспонент, равный:

$$\vec{f} = \frac{2\pi}{L} \vec{n} , \quad (6.3)$$

где  $\vec{n}$  - целочисленный вектор:

$$\vec{n} = (n_1, n_2, n_3) , \quad (6.4)$$

где  $n_i$  - целые числа.

В том виде, в котором был выбран вектор  $f$ , сдвиг на период дает фазовый множитель  $2\pi i$ , который умножается на компоненту вектора  $\vec{n}$  соответствующей проекции.

В силу того, что  $n$  - целый, автоматически выполняется условие периодичности. Использование этих условий удобнее, так как стоячие волны требуют дополнительных преобразований.

Все величины, которые в дальнейшем будут использоваться для изучения вопроса квантования в конечном объеме, а именно: величины  $\rho$ ,  $\vec{j}$ ,  $\vec{A}$ , - необходимо записать в виде разложения Фурье с нормировочным коэффициентом  $\frac{1}{\sqrt{V}}$  и суммами вместо интегралов, поскольку рассматривается конечный объем:

$$\rho = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{f}} \dots, \quad (6.5)$$

$$\vec{j} = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{f}} \dots, \quad (6.6)$$

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \sum_{\lambda} \sum_{\vec{f}} c \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\omega_f}} \vec{e}_{\lambda}(\vec{f}) \dots \quad (6.7)$$

**Замечание 6.1.** Волновые функции, которые были введены в выражении (6.2), выбраны так, чтобы выполнялось условие нормировки на символ Кронекера:

$$\int e^{i(\vec{f}-\vec{f}')\vec{r}} d\vec{r} = V \delta_{\vec{f},\vec{f}'}. \quad (6.8)$$

В терминах конечного объема вакуумная энергия может быть записана следующим образом:

$$E_0 = \frac{1}{2} \sum_{\vec{f}\lambda} \hbar\omega_f. \quad (6.9)$$

Сумма в выражении (6.9) расходится аналогично случаю бесконечного объема.

Далее необходимо выдвинуть предположение о том, что размер пластинок настолько большой, что можно пренебречь краевыми эффектами и, следовательно, получить выражение для удельной энергии. Во всех записанных выше выражениях сумма считается по вектору  $\vec{n}$ :

$$\sum_{\vec{n}} = \sum_{n_1, n_2, n_3} \Delta n_1 \Delta n_2 \Delta n_3. \quad (6.10)$$

Из выражения (6.3) следует, что  $\Delta n_i$  может быть записано как:

$$\Delta n_i = \frac{L}{2\pi} \Delta f_i. \quad (6.11)$$

Таким образом, при подстановке (6.11) в (6.10) получим следующее:

$$\sum_{\vec{n}} = \sum_{\vec{f}} \left( \frac{L}{2\pi} \right)^3 \Delta f_1 \Delta f_2 \Delta f_3 . \quad (6.12)$$

Далее, если предполагать, что величина  $L$  является очень большой, но при этом конечной, то:

$$\Delta \vec{f} = \frac{2\pi}{L} \Delta \vec{n} \rightarrow 0 . \quad (6.13)$$

Тогда

$$\sum_{\vec{n}} \rightarrow \left( \frac{L}{2\pi} \right)^3 \int d\vec{k} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} . \quad (6.14)$$

Далее конкретизируем задачу. Будем все также рассматривать две параллельные пластинки конечного размера. Расположим оси так, как показано на рис. 6.3.

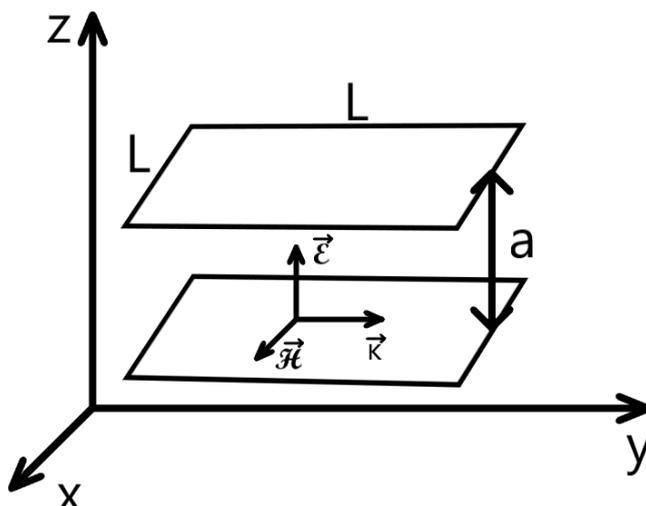


Рис. 6.3. Эффект Казимира для двух параллельных пластин конечного размера

Пластинки являются идеальными проводниками, поэтому для компонент электромагнитного поля должно выполняться граничное условие:

$$\vec{E}_{\parallel} = 0, \quad \vec{H}_{\perp} = 0 . \quad (6.15)$$

В результате выполнения данного граничного условия возникает еще одно, а именно: необходимо, чтобы волновой вектор  $\vec{k}$  по оси  $z$  обязательно был дискретен и равнялся следующему:

$$k_z = \frac{\pi n}{a} , \quad (6.16)$$

где  $n$  - целое число.

Тогда выражение для вакуумной энергии можно переписать в виде

$$E_0 = \frac{\hbar c}{2} \int \frac{L^2}{(2\pi)^2} d^2 \vec{k}_{\parallel} \times \left[ k_{\parallel} + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \sqrt{k_{\parallel}^2 + \left(\frac{\pi n}{a}\right)^2} \right]. \quad (6.17)$$

Стоит отметить, что первое слагаемое в квадратных скобках выражения (6.17) соответствует поляризации, при которой компонента  $k_z$  равна нулю.

Отметим, что  $E_0$  не имеет какого-либо физического смысла в силу расходимости по верхнему пределу. Сравним ее с энергией свободного поля в том же объеме, которую можно записать как

$$E_{free} = \frac{\hbar c}{2} \int \frac{L^2}{(2\pi)^2} d^2 \vec{k}_{\parallel} \times 2 \int \frac{a}{2\pi} \sqrt{k_{\parallel}^2 + k_z^2} dk_z. \quad (6.18)$$

Далее можем записать удельную силу, действующую на единицу площади пластин:

$$\begin{aligned} \frac{E_0 - E_{free}}{L^2} = \zeta = \frac{\hbar c}{2} \frac{1}{(2\pi)^2} (2\pi) \int_0^{\infty} k_{\parallel} dk_{\parallel} \left[ k_{\parallel} + \right. \\ \left. + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \sqrt{k_{\parallel}^2 + \left(\frac{\pi n}{a}\right)^2} - 2 \int_0^{\infty} dn \sqrt{k_{\parallel}^2 + \left(\frac{\pi n}{a}\right)^2} \right]. \end{aligned} \quad (6.19)$$

Упростим выражение (6.19) и получим следующее:

$$\zeta = \frac{\hbar c}{2\pi} \int_0^{\infty} k_{\parallel} dk_{\parallel} \left[ \frac{1}{2} k_{\parallel} + \sum_{n=1}^{\infty} \sqrt{k_{\parallel}^2 + \left(\frac{\pi n}{a}\right)^2} - \int_0^{\infty} dn \sqrt{k_{\parallel}^2 + \left(\frac{\pi n}{a}\right)^2} \right]. \quad (6.20)$$

Полученный в (6.20) ответ расходится. Так, для его регуляризации необходимо ввести функцию обрезания. Использование такой функции обусловлено физическими соображениями. Например, если рассматривать задачу о прохождении света сквозь пластинки, всегда нужно помнить, что реальные пластинки обладают коэффициентом пропускания. Если представить это в реальности, то, в случае если пластинка проводящая, например, металлическая, у нее есть кристаллическая решетка с периодом порядка ангстрема. Те моды электромагнитного поля, которые соответствуют высоким частотам (длина волны много меньше периода решетки), свободно пройдут сквозь решетку. Таким частотам соответствуют частицы высокой энергии, рассеяние которых на любом потенциале является очень слабым. Граничные условия для таких частиц не влияют на прохождение через решетку, как и пластинки, и, наоборот, оказывают существенное влияние на длины волн, сравнимых с длиной периода решетки или даже превышающих данный размер. Таким образом, функция

обрезания должна ограничивать спектр частот, по которым ведется суммирование и интегрирование в (6.20) (рис. 6.4).

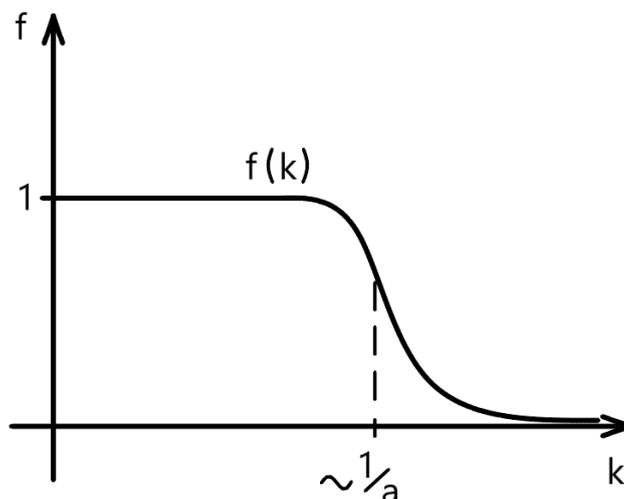


Рис. 6.4. График функции обрезания

Функция обрезания должна удовлетворять следующим условиям в нуле:

$$f(0) = 1, \quad f^{(n)}(0) = 0, \quad n \geq 1. \quad (6.21)$$

Далее, после введения функции обрезания, запишем ответ для удельной силы, действующей на единицу площади:

$$\zeta = \frac{\hbar c}{2\pi} \int_0^\infty k_{\parallel} dk_{\parallel} \left[ \frac{k_{\parallel}}{2} f(k_{\parallel}) + \sum_{n=1}^{\infty} \sqrt{k_{\parallel}^2 + \left(\frac{\pi n}{a}\right)^2} f\left(\sqrt{k_{\parallel}^2 + \left(\frac{\pi n}{a}\right)^2}\right) - \int_0^\infty dn \sqrt{k_{\parallel}^2 + \left(\frac{\pi n}{a}\right)^2} f\left(\sqrt{k_{\parallel}^2 + \left(\frac{\pi n}{a}\right)^2}\right) \right]. \quad (6.22)$$

Для того чтобы упростить выражение (6.22), удобно сделать следующую замену  $k_{\parallel}$ :

$$k_{\parallel} = \frac{\pi}{a} \sqrt{u}; \quad dk_{\parallel} = \frac{\pi}{2a} \frac{du}{\sqrt{u}}. \quad (6.23)$$

Тогда с учетом замен (6.23) выражение (6.22) может быть переписано в виде:

$$\zeta = \frac{\hbar c}{4\pi} \left(\frac{\pi}{a}\right)^3 \int_0^\infty du \left[ \frac{1}{2} \sqrt{u} f\left(\frac{\pi}{a} \sqrt{u}\right) + \sum_{n=1}^{\infty} \sqrt{u + n^2} f\left(\frac{\pi}{a} \sqrt{u + n^2}\right) - \int_0^\infty dn \sqrt{u + n^2} f\left(\frac{\pi}{a} \sqrt{u + n^2}\right) \right]. \quad (6.24)$$

В силу того, что в (6.24) при каждом слагаемом присутствует функция обрезания, интеграл сходится и является конечным, поэтому можно внести интеграл по  $du$  под

знак суммы, а также поменять порядок интегрирования в интеграле по  $dn$ . В таком случае можно ввести функцию:

$$F(n) = \int_0^\infty du \sqrt{u+n^2} f\left(\frac{\pi}{a}\sqrt{u+n^2}\right), \quad (6.25)$$

тогда выражение для удельной энергии можно переписать в виде

$$\zeta = \frac{\hbar c}{4\pi} \left(\frac{\pi}{a}\right)^3 \left[ \frac{1}{2}F(0) + \sum_{n=1}^\infty F(n) - \int_0^\infty dn F(n) \right]. \quad (6.26)$$

За счет наличия функции обрезания функция  $F$  определена для любого  $n$  и при  $n \rightarrow \infty$  функция  $F(n) \rightarrow 0$ . Далее воспользуемся формулой Эйлера-Маклорена замены бесконечной суммы интегралом с остаточным членом и таким образом преобразуем выражение из (6.26) в квадратных скобках:

$$\frac{1}{2}F(0) + \sum_{n=1}^\infty F(n) - \int_0^\infty dn F(n) = -\frac{1}{2!} B_2 F'(0) - \frac{1}{4!} B_4 F'''(0) + \dots + R, \quad (6.27)$$

где  $B$  - числа Бернулли, а  $R$  - остаточный член.

Остаточный член в выражении (6.27), исходя из физических соображений, можно опустить при условии, что последовательные производные функции  $F$  будут отличаться по знаку при больших аргументах.

**Пример 6.1.** Рассмотрим функции обрезания  $f$ , для которых остаточный член  $R$  можно опустить:

$$f(k) \sim e^{-\lambda k}, \quad (6.28)$$

$$f(k) \sim \frac{C}{k^\lambda}, \quad (6.29)$$

$$f(k) \sim e^{-\lambda k^2}. \quad (6.30)$$

Очевидно, что все производные функций, задаваемых выражениями (6.28)-(6.30), будут менять знак, что позволяет пренебречь  $R$ .

Функцию  $F$  может быть переписана при осуществлении сдвига  $u+n^2 \rightarrow u$ :

$$F(n) = \int_{n^2}^\infty \sqrt{u} f\left(\frac{\pi}{a}\sqrt{u}\right) du. \quad (6.31)$$

Далее запишем первую производную функции  $F$ :

$$F'(n) = -2n^2 f\left(\frac{\pi n}{a}\right). \quad (6.32)$$

Таким образом, для третьей производной от  $F$  в нуле с учетом введенных условий на обрезавшую функцию в нуле получим следующее:

$$F'''(0) = -4. \quad (6.33)$$

Для всех остальных же производных в нуле (в том числе для первой производной)

$$F'(0) = 0; F^{(n)} = 0. \quad (6.34)$$

В таком случае ответ для  $\zeta$ , получаемый подстановкой найденных производных для функции  $F$ , будет записан в виде:

$$\zeta = \frac{\hbar c}{4\pi} \left(\frac{\pi}{a}\right)^3 (-4) \frac{1}{30} \frac{1}{24} = -\frac{\hbar c \pi^2}{720 a^3}. \quad (6.35)$$

**Замечание 6.2.** Символы  $B$  в выражении (6.27) называются числами Бернулли, которые могут быть получены путем разложения в ряд по  $z$  функции вида:

$$\frac{z}{e^z - 1} = \sum_{n=0}^{\infty} B_n \frac{z^n}{n!}. \quad (6.36)$$

При этом числа  $B_2$  и  $B_4$  равны соответственно:

$$B_2 = \frac{1}{6}; B_4 = -\frac{1}{30}. \quad (6.37)$$

Все нечетные числа Бернулли, кроме  $B_1$ , равны нулю и быстро убывают с ростом их порядкового номера.

Далее уже можно записать окончательное выражение удельной силы Казимира для случая двух параллельных проводящих пластин:

$$F_{Cas} = -\frac{\partial \zeta}{\partial a} = -\frac{\pi^2 \hbar c}{240 a^4} \approx -\frac{0.013 \text{ дин}}{a^4 \text{ см}^2}. \quad (6.38)$$

Эффект Казимира является показательным с точки зрения того, что вакуумная энергия при правильном подходе может обеспечить наблюдаемые эффекты. Стоит отметить, что удельные сила и энергия не зависят от функции обрезания, а зависят только от расстояния между пластинами.

## Другие примеры эффектов Казимира

Помимо эффекта Казимира для двух параллельных проводящих пластин может быть интересен случай и проводящей сферы. В качестве граничных условий будет

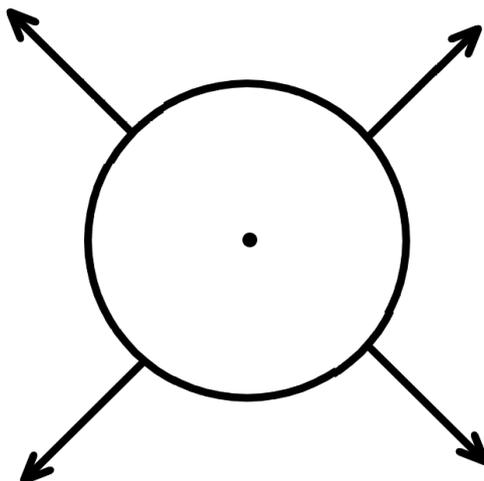


Рис. 6.5. Эффект Казимира для проводящей сферы

выступать поверхность сферы. При этом в результате решения такой задачи можно увидеть, что благодаря эффекту Казимира сфера будет сильно расширяться.

Одним из самых ярких наномасштабных примеров эффектов Казимира является зубчатая передача без трения (рис. 6.6).

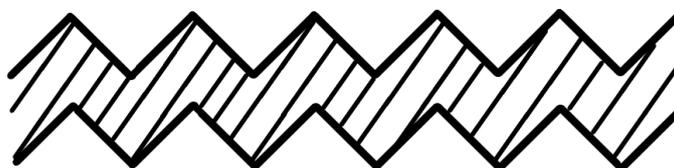


Рис. 6.6. Зубчатая передача без трения

В качестве зубчатых элементов выступают проводники, пространство между которыми заполняют диэлектриком со специальным подбором показателей диэлектрической проницаемости. Так, между такими зубчатыми элементами возникает отталкивание, что приводит к тому, что при движении, например, нижнего зубчатого элемента за счет казимировских сил отталкивания верхний зубчатый элемент будет приходить в движение без соприкосновения, хотя, как известно, сила трения возникнет только в случае, когда два зубчатых элемента соприкасаются, в результате чего и возникнет сцепление поверхностей.

Так как такие зубчатые элементы необходимо изготавливать с крайне высокой

степенью точности (порядок точности должен быть сравним с нанометровым масштабом), реально изготавливаемые зубчатые элементы по структуре подобны тем, что представлены на рис. 6.7.

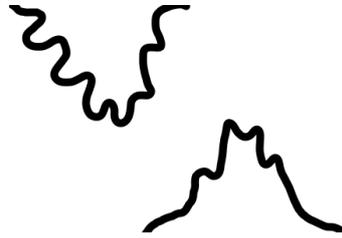


Рис. 6.7. Схематичный вид реально изготавливаемых зубчатых элементов

Как результат, из-за того, что силы Казимира довольно сильно изменяют величину с изменением угла, реализация такой передачи на сегодняшний день не представляется возможной.

## Матрицы плотности

В большинстве случаев в квантовой теории рассматриваются подсистемы, помещенные в некоторую объемлющую систему (рис. 6.8), с которой подсистемы находятся в контакте.

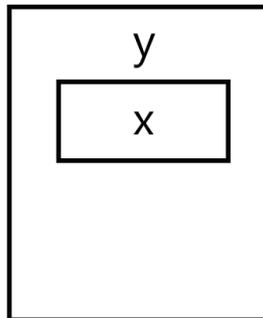


Рис. 6.8. Подсистема, помещенная в объемлющую систему

Контакт между подсистемой очень часто неконтролируемый. В доказательство этого можно привести следующий пример: каждый электрон на Земле очень слабо, но все же чувствует электрон на Луне, поскольку между ними существует кулоновское взаимодействие. Таким образом, любую систему в зависимости от необходимой

степени точности необходимо рассматривать как часть большей (объемлющей) системы. В то же время объемлющую систему можно считать за термостат, в котором, например, поддерживается постоянная температура.

Базисный вектор всей системы вместе с подсистемой можно записать в качестве тензорного произведения по двум типам переменных или по двум базисам. Один базис будет соответствовать подсистеме и в дальнейшем будет обозначаться как  $|\varphi_i\rangle$ . Другой - базис объемлющей части  $|\theta_j\rangle$ .

Введем дополнительное утверждение, которое представляет собой гипотезу:

**Утверждение 6.1.** *Вся система (подсистема + объемлющая система) находится в некотором чистом состоянии. Обозначим это чистое состояние как:*

$$\psi = \sum_{ij} C_{ij} |\varphi_i\rangle \otimes |\theta_j\rangle . \quad (6.39)$$

Выражение (6.39) представляет собой разложение по совокупному базису с коэффициентами  $C_{ij}$ , которые учитывают возможные корреляции между подсистемой и объемлющей частью.

Далее будем исследовать величины, относящиеся к подсистеме. Эти величины представляют собой операторы, которые должны раскладываться по базису подсистемы следующим образом:

$$A = \sum_{ik} A_{ik} |\varphi_i\rangle \langle \varphi_k| , \quad (6.40)$$

где

$$A_{ik} = \langle \varphi_i | A | \varphi_k \rangle . \quad (6.41)$$

В общем случае матрица  $A$  не является диагональной, но важно помнить, что величина  $A$  относится к подсистеме. Если необходимо расширить действие этого оператора на объемлющую систему, то необходимо дополнительно преобразовать выражение (6.40) так, что

$$A = \sum_{ikj} A_{ik} |\varphi_i\rangle |\theta_j\rangle \langle \theta_j| \langle \varphi_k| . \quad (6.42)$$

После преобразования (6.42) можно вычислить среднее значение по вектору чистого состояния  $\psi$ :

$$\bar{A} = \langle \psi | A | \psi \rangle . \quad (6.43)$$

Далее подставим ранее рассмотренные разложения  $\psi$  и  $A$ , и с учетом условий нормировки  $\langle \varphi_i | \varphi_k \rangle = \delta_{ik}$  и  $\langle \theta_j | \theta_m \rangle = \delta_{jm}$  получим выражение для  $\bar{A}$ :

$$\bar{A} = \sum_{i'j} C_{ij}^* C_{i'j} A_{i'i'} . \quad (6.44)$$

Далее введем матрицу  $\rho$ :

$$\rho_{i'i} = \sum_j C_{ij}^* C_{i'j} = \sum_j C_{i'j} (C^+)_{ji} . \quad (6.45)$$

Матрица  $\rho$  называется матрицей плотности и может быть компактно представлена в следующем виде:

$$\rho = C C^+ . \quad (6.46)$$

Структура (6.46) соответствует структуре неотрицательного оператора. У такого оператора все СЗ также являются неотрицательными. Ответ для  $\bar{A}$  в окончательном виде запишется так:

$$\bar{A} = \text{Tr} (\rho A) = \text{Tr} (A \rho) , \quad (6.47)$$

где предполагается, что  $\text{Tr}$  является сходящейся величиной.

По построению  $\rho$  представляет собой эрмитову матрицу и, соответственно, эрмитов оператор. Как и у любого эрмитового оператора, у матрицы плотности должно быть спектральное разложение по её базису:

$$\rho = \sum_n |n\rangle \omega_n \langle n| , \quad (6.48)$$

где предполагается нормировка  $\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$ .

**Замечание 6.3.** Матрица плотности также может быть составлена и записана для случая непрерывного спектра.

Каждый  $|n\rangle$  представляет собой СВ оператора  $\rho$ :

$$\rho |n\rangle = \omega_n |n\rangle , \quad (6.49)$$

где  $\omega_n \geq 0$ .

Если выбрать в качестве  $A$  единичный оператор, то получим что

$$1 = \text{Tr} \rho = \sum_n \omega_n . \quad (6.50)$$

Из (6.50) следует, что все  $\omega_n$  удовлетворяют условию  $0 \leq \omega_n \leq 1$ , а сумма всех СЗ матрицы плотности равна единице.

Смысл  $\omega_n$  и матрицы плотности наиболее просто объяснить, переписав выражение для  $\bar{A}$  по базису  $|n\rangle$ :

$$\bar{A} = \sum_n \langle n|A\rangle \rho|n\rangle . \quad (6.51)$$

Повернем унитарным преобразованием базис, с помощью которого осуществлялось вычисление матричного элемента в (6.51). Тогда  $|i\rangle = U|\alpha\rangle$  и

$$\sum_i \langle i|T|i\rangle = \sum_\alpha \langle \alpha|U^+ T U|\alpha\rangle . \quad (6.52)$$

Далее, если перейти к терминам следа матрицы, то, используя свойство перестановочности для сходящегося следа матрицы, получим под знаком  $\text{Tr}()$  следующее:

$$\text{Tr}(U^+ T U) = \text{Tr}(U U^+ T) = \text{Tr}(T) . \quad (6.53)$$

Следовательно, вычисление следа матрицы не зависит от базиса, в котором он вычисляется.

Далее перепишем ответ для среднего с учетом выражения для спектрального разложения  $\rho$  (6.48) и получим, что:

$$\bar{A} = \sum_n \langle n|A\rangle \rho|n\rangle = \sum_n \omega_n \langle n|A|n\rangle . \quad (6.54)$$

Веса  $\omega_n$  имеют статистический смысл, поэтому выражение (6.54) может быть трактовано следующим образом: среднее от величины  $A$  является смесью состояний  $|n\rangle$  с весами  $\omega_n$ , причем эти веса имеют вероятностный смысл. Отсюда возникает термин смешанного состояния.

Если  $\omega_n$  лежат в интервале от 0 до 1, то получается набор средних по всем  $n$ , который не совпадет ни с одним из соответствующих средних, в результате чего дисперсия величины  $A$  всегда будет отлична от нуля. Это означает, что не существует однозначной оценки получаемого состояния.

Смешанное состояние в частном случае может быть сведено к чистому состоянию. Такая ситуация возникнет, если какой-либо из  $\omega_n$  будет равен единице. Тогда в силу нормировки все остальные  $\omega_n$  должны быть равны нулю, и матрица плотности будет сведена к проектору на выделенный вектор  $n^*$ :

$$\rho = |n^*\rangle \langle n^*| ; \omega_{n^*} = 1 . \quad (6.55)$$

Далее запишем свойство проектора:

$$\rho^2 = \rho . \quad (6.56)$$

Свойство (6.56) является необходимым и достаточным условием для того, чтобы смешанное состояние сводилось к чистому.

Если система находится в состоянии (6.55), то среднее значение величины  $A$  может быть переписано в следующем виде:

$$\bar{A} = \text{Tr}(\rho A) = \langle n^* | A | n^* \rangle . \quad (6.57)$$

Выражение (6.57) совпадает с тем, что ранее было получено для среднего величины в базисе чистых состояний.

Далее рассмотрим наиболее значимый пример, связанный с матрицами плотности, а именно: рассмотрим систему в термостате, или осциллятор в термостате, при конечной температуре:

**Пример 6.2.** Пусть рассматривается абсолютно черное тело при постоянной температуре. Тогда для описания фотонных мод необходимо использовать матрицу плотности, которая для термостата может быть записана в виде

$$\rho = \frac{e^{-\beta H}}{\text{Tr}(e^{-\beta H})} , \quad (6.58)$$

где  $\beta = 1/kT$ .

Если далее раскладывать величину  $\rho$  по базису, то базисом для нее будет являться энергетический базис.

$$H|E_n\rangle = E_n|E_n\rangle . \quad (6.59)$$

В энергетическом виде матрица  $\rho$  будет иметь вид распределения Больцмана, нормированного на единицу.

Пусть система находится в некотором смешанном состоянии (то есть описывается матрицей плотности). Ответим на вопросом, с какой вероятностью в смешанном состоянии системы  $n$  будет обнаруживаться чистое состояние  $\chi$ ?

Пусть вектор  $\chi$  нормирован на единицу:

$$\langle \chi | \chi \rangle = 1 . \quad (6.60)$$

Найдем вероятность обнаружить в состоянии  $n$  состояние  $\chi$ :

$$P_{\chi}(\rho) = \sum_n \omega_n |\langle \chi | n \rangle|^2 . \quad (6.61)$$

Раскроем в выражении для  $P_{\chi}$  модуль. Тогда

$$P_{\chi}(\rho) = \langle \chi | \left( \sum_n \omega_n |n\rangle \langle n| \right) | \chi \rangle . \quad (6.62)$$

Далее, вспомнив спектральное разложение (6.48), получим окончательный ответ для  $P_{\chi}$ :

$$P_{\chi} = \langle \chi | \rho | \chi \rangle . \quad (6.63)$$

По своему виду выражение (6.63) напоминает среднее от физической величины, однако результат, полученный в ответе, является не значение физической величины, а вероятностью.

Предположим, что есть две матрицы плотности  $\rho_1$  и  $\rho_2$ . Известно, что в задаче задано состояние с матрицей плотности  $\rho_1$ . Тогда с какой вероятностью будут обнаружены свойства, характеризующиеся матрицей плотности  $\rho_2$ ?

Прежде всего запишем спектральное разложение для матрицы плотности  $\rho_2$ :

$$\rho_2 = \sum_{\nu} |\nu\rangle \varkappa_{\nu} \langle \nu| , \quad (6.64)$$

при этом для  $\rho_2$  будут выполняться следующие условия:

$$\sum_{\nu} \varkappa_{\nu} = 1; \quad 0 \leq \varkappa_{\nu} \leq 1 . \quad (6.65)$$

По условию система описывается с помощью  $\rho_1$ . Тогда вероятность  $P_{\rho_2}(\rho_1)$  можно записать в следующем виде:

$$P_{\rho_2}(\rho_1) = \sum_{\nu} \varkappa_{\nu} P_{\nu}(\rho_1) . \quad (6.66)$$

Величина  $P_{\nu}(\rho_1)$  лежит в интервале от 0 до 1, поэтому вероятность  $P_{\rho_2}(\rho_1)$  будет ограничена сверху:

$$P_{\rho_2}(\rho_1) \leq \sum_{\nu} \varkappa_{\nu} = 1 . \quad (6.67)$$

Подставим выражение для  $P_{\nu}(\rho_1)$  в (6.66) и получим, что

$$P_{\rho_2}(\rho_1) = \sum_{\nu} \varkappa_{\nu} \langle \nu | \rho_1 | \nu \rangle = \text{Tr}(\rho_1 \rho_2) . \quad (6.68)$$

Для доказательства последнего равенства внесем  $\varkappa_\nu$  в матричный элемент  $\langle \nu | \rho_1 | \nu \rangle$  и используем условие полноты базиса:

$$P_{\rho_2}(\rho_1) = \sum_{\nu'} \langle \nu' | \sum_{\nu} |\nu\rangle \varkappa_\nu \langle \nu | \rho_1 | \nu' \rangle = \text{Tr}(\rho_2 \rho_1) = \text{Tr}(\rho_1 \rho_2) . \quad (6.69)$$

Ответ получается симметричным, следовательно, в случае использования  $\rho_1$  можно рассматривать вероятность обнаружить  $\rho_2$ , либо наоборот.

Далее найдем вероятность обнаружить  $\rho$ , находясь в  $\rho$ :

$$P_\rho(\rho) = \text{Tr}\rho^2 = \sum_n \omega_n^2 . \quad (6.70)$$

В случае если матрица плотности  $\rho$  реализует чистое состояние, то  $P_\rho(\rho)$  будет равна единице. В противном случае все  $\omega_n$  будут равны числам в диапазоне от 0 до 1, и сумма будет меньше, чем:

$$P_\rho(\rho) < \sum_n \omega_n = 1 . \quad (6.71)$$

Выражение (6.71) показывает, что если рассматриваемый объект описывается матрицей плотности с весами от 0 до 1, то он задан неточно, поскольку его невозможно описать как состояние. Таким образом, в силу того, что состояние задано неточно, оно постоянно изменяется и не никогда не вернется в изначально заданное состояние.

## Лекция 7. Матрица плотности. Координатное и импульсное представление

### Приведенные матрицы плотности

Пусть есть подсистема и объемлющая система (см. рис. 6.8). Ранее мы предполагали, что объемлющая система представляет собой абсолютно все, и поэтому все сущее находится в состоянии, описываемом матрицей плотности с той или иной степенью точности. Теперь же мы будем предполагать, что объем ограничен, в результате чего весь существующий объем так же будет описываться матрицей плотности, так как он ограничен. Так, для „всего вместе“ введем матрицу плотности  $\rho$ . Пусть есть базис  $|\varphi_i\rangle \times |\theta_j\rangle$ . В силу того, что матрица плотности описывает совокупную систему, то в случае выбора диагонального базиса  $\rho$  можно представить в следующем виде:

$$\rho = \sum_{ij} |n_{ij}\rangle \omega_{ij} \langle n_{ij}| . \quad (7.1)$$

Обратим внимание, что двойной индекс суммирования указывает на то, что базис является сложным. Так, индекс  $i$  отвечает за подсистему, а  $j$  - за объемлющую часть. Обозначим веса отдельных состояний:

$$\sum_{ij} \omega_{ij} = 1 . \quad (7.2)$$

Будем исследовать подсистему. Тогда величину  $A$  из этой подсистемы можно задать в виде

$$A = \sum_{ij, i'j'} |n_{ij}\rangle A_{ij, i'j'} \langle n_{i'j'}| . \quad (7.3)$$

Так, в нашем базисе матрица оператора уже не будет являться диагональной. Единственным условием будет являться то, что для подсистемы оператор  $A$  является нетривиальной физической величиной, а для всеобъемлющей части - единичным оператором. Таким образом, матричные элементы будут устроены следующим образом:

$$A_{ij, i'j'} = A_{ii'} \delta_{jj'} . \quad (7.4)$$

Тогда вычисление среднего данной величины будут осуществляться исходя из общего правила для всей системы:

$$\bar{A} = \text{Tr}(A\rho) = \sum_{ij} \langle n_{ij}| A \rho |n_{ij}\rangle = \sum_i \langle n_i| A_1 \rho_1 |n_i\rangle . \quad (7.5)$$

Последнее равенство в (7.5) объясняется тем, что величина  $A$  является диагональной по  $j$ . Таким образом, суммирование будет происходить лишь по одному индексу  $i$ , а матрица  $A\rho$  усредняется по индексу  $j$ .

При этом обозначим, что

$$A_1 = \sum_{ii'} |n_i\rangle A_{ii'} \langle n_{i'}|, \quad (7.6)$$

$$\rho_1 = \text{Tr}_2 \rho, \quad (7.7)$$

где  $\text{Tr}_2$  означает вычисление следа матрицы по переменным  $j$ , или по объемлющей части.

Следовательно, вычисление сводится к нахождению следа матрицы в подсистеме:

$$\bar{A} = \text{Tr}(A\rho) = \text{Tr}\rho_1 A_1. \quad (7.8)$$

У данной формулы и такого способа описания есть целый ряд очень удобных примеров, самый простой из которых звучит следующим образом:

**Пример 7.1.** Пусть есть два спина  $S_1 = S_2 = \frac{1}{2}$ . Тогда, принимая во внимание, что

$$\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2, \quad (7.9)$$

в терминах суммарного спина возможен либо синглет либо триплет:

$$S = 0, 1. \quad (7.10)$$

Из курса атомной физики вспомним устройство синглета:

$$|S=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [\uparrow_1\downarrow_2 - \downarrow_1\uparrow_2] = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \right). \quad (7.11)$$

Напомним, что стрелки представляют собой проекции спина вдоль выбранной оси квантования. Предположим, что наша совокупная система, состоящая из двух равновеликих половин, находится в чистом состоянии. Тогда соответствующая матрица плотности будет являться проектором на наше синглетное чистое состояние в двухспиновой системе.

$$\rho = |S=0\rangle\langle S=0| = \frac{1}{2} |\uparrow_1\downarrow_2 - \downarrow_1\uparrow_2\rangle \langle\uparrow_1\downarrow_2 - \downarrow_1\uparrow_2|. \quad (7.12)$$

Будем производить измерение некоторой величины над спином  $S_1$ . Соответствующая матрица плотности будет выглядеть следующим образом:

$$\rho_1 = \text{Tr}_2 \rho = \langle \uparrow_2 | \rho | \uparrow_2 \rangle + \langle \downarrow_2 | \rho | \downarrow_2 \rangle = \frac{1}{2} (| \downarrow_1 \rangle \langle \downarrow_1 | + | \uparrow_1 \rangle \langle \uparrow_1 |) . \quad (7.13)$$

Таким образом, мы получили приведенную матрицу плотности по первому спину в синглете, представляющую собой матрицу плотности, разложение по базису которой осуществляется с весовыми коэффициентами  $1/2$  в силу равномерного смешивания. В результате удалось получить некоторую "смесь" состояний поляризации спина либо по оси квантовая, либо против. Поэтому среднее значение спина на, например, ось  $z$ , будет равно нулю.

$$\overline{S_{1z}} = \text{Tr}(\rho_1 S_{1z}) = 0 . \quad (7.14)$$

Важно, что это не собственное значение спина, а среднее в силу нахождения системы в смешанном состоянии, когда все три проекции равны нулю. При этом значения квадратичных дисперсий уже будут отличны от нуля. Их можно найти с помощью следующего рассуждения: результат в виде среднего, равного нулю, означает то, что в силу одинаковости весов получение значений как  $\frac{1}{2}$ , так и  $-\frac{1}{2}$  равновероятно. В результате этого при перемножении веса на количество возможных значений и на квадратичное отклонение от среднего, получим следующий результат:

$$\frac{1}{2} \cdot 2 \cdot \frac{1}{4} = \frac{1}{4} . \quad (7.15)$$

Полученный результат является довольно простым для понимания, однако он позволяет снова продемонстрировать, что Эйнштейн в своих рассуждениях, связанных с парадоксами, был не прав. Приведем спиновый (можно и в координатном) вариант рассуждения: пусть распадается ядро со спином, равным 0, на два фрагмента.

Суммарный спин (по нашему предположению, синглет) сохраняется. В результате разлета ядра на два фрагмента в первой подсистеме измеряется  $S_{1x}$  (при этом измерить  $S_{1y}$  и  $S_{1z}$  мы не можем, так как они не коммутируют), во второй подсистеме -  $S_{2y}$ . В силу закона сохранения по  $S_{2y}$  восстановим  $S_{1y}$ , так как данный закон для синглета предполагает следующее равенство:

$$S_{1i} + S_{2i} = 0 . \quad (7.16)$$

В результате мы убеждаемся в том, что возможно создать условия, в которых обе не коммутирующие проекции первого спина могут быть измерены с произволь-

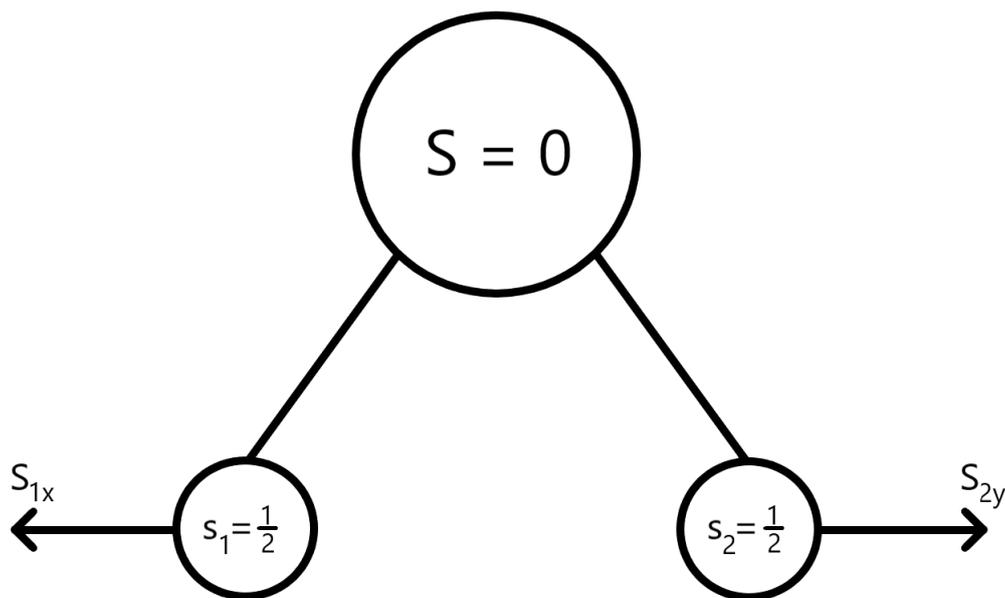


Рис. 7.1. Распад ядра со спином  $S = 0$  на два фрагмента

ной точностью. Ошибка данного рассуждения состоит в следующем: нельзя пользоваться классическими соображениями для закона сохранения, если система является квантовой. То есть Эйнштейн предполагал, что фрагменты системы можно рассматривать по отдельности, однако на самом деле система является совокупной. Для работы с совокупными системами необходимо использовать приведенные матрицы плотности. Так, разлетные компоненты по-прежнему будут образовывать синглет, в силу чего они могут быть описаны с помощью рассмотренной ранее матрицы плотности, а каждый из спинов по отдельности может быть описан через приведенную матрицу плотности с равномерным смешиванием. Тогда ни одна из проекция спина не сможет быть точно измеренной, так как средняя проекция всегда будет равна нулю, а также будет существовать дисперсия, рассчитанная ранее.

Аналогичное можно получить и в координатном представлении, рассматривая двухчастичную волновую функцию для того, чтобы получить приведенные координатные матрицы плотности и проделать с ними абсолютно идентичные действия в терминах координат. В результате мы сможем убедиться, что измерение координат с произвольной точностью невозможно в силу закона сохранения импульса.

## Общий закон эволюции

В силу того, что матрицы плотности по сути „заменяют“ вектор состояния, для которого закон эволюции представляет собой уравнение Шредингера, для матриц плотности также должно существовать эволюционное уравнение. Ограничимся рассмотрением лишь консервативных систем, то есть когда  $H = Const$ . По определению, матрица плотности записывается так:

$$\rho(t) = \sum_i \omega_i |n_i(t)\rangle \langle n_i(t)|, \quad (7.17)$$

где  $n_i(t)$  - это базис, по которому ведется разложение. В нашем консервативном случае оператор эволюции сводится к экспоненте:

$$|n_i(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} |n_i(0)\rangle, \quad (7.18)$$

тогда

$$\rho(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} \sum_i \omega_i |n_i(0)\rangle \langle n_i(0)| e^{\frac{i}{\hbar}Ht} = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} \rho(0) e^{\frac{i}{\hbar}Ht}. \quad (7.19)$$

Аналогичное можно записать и в терминах оператора эволюции:

$$\rho(t) = U(t) \rho(0) U^\dagger(t). \quad (7.20)$$

Перейдем в дифференциальную форму записи:

$$\dot{\rho} = \frac{i}{\hbar} [\rho, H]. \quad (7.21)$$

Отметим, что любая физическая величина изменяется во времени в представлении Гейзенберга очень похожим образом, однако  $\rho(t)$  не является физической величиной. Это величина, которая заменяет вектор чистого состояния, в результате чего имеет отличный закон эволюции во времени.

## Характеристика разброса смешанного состояния

Известно, что для описания смешанного состояния необходимо использование матриц плотности. Для того чтобы охарактеризовать разброс такого состояния, введем по аналогии со статистической физикой так называемую "энтропию" то есть величину  $S$ , которая будет являться мерой неупорядоченности нашей системы:

$$S = -\text{Tr}(\rho \ln \rho) = -\sum_n \omega_n \ln \omega_n \geq 0. \quad (7.22)$$

Заметим, что введенная нами „нечестная“ энтропия всегда является неотрицательной. Это доказывается с помощью последнего равенства в (7.21), которое представляет собой переход к собственному базису, где все  $\omega_n$  находятся в интервале  $[0,1]$ .

С помощью данной формулы легко также рассчитать значение энтропии для ранее уже исследованной спиновой подсистемы с равномерным смешиванием:  $\ln 2$ .

Разница между стат. физической энтропией и величиной  $S$ , введенной нами, прежде всего состоит в том, что „настоящая“ энтропия всегда растет. В нашем же случае это не так. При подстановке закона эволюции (7.20) под знак  $\text{Tr}$  в выражении (7.22) получим

$$S = -\text{Tr} [U \rho(0) \ln \rho(0) U^+] . \quad (7.23)$$

Формально выражение под логарифмом можно представить как

$$\ln [1 + \rho - 1] = \ln [U (1 + \rho - 1) U^+] . \quad (7.24)$$

Таким образом, после перестановки операторов под знаком  $\text{Tr}$  по циклу получаем, что энтропия в момент времени  $t$  равна энтропии в момент времени  $t = 0$ , что означает, что данная величина является постоянной:

$$S = -\text{Tr} [\rho(0) \ln \rho(0)] . \quad (7.25)$$

## Координатное и импульсное представление

Координатное и импульсное представление представляет собой реализации Гильбертова пространства в терминах обобщенного базиса, координатного и импульсного.

Запишем коммутационное соотношение

$$[\hat{q}, \hat{p}] = i \hbar . \quad (7.26)$$

Введем оператор трансляции

$$S(a) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{p} a} . \quad (7.27)$$

Данный оператор осуществляет функцию сдвига координаты на величину  $a$  за счет унитарного преобразования:

$$S^+(a) \hat{q} S(a) = \hat{q} + a . \quad (7.28)$$

Отметим, что:

$$S^+ S = 1 . \quad (7.29)$$

Величина  $a$  является произвольным вещественным числом, которое позволяет изменять координату на произвольное вещественное значение. Тогда если предположить, что у оператора координаты существует хотя бы один нормальный СВ:

$$\hat{q}|q_0\rangle = q_0|q_0\rangle, \quad (7.30)$$

то есть СВ, принадлежащий Гильбертову пространству (нормируемый на единицу):

$$\langle q_0|q_0\rangle = 1. \quad (7.31)$$

Пусть есть оператор координаты, который определяется как самосопряженный оператор пределом осцилляторных матриц при  $n \rightarrow \infty$ . По теореме Гильберта, такой оператор обязательно существует в гильбертовом пространстве у него набор СВ и СЗ. Предположим, что у нас существует хотя бы один СВ и соответствующий ему СЗ. Введем вектор  $|\tilde{q}_0\rangle$ , который получается из  $|q_0\rangle$  при действии на него оператора трансляции.

$$|\tilde{q}_0\rangle = S(a)|q_0\rangle. \quad (7.32)$$

Если  $S$ - унитарный оператор,  $|q_0\rangle$ - нормирован, то  $|\tilde{q}_0\rangle$  тоже нормирован.

$$\langle \tilde{q}_0|\tilde{q}_0\rangle = 1, \quad (7.33)$$

при этом данный вектор будет обладать таким свойством, что если в операторном виде

$$\hat{q}S = S(\hat{q} + a), \quad (7.34)$$

то при действии оператора  $\hat{q}$  на  $|\tilde{q}_0\rangle$  получим следующее:

$$\hat{q}|\tilde{q}_0\rangle = \hat{q}S(a)|q_0\rangle = S(\hat{q} + a)|q_0\rangle = (q_0 + a)|\tilde{q}_0\rangle. \quad (7.35)$$

Таким образом,  $|\tilde{q}_0\rangle$  также является СВ оператора  $\hat{q}$  с СЗ  $q_0 + a$ . Если  $a \neq 0$ , то в силу общего свойства эрмитовых операторов, а именно: два СВ, отвечающих различным СЗ, обязательно ортогональны:

$$\langle q_0|\tilde{q}_0\rangle = 0. \quad (7.36)$$

В предположении существования хотя бы одного нормального СВ у оператора  $\hat{q}$  существует еще континуум других ортогональных между собой СВ, отличающихся по СЗ со сдвигом на  $a$ . В силу того, что  $a$ - вещественное, мы имеем дело с континуумом, однако в Гильбертовом пространстве не может быть континуума линейно-

независимых СВ, так как для их описания требуется континуальный базис. Счетным набором векторов невозможно описать континуум, так как это множества разной мощности, что следует из теоремы Кантора. Это означает, что исходное предположение не является верным, поэтому занулим СВ. Следовательно, ни одного нормированного СВ у оператора  $\hat{q}$ , тем не менее сам оператор  $\hat{q}$  существует и является самосопряженным и определенным через предел. С точки зрения спектрального разложения у данного оператора должно быть разложение, в котором нет дискретной части, а есть только непрерывный спектр. Запишем оператор  $\hat{q}$ :

$$\hat{q} = \int |q\rangle q \langle q| dq , \quad (7.37)$$

при этом:

$$\langle q|q'\rangle = \delta(q - q') . \quad (7.38)$$

Так, базис является обобщенным. Ни один из векторов Гильбертова пространства ему не принадлежит. Однако базис существует в силу общей теоремы о разложении самосопряженных операторов. Таким образом

$$\hat{q}|q\rangle = q|q\rangle . \quad (7.39)$$

Иными словами, каждый  $|q\rangle$  является СВ оператора координаты и имеет бесконечную норму. При этом

$$\int |q\rangle \langle q| dq = 1 . \quad (7.40)$$

Таким образом, имеем один из способов разложения любого вектора Гильбертова пространства в обобщенный базис. Именно это и порождает координатное представление.

Воспользуемся стандартным приемом. Будем основываться на исходном пространстве Гильбертовых векторов:

$$|\psi\rangle \in H . \quad (7.41)$$

Для удобства предположим, что вектор имеет единичную норму:

$$\langle \psi|\psi\rangle = 1 . \quad (7.42)$$

### Координатное представление

Будем использовать координатное представление и запишем вектор  $|\psi\rangle$  следующим образом:

$$|\psi\rangle = \int |q\rangle \langle q|\psi\rangle dq . \quad (7.43)$$

Такое разложение легитимно, так как мы имеем дело с обобщенным базисом Гильбертова пространства. Для матричного элемента введем обозначение  $\psi(q)$ , назвав его волновой функцией:

$$\psi(q) = \langle q|\psi \rangle . \quad (7.44)$$

Обозначим, что наша волновая функция нормирована по квадрату модуля:

$$\langle \psi|\psi \rangle = 1 = \int |\psi(q)|^2 dq . \quad (7.45)$$

Далее раскроем физический смысл волновой функции. Для этого перейдем к вычислению средней координаты по исходной формуле для среднего:

$$\bar{q} = \langle \psi|\hat{q}|\psi \rangle = \int q |\psi(q)|^2 dq . \quad (7.46)$$

Таким образом, единственно возможной трактовкой квадрата волновой функции является плотность распределения вероятности обнаружить значение  $q$  нашей частицы. При этом важно отметить, что ни в коем случае нельзя трактовать волновую функцию как некую „размазку“ частицы в нечто облачное, потому что речь идет о вероятности обнаружить частицу с конкретным значением координаты, которая как была частицей, так ей и останется. Так, например, электрон в электронно-атомной оболочке всегда есть где-то целиком с зарядом, массой, спином и т.д. Тем не менее, в ряде задач, например Борновского рассеяния на атомах, очень удобно представлять электронную оболочку в виде плотности заряда, тем не менее при включении обменных эффектов оболочки уже отсутствуют, есть электрон, находящийся в определенном месте.

### Импульсное представление

Координатное и импульсное представление являются двумя абсолютно равноправными реализациями Гильбертова пространства. Получение импульсного базиса происходит аналогично получению координатного, однако в этом случае необходимо использовать унитарный оператор трансляции по импульсам:

$$S(b) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{q} b} . \quad (7.47)$$

Отличие данного оператора от оператора (7.27) заключается в операторе координаты и знаке экспоненты, однако их свойства аналогичны:

$$S^+(b) \hat{p} S(b) = \hat{p} + b . \quad (7.48)$$

Так, будет происходить сдвиг импульса на произвольное число  $b$ . Все остальные рассуждения полностью аналогичны тем, что были проделаны при изучении координатного представления. Так, можно показать, что у оператора импульса не существует ни одного нормального нормированного собственного вектора. Тем самым, у него существует только непрерывный спектр. Таким образом, для импульсного представления будут выполняться те же построения, что и для координатного. Так, например, разложение в непрерывный спектр

$$\hat{p} = \int |p\rangle p \langle p| dp . \quad (7.49)$$

При этом:

$$\langle p|p'\rangle = \delta(p - p') . \quad (7.50)$$

Далее покажем, что каждый вектор обобщенного базиса является СВ оператора импульса:

$$\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle . \quad (7.51)$$

Однако данные вектора не являются векторами Гильбертова пространства, их норма является бесконечной.

$$\int |p\rangle \langle p| dp = 1 . \quad (7.52)$$

В импульсном базисе аналогично координатному можно провести разложение вектора  $|\psi\rangle$ :

$$|\psi\rangle = \int |p\rangle \langle p|\psi\rangle dp . \quad (7.53)$$

Аналогично вводим волновую функцию ранее рассмотренного состояния:

$$\tilde{\psi}(p) = \langle p|\psi\rangle . \quad (7.54)$$

Свойства  $\tilde{\psi}$  полностью аналогичны свойствам  $\psi$  в координатном базисе:

$$\int |\tilde{\psi}|^2 dp = 1 . \quad (7.55)$$

Таким образом:

$$\bar{p} = \langle \psi|p|\psi\rangle = \int p |\tilde{\psi}|^2 dp . \quad (7.56)$$

Физическим смыслом  $|\tilde{\psi}|^2$  является плотность вероятности обнаружить частицу с данным значением импульса  $p$  в интервале  $dp$ .

Таким образом, мы имеем две эквивалентные реализации Гильбертова пространства, физика которых абсолютно одинакова. Выбор базиса зависит из соображений удобства для любой конкретной задачи.

Далее переведем все операторы в координатное представление. Определим действие оператора координаты непосредственно на волновую функцию  $\psi(q)$ :

$$(\hat{q}\psi)(q) \equiv \langle q|\hat{q}|\psi\rangle = q\psi(q) . \quad (7.57)$$

Следовательно, в координатном представлении оператор координаты сводится к умножению на аргумент волновой функции. Далее определим действие оператора импульса. Удобно постулировать это действие, а затем сослаться на теорему фон Неймана, из которой следует следующая координатная реализация оператора  $\hat{p}$ :

$$(\hat{p}\psi)(q) \equiv \langle q|\hat{p}|\psi\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q}\psi(q) . \quad (7.58)$$

Проверим, что в координатном представлении выполняется канонический коммутатор. Распишем коммутатор

$$[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar \Rightarrow \left[ q \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial q} \right) - \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial q} q \right) \right] \psi(q) = i\hbar \psi(q) . \quad (7.59)$$

Полученный ответ абсолютно корректен. Второй важный момент, требующий проверки, заключается в том, что известно, что оператор  $\hat{p}$ , определенный через такую производную, является самосопряженным, поэтому его действие можно переводить слева направо. Построим следующий матричный элемент, и если оператор является самосопряженным, то его действие можно будет перевести в обе стороны:

$$\langle \psi_1 | (\hat{p} | \psi_2 \rangle) = (\langle \psi_1 | \hat{p} | \psi_2 \rangle) = \int \psi_1^*(q) \left( -i\hbar \frac{\partial \psi_2}{\partial q} \right) dq . \quad (7.60)$$

Далее отметим один важный момент перед началом интегрирования по частям. В силу того, что волновые функции должны быть квадратично интегрируемы, должно выполняться следующее условие:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_1(q)|^2 dq = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_2(q)|^2 dq = 1 . \quad (7.61)$$

Чтобы интегралы сходились, то подынтегральные функции на бесконечности должны зануляться. Тогда внешняя подстановка исчезает, внеинтегральная, и при перекидывании производной получаем следующее:

$$\begin{aligned} & \int \psi_1^*(q) \left( -i\hbar \frac{\partial \psi_2}{\partial q} \right) dq = \\ & = \int \left( i\hbar \frac{\partial \psi_1^*}{\partial q} \right) \psi_2 dq = \int \left( -i\hbar \frac{\partial \psi_2}{\partial q} \right)^* \psi_1(q) dq = (\langle \psi_1 | \hat{p} | \psi_2 \rangle) . \end{aligned} \quad (7.62)$$

В результате мы получили ровно то, что и хотели доказать. Однако при введении условия нормировки было не совсем правильно считать, что на пространственных

бесконечностях функция будет равна нулю. Так, например, введем функцию, которая представляет из себя столбцы высотой единица в целых точках и шириной  $\frac{1}{n^2}$ , в следствие чего с ростом  $n$  они будут сужаться. Данные столбцы необходимо сгладить, сделав из них гладкую форму.

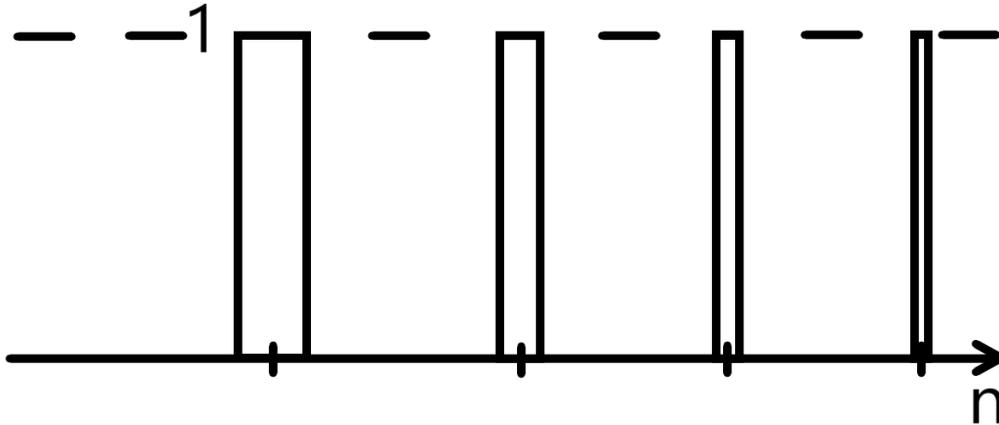


Рис. 7.2. Функция, состоящая из столбцов высотой 1 и шириной  $\frac{1}{n^2}$

Возникает вопрос, что будет происходить на бесконечности? На бесконечности будут те же самые единицы с той же самой шириной. Таким образом, интеграл будет сведен к сумме:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(q)|^2 dq = 1 \longrightarrow \sum \frac{1}{n^2} < \infty . \quad (7.63)$$

Данная сумма является сходящейся, и ее всегда можно отнормировать на единицу. Функция на бесконечности не является нулем. Все интегралы на самом деле определяются свойствам Лебега, а не Римана. Важно, что в интегралах Лебега есть понятие множества меры нуль. Вклад от данных прямоугольников при больших  $n$  пренебрежимо мал, поэтому с точки зрения интеграла множество меры нуль всегда можно выбросить. Таким образом, наши вычисления являются честными.

В импульсном представлении все то же самое. Действие оператора импульса  $\hat{p}$  на волновую функцию  $\tilde{\psi}$  сводится к умножению на ее аргумент:

$$\hat{p}\tilde{\psi}(p) = p\tilde{\psi}(p) . \quad (7.64)$$

Действие оператора координаты же сводится к следующему:

$$(\hat{q}\tilde{\psi})(p) = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \tilde{\psi}(p) . \quad (7.65)$$

Обсудим следующий вопрос: насколько однозначным является определение импульса или координаты как производных? Данный вопрос является крайне существенным, и ответ на него может дать теорема фон Неймана.

**Утверждение 7.1.** *Если мы имеем дело с конечным числом степеней свободы (то есть конечным числом коммутационных соотношений):*

$$[q_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij}, \quad i, j = 1, \dots, N, \quad (7.66)$$

*то представление импульса в координатном представлении  $-i\hbar\nabla$  и координаты в импульсном представлении  $i\hbar\nabla$  являются однозначными с точностью до унитарного преобразования, которое по сути ни на что не влияет, так как представляет собой поворот базиса, не влекущий физических изменений.*

Тем не менее, это верно только при конечном  $n$ , в бесконечномерном же случае (в больших статистических системах) данное утверждение не выполняется. К сожалению, пока наука не дает ответа на вопрос о том, какие различные унитарно-неэквивалентные подстановки коммутационных соотношения возможны. Однако это считается очень перспективным в статистической физике, так как факт возможности неэквивалентных подстановок с разной физикой является ключом к решению вопроса о фазовых переходах (по крайней мере, пока это не опровергнуто). Почему это так? Чтобы ответить на данный вопрос, приведем пример фазового перехода.

**Пример 7.2.** *Пусть есть система, например, проводник, все время состоящая из электронов проводимости и решетки, которая может возбуждаться фононными модами, имея электронные и решеточные степени свободы. В нормальной ситуации, когда при токе электроны мигрируют по решетке, сталкиваясь с узлами и возбуждая фононные моды, в данной системе возникает сопротивление, проводник нагревается, и далее все происходит по з. Ома. Однако та же самая система с теми же самыми степенями свободы (которых на самом деле бесконечно много), но при температуре, меньшей чем  $T_c$ , может показывать явление сверхпроводимости в тех случаях, когда работа ведется со сверхпроводниками. Единственным разумным объяснением является то, что при температурах, меньших, чем  $T_c$ , реализуется другое представление канонических коммутационных соотношений для тех же самых степеней свободы, что как раз-таки и позволяет теорема фон Неймана.*

Далее рассмотрим связь двух ранее рассмотренных волновых функций:

$$\psi(q) \longleftrightarrow \tilde{\psi}(p) . \quad (7.67)$$

Так, между ними должна быть взаимно-однозначная связь, так как они представляют собой две реализации одного и того же вектора Гильбертова пространства (либо в разложении по координатному базису, либо по импульсному). Для того чтобы показать это, распишем  $\psi(q)$ , подставив разложение по импульсному базису:

$$\psi(q) = \langle q|\psi\rangle = \int \underbrace{\langle q|p\rangle}_{\psi_p(q)} \tilde{\psi}(p) dp . \quad (7.68)$$

Далее найдем матричный элемент  $\psi_p(q)$ :

$$\langle q|\hat{p}|p\rangle = p\psi_p(q) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q}\psi_p(q) . \quad (7.69)$$

С одной стороны, оператор импульса  $\hat{p}$  действует на свой собственный вектор  $|p\rangle$ , а с другой - в координатном представлении оператор импульса можно выразить через производную. Таким образом, мы получили дифференциальное уравнение, решением которого является плоская волна:

$$\psi_p(q) = C e^{\frac{i}{\hbar}pq} . \quad (7.70)$$

В силу того, что  $\psi_p$  представляет собой координатную реализацию вектора  $|p\rangle$ , по определению:

$$\langle p|p'\rangle = \delta(p-p') . \quad (7.71)$$

Далее распишем единицу в виде разложения по координатному базису:

$$\langle p|p'\rangle = \int \psi_p^*(q) \psi_{p'}(q) dq = C_p^* C_{p'} \int e^{\frac{i}{\hbar}(p'-p)q} dq = C_p^* C_{p'} 2\pi\hbar \delta(p-p') . \quad (7.72)$$

Отсюда из (7.71-7.72):

$$|C_p|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar} . \quad (7.73)$$

Тогда нормированная функция  $\psi_p$  может быть записана в виде

$$\psi_p(q) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}pq} . \quad (7.74)$$

Выражение (7.74) представляет собой плоскую волну, которая не существует как физический объект, так как она не является локализованной в конечном пространстве, но в силу того, что базисные вектора в рассматриваемом случае являются обобщенными, плоские волны могут использоваться. Физический же смысл имеет волновой пакет с квадратично интегрируемой огибающей, в качестве которого выступает

исходный вектор  $\psi$ . Функции  $\psi_p(q)$  представляют собой разложение по базису. Ядра интегрального преобразования  $\psi(q) - \tilde{\psi}(p)$  приводят к следующему выражению:

$$\psi(q) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{\frac{i}{\hbar}pq} \tilde{\psi}(p) dq. \quad (7.75)$$

Выражение (7.75) представляет собой преобразование Фурье с одной степенью свободы. Для трехмерного случая его можно переписать в виде

$$\psi(\vec{r}) = (2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}} \int e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}} \tilde{\psi}(\vec{p}) d\vec{p}. \quad (7.76)$$

Обратное преобразование можно записать в виде

$$\tilde{\psi}(\vec{p}) = (2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}} \int e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}} \psi(\vec{r}) d\vec{r}. \quad (7.77)$$

### Матрица плотности в координатном представлении

Рассмотрим случай обобщенной матрицы плотности. Система вместе с подсистемой представляют собой некоторое чистое состояние. Так, координатном представлении все будет описываться в терминах волновой функции с двумя типами координатных аргументов:  $x$  - подсистема,  $y$  - объемлющая система. В таком случае координатный базис может быть записан в виде

$$\psi(x, y) = \langle x | \times \langle y | \psi \rangle. \quad (7.78)$$

Далее ответим на следующий вопрос: как задается матрица плотности? Будем исследовать подсистему, в которой все операторы представляют собой интегральные операторы с ядром

$$A(x, x') = \langle x | A | x' \rangle. \quad (7.79)$$

В объемлющей части по координате  $y$  (7.79) равно единице. Вычислим среднее значение величины  $A$ :

$$\bar{A} = \langle \psi | A | \psi \rangle = \int \psi^*(x, y) A(x, x') \psi(x', y) dx dy dx'. \quad (7.80)$$

Если записывать выражение (7.80) в более общем виде, то, вообще говоря,  $A$  будет являться функцией четырех аргументов. Так, необходимо будет вычислять интеграл и по  $y'$ , который впоследствии может быть опущен в силу следующего условия:

$$A(x, y; x', y') = A(x, x') \delta(y, y'). \quad (7.81)$$

Далее преобразуем выражение (7.80):

$$\bar{A} = \int A(x, x') \rho(x', x) dx dx' = \text{Tr} \rho A, \quad (7.82)$$

где  $\rho(x', x)$  может быть записан в следующем виде:

$$\rho(x', x) = \int \psi^*(x, y) \psi(x', y) dy. \quad (7.83)$$

$\rho(x', x)$  представляет собой матрицу плотности в координатном базисе, которую определяет выражение (7.83). Такая матрица обладает свойством эрмитовости. Легко можно убедиться в том, что

$$\rho^*(x, x') = \rho(x', x). \quad (7.84)$$

Переведем действие оператора  $A$  на вектор  $\psi$ , в результате чего получим

$$\langle x|A|\psi\rangle = \int \langle x|A|x'\rangle \langle x'|\psi\rangle dx' = \int A(x, x') \psi(x') dx'. \quad (7.85)$$

Таким образом, в непрерывном случае, в отличие от дискретного, за счет работы с непрерывным базисом вместо суммирования используется интегрирование, а матрица плотности представляет собой ядро интегрального оператора.

Далее, после введения операторов в представление Шредингера, рассмотрим координатные задачи, примером которых является задача на частицу в потенциальном поле.

## Частица в потенциальном поле

Оператор гамильтона для задач на частицы в потенциальном поле в общем виде может быть записан как

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}). \quad (7.86)$$

Задачи с гамильтонианом такого вида предполагают их решение в координатном представлении. Далее будут рассматриваться задачи различной размерности: 1D, 2D и 3D.

Запишем нестационарное уравнение Шредингера для системы с гамильтонианом (7.86):

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}, t), \quad (7.87)$$

где  $\psi(\vec{r}, t)$  - волновая функция или координатная реализация базиса.

Про задачи такого рода необходимо знать 10 главных свойств, которые применимы чаще всего в случае поиска стационарного состояния. Для этого необходимо решать следующую задачу:

$$H\psi = E\psi . \quad (7.88)$$

Задачи, решаемые с помощью стационарного уравнения Шредингера, сводятся к задачам на эллиптический оператор.

Запишем 10 главных свойств, о которых упоминалось ранее:

- 1) Уравнение Шредингера может быть решено для регулярных потенциалов, ведущих себя как непрерывные функции, которые могут иметь разную асимптотику на бесконечности, зануляться как, например, в случае кулоновского потенциала, осциллировать как, например, в случае периодического потенциала кристаллической решетки, создавать разного рода ямы. Кроме того, в  $V(\vec{r})$  допустимы разного рода особенности, например, случаи дельта-потенциалов.
- 2) Вариационный принцип, использование которого очень полезно в ряде случаев для оценки пробных функций. Также данный принцип является чрезвычайно удобным для вычислительных задач. Вариационный принцип может быть трактован следующим образом: введем дополнительный функционал от функций  $\psi$ :

$$E[\psi] = \langle \psi | H | \psi \rangle = \int \left[ \frac{\hbar^2}{2m} |\vec{\nabla}\psi|^2 + V(\vec{r}) |\psi|^2 \right] d\vec{r} . \quad (7.89)$$

Далее найдем вариацию энергетического функционала (7.89):

$$\delta E[\psi] = 0 + \langle \psi | \psi \rangle = \text{Const} . \quad (7.90)$$

Построим вспомогательный функционал  $F$  вида

$$F[\psi] = E[\psi] - \lambda (\langle \psi | \psi \rangle - \text{Const}) . \quad (7.91)$$

В методе Лагранжа утверждается, что условный экстремум сводится к безусловному при вариации как по  $\psi$ , так и по  $\lambda$ . Проварьируем по бра либо кет вектору  $\psi$ , так как волновая функция в общем случае является комплекснозначной, что означает, что она может быть разложена на вещественную и мнимую часть, каждая из которых является вариационным аргументом и может изменяться независимо:

$$\psi = u + i v . \quad (7.92)$$

$$\psi^* = u - i v . \quad (7.93)$$

Варьируя по бра вектору  $\psi$ , получим следующее выражение:

$$\delta F = (\delta\langle\psi|) H|\psi\rangle - \lambda (\delta\langle\psi|) |\psi\rangle = 0 . \quad (7.94)$$

Аналогично можно выполнить варьирование по кет вектору, однако в силу того, что ответ может быть получен эрмитовым сопряжением от  $\psi$ , это не имеет смысла.

По стандартному правилу вариационного исчисления приравняем коэффициенты при вариации независимой переменной, в результате чего получим следующее уравнение, в котором заменим переменную  $\lambda$  на  $E$ :

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle . \quad (7.95)$$

Таким образом, из вариационного принципа может быть получено стационарное уравнение Шредингера. Поиск минимума функционала может быть осуществлен методом градиентного спуска, который при правильном программировании всегда будет задавать нужное направление изменения траектории спуска для того, чтобы осуществлялся выход на минимум.

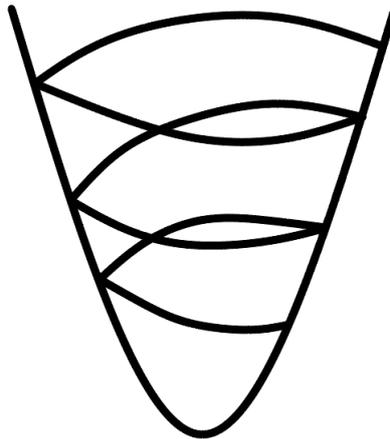


Рис. 7.3. Метод градиентного спуска

## Лекция 8. Свойства и следствия уравнения Шредингера

### Дополнение к координатно-импульсному представлению

**Упражнение 8.1.** Если между двумя операторами существуют такие коммутаторы:

$$[q, p] = i\hbar, \quad (8.1)$$

то автоматически предполагается, что у операторов  $q$  и  $p$ , либо же у любых других операторов  $A$  и  $B$ , которые коммутируют так же, существует только непрерывный спектр, из чего следуют некоторые утверждения, которые будут сформулированы далее.

Так, если мы „существуем“ в ковариантном мире, то соотношения типа (8.1) необходимо обобщать так:

$$[p^\mu, q^\nu] = i\hbar g^{\mu\nu}. \quad (8.2)$$

По договоренности

$$g^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (8.3)$$

тогда для пространственных компонент запишем следующее:

$$[p^i, q^j] = -i\hbar \delta_{ij}. \quad (8.4)$$

Однако, по предположению, должен существовать и следующий коммутатор:

$$[H, T] = i\hbar. \quad (8.5)$$

Такой коммутатор должен существовать с точки зрения релятивизма, так как мы используем именно ковариантные величины. Однако в квантовой теории такой коммутатор и оператор времени лишены смысла. Причина заключается в том, что в силу того, что коммутаторы (8.1) и (8.5) абсолютно однотипны, у коммутатора (8.5) будет чисто непрерывный спектр, однако если  $T$  еще можно считать за величину с чисто непрерывным спектром, то  $H$  уже нельзя, так как такой оператор

отнодь не обязательно должен иметь только непрерывный спектр. Например, если речь идет о потенциальной яме с бесконечно высокими стенками, то спектр будет чисто дискретный. Более того, для модели квантового осциллятора спектр является дискретным и положительным, однако из соотношения (8.5) следует, что спектр должен быть непрерывный от  $-\infty$  до  $+\infty$ . Таким образом, с точки зрения квантовой теории такой коммутатор не приемлем. Интересно, что в работе Швингера наиболее ярко сформулировано, что данный коммутатор должен быть запрещен, потому что он противоречит физической природе энергетического спектра. Так, в гамильтониане закладывается вся информация о взаимодействия в системе, а именно спектр дает нам информацию о динамике системы. Если допустить выполнение соотношения (8.5), то из гамильтониана исчезнет вся информация о динамике системы.

Однако существует одно гипотетическое исключение, а именно: безмассовые фермионы. На данный момент даже такая частица, как нейтрино, получила массу. В уравнении Дирака для фермионов спектр в отличие от уравнения Шредингера выглядит следующим образом:

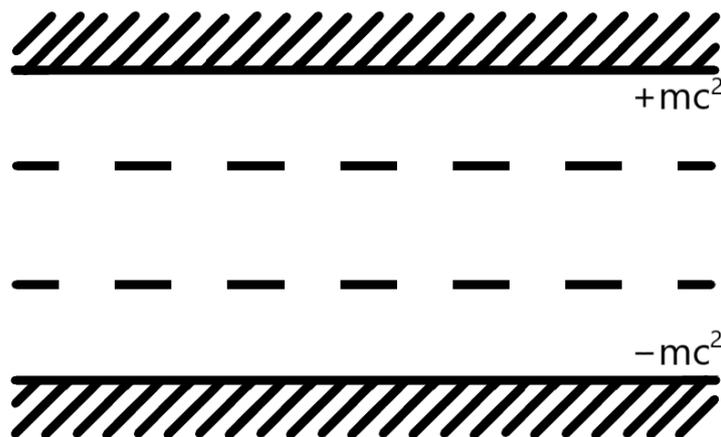


Рис. 8.1. Спектр в уравнении Дирака

Так, из рис 8.1 видно, что существует верхний и нижний порог, область сплошного спектра, а также дискретных уровней. Заметим, что уравнение Дирака является релятивистским, так как оно учитывает массу покоя. Однако если масса равняется нулю, то можно получить сплошной бесщелевой спектр от  $-\infty$  до  $+\infty$ . Возможно, именно из-за этого пока не удалось получить графен как лист. Известно, что однослойный графен сворачивается в два слоя, не подчиняясь условию однослойной плоскости. Таким образом, на сегодняшний день примера безмассового фермиона привести нельзя.

**Упражнение 8.2** (Фаза осциллятора). Если бы у осциллятора существовала фаза, то ее следовало бы ввести следующим образом:

$$q \sim A \cos(\omega t + \varphi) , \quad (8.6)$$

$$p \sim A \sin(\omega t + \varphi) . \quad (8.7)$$

Тогда оператор уничтожения  $a$  можно представить в следующем виде:

$$a \sim q + i p , \quad (8.8)$$

то есть:

$$a = \rho e^{i\varphi} . \quad (8.9)$$

Оператор рождения же записывается аналогичным образом:

$$a^+ = e^{-i\varphi} \rho , \quad (8.10)$$

где  $\rho$  определяется корнем из числа осцилляторных квантов:

$$\rho = \sqrt{a^+ a} . \quad (8.11)$$

Данный оператор также можно определить и иным способом:

$$\rho = \sum_{n=0}^{\infty} |\hat{n}\rangle \sqrt{n} \langle \hat{n}| . \quad (8.12)$$

Для такой суммы арифметический корень из числа квантов хорошо определен, поэтому с точки зрения определения корня проблем не возникает.

Запишем коммутационное соотношение

$$a a^+ - a^+ a = \rho^2 - e^{-i\varphi} \rho^2 e^{i\varphi} = 1 . \quad (8.13)$$

Перепишем данное соотношение в терминах оператора  $\hat{n}$ :

$$e^{i\varphi} \hat{n} - \hat{n} e^{i\varphi} = e^{i\varphi} . \quad (8.14)$$

Таким образом, мы получили следующее коммутационное соотношение:

$$[e^{i\varphi}, \hat{n}] = e^{i\varphi} . \quad (8.15)$$

Для того чтобы соотношение (8.15) выполнялось, должен выполняться следующий коммутатор:

$$[\varphi, \hat{n}] = -i . \quad (8.16)$$

Это действительно так, так как в этом случае данный коммутатор вычисляется через производные. Таким образом, такое коммутационное соотношение снова имеет вид типа (8.1), что означает, что и у  $\varphi$  и  $n$  чисто непрерывный спектр. Если по отношению к  $\varphi$  мы еще можем утверждать так, то спектр  $n$  состоит из целых неотрицательных чисел. Таким образом, возникает противоречие, из которого следует, что фазу для осциллятора ввести нельзя.

## Следствия нестационарного уравнения Шредингера

Прямым следствием нестационарного уравнения Шредингера является уравнение непрерывности. Запишем уравнение Шредингера и сопряженное к нему:

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left( \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}, t) \\ -i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \left( \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}) \right) \psi^*(\vec{r}, t) \end{cases} \quad (8.17)$$

Первое уравнение системы (8.17) умножим на  $\psi^*$ , а второе - на  $\psi$  и вычтем одно из другого:

$$i\hbar \left( \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \psi^* \vec{\Delta} \psi - \psi \vec{\Delta} \psi^* \right). \quad (8.18)$$

С учетом того, что

$$\psi^* \vec{\Delta} \psi - \psi \vec{\Delta} \psi^* = \vec{\nabla} \left( \psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^* \right). \quad (8.19)$$

Равенство (8.19) после перегруппировки коэффициентов уравнения позволяет записать следующее:

$$\frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} + \text{div} \vec{j} = 0, \quad (8.20)$$

где

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} \left( \psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^* \right). \quad (8.21)$$

Таким образом, мы получили уравнение непрерывности, которое вложено в уравнение Шредингера в качестве „добавки“ аналогично тому, как в уравнениях Максвелла дополнительное уравнение непрерывности на самом деле является одним из уравнений системы.

**Замечание 8.1.** В нашем случае функция  $V(\vec{r})$  должна быть вещественной, если мы работаем в координатном представлении, в общем же виде - эрмитовым оператором. Если  $V(\vec{r})$  не будет являться эрмитовым оператором, то левая часть уравнения (8.20) не будет равняться нулю.

Итак, мы записали уравнение непрерывности в дифференциальной форме, однако данному соотношению можно придать и интегральную форму. Для этого снова введем некоторый объем  $\Omega$  с границей  $\Sigma$ .

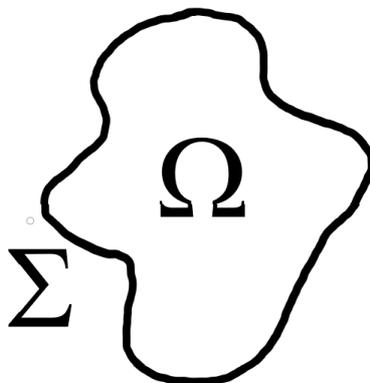


Рис. 8.2. Объем интегрирования

Постараемся ответить на следующие вопросы: Какова вероятность обнаружения части внутри объема  $\Omega$ ? Каким будет изменение положения данной частицы внутри  $\Omega$  во времени? Так, запишем интегральное выражение для вероятности, являющейся в общем случае функцией времени:

$$P_{\Omega} = \int_{\Omega} |\psi(\vec{r}, t)|^2 d\vec{r}. \quad (8.22)$$

Отметим, что в данном случае функция  $\psi$  должна быть нормированной. Далее возьмем производную по времени:

$$\frac{\partial P_{\Omega}}{\partial t} = \int_{\Omega} \frac{\partial |\psi(\vec{r}, t)|^2}{\partial t} d\vec{r} = - \int_{\Sigma} \vec{j} d\vec{\sigma}, \quad (8.23)$$

где  $d\vec{\sigma}$  представляет собой векторный элемент поверхности. Так,  $d\sigma$  - это элемент площади поверхности, а вектор  $\vec{n}$  является внешней нормалью к поверхности:

$$d\vec{\sigma} = d\sigma \vec{n}. \quad (8.24)$$

В последнем равенстве (8.23) была использована функция Грина. Из данного поверхностного интеграла сразу же можно понять физический смысл вектора  $\vec{j}$ . Если  $\vec{j}$  направлен наружу по отношению к объему, то его скалярное произведение с вектором внешней нормали будет положительным. Тогда, вероятность обнаружить частицу внутри объема будет убывать, из чего следует, что  $\vec{j}$  представляет собой ток

переноса. То есть в этом случае частица будет „выходить“ из объема. Если же вектор  $\vec{j}$  направлен внутрь, то вероятность обнаружить частицу внутри будет увеличиваться. Так, частица будет „вноситься“ в объем.

Таким образом, уравнение непрерывности является важным дополнением к уравнению Шредингера.

**Замечание 8.2.** Если функция  $V(\vec{r})$  будет являться комплексной, то будет происходить не только перенос частиц, но и убыль или же добавление частиц за счет комплексной части потенциала. Это используется, например, когда необходимо симитировать термоядерную реакцию. Так, частицы сталкиваются, проходят через туннельный барьер и уходят из объема, образовав новую частицу. Однако это достаточно трудоемко, так как приходится работать совершенно с другим типом взаимодействия - сильным.

## Волновые пакеты

Пусть есть гамильтониан свободной частицы:

$$H = \frac{p^2}{2m} . \quad (8.25)$$

Запишем стационарное уравнение Шредингера:

$$H\psi_p(\vec{r}) = E_p\psi_p(\vec{r}) . \quad (8.26)$$

Такая частица будет иметь абсолютно непрерывный спектр:

$$E_p = \frac{p^2}{2m} . \quad (8.27)$$

Волновые функции являются плоскими волнами, которые представляют собой базис гамильтониана:

$$\psi_p = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}} . \quad (8.28)$$

В силу того, что мы имеем дело с обобщенным базисом, построим волновой пакет в виде суперпозиции плоских волн с огибающей  $C(E_p)$ :

$$\psi(\vec{r}, t) = \int \psi_p(\vec{r}) C(E_p) dE_p . \quad (8.29)$$

Огибающая пакета должна иметь нормировку:

$$\int_0^\infty |C(E_p)|^2 dE_p = 1 . \quad (8.30)$$

Так, мы имеем дело с нормальными нормированными состояниями:

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1 . \quad (8.31)$$

Эволюция во времени такого волнового пакета является тривиальной и может быть записана следующим образом:

$$\psi(\vec{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \psi(\vec{r}, 0) = \int e^{-\frac{i}{\hbar} E_p t} \psi_p(\vec{r}) C(E_p) dE_p . \quad (8.32)$$

Какой тогда будет вероятность обнаружить частицу в некотором конечном объеме пространства? Будем вычислять так:

$$P_{\Omega}(t) = \int_{\Omega} d\vec{r} \int \int dE_p dE'_p C^*(E_p) C(E'_p) e^{\frac{i}{\hbar} (E_p - E'_p) t} \psi_p^*(\vec{r}) \psi_{p'}(\vec{r}) . \quad (8.33)$$

Заметим, что если проводить интегрирование по всему объему, то двойной интеграл будет снят, экспонента уйдет, и при любом моменте времени полная вероятность частицы будет сохраняться, так как частице некуда исчезнуть. Однако если рассматривать именно конечный объем, то вероятность обнаружить частицу в этом объеме при бесконечном времени будет подчиняться лемме Римана-Лебега. В этом случае уже нет дельта-функции, поэтому экспонента не уйдет. Более того, при больших временах экспонента будет бесконечно быстро осциллировать, а подынтегральная функция же за счет наличия огибающей является гладкой. Мы показали, что можем использовать лемму Римана-Лебега, что означает, что эволюция свободной частицы во времени будет заключаться в том, что частица из любого конечного объема уйдет на пространственную бесконечность и далее будет находиться именно там.

$$P_{\Omega}(t) \longrightarrow 0 \quad (t \rightarrow \infty) . \quad (8.34)$$

На физическом уровне можно привести такое объяснение: при любой ненулевой скорости свободная частица улетит. Так, если частица улетает, то любой локализованный пакет расплывается.

Приведем достаточно грубую оценку на время жизни волнового пакета в одномерном случае. Данная оценка хоть и является очень приближенной, однако она хорошо показывает, что любой пакет живет конечное время.

Из соотношения неопределенности, запишем отклонение импульса от среднего, приняв во внимание, что корень из квадратичной дисперсии будет порядка величины  $a$  - ширины пакета:

$$\Delta p \sim \frac{\hbar}{a} . \quad (8.35)$$

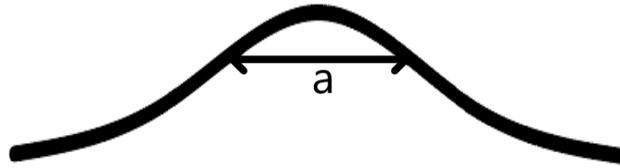


Рис. 8.3. Волновой пакет

Тогда запишем оценку для разброса скоростей в пакете:

$$\Delta v \sim \frac{\hbar}{ma} . \quad (8.36)$$

Далее оценим время жизни пакета как время, за которое за счет данного разброса будет перекрыт размер пакета  $a$ . Так, компоненты пакета разойдутся таким образом, что исходная форма пакета исказится:

$$\Delta t \sim \frac{ma^2}{\hbar} . \quad (8.37)$$

Запишем также, что

$$\Delta v \Delta t \sim ma . \quad (8.38)$$

Еще раз отметим, что к такому соотношению не стоит относиться серьезно, так как это всего лишь грубая оценка, показывающая, что пакет живет конечное время. Реально же необходимо учитывать форму пакета. Так, например, известной задачей в атомной физике является нахождение времени жизни гауссова пакета.

### Свойства уравнения $H\psi = E\psi$ . Продолжение.

#### 3) Ограниченный спектр

В отличие от уравнения Дирака, спектр задач Шредингера всегда ограничен снизу минимальным значением потенциала.

Запишем гамильтониан:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}) . \quad (8.39)$$

Для того чтобы показать существование минимума потенциала, необходимо вычислить среднее от гамильтониана, что будет является энергетическим функционалом.

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = E[\psi] = \underbrace{\langle T \rangle}_{\geq 0} + \langle V \rangle_{\psi} , \quad (8.40)$$

где  $T$  является кинетическим оператором.

Далее применим теорему о среднем:

$$\langle T \rangle_\psi + \langle V \rangle_\psi \geq \int d\vec{r} V(\vec{r}) |\psi|^2 \geq V_{\min} \underbrace{\int d\vec{r} |\psi|^2}_{=1} = V_{\min}. \quad (8.41)$$

Таким образом, мы получили оценку снизу на уровень энергии для уравнения Шредингера. Так, ниже дна ямы опустится нельзя.

**Замечание 8.3.** Данное свойство выполняется только для уравнения Шредингера. Так, в задачах Дирака всегда существует нижний континуум. Например,  $1s$  уровень в нерелятивистском атоме водорода является минимумом, а в релятивистском - точкой перегиба.

#### 4) Условие для дискретных уровней и непрерывного спектра

Пусть есть потенциал  $V(r)$ , который обращается в ноль на пространственной бесконечности:

$$V(\infty) = 0. \quad (8.42)$$

Это означает, что, например, на сфере большого радиуса или же при любом другом предельном переходе такой потенциал выходит на ноль. Тогда существует следующее довольно принципиальное утверждение:

**Утверждение 8.1.** Для всех разумных потенциалов, кроме некоторых нестандартных исключений, выполняется следующее:  $E < 0$  - дискретные уровни,  $E \geq 0$  - непрерывный спектр.

Доказательство строится на основе волновых пакетов. Волновые пакеты расплываются, а частица „уходит на бесконечность“, при этом потенциал будет равняться нулю. Если потенциал равняется нулю, то энергия частицы будет обязательно положительной. Например, можно сделать сколь угодно узкий пакет, отпустить его, он расплывется, но его энергия будет обязательно положительной. Если же в потенциале существует область ямы, то возникнут дискретные уровни при энергии  $E < 0$ .

Еще раз отметим, что данное утверждение не является строгим. Так есть примеры потенциалов, которые обращаются в ноль на бесконечности, но при этом

также обладают некоторыми уникальными свойствами. Так, существует пример фон Неймана и Вигнера:

$$V(r) \longrightarrow \frac{\sin \lambda r}{r} . \quad (8.43)$$

Действительно, предел такого потенциала равен нулю, однако такой потенциал является осциллирующим. Решение уравнения Шредингера для такого потенциала явно показывает существование дискретного уровня, вложенного в положительный непрерывный спектр. При этом же волновая функция для данного уровня является квадратично-интегрируемой и ортогональной всем функциям непрерывного спектра.

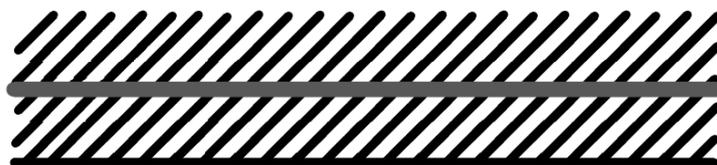


Рис. 8.4. Погружение уровня в область непрерывного спектра

5) Оценка на потенциал для возникновения связанных состояний.

Снова будем считать, что выполняется условие (8.43), однако также будем допускать, что потенциал может иметь область ямы. Величиной  $a$  будем характеризовать размер ямы. Пусть средним значением потенциала внутри ямы будет являться  $V_0$ . Так,  $V_0$  является так называемой магнитудой, а не минимумом потенциала.

Если частица находится в дискретной уровне, то она должна быть локализована в области ямы. Тогда средняя энергия будет оцениваться следующим образом:

$$\bar{E} \sim \frac{\hbar^2}{2ma^2} + \bar{V} = \frac{\hbar^2}{2ma^2} - V_0 . \quad (8.44)$$

Для того чтобы состояние было связанным, необходимо, чтобы энергия была меньше нуля, что следует из свойства 4). Тогда из выражения (8.44) следует, что:

$$\frac{\hbar^2}{2ma^2} - V_0 < 0 . \quad (8.45)$$

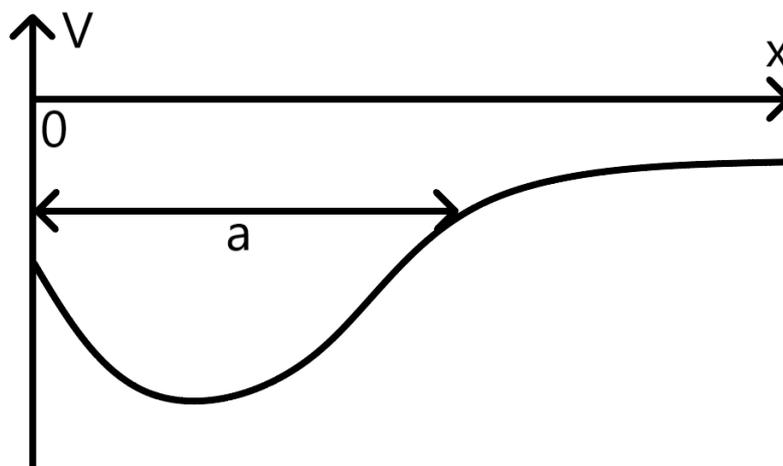


Рис. 8.5. Вид потенциальной ямы для иллюстрации свойства 5

Таким образом, получаем следующее условие на связь между глубиной и шириной потенциальной ямы для возникновения связанного состояния:

$$\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} > 1. \quad (8.46)$$

Тем не менее стоит помнить, что данное условие является оценочным, а не точным. Практически для полного большинства трехмерных ям, а также для стандартных двумерных ям данное условие выполняется.

Однако существует достаточно важное с точки зрения практических приложения исключение: одномерная и двумерная яма с равновысокими стенками. Тем не менее, данное условие очень хорошо выполняется в трехмерном случае.

#### 6) Существование эффекта туннелирования

В классической физике существует достаточно очевидное утверждение о том, что если существует область, где потенциал может превышать энергию частицы, то частица в этом случае не может выходить за границы разрешенной области в запрещенную область, где критическая энергия должна быть отрицательной, а импульс - мнимым, что не допустимо для классической механики. Именно для этого случая и существует точки поворота  $x_1, x_2$ .

В квантовом же случае это не так. Частица может проходить в запрещенную область, при этом модуль квадрата волновой функции с погружением частицы в

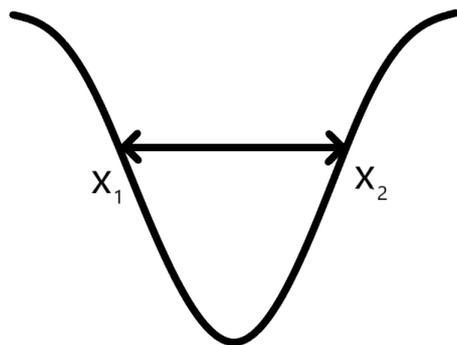


Рис. 8.6. Точки поворота в классической физике

область запрещенной зоны обязательно будет убывать  $|\psi|^2 \rightarrow 0$ . Однако на конечных расстояниях от точки поворота, внутри запрещенной области, волновая функция не будет равняться нулю, что и является эффектом туннелирования.

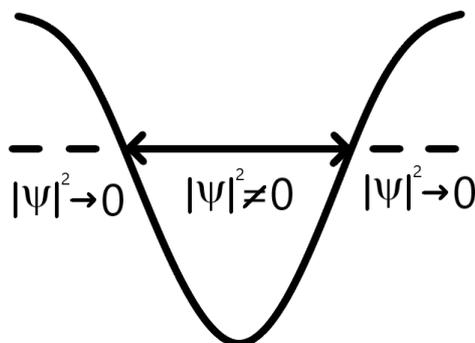


Рис. 8.7. Туннелирование в запрещенную область

В результате, в квантовом случае частица может проходить через барьеры, что никогда не будет возможно в классическом, так как частица обязательно будет отражена с единичной вероятностью.

Разберем еще один пример, представляющий собой осцилляторную яму, где движется частица. Будем рассматривать одномерный случай с потенциалом:

$$V(x) = \frac{m\omega^2}{2} x^2. \quad (8.47)$$

В классическом случае будут наблюдаться осцилляции частицы от одной точки поворота к другой, не заходя за пределы потенциальной ямы. Однако в случае квантового осциллятора будет наблюдаться эффект туннелирования. Так, как видно из рис. 8.8, волновая функция является гауссовой.

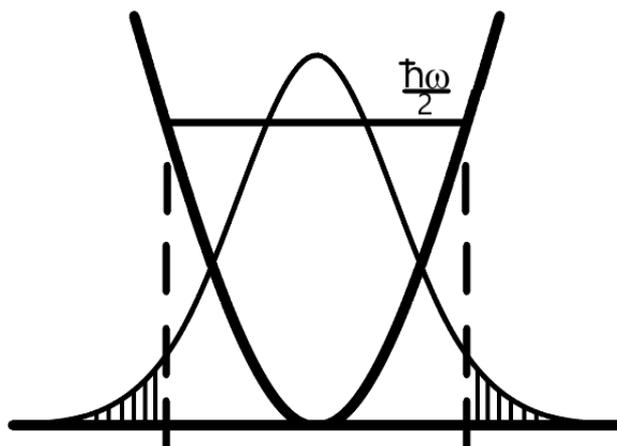


Рис. 8.8. Движение частицы в осцилляторной яме

- 7) Пусть в потенциале есть яма, в которой находится определенное число дискретных уровней:

$$E_0 < E_1 < \dots < E_N . \quad (8.48)$$

Волновая функция основного состояния является функцией, не имеющей нулей. Отметим, что для частицы, находящейся в потенциальном поле, такое утверждение корректно, однако, например, для трех частиц (например, трех электронов, если решать задачу на основное состояние атома лития) это уже не является верным, что может быть объяснено с помощью диаграммы Юнга, представляющей собой в данном случае треугольник. Следовательно, волновая функция такой системы за счет ферми-статистики электронов обязательно будет иметь нули. Отсутствие нулей для одной частицы же объясняется на основе теоремы Люстерника-Соболева (функциональный анализ). Смысл данной теоремы проиллюстрирован на рис. 8.9.

Пусть имеется потенциал  $V(x)$  с областью ямы, а также две функции, одна из которых является гладкой (без нулей), а другая имеет ноль. Ответим на вопрос, какая функция будет иметь наибольшую энергию? Чтобы ответить на этот вопрос, надо оценить среднюю энергию. Заметим, что функция без нуля имеет минимальную производную и, тем самым, минимальную кинетическую энергию. Другая же функция имеет ноль и, следовательно, большой градиент, что означает, что кинетическая энергия является достаточно большой. Однако сразу же возникает вопрос по поводу оценки потенциальной энергии, ответ на

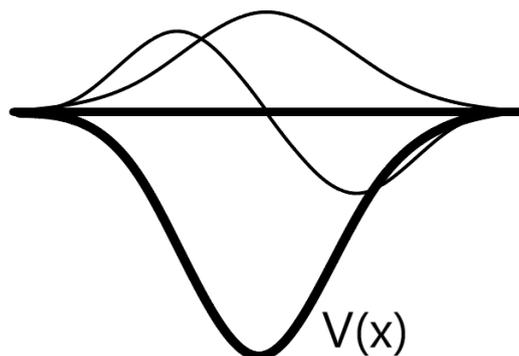


Рис. 8.9. Иллюстрация теоремы Люстерника-Соболева

который и дает теорема Люстерника-Соболева, в которой утверждается, что для волновой функции без нулей оценка величины энергии всегда оказывается ниже, чем для функции, которая имеет нули. Таким образом, волновая функция, которая не имеет нулей, автоматически оказывается невырожденной, потому что если предположить, что уравнение Шредингера имеет две функции основного состояния  $\psi_0$  и  $\widetilde{\psi}_0$ , соответствующие одному и тому же значению энергии  $E_0$ :

$$\begin{cases} H\psi_0 = E_0\psi_0 \\ H\widetilde{\psi}_0 = E_0\widetilde{\psi}_0 \end{cases} \quad (8.49)$$

то можно построить их линейную комбинацию, которая так же будет являться решением уравнения Шредингера, при этом  $c = const$ , :

$$\widehat{\psi}_0 = \psi_0 + c\widetilde{\psi}_0. \quad (8.50)$$

Так, варьируя параметр  $c$ , всегда можно обратить функцию  $\widehat{\psi}_0$  в нуль в любой заданной точке. Однако у волновой функции основного состояния не может быть нулей, поэтому в данной задаче основное состояние не вырождено.

- 8) Если  $V(\infty) = 0$ , а также  $V(\vec{r}) \geq 0$ , то у данного потенциала может быть только непрерывный спектр. Дискретных уровней быть не может в силу того, что нет области ямы. Для дискретных уровней обязательно наличие ямы. Так, например, в одномерном случае яма с отрицательным значением потенциала может быть бесконечно малой по магнитуде и бесконечно узкой по размеру, однако хотя бы одно связанное состояние обязательно будет.

Отметим, что и для случая  $V = 0$  данное условие тоже выполняется.



Рис. 8.10. Пример потенциала, удовлетворяющего условию свойства 8

Наиболее же простым примером является оболочка. Например, полупрозрачный пузырь или фуллерен. Так, внутри и снаружи такой системы потенциал равен нулю, а на границе -  $\delta$ -функция.

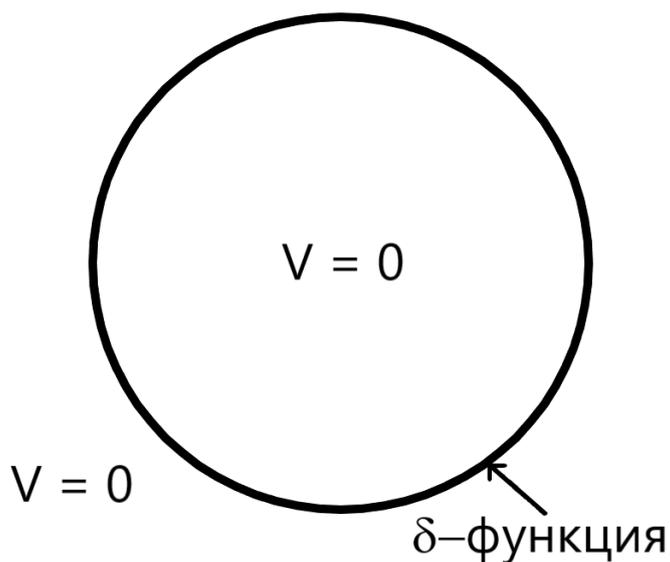


Рис. 8.11. Полупрозрачный пузырь

В таком пузыре могут возникать метастабильные и достаточно долгоживущие состояния, пока частица колеблется от стенки к стенке. Однако здесь речь идет именно о метастабильных состояниях, то есть о резонансах в непрерывном спектре.

9) Для дискретных уровней энергии выполняется следующее утверждение: если уровни не являются вырожденными, то они всегда могут быть выбраны вещественными. Это связано с тем, что гамильтониан представляет собой чисто вещественный оператор:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r) . \quad (8.51)$$

Таким образом, если записать волновую функцию  $\psi$  в комплексном виде:

$$\psi = u + i v , \quad (8.52)$$

то в результате деления уравнения Шредингера на вещественную и мнимую части можно получить два уравнения на один и тот же уровень:

$$\begin{cases} Hu = Eu \\ Hv = Ev \end{cases} \quad (8.53)$$

Так, если уровень не вырожден, то  $u$  и  $v$  связаны друг с другом постоянным множителем. Тогда данную комбинацию всегда можно записать через фазу, которую в квантовой механике всегда можно положить равной нулю.

## Задача на определение ВФ основного состояния одномерного квантового гармонического осциллятора в координатном представлении

Далее решим задачу на определение ВФ основного состояния одномерного квантового гармонического осциллятора:

$$a|0\rangle = 0 . \quad (8.54)$$

Введем волновую функцию основного состояния в координатном базисе:

$$\psi_0(x) = \langle x|0\rangle . \quad (8.55)$$

Запишем оператор уничтожения  $a$  в координатной форме:

$$a = \frac{Q + iP}{\sqrt{2}} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} q + i \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} p . \quad (8.56)$$

Далее подставим полученное выражение для оператора уничтожения из (8.56) в уравнение (8.54):

$$\langle x|a|0\rangle = 0 = \left[ \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x + \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \right] \psi_0 . \quad (8.57)$$

В результате получим следующее уравнение:

$$\left[ \frac{m\omega}{\hbar} + \frac{\partial}{\partial x} \right] \psi_0(x) = 0 . \quad (8.58)$$

Очевидно, что решением полученного (8.58) является гауссова функция:

$$\psi_0 = C e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} . \quad (8.59)$$

Нормировочную константу  $C$  определим из условия нормировки:

$$\int \psi_0^2 dx = 1 = C^2 \int e^{-\frac{m\omega}{\hbar} x^2} dx = C^2 \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}} . \quad (8.60)$$

Для того чтобы вычислить интеграл из (8.60), необходимо вспомнить, чему равен интеграл Пуассона:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} . \quad (8.61)$$

Далее запишем формулу для  $n$ -ого осцилляторного уровня:

$$|n\rangle = \frac{a^{+n}}{\sqrt{n!}} |0\rangle . \quad (8.62)$$

Для данного уровня построим волновую функцию:

$$\psi_n(x) = \langle x|n\rangle = \frac{\langle x|a^{+n}|0\rangle}{\sqrt{n!}} = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{\partial}{\partial x} \right)^n \psi_0(x) . \quad (8.63)$$

При получении итогового выражения в (8.63) мы провели операцию перевода оператора рождения в координатное представление, аналогичную (8.56). Таким образом выражение (8.63) дает ответ для всех эрмитовых функций через формулу Родрига. Если  $\psi_0(x)$  - нормированная функция, то с учетом всех коэффициентов  $\psi_n$  будет нормированной на единицу. При этом для выполнения условия нормировки необходимо, чтобы коэффициент  $C$  был равен:

$$C = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} . \quad (8.64)$$

## Одномерное уравнение Шредингера

В силу того, что в природе существует множество одномерных систем (или квазиодномерных системы), имеет смысл рассматривать уравнение Шредингера в качестве целого отдельного подраздела. Так, на роль таких систем подходят полимеры, полимерные нитки и нанотрубки, которые являются квазиодномерными, но в широком ряде задач могут быть рассмотрены в одномерном пространстве с пренебрежением движения частиц в других направлениях. В случае, если человечество умело бы создавать достаточно сильные однородные магнитные поля, список одномерных систем был бы гораздо шире. Так, например, интересно рассмотреть ограниченный в движении в плоскости  $xy$  электрон, движение которого возможно только по оси  $z$ , куда направлен магнитный момент. В данном случае стоит учитывать, что область локализации электрона в плоскости  $xy$  по отношению к напряженности магнитного поля имеет логарифмическую зависимость, а поскольку логарифм - это медленно растущая функция, то для того чтобы достичь достаточно малой области локализации, необходимо создать сильное магнитное поле.

Одномерное уравнение Шредингера в общем виде может быть записано как:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) . \quad (8.65)$$

При этом у уравнения (8.65) есть свои специфические свойства, которые важно проанализировать.

**Утверждение 8.2.** *В случае, если решение уравнения предполагает наличие дискретного спектра, он обязательно будет невырожденным, а, следовательно, и волновые функции дискретного спектра всегда должны быть вещественными:*

$$H\psi_n = E_n\psi_n . \quad (8.66)$$

### Доказательство.

Для доказательства утверждения предположим, что две волновые функции соответствуют одному и тому же значению энергии:

$$H\psi_{1,2} = E\psi_{1,2} . \quad (8.67)$$

Перепишем уравнение Шредингера для функций  $\psi_1$  и  $\psi_2$  в следующем виде:

$$\begin{cases} \psi_1'' + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \psi_1 = 0 \\ \psi_2'' + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \psi_2 = 0 \end{cases} \quad (8.68)$$

**Замечание 8.4.** Стоит отметить, что после комплексного сопряжения вид волновых функций не будет отличаться от своего изначального вида, так как они являются вещественными.

Далее запишем следующую комбинацию:

$$\psi_2 \psi_1'' - \psi_1 \psi_2'' = 0 = \frac{d}{dx} W(\psi_1, \psi_2) , \quad (8.69)$$

где  $W(\psi_1, \psi_2)$  - вронскиан от функций  $\psi_1$  и  $\psi_2$ . Для уравнения Шредингера он имеет следующий вид:

$$W = \psi_2 \psi_1' - \psi_1 \psi_2' = 0 , \quad (8.70)$$

где равенство нулю вронскиана обосновано тем, что при переходе на пространственную бесконечность волновые функции  $\psi_1$  и  $\psi_2$  должны зануляться.

**Замечание 8.5.** Для системы линейных уравнений первого порядка вронскиан строится в виде матрицы, столбцы которой относятся к фундаментальному семейству решений.

Поскольку вронскиан оказывается равным нулю, то функции  $\psi_1$  и  $\psi_2$  являются линейно зависимыми. Это утверждение может быть получено в результате преобразования выражения (8.70) к следующему виду:

$$\frac{\psi_1'}{\psi_1} = \frac{\psi_2'}{\psi_2} . \quad (8.71)$$

Далее проинтегрируем правые и левые части уравнения (8.71) и получим, что

$$\ln \psi_1 = \ln \psi_2 + \text{Const} . \quad (8.72)$$

Тогда после преобразования (8.72) получим окончательный ответ для  $\psi_1$ :

$$\psi_1 = e^{\text{Const}} \psi_2 . \quad (8.73)$$

Следовательно, одномерное уравнение Шредингера обладает свойством невырожденности уровней энергии дискретного спектра. ■

- 10) Рассмотрим произвольную потенциальную яму (яма может быть любой по ширине и высоте) в одномерном случае с условием выхода краев ямы на одну и ту же высоту (условие равновысоких стенок). В силу произвольности выбора

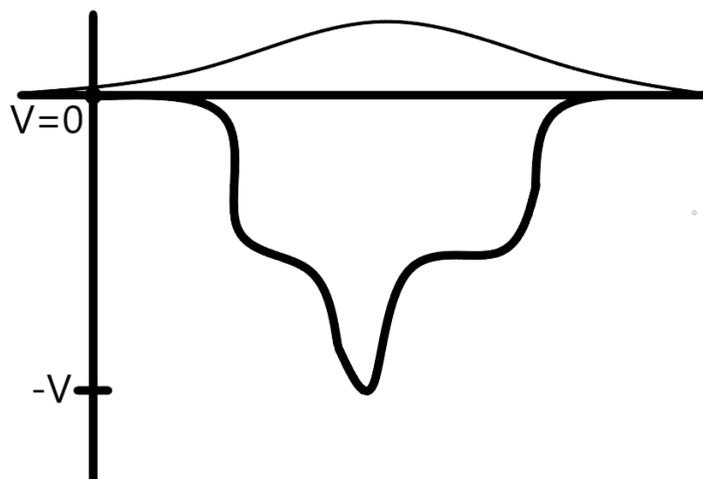


Рис. 8.12. Произвольная потенциальная яма с равновысокими стенками

начала отсчета энергии примем за нуль высоту так, как показано на рис. 8.12 ( $V = 0$ ).

Далее воспользуемся вариационным принципом, а именно: с помощью данного принципа оценим энергию для пробной функции следующего вида:

$$\psi_{tr}(x) = C e^{-\frac{\varepsilon x^2}{2}}. \quad (8.74)$$

Будем предполагать, что величина  $\varepsilon$  достаточно мала. Таким образом, область локализации волновой функции оказывается много больше относительно размера ямы. Для того чтобы найти константу  $C$  из выражения (8.74), воспользуемся условием нормированности волновой функции на единицу:

$$\langle \psi_{tr} | \psi_{tr} \rangle = 1, \quad (8.75)$$

тогда

$$C^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\varepsilon x^2} dx = 1 = C^2 \sqrt{\frac{\pi}{\varepsilon}}, \quad (8.76)$$

откуда коэффициент  $C$  может быть выбран как:

$$C = \sqrt[4]{\frac{\varepsilon}{\pi}}. \quad (8.77)$$

Далее запишем выражение для энергии  $E_{tr}$ :

$$E_{tr} = E[\psi_{tr}] = \langle \psi_{tr} | H | \psi_{tr} \rangle = \underbrace{\int dx \frac{\hbar^2}{2m} (\psi'_{tr})^2}_{=T_{tr}} + \int V(x) \psi_{tr}^2(x) dx. \quad (8.78)$$

Таким образом, мы получили честную вариационную оценку на энергию. Далее будет вычислять интегралы из последнего равенства в выражении (8.78). Вычислим интеграл  $T_{tr}$ , ответственный за кинетическую энергию:

$$T_{tr} = \frac{\hbar^2}{2m} \sqrt{\frac{\varepsilon}{\pi}} \int dx \left( \varepsilon x e^{-\frac{\varepsilon x^2}{2}} \right) = \frac{\hbar^2}{2m} \sqrt{\frac{\varepsilon}{\pi}} \varepsilon^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 e^{-\varepsilon x^2} . \quad (8.79)$$

Вычисление интеграла будем производить через производную. Заметим, что

$$-\frac{\partial}{\partial \varepsilon} \sqrt{\frac{\pi}{\varepsilon}} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\varepsilon^2}} . \quad (8.80)$$

Далее произведем оценку на интеграл из итогового выражения (8.78), ответственный за потенциальную энергию. Так, в пределах маленькой, узкой ямы в силу того, что величина  $\varepsilon$  достаточно мала, можем считать волновую функцию гауссового вида постоянной, поэтому будем перемножать значение функции в нуле на интеграл  $\int dx V(x)$ , что является ключевым моментом, так как при равновысоких стенках можно вывести потенциал из бесконечности на ноль, поменяв систему отсчета, в результате чего интеграл будет конечен.

$$E_{tr} = \frac{\hbar^2}{4m} \varepsilon + \sqrt{\frac{\varepsilon}{\pi}} \int dx V(x) . \quad (8.81)$$

При этом заметим, что если стенки ямы будут не равновысокими, интеграл потенциальной энергии будет расходиться.

Таким образом, получаем следующее итоговое выражение для вариационной оценки энергии:

$$E_{tr} = \frac{\hbar^2}{4m} \varepsilon - \sqrt{\frac{\varepsilon}{\pi}} \bar{V} . \quad (8.82)$$

**Замечание 8.6.** Знак „-“ в выражении (8.82) используется потому, что интеграл потенциальной энергии является отрицательным в силу интегрирования по отрицательной области.

Точным вариационным минимумом является энергетический уровень основного состояния  $E_0 < 0$ . Выберем некоторое пробное  $E_{tr} < 0$ . На рис. 8.13 видно, что точный минимум обязательно будет лежать ниже, так как он является абсолютным минимумом вариационного функционала. Так, мы показали, что существует пробная функция, в которой значение вариационного функционала меньше нуля, что означает, что точный минимум лежит еще ниже и дает отрицательное значение энергии.

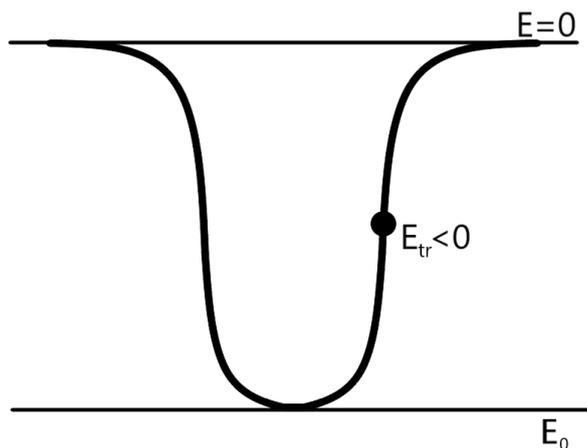


Рис. 8.13. Поиск энергии  $E_{tr}$  вариационным методом

Таким образом, удалось показать, что в любой одномерной потенциальной яме с равновысокими стенками будет существовать хотя бы одно связанное состояние, область локализации которого в случае, если яма является маленькой и узкой, будет значительно больше размера ямы.

**Замечание 8.7.** Отметим, что данное свойство противоречит свойству 5, в котором была получена оценка (8.46). При получении данной оценки предполагалось, что связанное состояние локализовано в области ямы. В свойстве же 10 за счет малости параметра  $\varepsilon$  волновая функция является делокализованной относительно размеров ямы на совершенно иной масштаб, однако, тем не менее, связанное состояние все равно будет.

Так, любая одномерная яма в одномерных задачах может работать как ловушка. Например, энтальпирование нитевидных полимеров с помощью примесей, которые будут оттягивать на себя  $\pi$ -электрон, то есть работать в качестве акцептора или, наоборот, донора. Тем не менее, соответствующий случай акцептора будет срабатывать в любом случае, так как какой бы ион ни „пришел“, он всегда оттянет  $\pi$ -электрон за счет данного одномерного свойства.

Данное свойство можно качественно предъявить и для двумерных задач, однако это будет не совсем честно. Если в одномерном случае мы получили честную вариационную оценку, то в двумерном случае - оценка будет очень грубой.

## Непрерывный энергетический спектр

Рассмотрим гладкий потенциал, изображенный на рис. 8.14. Потенциал имеет область, соответствующую яме, в которой могут существовать дискретные уровни. При  $V > 0$  спектр становится непрерывным.

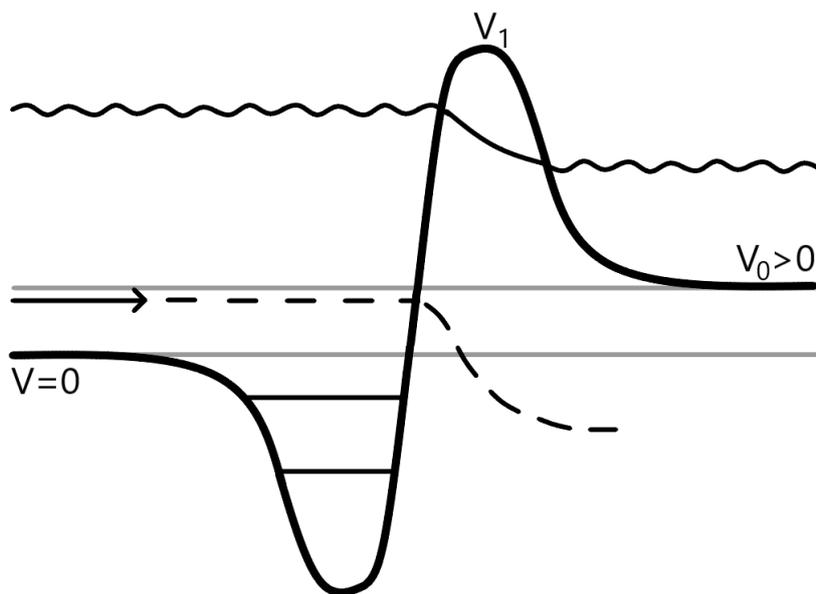


Рис. 8.14. Гладкий потенциал с тремя областями

Для данной рассматриваемой системы можно выделить всего три области потенциала. Первая область - это область дискретного спектра при  $E < 0$ .

Далее для  $0 \leq E < V_0$  в левом конце волновые функции имеют вид

$$\psi_{x \rightarrow -\infty} \rightarrow e^{ikx} + B e^{-ikx}, \quad (8.83)$$

где волновое число  $k$  вводится стандартной параметризацией:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2. \quad (8.84)$$

Справа от барьера находится область туннелирования частиц. При этом волновая функция на бесконечности обращается в нуль, поэтому спектр обязательно является невырожденным. Соответствующая волновая функция для данной области имеет вид убывающей экспоненты:

$$\psi_{x \rightarrow \infty} \rightarrow C e^{-\kappa x}, \quad (8.85)$$

где

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)}. \quad (8.86)$$

Решение для области  $0 \leq E < V_0$  только одно, поскольку вронскиан между любыми двумя решениями такого типа будет равен нулю.

Третья область соответствует  $E \geq V_0$ . При таких значениях энергии частица будет также рассеиваться. При этом в левой области волновая функция представляет собой падающую и отраженную волны:

$$\psi_{x \rightarrow -\infty} \longrightarrow e^{ikx} + B e^{-ikx} . \quad (8.87)$$

Отличие от второй области при этом заключается в том, что в правой области частица продолжает движение. В области от  $V_0$  до  $V_1$  частица туннелирует, а при энергиях больше, чем  $V_1$ , она свободно проходит в правую область, однако при этом все равно может происходить эффект надбарьерного отражения. Следовательно, волновая функция в правой области должна быть представлена в виде:

$$\psi_{x \rightarrow +\infty} \longrightarrow C e^{ik_1 x} , \quad (8.88)$$

где  $k_1$  равен:

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)} . \quad (8.89)$$

Для того чтобы установить связь между коэффициентами  $B$  и  $C$  и реальными коэффициентами отражения и прохождения, необходимо обратиться к потоку, отвечающему за все процессы переноса:

$$j = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \psi' - \psi \psi^{*'}) . \quad (8.90)$$

На пространственной минус-бесконечности поток будет определяться следующим выражением:

$$j_{x \rightarrow -\infty} = \frac{\hbar k}{m} (1 - |B|^2) , \quad (8.91)$$

где  $\hbar k/m$  - это скорость. На пространственной плюс-бесконечности ответ для потока выглядит так:

$$j_{x \rightarrow +\infty} = \frac{\hbar k_1}{m} |C|^2 . \quad (8.92)$$

Из курса механики вспомним определения коэффициента отражения и прохождения. Так, это всегда отношение потоков. Тогда коэффициент отражения  $R$  представляет собой отношение отраженного потока к падающему:

$$R = |B|^2 . \quad (8.93)$$

Коэффициент прохождения  $T$  представляет собой отношение прошедшего потока к падающему:

$$T = \frac{k_1}{k} |C|^2 . \quad (8.94)$$

Фактически, работая с потоком, мы имеем дело с вронскинианом между  $\psi$  и  $\psi^*$ . Известно, что вронскиниан не зависит от аргумента, поэтому два потока (8.91) и (8.92), или вронскиниана, равны друг другу:

$$1 - \underbrace{|B|^2}_{=R} = \underbrace{\frac{k_1}{k} |C|^2}_{=T} . \quad (8.95)$$

Из (8.95) следует выполнение следующего равенства:

$$R + T = 1 . \quad (8.96)$$

## Обратная задача рассеяния

Ответим на вопрос, как можно было бы восстановить потенциал задачи про непрерывный спектр? Чаще всего из эксперимента мы можем видеть результаты рассеяния или дискретные уровни по тем или иным переходам, однако сам потенциал не известен. Так, для одномерных задач существует такой метод, как обратная задача рассеяния. С помощью данного метода можно восстановить потенциал по определенному набору данных, называемых данными рассеяния. Каких данных рассеяния будет достаточно для восстановления потенциала? Прежде всего, необходимо знать дискретный спектр:

$$\kappa_n \longrightarrow E_n = -\frac{\hbar^2}{2m} \kappa_n^2 . \quad (8.97)$$

У дискретного спектра есть следующее свойство:

**Теорема 8.1** (Осцилляционная теорема Штурма). *Волновая функция основного состояния в случае одномерной задачи всегда не будет иметь нулей. Для последующих же уровней в уравнении Шредингера имеет место быть следующее утверждение: если занумеровать уровни в порядке возрастания, то в соответствии с этой нумерацией, каждая последующая волновая функция дискретного уровня обращается в нуль в точках, находящихся между нулями предыдущей волновой функции.*

Проиллюстрируем данную теорему на примере квадратной одномерной потенциальной ямы, представленной на рис. 8.15.

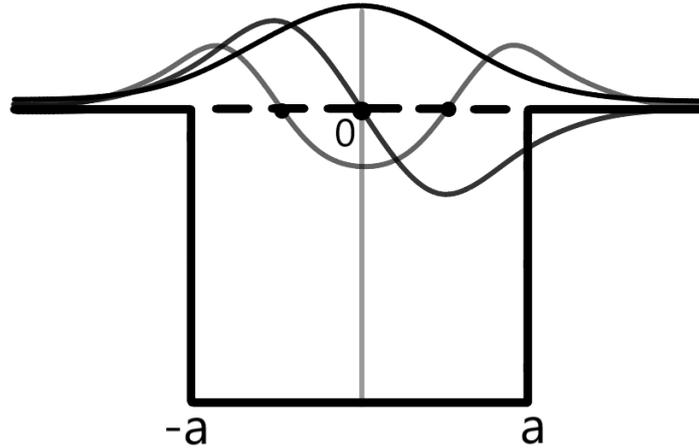


Рис. 8.15. Волновые функции одномерной потенциальной ямы конечной глубины

На рис. 8.15 также показаны волновые функции для первых трех энергетических уровней. Так, волновая функция основного состояния имеет гауссов вид и лишена нулей. Следующий уровень является нечетным, его волновая функция имеет один ноль. Следующая же функция по номеру является четной, симметричной и имеет два нуля. При этом видно, что ноль предыдущей функции находится между нулями последующей.

Если мы будем нормировать все волновые функции асимптотикой слева, то получим следующее выражение:

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} \psi_n = e^{\kappa_n x} . \quad (8.98)$$

Отметим, что степень экспоненты в выражении (8.98) на самом деле не является положительной в силу отрицательного  $x$ . В случае асимптотики справа получим следующее:

$$\lim_{x \rightarrow +\infty} \psi_n = (-1)^n |b_n| e^{-\kappa_n x} . \quad (8.99)$$

При этом множитель  $(-1)^n$  является осцилляционным. Так, в зависимости от числа нулей асимптотика будет либо положительной либо отрицательной. При этом важно помнить, что все это верно лишь для случая, когда стенки ямы одинаковы.

Отметим, что величины  $|b_n|$  также являются данными рассеяния. Кроме этого, необходимо также знать коэффициент отражения как функцию от энергии и от волнового числа. Таким образом, если мы обладаем следующей совокупностью данных:  $\{\kappa_n, |b_n|, R(k)\}$ , мы можем восстановить форму потенциала.

**Замечание 8.8.** Отметим, что методом обратной задачи решается и целый класс

*эволюционных уравнений типа уравнения Кортевега-де Фриза:*

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = 0 . \quad (8.100)$$

## Лекция 9. Основы физики твердого тела. Квазиклассическое приближение. ВКБ

Ранее нами были рассмотрены случаи различных потенциальных барьеров и ям, которые являлись относительно простыми за счет того, что в этих задачах потенциал в асимптотике на бесконечности являлся константой.

### Одномерный кристалл

Теперь же рассмотрим более сложную задачу, в которой потенциал не стремится на бесконечности к константе. Так, исследуем задачу на одномерный кристалл. Потенциал в данном случае будет удовлетворять следующему условию:

$$V(x) = V(x + a) . \quad (9.1)$$

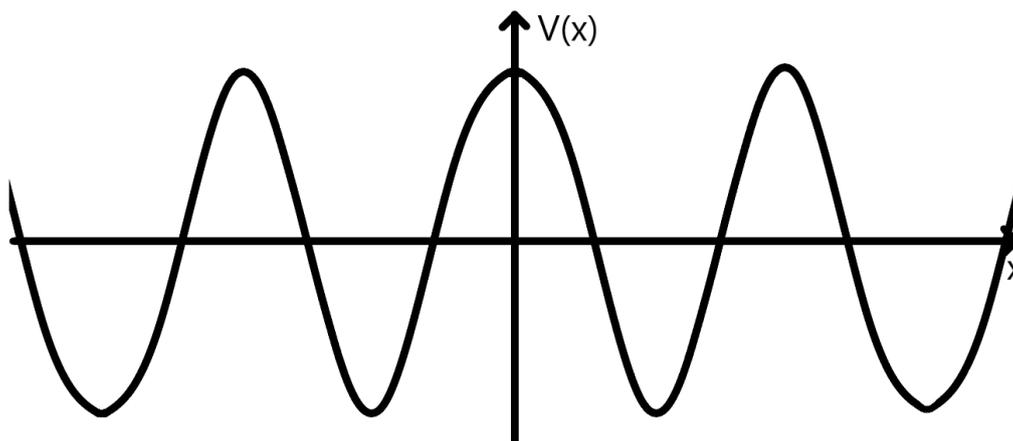


Рис. 9.1. Пример потенциала, удовлетворяющего условию (9.1)

Запишем одномерное уравнение Шредингера для данной задачи:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' + V(x) \psi = E \psi . \quad (9.2)$$

Из условия (9.1) видно, что в задаче присутствует симметрия, свойства которой обязательно необходимо использовать. Для её учета необходимо воспользоваться теоремой Флоке:

**Теорема 9.1** (Теорема Флоке). *Всегда можно выбрать такое решение уравнения Шредингера в силу периодичности потенциала, которое удовлетворяет условию Флоке:*

$$\psi_E(x+a) = \lambda \psi_E(x) . \quad (9.3)$$

*При сдвиге аргумента волновой функции на период решетки  $a$ , ВФ получается равной исходной волновой функции, умноженной на некоторую константу, не зависящую от  $x$ .*

**Доказательство.**

Для каждого  $E$  (где  $E$  - фиксированная величина), уравнение Шредингера, как уравнение второго порядка, имеет два фундаментальных решения, которые можно обозначить как  $u_i(x)$ , где индексы  $i$  могут принимать значения 1 и 2. Основное свойство решений  $u_i$  заключается в том, что волновая функция  $\psi_E$  может быть представлена в виде линейной комбинации:

$$\psi_E = A u_1 + B u_2 . \quad (9.4)$$

Кроме того, в силу периодичности, очевидно, что  $u_i(x+a)$ , которое можно переобозначить за  $\bar{u}_i(x)$ , является такой же парой решений, что и исходная пара  $u_i(x)$ .

В силу того, что  $u_i$  является базисом для решения уравнения (9.2), может быть выполнено следующее линейное преобразование:

$$\bar{u}_i(x) = C_{ij} u_j(x) . \quad (9.5)$$

Кроме того, должно также существовать и обратное преобразование, поскольку пары  $u_i$  и  $\bar{u}_i$  совершенно равноправны, и неважно, какой из периодов выбирать при решении уравнения. При этом существование обратного преобразования предполагает выполнение условия:

$$\det C \neq 0 . \quad (9.6)$$

Запишем  $\psi_E(x)$  в виде линейной комбинации, и будем требовать, чтобы  $\psi_E(x+a)$  было равно:

$$\psi_E(x+a) = A u_1(x+a) + B u_2(x+a) . \quad (9.7)$$

Далее выразим сдвинутые на  $a$  фундаментальные решения через исходную пару и получим:

$$\psi_E(x+a) = A(C_{11} u_1(x) + C_{12} u_2(x)) + B(C_{21} u_1(x) + C_{22} u_2(x)) . \quad (9.8)$$

Поскольку мы хотим проверить выполнение условия Флоке, запишем следующее равенство:

$$\psi_E = \lambda (A u_1(x) + B u_2(x)) . \quad (9.9)$$

Так как  $u_1$  и  $u_2$  - линейно независимые фундаментальные решения, то равенство (9.8) с (9.9) будет выполнено тогда и только тогда, когда коэффициенты при  $u_i(x)$  будут равны друг другу:

$$\begin{cases} A C_{11} + B C_{21} = \lambda A \\ A C_{12} + B C_{22} = \lambda B \end{cases} \quad (9.10)$$

Система (9.10) представляет собой линейную однородную систему относительно коэффициентов  $A$  и  $B$ . Для её решения необходимо приравнять к нулю следующий определитель:

$$\det \begin{vmatrix} C_{11} - \lambda & C_{21} \\ C_{12} & C_{22} - \lambda \end{vmatrix} = 0 . \quad (9.11)$$

В результате преобразования выражения (9.11) получим квадратное уравнение на коэффициенты  $\lambda$ , из чего следует, что  $\lambda$  будет иметь два корня, которые не обязательно будут являться действительными. Далее проверим следующее утверждение:

**Утверждение 9.1.** Произведение корней  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$  должно быть постоянным.

**Доказательство.**

Поскольку уравнение (9.11) имеет два решения на  $\lambda$ , будет существовать два решения уравнения Шредингера:

$$\psi_{E,i}(x+a) = \lambda_i \psi_{E,i}(x) , \quad i = 1, 2 . \quad (9.12)$$

Составим вронскиан для волновых функций из (9.12). Для случая уравнения Шредингера такой вронскиан не будет зависеть от координаты  $x$ , что уже было проверено ранее:

$$W[\psi_{E,1}, \psi_{E,2}] = \psi_{E,1} \psi'_{E,2} - \psi_{E,2} \psi'_{E,1} = \text{Const} . \quad (9.13)$$

С другой стороны, вронскиан может быть вычислен два раза: один раз - в точке  $x$ , другой раз - в точке  $x+a$ . По свойству независимости вронскиана от координаты:

$$W[x] = W[x+a] = \lambda_1 \lambda_2 W[x] , \quad (9.14)$$

где последнее равенство получается переходом от аргумента  $x + a$  к  $x$ . Поскольку  $W(x)$  не равен нулю, то получим следующее равенство:

$$\lambda_1 \lambda_2 = 1 . \quad (9.15)$$

■

Из (9.14) вытекает одно важное следствие:

**Следствие 9.1.** *Если сдвинуться на  $n$  периодов по условию Флоке, взяв для конкретности решение с индексом 1, то волновая функция будет преобразована к виду:*

$$\psi_{E,1}(x + na) = \lambda_1^n \psi_{E,1}(x) . \quad (9.16)$$

В силу свойств уравнения Шредингера, волновая функция на бесконечности не может расти, поскольку она должна быть нормируемой. Это означает то, что  $\lambda$  не может быть по модулю больше единицы.

С другой стороны,  $n$  может принимать отрицательные значения. Таким образом, аргумент будет смещаться в сторону минус-бесконечности и, поэтому необходимо, чтобы  $\lambda$ , помимо введенного ранее условия, не было по модулю меньше единицы.

Так, приходим к условию на  $\lambda$ :

$$|\lambda_1| = |\lambda_2| = 1 . \quad (9.17)$$

Исходя из полученных условий (9.15) и (9.17) на  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$ , приходим к выводу о том, что они представляют собой фазовые множители:

$$\lambda_1 = e^{ika} , \quad \lambda_2 = e^{-ika} , \quad (9.18)$$

где  $k$  - квазиимпульс, на который накладывается условие  $-\pi/a < k \leq \pi/a$ .

Выражение (9.18) позволяет записать окончательное выражение условия Флоке для квантовомеханических задач:

$$\boxed{\psi(x + a) = e^{ika} \psi(x)} . \quad (9.19)$$

■

Условие Флоке очень часто (особенно в твердотельных приложениях) переписывают в следующем виде:

$$\psi(x) = e^{ikx} \omega_k(x) . \quad (9.20)$$

где  $\omega_k(x)$  является функцией Блока и удовлетворяет условию периодичности:

$$\omega_k(x+a) = \omega_k(x) . \quad (9.21)$$

Так, в этой функции содержится информация о том, что происходит на каждом отдельном периоде решетки. Формально, выражение (9.20) является дополнительной формой записи условия Флоке. Данное условие также легко может быть проверено с помощью условия периодичности

$$\psi(x+a) = e^{ik(x+a)} \omega_k(x+a) = e^{ika} \psi(x) . \quad (9.22)$$

Следствием общих свойств задачи с периодическим потенциалом является наличие зонной структуры.

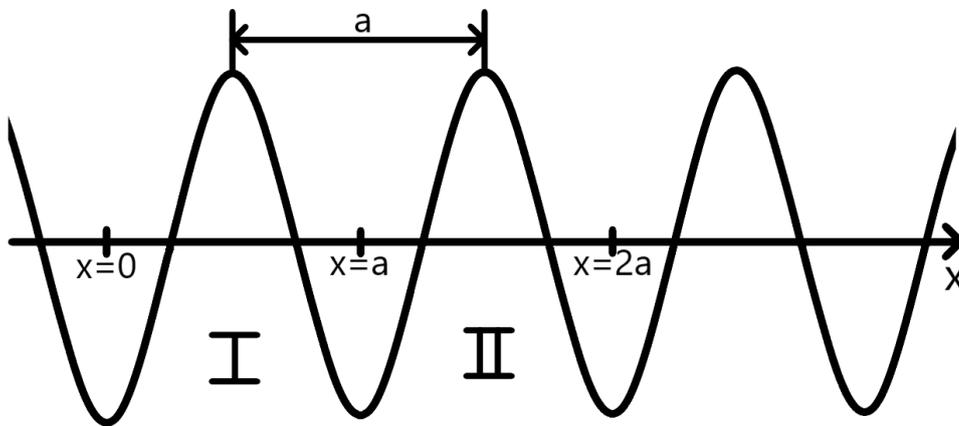


Рис. 9.2. Разделение областей периодического потенциала

На интервале  $I$  функция  $\psi_I$  будет представлять собой следующую линейную комбинацию:

$$\psi_I = A u_1(x) + B u_2(x) , \quad (9.23)$$

где  $u_1$  и  $u_2$  - это два фундаментальных решения уравнения Шредингера при данной энергии.

Функция  $\psi_{II}$ , в силу условия Флоке, будет записана следующим образом:

$$\psi_{II} = e^{ika} \psi_I(x-a) = e^{ika} (A u_1(x-a) + B u_2(x-a)) . \quad (9.24)$$

В силу того, что потенциал является непрерывным, воспользуемся двумя условиями для сшивки волновых функций:

$$\begin{cases} \psi_I(a) = \psi_{II}(a) \\ \psi'_I(a) = \psi'_{II}(a) \end{cases} \quad (9.25)$$

Далее подставим волновые функции и их производные в (9.25), в результате чего получим следующую систему уравнений:

$$\begin{cases} A u_1(a) + B u_2(a) = e^{ika} (A u_1(0) + B u_2(0)) \\ A u_1'(a) + B u_2'(a) = e^{ika} (A u_1'(0) + B u_2'(0)) \end{cases} \quad (9.26)$$

Выражение (9.26) представляет собой линейную систему однородных уравнений на определение коэффициентов  $A$  и  $B$ . Составим определитель для такой системы и приравняем его к нулю:

$$\det \begin{vmatrix} u_1(a) - e^{ika} u_1(0) & u_2(a) - e^{ika} u_2(0) \\ u_1'(a) - e^{ika} u_1'(0) & u_2'(a) - e^{ika} u_2'(0) \end{vmatrix} = 0. \quad (9.27)$$

Если вычислить определитель (9.27) и преобразовать полученное выражение, ответ будет иметь следующий вид:

$$\cos ka = \frac{u_1(0) u_2'(a) + u_1(a) u_2'(0) - u_2(0) u_1'(a) - u_2(a) u_1'(0)}{u_1 u_2' - u_2 u_1'} , \quad (9.28)$$

где в знаменателе были опущены аргументы функций, поскольку выражение  $u_1 u_2' - u_2 u_1'$  представляет собой вронскиан между двумя фундаментальными решениями, а, следовательно, он не зависит от аргумента.

В правой части (9.28) было получено выражение, зависящее от энергии, а в левой части - косинус с аргументом  $ka$ , причем  $k$  по способу его ввода является вещественным числом. Исходя из этого, выражение в левой части ограничено по модулю единицей, а правая часть в зависимости от  $E$  может как попадать в область косинуса, так и выходить за её пределы.

Таким образом, в случае, если правая часть (9.28) попадает в область значений функции по модулю меньше единицы, то между  $E$  и  $k$  устанавливается связь, которая называется дисперсионным соотношением. При значениях функций в правой части больше единицы решений не будет и, следовательно, частица не сможет двигаться по кристаллу, что соответствует запрещенной энергетической области.

Построим график зависимости энергии от квазиимпульса  $k$  (рис. 9.3).

В выражении (9.28) основной зависимостью является функция, находящаяся в правой части. Как видно из рис. 9.3, при низких значениях энергиях сначала наблюдается самая широкая запрещенная зона, после чего появляется первая и самая узкая разрешенная область.

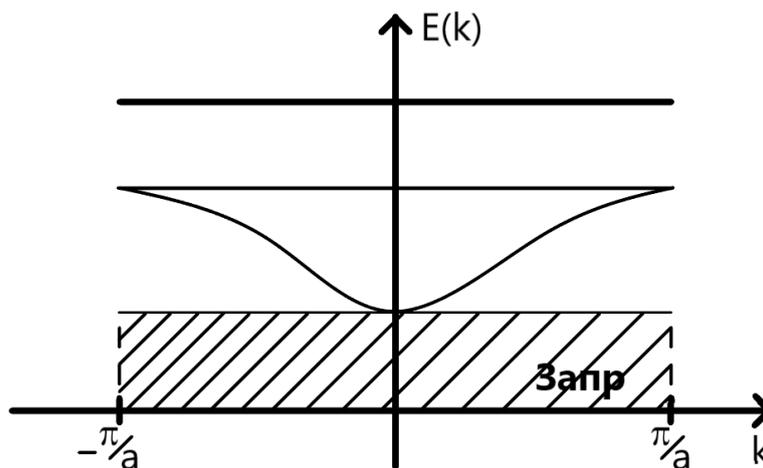


Рис. 9.3. График зависимости энергии от квазиимпульса

Далее появляется вторая запрещенная область, которая является более узкой по сравнению с первой, после чего появляется более широкая вторая разрешенная область, которая, как видно из рис. 9.4, является шире первой.

Сформулируем следующее утверждение:

**Утверждение 9.2.** *Свойства кристаллов, металлов и неметаллов очень сильно зависят от того, как именно расположены относительно уровня Ферми разрешенные и запрещенные области.*

Верхняя и нижележащие заполненные зоны определяют так называемую валентную зону, ответственную за образование химических связей. Последующие зоны определяют зону проводимости. В зависимости от количества электронов в нижней не до конца заполненной области определяются свойства токопроводимости материала. Если электронов мало, то при приложении электрического поля будет наблюдаться только очень слабый отклик.

В случае, когда запрещенная зона, разделяющая валентную зону от зоны проводимости, является достаточно широкой, для перехода электрона в зону проводимости необходимо приложить к нему достаточно сильное поле. Такие материалы являются диэлектриками.

В случае, когда нижняя зона проводимости лежит ниже уровня Ферми, для перехода электрона в зону проводимости необходимо сообщить ему меньшую энергию. Такие материалы являются металлами.

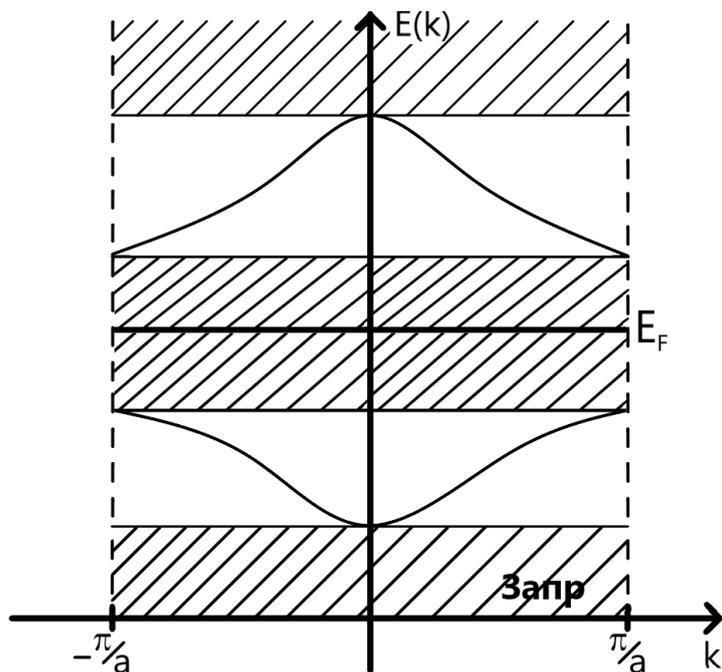


Рис. 9.4. Зонная структура

## Переход к квазиклассическому пределу

Далее перейдем к следующей важной теме: будем рассматривать переход к квазиклассическому пределу в одномерном случае. Как уже было сказано ранее, квантовая теория прежде всего работает с объектами, для которых параметры размерности действия сравнимы с величиной  $\hbar$ . Так, в случае роста данного параметра необходимо переходить к квазиклассическому рассмотрению.

Удобнее всего рассматривать квазиклассическое приближение, основываясь на уравнении Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right] \psi. \quad (9.29)$$

**Замечание 9.1.** Далее будет представлено рассмотрение квазиклассического приближения для трехмерного пространства. При переходе к ВКБ будет рассмотрен только одномерный случай, поскольку теории ВКБ для трехмерного пространства не существует.

Введем для  $\psi$  как для комплекснозначной функции запись через модуль ком-

плексного числа и фазы, так как любое комплекснозначное число можно записать в следующем виде  $z = \rho e^{i\varphi}$ :

$$\psi = a e^{\frac{i}{\hbar} S} . \quad (9.30)$$

Подставим функцию  $\psi$  в уравнение Шредингера в терминах двух функций  $a(\vec{r}, t)$  и  $S(\vec{r}, t)$ , которые по определению являются вещественными. Таким образом, после переноса всех слагаемых уравнения вправо получим следующее:

$$-i\hbar \frac{\partial a}{\partial t} + a \frac{\partial S}{\partial t} - \frac{i\hbar}{2m} a \Delta S + \frac{1}{2m} a (\vec{\nabla} S)^2 - \frac{i\hbar}{m} \vec{\nabla} a \vec{\nabla} S - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta a + V(r) a = 0 . \quad (9.31)$$

Таким образом, мы получили комплексное уравнение, однако в силу того, что функции  $a(\vec{r}, t)$  и  $S(\vec{r}, t)$ , как уже было сказано ранее, являются вещественными, то уравнение (9.31) представляет собой два более простых уравнения для вещественной и мнимой части. Так, мнимая часть (9.31) даст следующее уравнение:

$$\frac{\partial a}{\partial t} + \frac{a}{2m} \Delta S + \frac{1}{m} \vec{\nabla} a \vec{\nabla} S = 0 . \quad (9.32)$$

Далее запишем уравнение вещественной части:

$$a \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{a}{2m} (\vec{\nabla} S)^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta a + V(\vec{r}) a = 0 . \quad (9.33)$$

Преобразуем уравнение (9.33) так, чтобы оно совпадало с уравнением Гамильтона-Якоби:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} (\vec{\nabla} S)^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta a}{a} + V(\vec{r}) = 0 . \quad (9.34)$$

Обратим внимание на то, что слагаемое в уравнении (9.34), содержащее множитель  $\hbar^2$ , может показать квантовую поправку, однако необходимо помнить, что  $\hbar$  является размерной величиной. Так, пренебрегать размерными величинами можно лишь только в сравнении с другими величинами, имеющими ту же размерность. В нашем случае функция  $S(\vec{r}, t)$  должна иметь размерность действия, как функция Гамильтона-Якоби, поэтому сравнивать между собой мы можем лишь те слагаемые в данном уравнении, которые имеют множитель  $m$  в знаменателе и  $\vec{\nabla}^2$ . Так, для того, чтобы перейти к уравнению Гамильтона-Якоби как к нулевому приближению, необходимо, чтобы выполнялось следующее соотношение:

$$\left| \frac{S}{\hbar} \right| \ll 1 . \quad (9.35)$$

Так, квазиклассическое приближение имеет место быть, когда действие нашей системы является большим по отношению к величине  $\hbar$ . Тогда, в нулевом приближении

имеем уравнение Гамильтона-Якоби:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} (\vec{\nabla} S)^2 + V = 0, \quad (9.36)$$

где функция  $S(\vec{r}, t)$  имеет смысл классического действия, а  $\vec{\nabla} S^2$  представляет собой импульс. Преобразуем также и уравнение (9.32):

$$\frac{1}{2} \frac{\partial a^2}{\partial t} + \frac{1}{2m} \vec{\nabla} (a^2 \vec{\nabla} S) = 0. \quad (9.37)$$

Вспомнив выражение (9.30), отметим, что  $a^2$  является квадратом волновой функции:

$$a^2 = |\psi|^2. \quad (9.38)$$

Поэтому можем переписать уравнение (9.37) в терминах волновой функции:

$$\frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} + \vec{\nabla} (|\psi|^2 \vec{v}) = 0. \quad (9.39)$$

Уравнение (9.39) совпадает с уравнением непрерывности, причем  $|\psi|^2$  является плотностью вероятности, а выражение под градиентом представляет собой ток переноса.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} (\rho \vec{v}) = 0. \quad (9.40)$$

Следовательно, в классическом пределе сохраняется волновой пакет, но при этом он подчиняется классическим уравнениям: уравнению Гамильтона-Якоби и уравнению непрерывности. Восстановление классической механики в данном случае происходит не полностью, так как при переходе к классическому рассмотрению не возникает точечных частиц, а положение частиц определяется плотностью вероятности. При этом движение частицы является почти классическим, поскольку оно удовлетворяет уравнению Гамильтона-Якоби. Скорость определяется как  $\frac{p}{m}$ , где  $p$  равно  $\vec{\nabla} S$ .

## Приближение ВКБ

Перейдем теперь к приближению Вентцеля, Крамерса и Бриллюэна. Для того чтобы показать смысл данного приближения, запишем уравнение Шредингера:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right] \psi = E \psi. \quad (9.41)$$

Далее для волновой функции  $\psi$  осуществим следующую замену:

$$\psi = e^{\frac{i}{\hbar}S}, \quad (9.42)$$

где  $S$  - комплекснозначная функция.

Данную замену подставим в уравнение (9.41), и после преобразований получим, что

$$\frac{1}{2m} (\vec{\nabla}S)^2 - \frac{i\hbar}{2m} \Delta S + V - E = 0. \quad (9.43)$$

Из (9.43) может быть выделено стационарное уравнение Гамильтона-Якоби. Для того чтобы его получить, необходимо опустить квантовую поправку, за которую отвечает второй член выражения. Тогда необходимо, чтобы выполнялось следующее соотношение:

$$|\vec{\nabla}S|^2 \gg \hbar |\Delta S|. \quad (9.44)$$

Если условие (9.44) выполняется, то второй член в выражении (9.43) в нулевом приближении можно отбросить, в результате чего удастся получить уравнение Гамильтона-Якоби для фиксированной энергии. Условие (9.44) также удобно переписать в виде:

$$|p|^2 \gg \hbar |\vec{\nabla}p|. \quad (9.45)$$

К сожалению, решить задачу для трехмерного случая нельзя, поскольку для метода ВКБ в данном случае нет общей теории. Объясняется это тем, что, в отличие от трехмерного, в одномерном случае туннелирование частицы может быть легко объяснимо. Более того, существуют различные трехмерные траектории, описать которые невозможно.

В одномерном случае условие (9.45) можно переписать в следующем виде:

$$p^2 \gg \hbar \left| \frac{dp}{dx} \right|. \quad (9.46)$$

Или, если поделить в (9.46) правую и левую часть на  $p^2$ , после внесения  $p^2$  под дифференциал получим:

$$1 \gg \left| \frac{d}{dx} \left( \frac{\hbar}{p} \right) \right|. \quad (9.47)$$

Выражение под дифференциалом представляет собой приведенную дебройлевскую длину волны  $\lambda$ , где стандартная длина волны де Бройля равна:

$$\lambda_B = \frac{h}{p}. \quad (9.48)$$

Тогда условие (9.47) может быть записано следующим образом:

$$\left| \frac{\partial \lambda}{\partial x} \right| \ll 1 . \quad (9.49)$$

Условие (9.49) означает, что изменение длины волны де Бройля на масштабах задачи должно быть малым. Существует также еще более понятная расшифровка условия (9.46), а именно: если использовать выражение для импульса в квазиклассическом пределе, запись которого выглядит следующим образом:

$$p = \sqrt{2m(E - V(x))} , \quad (9.50)$$

то вместо  $p$  в правой части (9.46) подставим (9.50) и получим, что

$$p^2 \gg \frac{\hbar m}{|p|} \left| \frac{\partial V}{\partial x} \right| . \quad (9.51)$$

Учитывая, что  $\frac{\partial V}{\partial x} = -F_{\text{кл}}$ , перепишем (9.51) как

$$|F_{\text{кл}}| \ll \frac{|p|^3}{\hbar m} . \quad (9.52)$$

Если нарисовать рисунок потенциала (рис. 9.5), то, если частица находится на уровне энергии, соответствующем энергии  $E$ , в классической задаче будет получаться две точки поворота  $x_1$  и  $x_2$ , где классический импульс тождественно равен нулю. Следовательно, в окрестности данных точек нельзя опускать второй член выражения (9.43). Исходя из этого,  $x_1$  и  $x_2$  требуют дополнительного рассмотрения. Если же искать решение задачи в любых других точках, то метод ВКБ будет являться вполне применимым. Далее рассмотрим метод ВКБ более детально. В одномерном случае точное уравнение для  $S$  будет записано в виде

$$\frac{1}{2m} (S')^2 - \frac{i\hbar}{2m} S'' + V - E = 0 . \quad (9.53)$$

Метод ВКБ заключается в использовании теории возмущений для уравнения (9.53). Таким образом, применим следующее разложение:

$$S = \sigma_0 + \frac{\hbar}{i} \sigma_1 + \left( \frac{\hbar}{i} \right)^2 \sigma_2 + \dots . \quad (9.54)$$

**Замечание 9.2.** Такой способ не является полностью корректным, так как разложение в ряд по размерному параметру является не совсем „честной“ операцией. Тем не менее, данная операция является общепринятой.

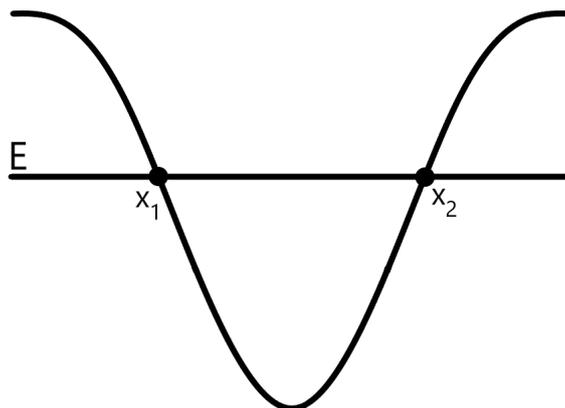


Рис. 9.5. Уровень энергии в классической задаче

Далее подставим разложение (9.54) в уравнение (9.53), после чего перепишем его в виде нескольких уравнений по степеням  $\hbar^n$ .

$$\begin{cases} \hbar^0 : & \sigma_0'^2 = p^2(x) = 2m(E - V(x)) \\ \hbar^1 : & 2\sigma_0'\sigma_1' + \sigma_0'' = 0 \\ \hbar^2 : & 2\sigma_0'\sigma_2' + (\sigma_1')^2 + \sigma_1'' = 0 \end{cases} \quad (9.55)$$

Представленная схема работает исключительно как теория возмущений. Так, нулевое приближение определяет функцию  $\sigma_0$ , а далее - итерационная цепочка. Из следующего порядка определим функцию  $\sigma_1$  и т.д.

**Замечание 9.3.** В реальности в основном используют первые два приближения. Если же возникает необходимость в рассмотрении следующих порядков приближения, задачу, как правило, решают численно.

Для того чтобы решить первые два уравнения из системы (9.55), обратимся к следующим вспомогательным рисункам:

Отметим, что в точке  $E = V$ , являющейся классической точкой поворота, ВКБ не может быть применимо сразу, так как в ней условие ВКБ нарушается.

Область  $I$  является классически разрешенной областью, в которой значение энергии больше значения потенциала. В области  $II$  энергия частицы оказывается меньше потенциала, что соответствует классически запрещенной области. Обе области разрешены с точки зрения ВКБ, кроме уже указанной ранее окрестности точки поворота.

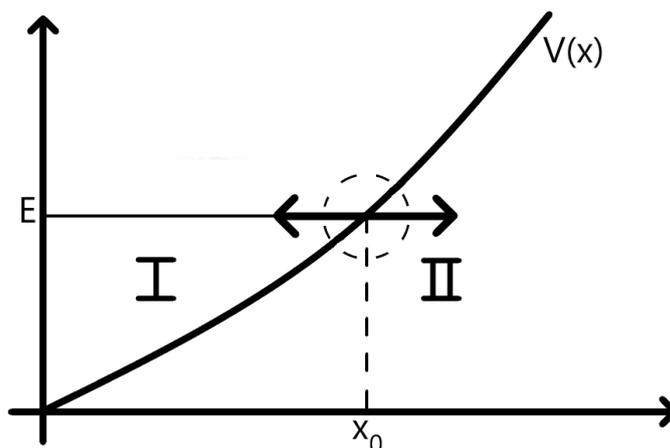


Рис. 9.6. Нарушение условия применимости метода ВКБ

Импульс в области  $I$  оказывается вещественным, поэтому для  $\sigma_0$  получается два решения:

$$\sigma_0 = \pm \int_x^{x_0} p(x') dx', \quad (9.56)$$

где здесь и в последующих выражениях пределы интегрирования будут выбираться так, чтобы нижний предел был ниже, чем верхний. Это необходимо для того, чтобы в задачах, в которых есть вторая точка поворота, выражения переписывались более простым образом.

Величина  $p$  из (9.56) представляет собой классический импульс, который можно записать в виде

$$p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))}. \quad (9.57)$$

Далее выразим  $\sigma'_1$  из второго уравнения в (9.55). Тогда

$$\sigma'_1 = -\frac{\sigma''_0}{2\sigma'_0}. \quad (9.58)$$

Следовательно, получим выражение для  $\sigma_1$ :

$$\sigma_1 = -\frac{1}{2} \ln |\sigma'_0| + \text{Const}. \quad (9.59)$$

Далее, после того, как удалось найти  $\sigma_0$  и  $\sigma_1$ , подставим их в разложение  $S$ , в результате чего получим ответ для  $\psi_I$ :

$$\psi_I = e^{\frac{i}{\hbar}S} = \frac{a}{\sqrt{p(x)}} \sin(z + \gamma) + \frac{b}{\sqrt{p(x)}} \cos(z + \gamma), \quad (9.60)$$

где в выражении была введена величина  $z$ , которая определяется выражением

$$z = \frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} p(x') dx', \quad (9.61)$$

а также в аргументы синуса и косинуса были добавлены дополнительные фазы  $\gamma$  и  $\gamma'$ .

**Замечание 9.4.** В результате преобразования величины  $\psi_I$  возникает выражение с экспоненциальными членами, которые для удобства могут быть записаны в виде синуса и косинуса, как это было сделано в (9.60).

Теперь же рассмотрим запрещенную для движения классической частицы область. В этой области величина  $\sigma_0$  становится мнимой, поскольку становится мнимым классический импульс.

Введем следующее обозначение:

$$|p(x)| = \sqrt{2m(V(x) - E)}. \quad (9.62)$$

Величина  $|p(x)|$  может быть названа туннельным импульсом, поскольку она соответствует импульсу частицы в запрещенной для движения области.

Введем также

$$|z| = \frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x |p(x')| dx', \quad (9.63)$$

где пределы интегрирования теперь выбраны от  $x_0$  до  $x$ .

Таким образом, в области  $II$  величины  $\sigma$  являются чисто мнимыми, поэтому ответ для функции  $\psi_{II}$  представляет собой две экспоненты: одну растущую и одну убывающую:

$$\psi_{II} = \frac{A}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-|z|} + \frac{B}{\sqrt{|p(x)|}} e^{|z|}. \quad (9.64)$$

В выражении была оставлена растущая экспонента, так как, например, для случая конечного барьера в ограниченной области для  $\psi_{II}$  будет оставаться выражение с двумя экспонентами (как два линейно независимых решения).

Для сшивки решений в двух областях необходимо рассмотреть окрестность точки поворота, потому что они не могут быть сшиты напрямую, а также в силу неприменимости использования приближения ВКБ для данной области.

Для правильного „сшивания“ волновых функций в окрестности точки поворота изначально необходимо разложить потенциал в ряд Тейлора:

$$V(x) = V(x_0) + V'(x_0)(x - x_0) + \dots \quad (9.65)$$

В разложении (9.65) можно оставить только линейные члены, считая, что нам нужна только малая окрестность точки поворота, пренебрегая тем самым более высокими порядками разложения. Введем следующее обозначение:

$$V'(x_0) = \frac{\hbar^2}{2m} \alpha . \quad (9.66)$$

Тогда для потенциала в окрестности точки  $x = x_0$  можно записать, что

$$V(x) = E + \alpha \frac{\hbar^2}{2m} (x - x_0) . \quad (9.67)$$

Далее необходимо записать исходное уравнение Шредингера для окрестности точки поворота:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' + (V - E) \psi = 0 . \quad (9.68)$$

Подставим в (9.68) приближение для  $V(x)$  (9.67), и получим следующее уравнение:

$$\psi'' - \alpha (x - x_0) \psi = 0 . \quad (9.69)$$

Осуществим следующую замену переменных:

$$\xi = \alpha^{1/3} (x - x_0) , \quad (9.70)$$

где  $\alpha$  в подстановке имеет степень  $1/3$  для того, чтобы сократить в (9.69) величину  $\alpha$ . Тогда (9.69) будет преобразовано к виду

$$\psi'' - \xi \psi = 0 , \quad (9.71)$$

где выражение записано в терминах переменной  $\xi$ .

Уравнение (9.71) представляет собой одно из базовых уравнений математической физики (уравнение Эйри). Его решение известно и может быть найдено во многих квантовомеханических книгах.

Запишем это решение:

$$u(\xi) = \sqrt{\xi} Z_{1/3} \left( \frac{2}{3} \xi^{3/2} \right) , \quad (9.72)$$

где  $Z$  - произвольная цилиндрическая функция, выбор которой зависит от конкретной задачи и краевых условий. Для рассматриваемого нами случая необходимо использовать две функции, предложенные Вентцелем, Крамерсом и Бриллюеном. Эти функции выбраны так, чтобы при выходе из окрестности точки поворота они переходили либо в  $\psi_I$ , либо в  $\psi_{II}$ .

Далее запишем функции в интегральном представлении цилиндрических функций:

$$\begin{cases} u_1 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dt \left[ e^{t\xi - t^3/3} + \sin(t\xi + t^3/3) \right] \\ u_2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dt \cos(t\xi + t^3/3) \end{cases} \quad (9.73)$$

Функции (9.73) представляют собой два линейно независимых решения. Рассмотрим асимптотики этих функции при  $\xi \gg 1$  и  $\xi \ll -1$ . В первом случае мы уходим далеко в туннельную область, в которой для волновой функции должна оставаться затухающая экспонента. Во втором же случае частица должна быть описана квазиклассическим образом, а решения должны вести себя как синусы или косинусы. Тогда при  $\xi \gg 1$ ,  $u_1$  и  $u_2$  асимптотически стремятся к:

$$\begin{cases} u_1 \xrightarrow{\xi \gg 1} \xi^{-\frac{1}{4}} e^{\frac{2}{3}\xi^{3/2}} \\ u_2 \xrightarrow{\xi \gg 1} \frac{1}{2} \xi^{-\frac{1}{4}} e^{-\frac{2}{3}\xi^{3/2}} \end{cases} . \quad (9.74)$$

Во втором пределе при  $\xi \ll -1$ :

$$\begin{cases} u_1 \xrightarrow{\xi \ll -1} |\xi|^{-\frac{1}{4}} \cos\left(\frac{2}{3}|\xi|^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4}\right) \\ u_2 \xrightarrow{\xi \ll -1} |\xi|^{-\frac{1}{4}} \sin\left(\frac{2}{3}|\xi|^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4}\right) \end{cases} \quad (9.75)$$

Установим связь между величинами  $z$  и  $\xi$ . Для этого рассмотрим классически разрешенную область при условии, что

$$x = x_0 - \varepsilon . \quad (9.76)$$

Тогда величина  $z$ , входящая в решение для  $\psi_I$ , будет записана так:

$$z = \frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} p(x') dx' = \frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} \sqrt{2m\alpha \frac{\hbar^2}{2m} (x_0 - x')} dx' = \int_x^{x_0} \sqrt{\alpha (x_0 - x')} dx' , \quad (9.77)$$

где для  $p(x')$  из интеграла было использовано разложение потенциала в ряд вплоть до линейного члена, поскольку пределы интегрирования выбраны так, что область интегрирования соответствует  $\varepsilon$  окрестности точки поворота.

В результате интегрирования выражения (9.77) получим следующее выражение:

$$z = \sqrt{\alpha} \frac{2}{3} (x_0 - x)^{\frac{3}{2}} = \frac{2}{3} |\xi|^{\frac{3}{2}} . \quad (9.78)$$

В области перекрытия между квазиклассической областью и окрестностью точки поворота, в которой было проведено разложение потенциала  $V(x)$ , выполняется

асимптотическое равенство функций, полученных при решении уравнения Шредингера и решения ВКБ в квазиклассической области, в которой волновая функция имеет вид:

$$\psi_I = \frac{a}{|\xi|^{\frac{1}{4}}} \sin\left(\frac{2}{3}|\xi|^{\frac{3}{2}} + \gamma\right) + \frac{b}{|\xi|^{\frac{1}{4}}} \cos\left(\frac{2}{3}|\xi|^{\frac{3}{2}} + \gamma'\right). \quad (9.79)$$

Чтобы два решения были „сшиты“ в точке поворота, необходимо, чтобы решение с синусом совпадало с асимптотикой  $u_2$ , а с косинусом - с  $u_1$ . Тогда для выполнения равенства необходимо, чтобы выполнялось следующее:

$$\gamma = \gamma' = \frac{\pi}{4}. \quad (9.80)$$

Далее рассмотрим  $\varepsilon$  окрестность точки поворота справа. Для области  $x = x_0 + \varepsilon$  и далее необходимо произвести совершенно аналогичные действия, что и для левой области.  $\psi_{II}$  для данного случая будет записано в виде:

$$\psi_{II} \longrightarrow \frac{A}{\xi^{\frac{1}{4}}} e^{-\frac{2}{3}\xi^{3/2}} + \frac{B}{\xi^{\frac{1}{4}}} e^{\frac{2}{3}\xi^{3/2}}. \quad (9.81)$$

Сравнивая выражение для  $\psi_{II}$  и асимптотики решений  $u_1$  и  $u_2$ , можно заметить, что решению  $u_1$  соответствует второе слагаемое (9.81), а  $u_2$  - первое. При этом коэффициенты при сшивке оказываются равными:  $A = a/2$ ,  $B = b$ .

Теперь можно выписать решение ВКБ для всей области:

$$\psi = a\psi_1 + b\psi_2, \quad (9.82)$$

где  $\psi_1$ :

$$\psi_1 = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{p}} \sin\left(z + \frac{\pi}{4}\right), & x < x_0 \\ \frac{1}{2\sqrt{|p|}} e^{-|z|}, & x > x_0 \end{cases} \quad (9.83)$$

а  $\psi_2$ :

$$\psi_2 = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{p}} \cos\left(z + \frac{\pi}{4}\right), & x < x_0 \\ \frac{1}{\sqrt{|p|}} e^{|z|}, & x > x_0 \end{cases} \quad (9.84)$$

Далее перейдем к рассмотрению задачи на прохождение потенциального барьера.

## Прохождение потенциального барьера в приближении ВКБ

Потенциал для рассматриваемой задачи будет иметь вид барьера, представленного на рис. 9.7. Слева и справа от барьера потенциал на асимптотике равен нулю.

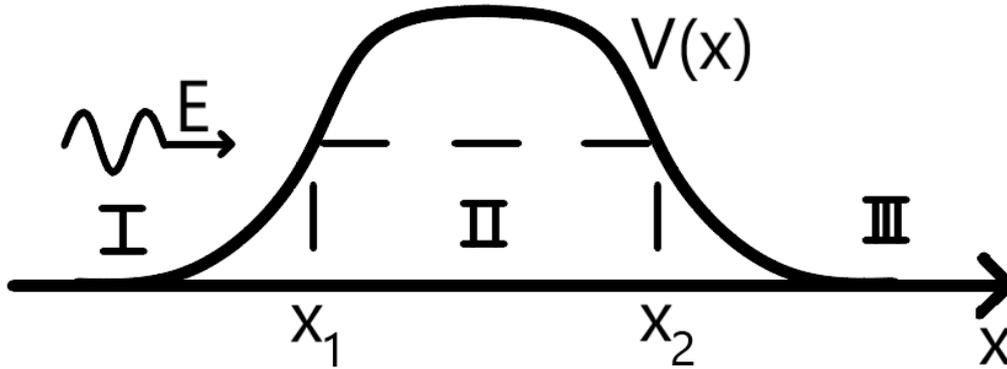


Рис. 9.7. Вид потенциального барьера для задачи на приближение ВКБ

Пусть на барьер налетает частица с энергией  $E$ , вследствие чего в системе будет существовать две точки поворота  $x_1$  и  $x_2$ .

Будем решать задачу, используя ранее полученные формулы для приближения ВКБ. В рассматриваемом случае пространство можно разделить на три области, где средняя область представляет собой туннельную область, а две другие - разрешенные. В области  $I$  волновая функция  $\psi_I$  будет иметь следующий вид:

$$\psi_I = \frac{a}{\sqrt{p}} \sin\left(z + \frac{\pi}{4}\right) + \frac{b}{\sqrt{p}} \cos\left(z + \frac{\pi}{4}\right). \quad (9.85)$$

В рассматриваемом случае удобнее пользоваться представлением в виде экспонент:

$$\psi_I = \frac{B_0}{\sqrt{p}} e^{-i(z+\frac{\pi}{4})} + \frac{B_1}{\sqrt{p}} e^{i(z+\frac{\pi}{4})}, \quad (9.86)$$

где

$$B_0 = \frac{b + ia}{2}, \quad B_1 = \frac{b - ia}{2} \quad (9.87)$$

Далее ответим на вопрос: какая из экспонент соответствует падающей волне, а какая - отраженной? Казалось бы, что экспонента со знаком „+“ соответствует падающей волне, а с „-“ - отраженной. Однако это не так. Для того, чтобы понять, почему это так, необходимо рассмотреть величину  $z$ :

$$z = \frac{1}{\hbar} \int_x^{x_1} p(x') dx'. \quad (9.88)$$

Для нахождения члена, отвечающего за падающую волну, необходимо проанализировать значение  $z$  на минус бесконечности. Сперва рассмотрим значение производной  $z$ :

$$\frac{dz}{dx} = -\frac{1}{\hbar} p(x) \xrightarrow{x \rightarrow -\infty} -\frac{1}{\hbar} p_0, \quad (9.89)$$

где  $p_0$  - начальный импульс частицы.

Из (9.89) следует выражение для величины  $z$ :

$$z \xrightarrow{x \rightarrow -\infty} -\frac{1}{\hbar} p_0 x + \text{Const} . \quad (9.90)$$

Из выражения (9.90) окончательно видно, что в выражении для  $z$  присутствует минус, поэтому падающей волне соответствует экспонента с коэффициентом  $B_0$ , а отраженной с -  $B_1$ .

Далее рассмотрим область за первой точкой поворота. Так, в области  $II$  волновая функция  $\psi_2$  будет равна:

$$\psi_{II} = \frac{a}{2\sqrt{|p|}} e^{-|z|} + \frac{b}{\sqrt{|p|}} e^{|z|} , \quad (9.91)$$

где  $|z|$  равен:

$$|z| = \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x |p(x')| dx' . \quad (9.92)$$

Для того чтобы пройти вторую точку поворота, необходимо переписать решение так, чтобы в пределах интегрирования присутствовала координата второй точки поворота. Введем с этой целью величину  $\gamma$ , которая может быть записана как

$$\gamma = \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} |p(x')| dx' . \quad (9.93)$$

Тогда  $|z|$  можно переписать следующим образом:

$$|z| = \gamma - \frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} |p(x')| dx' . \quad (9.94)$$

В результате выполнения преобразования мы поменяли точку поворота с  $x_1$  на  $x_2$ , что позволяет нам переписать выражение для волновой функции  $\psi_{II}$  следующим образом:

$$\psi_{II} = \frac{a}{2\sqrt{|p|}} e^{-\gamma} e^{|\tilde{z}|} + \frac{b}{\sqrt{|p|}} e^{\gamma} e^{-|\tilde{z}|} , \quad (9.95)$$

где  $|\tilde{z}|$  - слагаемое, отсчитываемое от второй точки:

$$|\tilde{z}| = \frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} |p(x')| dx' . \quad (9.96)$$

Волновая функция  $\psi_{II}$  может быть переписана в виде

$$\psi_{II} = \frac{\tilde{b}}{\sqrt{|p|}} e^{|\tilde{z}|} + \frac{\tilde{a}}{2\sqrt{|p|}} e^{-|\tilde{z}|} , \quad (9.97)$$

где коэффициенты  $\tilde{a}$  и  $\tilde{b}$  равны соответственно:

$$\tilde{b} = \frac{1}{2} a e^{-\gamma}, \quad \tilde{a} = 2 b e^{\gamma}. \quad (9.98)$$

Таким образом, получили, что решение с  $\tilde{a}$  является убывающим при движении влево от второй точки поворота. Именно поэтому оно должно переходить в область  $I$  в виде синуса. Второе же решение с  $\tilde{b}$  должно переходить в косинус.

Далее запишем решение для области  $III$ :

$$\psi_{III} = \frac{\tilde{B}_0}{\sqrt{p}} e^{-i(z+\frac{\pi}{4})} + \frac{\tilde{B}_1}{\sqrt{p}} e^{i(z+\frac{\pi}{4})}, \quad (9.99)$$

где величина  $z$  для данной области оказывается равной

$$z = \frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^x p(x') dx'. \quad (9.100)$$

**Замечание 9.5.** В выражении (9.99) присутствует слагаемое для отраженной волны, потому что это выражение было записано в общем виде и далее будет отброшено в силу определенных дополнительных условий на функцию  $\psi$ .

При этом  $\tilde{B}_0$  и  $\tilde{B}_1$  связаны с  $\tilde{a}$  и  $\tilde{b}$  следующими соотношениями:

$$\tilde{B}_0 = \frac{\tilde{b} + i\tilde{a}}{2}, \quad \tilde{B}_1 = \frac{\tilde{b} - i\tilde{a}}{2}. \quad (9.101)$$

Теперь же проанализируем, какое из слагаемых в (9.99) отвечает за прошедшую, а какое за отраженную волну. Для этого необходимо посмотреть на асимптотику величины  $z$  при  $x \rightarrow \infty$ :

$$z \xrightarrow{x \rightarrow \infty} \frac{p_0}{\hbar} x + \text{Const}. \quad (9.102)$$

Из (9.102) следует, что прошедшая волна соответствует слагаемому с коэффициентом  $\tilde{B}_1$ . Следовательно, необходимо опустить слагаемое с коэффициентом  $\tilde{B}_0$ , поскольку в условиях рассматриваемой задачи в области  $III$  должна отсутствовать отраженная волна.

Установим связи между коэффициентами волновых функций в областях  $I$ ,  $II$  и  $III$ . Так как необходимо, чтобы в области  $III$  коэффициент  $\tilde{B}_0$  был равен нулю, должно выполнялось следующее соотношение между  $\tilde{b}$  и  $\tilde{a}$ :

$$\tilde{b} = -i\tilde{a}. \quad (9.103)$$

Тогда, подставив (9.103) в выражение для  $\tilde{B}_1$ , получим, что

$$\tilde{B}_1 = \tilde{b} = \frac{1}{2} a e^{-\gamma}. \quad (9.104)$$

Далее подставим в (9.104) выражение для  $\tilde{a}$  из (9.98):

$$\tilde{b} = -i2be^\gamma = \frac{1}{2}ae^{-\gamma}. \quad (9.105)$$

Таким образом, из (9.105) может быть легко найдена связь между  $b$  и  $a$ :

$$b = \frac{i}{4}ae^{-2\gamma}. \quad (9.106)$$

Через соотношение (9.87) получим выражения для  $B_0$  и  $B_1$ :

$$\begin{cases} B_0 = \frac{ia}{2} \left(1 + \frac{1}{4}e^{-2\gamma}\right) \\ B_1 = \frac{ia}{2} \left(\frac{1}{4}e^{-2\gamma} - 1\right) \end{cases} \quad (9.107)$$

Далее вспомним ранее полученное выражение для  $\tilde{B}_1$  через  $a$  и найдем коэффициент прохождения частицы через барьер:

$$T = \left| \frac{\tilde{B}_1}{B_0} \right|^2 = \frac{e^{-2\gamma}}{\left(1 + \frac{1}{4}e^{-2\gamma}\right)^2}. \quad (9.108)$$

По условию задачи, параметр  $\gamma$  представляет собой интеграл от импульса по туннельной области. Так, его значение много больше единицы. В силу данных причин, в итоговом ответе (9.108) можно воспользоваться разложением экспоненты с большим значением показателя степени и оставить только главный член по причине того, что в задаче были рассмотрены только нулевой и первый порядки малости. Тогда:

$$T \approx e^{-2\gamma} \ll 1. \quad (9.109)$$

Величина  $T$  дает разумную оценку на коэффициент прохождения через барьер частицы. Для нахождения коэффициента отражения можно воспользоваться соотношением  $R + T = 1$ .

## Лекция 10. Квазиклассическое приближение. Задача на „шляпу Лившица“ и приложения к ней

Ранее нами была рассмотрена задача на туннельный эффект в приближении ВКБ, а также был получен следующий ответ для коэффициента прохождения:

$$T \sim e^{-\frac{i}{\hbar} S_{\text{tunn}}}, \quad (10.1)$$

где  $S_{\text{tunn}}$  равна:

$$S_{\text{tunn}} = \int_{x_1}^{x_2} |p| dx, \quad (10.2)$$

а  $|p|$  по построению представляет собой функцию от потенциала:

$$|p| = \sqrt{2m(V(x) - E)}. \quad (10.3)$$

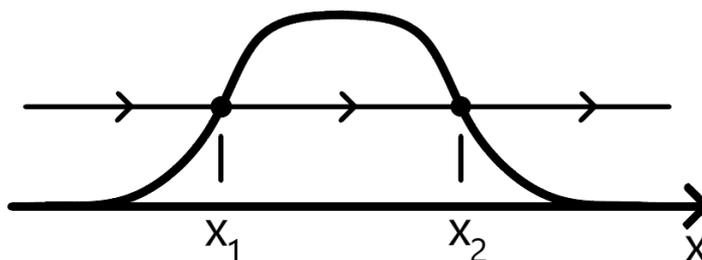


Рис. 10.1. Туннелирование частицы через барьер в квазиклассическом приближении

Таким образом, для определения коэффициента прохождения в квазиклассическом случае достаточно лишь вычислить интеграл от потенциала по туннельной области. Помимо этого, формула (10.1) имеет массу приложений более широкого плана.

### Рождение пар в постоянном электрическом поле

Одной из задач, в которых в качестве оценки можно использовать формулу (10.1), является задача на рождение пар  $e^+ + e^-$  в постоянном однородном электрическом поле.

Смысл данной задачи заключается в том, что квантовоэлектродинамический вакуум флуктуирует, в результате чего периодически рождается  $e^+e^-$  пара. Закону сохранения заряда это не противоречит, поэтому данная ситуация возможна. Однако, поскольку  $e^+$  и  $e^-$  притягиваются, они мгновенно схлопываются, и происходит

аннигиляция пары. Если приложить достаточно сильное электрическое поле, то оно может значительно разделить электроны друг от друга для того чтобы они перестали быть виртуальными и стали реальными.

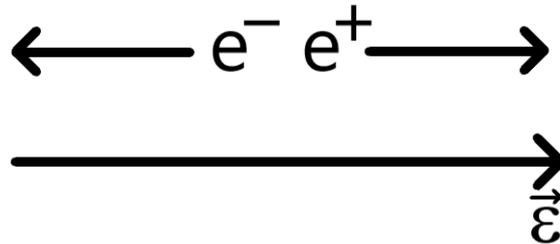


Рис. 10.2. Рождение пар  $e^+e^-$  в электрическом поле

Оценим туннельное действие для данной задачи. Будем считать, что электроны отдаляются друг от друга по оси  $x$ , т. е. поле  $\vec{\varepsilon}$  направлено вдоль оси  $x$ . В таком случае:

$$S_{\text{tunn}} \approx p \Delta x , \quad (10.4)$$

где  $p$  - импульс, который может быть оценен как

$$p \sim mc . \quad (10.5)$$

Для того чтобы оценить величину  $\Delta x$ , для начала необходимо прибегнуть к дополнительным размышлениям. Рождение пары сопровождается изменением энергии на величину порядка  $mc^2$ :

$$\Delta E \sim mc^2 . \quad (10.6)$$

Тогда по принципу неопределенности:

$$\Delta t \sim \frac{\hbar}{\Delta E} \sim \frac{\hbar}{mc^2} . \quad (10.7)$$

С другой стороны, поскольку на пару действует сила порождаемая электрическим полем, можно записать следующее соотношение:

$$e\varepsilon = \frac{\Delta p}{\Delta t} . \quad (10.8)$$

Так, из выражения (10.8) можно выразить изменение импульса:

$$\Delta p \sim \frac{\hbar e \varepsilon}{mc^2} . \quad (10.9)$$

Тогда в силу соотношения неопределенности можно оценить величину  $\Delta x$  следующим образом:

$$\Delta x \sim \frac{\hbar}{\Delta p} \sim \frac{\hbar mc^2}{\hbar e \varepsilon} = \frac{mc^2}{e \varepsilon}. \quad (10.10)$$

Следовательно, с учетом зависимостей (10.5) и (10.10) получим следующий ответ для туннельного действия  $S_{\text{tunn}}$ :

$$S_{\text{tunn}} \sim \frac{m^2 c^3}{e \varepsilon}, \quad (10.11)$$

откуда величина  $T$  будет равна:

$$T = P \sim e^{-\text{Const}(\varepsilon_{\text{QED}}/\varepsilon)}, \quad (10.12)$$

где  $P$  - вероятность рождения пары, поскольку туннелирование частиц сквозь барьер соответствует превращению пары из виртуальной в реальную,  $\text{Const}$  - некоторая константа,  $\varepsilon$  - текущая напряженность поля,  $\varepsilon_{\text{QED}}$  - квантовоэлектродинамическая напряженность, которая равна

$$\varepsilon_{\text{QED}} = \frac{m^2 c^3}{e \hbar}. \quad (10.13)$$

$\varepsilon_{\text{QED}}$  соответствует напряженности, при которой работа по перемещению электрона на расстояние в одну комптоновскую длину электрона будет  $mc^2$ :

$$e \varepsilon_{\text{QED}} \frac{\hbar}{mc} = mc^2. \quad (10.14)$$

$\varepsilon_{\text{QED}}$  может быть оценена как

$$\varepsilon_{\text{QED}} \sim 10^{16} \frac{\text{В}}{\text{см}}. \quad (10.15)$$

**Замечание 10.1.** Существует также аналогичная магнитная квантовоэлектродинамическая напряженность, которая соответствует тому, что первый уровень Ландау в постоянном магнитном поле такой напряженности будет сжиматься до одной комптоновской длины.

**Замечание 10.2.** Если решить данную задачу квантовоэлектродинамическим способом, то итоговый ответ будет отличаться тем, что вместо константы в (10.12) появится множитель  $\text{Const} = \pi$ .

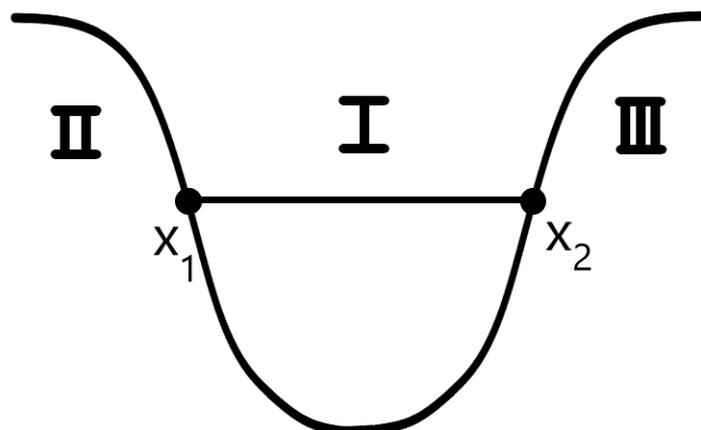


Рис. 10.3. Потенциальной яме с равновысокими стенками в квазиклассическом рассмотрении

### Финитное движение в потенциальной яме

Рассмотрим потенциальную яму, изображенную на рис. 10.3. Будем исследовать финитное движение внутри данной ямы.

Исходя из теории, в данной яме должны возникать связанные состояния. В рассматриваемом случае их будет заведомо много, поскольку квазиклассический режим предполагает, что величина действия от  $x_1$  до  $x_2$  является большим по сравнению с  $\hbar$ . Следовательно, выполняется условие  $2mV_0/\hbar^2 \gg 1$ , что означает, что яма имеет много связанных состояний. В этом случае существует метод, который приводит нас к формуле Бора-Зоммерфельда, основанной на описанном далее принципе. Волновая функция в областях I и III, как известно, должна экспоненциально затухать, что выполняется для любого дискретного уровня энергии. Тогда возможны два решения:

$$\psi_1 = \frac{a}{\sqrt{p}} \sin \left( \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right), \quad (10.16)$$

и

$$\psi_2 = \frac{a'}{\sqrt{p}} \sin \left( \frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right). \quad (10.17)$$

Функция  $\psi_1$  построена таким образом, что она продолжается в левую область в виде убывающей экспоненты, а  $\psi_2$  - в правую область. Внутри, в области I, обе функции являются решением уравнения, но, поскольку мы решаем одномерную задачу, то, как уже было показано ранее, уровни дискретного спектра в данном случае являются невырожденными. Следовательно, волновые функции  $\psi_1$  и  $\psi_2$  соответствуют

одной и той же волновой функции. Для того чтобы зафиксировать этот факт, необходимо в произвольной внутренней точке  $x$  сшить функции по непрерывности самой функции и её производной. Если проделать это, то получится следующее условие:

$$\operatorname{tg}\left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right) = -\operatorname{tg}\left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right). \quad (10.18)$$

Перенесем все в одну часть, распишем тангенсы как  $\operatorname{tg} x = \sin x / \cos x$  и домножим все выражение на произведение косинусов, стоящих в знаменателе выражения. Тогда, в результате данного преобразования получим следующее выражение:

$$\begin{aligned} & \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right) \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right) + \\ & + \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right) \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right) = 0. \end{aligned} \quad (10.19)$$

Выражение (10.19) может быть представлено в виде синуса суммы, тогда

$$\sin\left[\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} p(x') dx' + \frac{\pi}{2}\right] = 0. \quad (10.20)$$

Следовательно, аргумент синуса должен удовлетворять следующему условию:

$$\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} p(x') dx' + \frac{\pi}{2} = \pi n, \quad n \gg 1, \quad (10.21)$$

где условие  $n \gg 1$  должно быть выполнено, поскольку тогда будет выполняться условие квазиклассического рассмотрения.

Выражение (10.21) представляет собой условие квантования Бора-Зоммерфельда. Оно очень удобно тем, что не требует явного решения уравнения Шредингера и дает ответ для уровней, который удобнее переписать в следующем виде:

$$\int_{x_1}^{x_2} p(x') dx' = \pi \hbar \left(n + \frac{1}{2}\right). \quad (10.22)$$

Другая форма записи этого условия - запись через контурный интеграл по периоду. В (10.22) интегрирование ведется в пределах от  $x_1$  до  $x_2$  - это соответствует половине периода классического движения частицы. Следовательно, окончательное выражение для условия Бора-Зоммерфельда запишется в виде

$$\oint p dq = 2\pi \hbar \left(n + \frac{1}{2}\right), \quad (10.23)$$

где импульс  $p$  выражается через энергию следующим образом:

$$p = \sqrt{2m(E_n - V)}. \quad (10.24)$$

В некоторых случаях выражение (10.23) может дать точный ответ при решении задачи. Одним из таких примеров является осциллятор, который всеми известными способами решается точно.

Формула (10.23) предполагает ряд очень существенных обобщений. В нашем рассмотрении эти обобщения будут лишь для одномерного случая.

**Замечание 10.3.** При получении формулы Бора-Зоммерфельда использовалось предположение, что стенки ямы являются гладкими, откуда следует появление дополнительной фазы  $\pi/4$ , которая была введена в предыдущей лекции при рассмотрении приближения ВКБ. Так, вполне возможен вариант, когда одна из стенок является вертикальной. Примером такой задачи является гармонический осциллятор с бесконечно высокой стенкой в нуле (обрезанный гармонический осциллятор).

### Обрезанный гармонический осциллятор

Потенциал рассматриваемой задачи представлен на рис. 10.4. Благодаря наличию вертикальной стенки в точке  $x = 0$ , необходимы дополнительные действия при решении задачи, потому что, по определению, проход частицы через вертикальную стенку запрещен. Следовательно, разрешенная область представляет собой половину оси  $x$ .

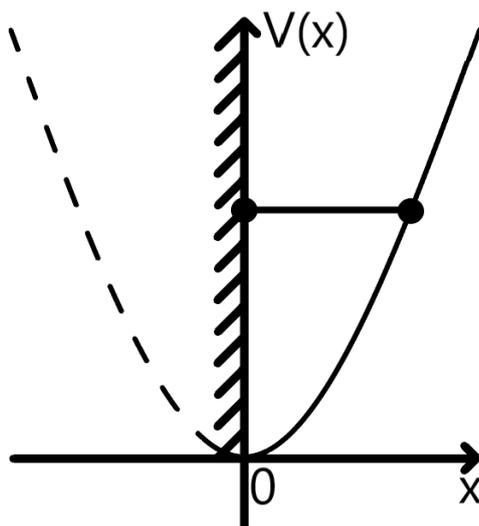


Рис. 10.4. Гармонический осциллятор с бесконечно высокой стенкой в точке  $x = 0$

В нуле при этом необходимо поставить граничное условие  $\psi(0) = 0$  и тогда, если

писать квазиклассическое решение в разрешенной области, то решение отсчитываемое от левой точки поворота (точка  $x_0 = 0$ ), должно учитывать поставленное граничное условие. Тогда из решения пропадет фаза  $\pi/4$ , которая была введена для случая гладкого потенциала, в результате чего волновую функцию можно будет записать в виде

$$\psi_1 = \frac{a}{\sqrt{p}} \sin \left[ \frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x p(x') dx' \right]. \quad (10.25)$$

Поскольку правая граница является гладкой, то решение справа будет совпадать с (10.17). Таким образом, при сшивке волновой функции и её производной с учетом дальнейших преобразований можно прийти к следующему условию:

$$\int_{x_0}^{x_2} p(x') dx' = \pi \hbar \left( n + \frac{3}{4} \right). \quad (10.26)$$

Поскольку задача рассматривается в квазиклассическом приближении, то мы работа ведется с классическими траекториями. Эти траектории являются замкнутыми, так как рассматриваются связанные состояния. Каждый контурный интеграл соответствует своему числу  $n$ . Переход от одного номера  $n$  к следующему соответствует изменению контурного интеграла на величину  $2\pi\hbar$ . В рассматриваемом нами случае контурный интеграл - это площадь, которая закрывает контур в фазовой плоскости (рис. 10.5).

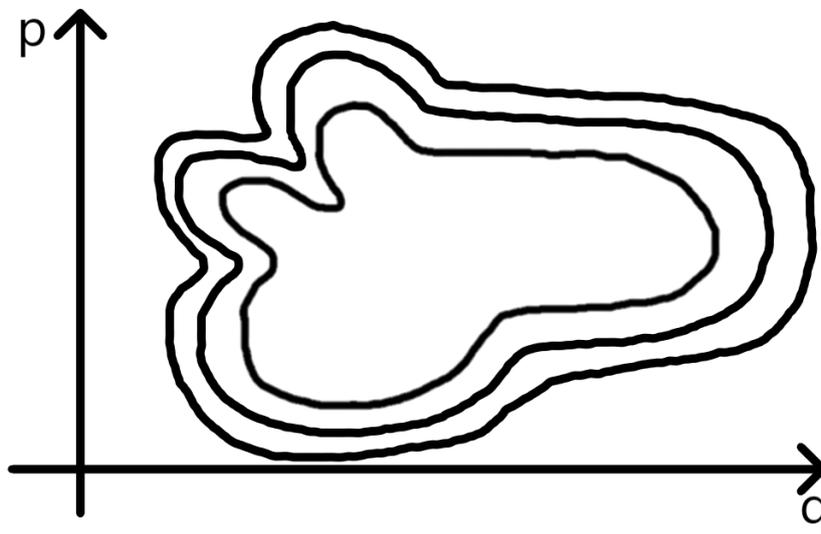


Рис. 10.5. Контур в фазовой плоскости

Следовательно, полное число квазиклассических состояний может быть оценено следующим образом: если вся область фазовой плоскости разрешенная для замкну-

того движения имеет площадь  $S$ , то  $N$  будет равно

$$N \approx \left[ \frac{S}{2\pi\hbar} \right]. \quad (10.27)$$

Изменение величины  $N$  на единицу тогда равно

$$\Delta N = 1 = \left[ \frac{\Delta S}{2\pi\hbar} \right], \quad (10.28)$$

где  $\Delta S$  - изменение площади при переходе от предыдущего контура к следующему. Если теперь расписать  $\Delta S$  в виде произведения  $\Delta p \Delta q$ , то получим следующее выражение, от которого можно предельным переходом перейти к дифференциалу  $dN$ :

$$\Delta N = \frac{\Delta p \Delta q}{2\pi\hbar} \rightarrow dN = \frac{dp dq}{2\pi\hbar}. \quad (10.29)$$

Если обобщить полученное выражение на трехмерный случай, то получим

$$dN = \frac{d\vec{p} d\vec{q}}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{d\vec{k} d\vec{q}}{(2\pi)^3}. \quad (10.30)$$

Формула (10.30) уже была использована нами ранее, для конкретной задачи может быть использована с учетом мультиплетности частиц. Таким образом, может быть получен удобный ответ для оценки плотности состояний. Причем такой подход оправдан тем, что для любой квантовой задачи есть чисто квантовые состояния, которые лежат внизу дискретного спектра и для которых не работает квазиклассическое приближение, более того, величина действия оказывается порядка  $\hbar$ . При увеличении номера дискретного уровня осуществляется переход в квазиклассическую область, для которой вклад в плотность состояний дают квазиклассические состояния.

## „Шляпа Лившица“ (Mexican hat & Double well)

Далее перейдем к следующей задаче, которая будет рассмотрена в квазиклассическом приближении, а именно: задаче на „шляпу Лившица“ (рис. 10.6).

Для построения „шляпы Лившица“ сначала необходимо построить одну одномерную яму, в которой присутствует квазиклассический уровень, соответствующий энергии  $E_0$  и волновой функции  $\psi_0(x)$ . Далее симметричным образом слева к этой яме необходимо подстроить другую яму. При этом стоит помнить, что стенки ямы уходят по оси энергии на бесконечность, поэтому между ямами необходимо сделать высокий плохопроходимый, но конечный барьер.

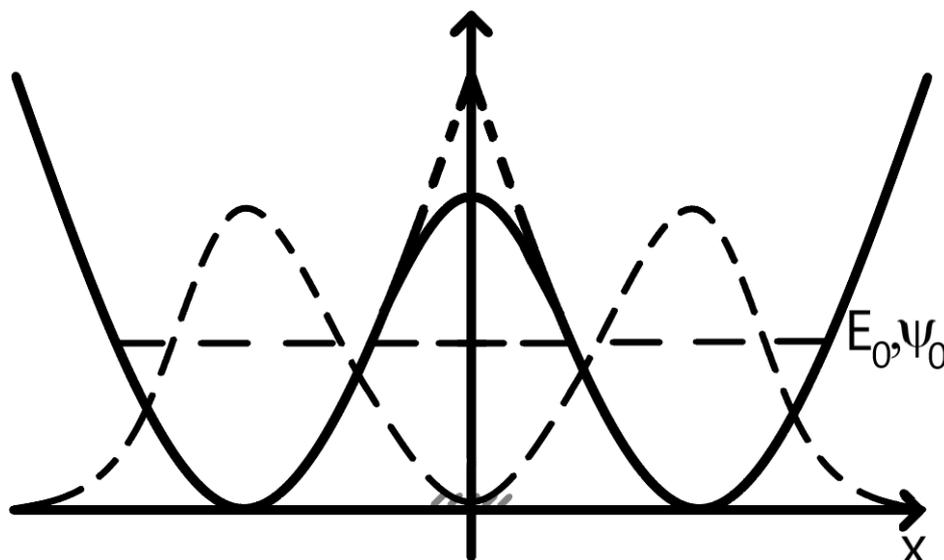


Рис. 10.6. „Шляпа Лившица“

Далее разберемся с тем, что будет происходить с частицей, попавшей в правую яму. У данной частицы существует ненулевая вероятность протуннелировать в левую яму, откуда она может вернуться обратно. Таким образом, мы получаем задачу про частицу, которая живет одновременно в двух ямах. Если барьер между ямами сделать бесконечно высоким, то частица останется либо в одной, либо в другой яме, и этот случай будет соответствовать волновой функции  $\psi_0$ . Из  $\psi_0$  в случае наличия барьера будут возникать два состояния с волновыми функциями  $\psi_1$  и  $\psi_2$ .

Примером потенциала, изображенного на рис. 10.6, является потенциал, записываемый в следующей виде:

$$V(x) = \frac{\lambda}{4} \left( 1 - \left( \frac{x}{a} \right)^2 \right)^2, \quad (10.31)$$

где минимумами для потенциала такого вида являются точки  $x = \pm a$ . В точке  $x = 0$  для потенциала (10.31) его значение конечно и равно  $\lambda/4$ , при этом при больших по модулю значениях  $x$  потенциал будет устремлен в бесконечность.

Вне ямы  $\psi_0$  достаточно быстро убывает, поэтому можно ввести следующее условие: в случае, если левая яма будет являться изолированной, решением для нее будет  $\psi_0(-x)$ . При этом область перекрытия для волновых функций будет существовать, однако она будет являться экспоненциально малой. Поскольку приближение ВКБ строится в пренебрежении экспоненциально малыми поправками, то мы будем использовать это замечание.

**Замечание 10.4.** Для учета экспоненциально малых поправок необходимо пользоваться более высокими порядками ВКБ приближения.

Пренебрежение экспоненциально малыми поправками приводит к условию

$$\psi_0(x) \psi_0(-x) \approx 0. \quad (10.32)$$

Тогда в случае, когда выполняется условие (10.32), для волновых функций при конечном барьере между ямами, будут два возможных решения. Одно из них является нижним и соответственно четным:

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_0(x) + \psi_0(-x)]. \quad (10.33)$$

Вторым является нечетное решение, которое может быть записано как

$$\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_0(x) - \psi_0(-x)]. \quad (10.34)$$

Каждому из решений соответствует свои энергии  $E_1$  и  $E_2$ , которые будут смещены относительно  $E_0$  на поправку, обусловленную туннелированием частицы из одной области в другую, т. е. происходит так называемый эффект расщепления уровней.

**Замечание 10.5.** Эффект расщепления уровней, лежит в основе работы аммиачного лазера. Благодаря существованию этого эффекта существует и другой важный эффект образования вакуумных пузырьков. Помимо этого, на эффекте расщепления построена вся странная физика.

Для того чтобы оценить это расщепление с учетом условия (10.32), необходимо сначала записать уравнения Шредингера для случая двухъямного потенциала  $U$  и случая потенциала отдельной ямы  $U_0$ :

$$\psi_0'' + \frac{2m}{\hbar^2} (E_0 - U_0) \psi_0 = 0. \quad (10.35)$$

Соотношению (10.35) удовлетворяет каждая из волновых функций  $\psi_0$  в своей яме. Для двух других решений, появляющихся в случае двухъямного потенциала, получим два уравнения

$$\psi_i'' + \frac{2m}{\hbar^2} (E_i - U) \psi_i = 0, \quad i = 1, 2. \quad (10.36)$$

Далее снова рассмотрим уравнение (10.35) и уравнение для  $\psi_1$ , записываемое в следующем виде:

$$\psi_1'' + \frac{2m}{\hbar^2} (E_1 - U) \psi_1 = 0. \quad (10.37)$$

Умножим (10.35) на  $\psi_1$ , а (10.37) - на  $\psi_0$  и вычтем (10.37) из (10.35). Тогда

$$\psi_1 \psi_0'' - \psi_0 \psi_1'' + \frac{2m}{\hbar^2} (E_0 - E_1) \psi_1 \psi_0 + \frac{2m}{\hbar^2} (U - U_0) \psi_0 \psi_1 = 0. \quad (10.38)$$

Далее рассмотрим слагаемое  $\frac{2m}{\hbar^2} (U - U_0)$ . Как ранее уже было сказано, потенциал  $U$  строится из  $U_0$  таким образом, что справа потенциалы совпадают, после чего при движении налево начинается область узкого высокого барьера, и в левой области потенциалы оказываются различными. Далее перейдем к волновым функциям. Справа решением для волновой функции является  $\psi_0$ , которая является отличной от нуля в области положительной разности  $E - U_0$ , т. е. там, где  $U$  и  $U_0$  практически совпадают. На левой полуоси  $U$  и  $U_0$  отличны, но  $\psi_0$  экспоненциально мало, поэтому в приближении пренебрежения экспоненциально малыми членами слагаемое  $\frac{2m}{\hbar^2} (U - U_0)$  может быть опущено. Тогда уравнение (10.38) можно переписать в виде:

$$\frac{d}{dx} (\psi_1 \psi_0' - \psi_0 \psi_1') + \frac{2m}{\hbar^2} (E_0 - E_1) \psi_0 \psi_1 = 0. \quad (10.39)$$

Перенесем второе слагаемое в правую часть и выполним интегрирование в пределах от  $x = 0$  до бесконечности. Тогда

$$\psi_1 \psi_0' - \psi_0 \psi_1' \Big|_0^\infty = \frac{2m}{\hbar^2} (E_1 - E_0) \int_0^\infty \psi_0 \psi_1 dx, \quad (10.40)$$

где волновая функция  $\psi_0$  предполагается нормированной:

$$\int_0^\infty \psi_0^2 dx = 1, \quad (10.41)$$

вообще говоря интегрирование должно производиться в интервале от минус до плюс бесконечности, однако, поскольку на отрицательной вещественной оси  $\psi_0$  принимает экспоненциально малые значения, то можно использовать пределы от 0 до  $\infty$ .

Интеграл  $\int_0^\infty \psi_0 \psi_1 dx$  легко может быть взят, поскольку, если расписать  $\psi_1$  в виде линейной комбинации, то получится два слагаемых. Так, одним из слагаемых является  $\psi_0(x) \cdot \psi_0(x)$ , которое в силу условия нормировки (10.41) приводит к равенству интеграла единице, вторым же слагаемым является  $\psi_0(x) \cdot \psi_0(-x)$ , которое, в силу приближения (10.32), обратит интеграл в нуль. Следовательно, выражение (10.40) можно переписать в виде:

$$\psi_1 \psi_0' - \psi_0 \psi_1' \Big|_0^\infty = \frac{\sqrt{2} m}{\hbar^2} (E_1 - E_0). \quad (10.42)$$

Далее разберемся с левой частью (10.42). Очевидно, что на бесконечности выражение обращается в нуль, так как рассматриваются стационарные состояния. Подстановка в точке  $x = 0$  при этом выглядит следующим образом:  $\psi_1$  является четной функцией, поэтому она не будет равна нулю в данной точке, а производная от её функции является нечетной, и при  $x = 0$  она обращается в нуль, следовательно, (10.42) можно переписать в виде:

$$\psi'_0(0) \psi_0(0) = \frac{m}{\hbar^2} (E_0 - E_1) , \quad (10.43)$$

где разность  $E_0 - E_1$  является положительной, поскольку уровень будет смещаться относительно изначального вниз.

Если проделать аналогичную операцию для  $\psi_2$ , то есть для нечетной волновой функции, заданной выражением (10.34), можно получить, что

$$\psi'_0(0) \psi_0(0) = \frac{m}{\hbar^2} (E_2 - E_0) . \quad (10.44)$$

Тогда ответ для расщепления уровней будет получен в результате сложения уравнений (10.43) и (10.44):

$$E_2 - E_1 = \frac{2\hbar^2}{m} \psi'_0(0) \psi_0(0) . \quad (10.45)$$

Смещение уровней относительно  $E_0$  может быть найдено как половина от выражения (10.45). Далее разберемся с выражением для волновой функции  $\psi_0$ . По условию,  $\psi_0$  является квазиклассическим уровнем, следовательно, для записи волновой функции воспользуемся записью в приближении ВКБ. Точками поворота для правой ямы будут точки  $x = a$  и  $x = b$  (рис. 10.7), тогда внутри разрешенной области:

$$\psi_0 = \frac{A}{\sqrt{p}} \sin \left[ \frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right] . \quad (10.46)$$

Слева от точки  $x = a$ , в подбарьерной области волновая функция  $\psi_0$  запишется в виде

$$\psi_0 = \frac{A}{2\sqrt{|p|}} \exp \left[ -\frac{1}{\hbar} \int_x^a |p(x')| dx' \right] . \quad (10.47)$$

Далее выполним нормировку  $\psi_0$ , тогда:

$$\int \psi_0^2 dx = \frac{A^2}{2} \int_a^b \frac{dx}{p(x)} = \frac{A^2}{2} \int_a^b \frac{dx}{m \frac{dx}{dt}} = \frac{A^2}{2m} \int_a^b dt = \frac{A^2}{2m} T , \quad (10.48)$$

где было использовано упомянутое ранее приближение экспоненциальной малости: вне разрешенной области волновая функция быстро экспоненциально убывает, следовательно, можно опустить вклады в интеграл от запрещенных областей и оставить

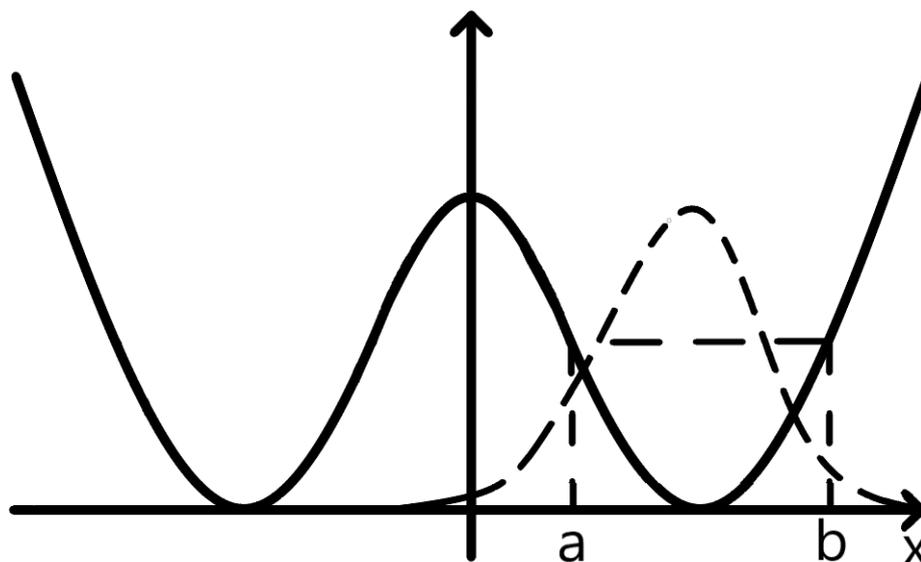


Рис. 10.7. Точки поворота правой ямы „шляпы Лившица“

интеграл с пределами интегрирования от  $x = a$  до  $x = b$ . Помимо этого, в силу того, что действие оказывается много больше, чем  $\hbar$ , синус в  $\psi_0$  является быстро осциллирующим, вследствие чего интеграл от квадрата синуса можно заменить на  $1/2$ , как это уже было сделано в (10.48). По-другому объяснить замену квадрата синуса на  $1/2$  можно так: квадрат синуса можно заменить на  $(1 - \cos(2\alpha))/2$ , где  $\alpha$  - аргумент  $\sin^2$ , а поскольку среднее от  $\cos$  будет равным нулю, то останется только интеграл с  $1/2$ . Величина  $T$  в (10.48) представляет собой период движения частицы в ограниченной области и равен:

$$T = \frac{2\pi}{\omega}, \quad (10.49)$$

где  $\omega$  - круговая частота, в терминах которой будет дан окончательный ответ. Тогда

$$\int \psi_0^2 dx = \frac{A^2}{2m\omega} \pi = 1. \quad (10.50)$$

Из (10.50) может быть легко вычислена нормировочная константа  $A$ :

$$A = \sqrt{\frac{2m\omega}{\pi}}. \quad (10.51)$$

Таким образом, нами была выполнена нормировка волновой функции для разрешенной области, следовательно, можно легко уточнить волновую функцию и в подбарьерной области. Подставим нормировочную константу  $A$  в (10.47). Тогда

$$\psi_0 = \sqrt{\frac{\omega}{2|v|\pi}} \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \int_x^a |p(x')| dx'\right], \quad (10.52)$$

где  $|v|$  - туннельная скорость, которая равна  $|p|/m$ .

Зная  $\psi_0(x)$ , легко вычислить  $\psi_0(0)$ , а также  $\psi'(0)$ :

$$\psi'_0(0) = \sqrt{\frac{\omega}{2\pi|v(0)|}} \frac{1}{\hbar} |p(0)| \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \int_0^a |p(x')| dx'\right], \quad (10.53)$$

где должно производиться дифференцирование экспоненты и величины  $|v|$ , но производная  $|v(0)|'$  равна нулю с точностью до экспоненциально малых поправок и, следовательно, останется только одно слагаемое.

Далее запишем окончательный ответ для выражения (10.45):

$$\begin{aligned} E_2 - E_1 &= \frac{2\hbar^2}{m} \frac{\omega}{2\pi|v(0)|} \frac{1}{\hbar} m |v(0)| \times \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^a |p(x')| dx'\right] = \\ &= \frac{\hbar\omega}{\pi} \exp\left[-\frac{1}{\hbar} S_{\text{tunn}}\right], \end{aligned} \quad (10.54)$$

где пределы интегрирования в экспоненте были изменены на от  $-a$  до  $a$ , поскольку при перемножении  $\psi(0)$  и  $\psi'(0)$  экспонента будет умножена на такую же экспоненту, в результате чего в её аргументе появится множитель 2, а поскольку потенциал „шляпы Лившица“ является симметричным, то можно убрать появившийся множитель и расширить при этом пределы интегрирования.

По условию задачи, туннельное действие достаточно велико по сравнению с  $\hbar$ , поэтому экспонента является достаточно малой величиной, в следствие чего расщепление уровней достаточно мало, однако оно все же есть. Более того, оно объясняет массу достаточно интересных физических эффектов. Первым из таких эффектов является аммиачный лазер, являющийся предшественником нынешних лазеров.

## Аммиачный лазер

Работа лазера заключается в том, что каждая молекула аммиака ( $\text{NH}_3$ ) представляет собой пирамиду, которая является не идеальной за счет наличия  $sp$ -гибридизации в  $\text{NH}_3$ . Рассмотрим две конфигурации  $\text{NH}_3$ , представленные на рис. 10.8а, б.

Одна ориентация отличается от другой зеркальным отображением, поэтому энергия этих конфигураций одинаковая. Атом азота может туннелировать сквозь плоскость атомов водорода, переходя тем самым к другой конфигурации. В результате честные энергетические состояния молекулы  $\text{NH}_3$  будут представлять собой смесь двух состояний, изображенных на рис. 10.8, со знаками плюс и минус и коэффициентом  $\frac{1}{\sqrt{2}}$ :

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{up} \pm \psi_{down}]. \quad (10.55)$$

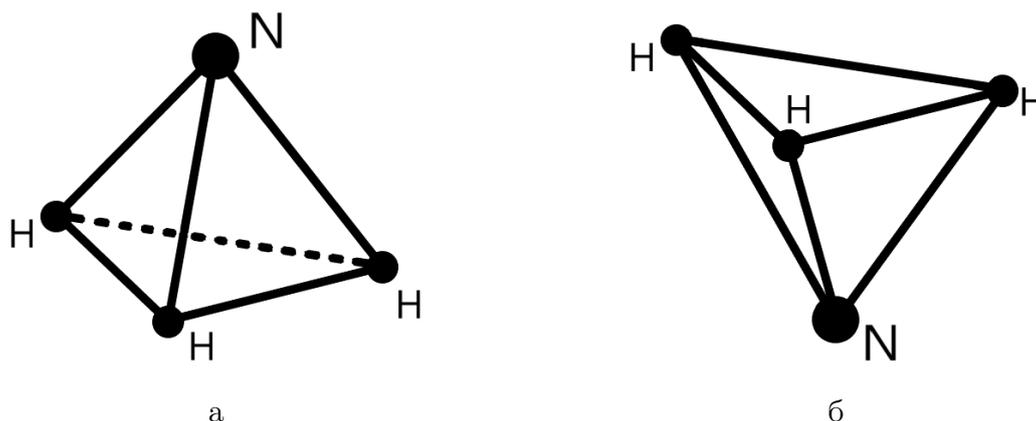


Рис. 10.8. Конфигурации молекулы  $\text{NH}_3$

Расщепление энергии между состояниями для молекулы аммиака дает значение:  $\Delta E \sim 24000$  МГц, или порядка  $10^{-4}$  эВ. На этом переходе между энергетическими состояниями молекулы аммиака был построен первый аммиачный мазер за счет того, что переход лежит в радиодиапазоне, и, если переводить данное значение на длины волн, оно будет соответствовать дециметровым волнам.

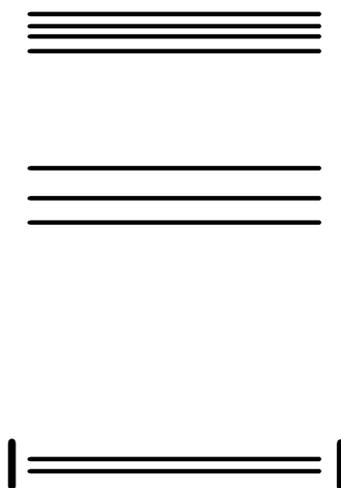


Рис. 10.9. Энергетический спектр молекулы

На примере молекулы аммиака рассмотрим устройство спектра любой другой молекулы. Так, для  $\text{NH}_3$  в спектре существуют два близких уровня, существенно выше которых, начиная с глубокого инфракрасного света, начинается реальная степень возбуждения молекулы. Прежде всего, это вращательные уровни, которые соответствуют глубокому инфракрасному свету, затем же возбуждаются колебательные степени свободы, а далее начинаются электронные возбуждения. При дальнейшем

росте энергии в возбуждении молекулы будет участвовать уже суперпозиция перечисленных возбуждений молекулы. Следовательно, если поместить систему в резонатор, который будет выделять полосу в радиодиапазоне, то возбуждаться будут только переходы между двумя конфигурациями молекулы, а все остальные переходы будут очень сильно подавленными за счет большой энергетической щели в спектре.

## Вакуумные пузырьки (Шальников)

Далее рассмотрим один интересный низкотемпературный эффект, который был подтвержден экспериментально, а именно: вакуумные пузырьки. Первым человеком, наблюдавшим данный эффект, является Шальников.

Эксперимент проводился на жидком  $\text{He}^4$ , который является конденсатом атомов  $\text{He}$  в одно единственное состояние со свойством сверхтекучести. При этом среда, состоящая из такого  $\text{He}$ , является очень чистой, и любая примесь, которая попадает в такой конденсат, выбрасывается на стенки в силу того, что она повышает энергию системы. Однако, если в сосуд Дьюара, заполненным  $\text{He}$ , напустить  $\beta$ -электроны, то они смогут застрять в таком конденсате между атомами  $\text{He}$  (рис. 10.10).

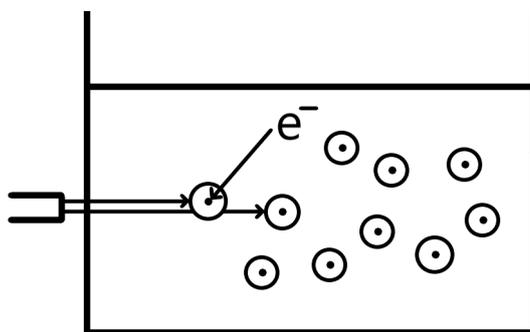


Рис. 10.10. Застревание электронов в конденсате атомов гелия

Каждый электрон при этом вырывает себе ямку, образовав тем самым вакуумный пузырек. Внутри каждого такого пузырька содержится электрон, вокруг которого находятся атомы гелия (рис. 10.11).

Существование таких пузырьков подтверждено экспериментально, поскольку при насыщении  $\text{He}$  пузырьками за счет того, что их поверхность начинает отражать свет, изменяется коэффициент отражения, что хорошо наблюдается в эксперименте.

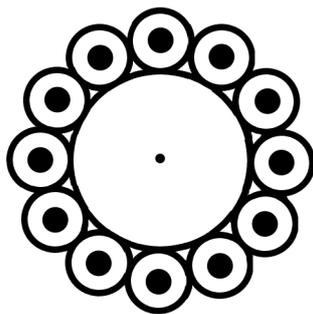


Рис. 10.11. Рисунок вакуумного пузырька

Если попытаться решить данную задачу численно с целью вычисления параметров пузырьков, то возникнут большие трудности, обусловленные тем, что каждый атом He, в сосуде имеет свои электроны, а поскольку внутри пузырьков также находятся электроны, в расчетах необходимо учитывать неразличимость частиц.

Интересным также является тот факт, что, если воздействовать на сосуд со сверхтекучим He поршнем, давление внутри сосуда будет повышаться. При этом стоит отметить, что повысить давление в такой системе весьма трудно в силу того, что сверхтекучий He может проникать в зазоры между стенкой сосуда и поршнем.

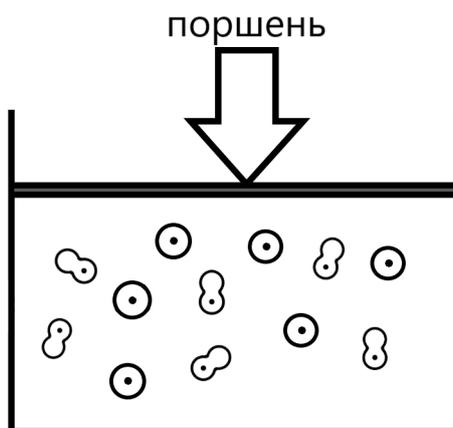


Рис. 10.12. Воздействие поршня на сосуд с He

Проведем аналогию между состоянием электронов в пузырьках и состоянием электронов в атоме водорода. Когда давление является нормальным, электроны, по аналогии, находятся в „1s“ состоянии, а при его повышении пузырьки начинают деформироваться и превращаться сначала в „гантельку“, затем каждый из пузырьков поделится на два дочерних, после чего пузырьки разойдутся на некоторое расстояние между друг другом. Сразу же возникает вопрос относительно того, что будет

происходить с электроном, так как он не может быть поделен. Ответ заключается в том, что, поскольку поделенные пузырьки расходятся на небольшое расстояние, то электрон, по аналогии с задачей на „шляпу Лившица“, может туннелировать из одной области в другую. В результате возникнут два состояния электрона, в каждом из которых электрон проводит по половине времени.

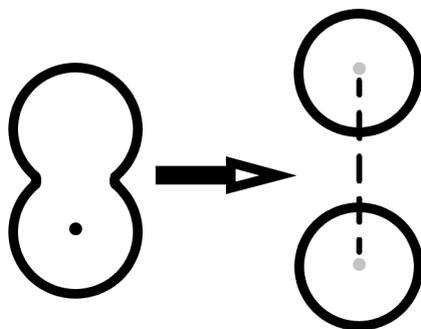


Рис. 10.13. Разделение пузырька на два дочерних

## Странная физика

Другим немаловажным для рассмотрения аспектом является так называемая странная физика, которая представляет собой целую эпоху, которая началась с получения на ускорителях каонов.

Когда в начале 50-ых годов на ускорителях была достигнута энергия порядка ГэВ, в столкновениях  $p + p$  стали появляться  $K$ -мезоны по каналам:

$$p + p \longrightarrow \begin{cases} K^+ + p + \Lambda \\ K_0 + \Sigma^+ + p \\ K_0 + \Lambda + \dots \end{cases} \quad (10.56)$$

По первому каналу происходит появление  $K^+$ , протона и  $\Lambda$  гиперона. Для выполнения закона сохранения в данном канале достаточно  $K^+$  и  $p$ . Для сохранения странности появляются  $K^+$  и  $\Lambda$  гиперон, которые дают в сумме нулевую странность. Два бариона:  $p$  и  $\Lambda$  гиперон сохраняют постоянным барионное число.

По второму каналу рождается нейтральный  $K_0$ , поэтому для выполнения закона сохранения заряда необходимы два заряженных бариона:  $\Sigma^+$  и  $p$ , благодаря которым также выполняется закон сохранения барионного числа. Странность также оказывается равной нулю благодаря тому, что у  $\Sigma^+$  странность  $-1$ , а у  $K_0$   $+1$ .

По третьему каналу странность оказывается нулевой благодаря тому, что у  $K_0$  она равна  $+1$ , а у  $\Lambda$  гиперона  $-1$ . Так, вместо ... должен стоять барион, обеспечивающий выполнение закона сохранения заряда.

Далее перейдем к каонам. Их всего три:  $K_0, K^\pm$  с изоспином  $I = 1$  (триплет). При этом  $K_0$  и  $K^+$  имеют положительную странность, равную  $+1$ , а  $K^-$  является античастицей  $K^+$  со странностью  $-1$ . Если расписать кварковый состав для каонов, то для них окажется, что

$$\begin{cases} K^+ = \bar{s}u \\ K_0 = \bar{s}d \\ K^- = s\bar{u} \\ \bar{K}_0 = s\bar{d} \end{cases} \quad (10.57)$$

где по определению  $\bar{s}$ -кварк обладает странностью  $-1$ .

При этом если  $K^+$  и  $K^-$  являются заряженными частицами и являются анти-частицами по знаку заряда, то  $K_0$  и  $\bar{K}_0$  являются нейтральными, но разными частицами: они имеют разный кварковый состав и странность. При этом  $K_0$  и  $\bar{K}_0$  связываются через слабое взаимодействие. Отметим также, что странность может изменяться с очень малой вероятностью за счет туннельного эффекта. Слабое взаимодействие, таким образом, разрешает  $\Delta S = 2$ . С точки зрения рассматриваемой задачи она представляет собой потенциал типа „шляпы Лившица“ (рис. 10.14). При этом одна яма возникает за счет сильного взаимодействия для  $K_0$ , другая же яма расположена симметрично первой и соответствует  $\bar{K}_0$ . С точки зрения сильного взаимодействия, частицы находятся в двух разных ямах с бесконечно высокими стенками. За счет слабого взаимодействия происходит смешивание состояний, за счет чего барьер становится проходимым, хоть и достаточно высоким (поскольку смешивание очень слабое).

В результате смешивания, вместо  $K_0$  и  $\bar{K}_0$  образуются два других смешанных состояния аналогично тому, как вместо  $\psi_0$  возникают  $\psi_1$  и  $\psi_2$ . В результате возникают  $K_L^0$  и  $K_S^0$ , такие что

$$\begin{cases} K_L^0 = \frac{1}{\sqrt{2}} [K_0 - \bar{K}_0] \\ K_S^0 = \frac{1}{\sqrt{2}} [K_0 + \bar{K}_0] \end{cases} \quad (10.58)$$

Расщепление между состояниями  $K_L^0$  и  $K_S^0$  очень мало и составляет примерно  $\Delta E \approx 3 \cdot 10^{-6}$  эВ, однако при этом у этих состояний существенно различается время

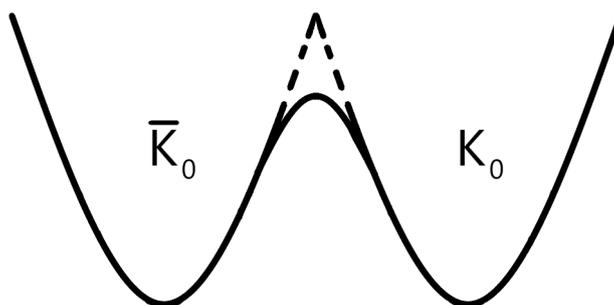


Рис. 10.14. Туннельный эффект для  $K_0$  и  $\bar{K}_0$

жизни:  $\tau_{K_L^0} \sim 5 \cdot 10^{-8}$  с и  $\tau_{K_S^0} \sim 0.89 \cdot 10^{-10}$  с. Эти два состояния были не отличимы в эксперименте, пока не была открыта странность, поскольку они очень мало отличаются по массе.

Массы  $K^+$  и  $K_0$  равны соответственно:  $m_{K^+} = 493$  МэВ,  $m_{K_0} = 497$  МэВ. У  $K_L^0$  и  $K_S^0$  массы равны практически 497 МэВ с очень малым расщеплением. Когда на ускорителях стали получать  $K$ -мезоны в столкновениях,  $K_0$  и  $\bar{K}_0$  собирались в энергетические состояния  $K_L^0$  и  $K_S^0$ , которые вели себя по разному, поскольку у них разное время жизни и разная  $CP$ -четность.  $K_L^0$  является  $CP$ -нечетным, а  $K_S^0$  -  $CP$ -четный. Таким образом, распад короткоживущего мезона происходит на  $CP$ -четные комбинации:

$$K_S^0 \longrightarrow \pi^+ + \pi^-, 2\pi_0 \sim 10^{-10} \text{ с} . \quad (10.59)$$

Долгоживущий же мезон для сохранения  $CP$ -четности должен распадаться так, чтобы

$$K_L^0 \longrightarrow \pi^+ + \pi^0 + \pi^-, 3\pi_0, \dots . \quad (10.60)$$

Распады являются разными, что хорошо наблюдалось на фотопластинках в эксперименте. При этом частицы являются одними и теми же. Когда был открыт странный кварк стало понятным, за счет чего происходит смешивание  $K_0$  и  $\bar{K}_0$  мезонов. Эти эксперименты привели к работе Гелл Манна „Eightfold way“, где он предложил  $SO_3$  симметрию сильных взаимодействий со странным кварком.

Существует один интересный факт, что в долгоживущих распадах с вероятностью порядка 0.2 % существует канал распада на два  $\pi$ -мезона вместо трех. Другими словами, в распадах  $K$ -мезонов  $CP$ -четность не сохраняется. Если считать, что  $CPT$  в мире элементарных частиц представляет собой основную симметрию, то это

означает, что так или иначе нарушается  $T$ , а следовательно, в механизме распада странных  $K$ -мезонов спрятано указание о том, что именно запускает время в одну сторону.

$K$ -мезоны замечательны также и тем, что пока ученые разбирались со странностью, был открыт другой эффект. Пусть пучок протонов налетает на водородную мишень. При этом при столкновении с частицами мишени возникает множество продуктов реакции, в том числе и  $K$ -мезоны. Сначала в таком случае будет вылетать смесь короткоживущих и долгоживущих мезонов. Стоит отметить, что короткоживущие мезоны живут на два порядка меньше по времени. Вторичную водородную мишень расположим при этом так, чтобы гарантировать, что короткоживущие мезоны успеют распасться. Это расстояние легко подобрать по скоростям частиц и временам их жизни.

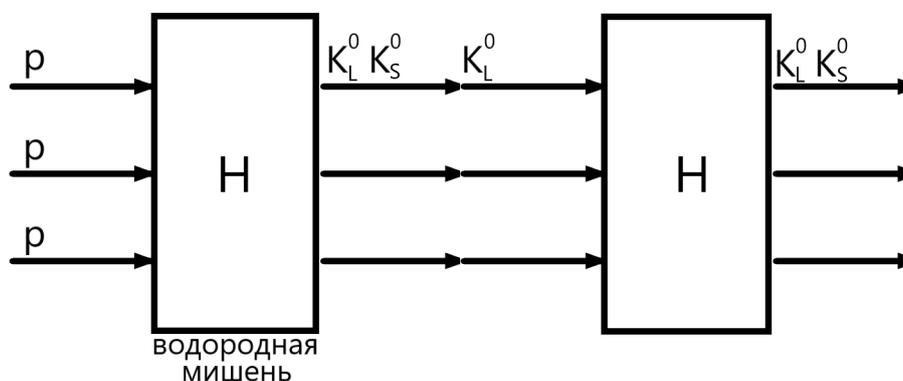


Рис. 10.15. Удар протонами по водородной мишени

После первой водородной мишени появится масса продуктов реакции, следовательно, оставим к рассмотрению только  $K_L^0$  и  $K_S^0$ . Сначала эти мезоны летят вместе, после чего короткоживущие мезоны распадаются по своим каналам, а долгоживущие будут лететь дальше. Пропустим пучок долгоживущих мезонов через вторичную водородную мишень. В результате на выходе второй мишени обнаружим, помимо долгоживущих, и короткоживущие мезоны. Данный эффект называется регенерацией короткоживущих  $K$ -мезонов. Он наблюдается за счет того, что в процессах взаимодействия участвуют не  $K_L^0$  и  $K_S^0$ , а  $K_0$  и  $\bar{K}_0$ , поскольку  $K_L^0$  и  $K_S^0$  представляют собой линейные комбинации  $K_0$  и  $\bar{K}_0$ . При этом  $\bar{K}_0$  взаимодействует с частицами мишени следующим образом:

$$\bar{K}_0 + p \longrightarrow \Lambda + \pi^+ , \quad (10.61)$$

где  $\bar{K}_0$  и  $\Lambda$  гиперон являются незаряженными, а  $p$  и  $\pi^+$  имеют заряд  $+1$ , следовательно, выполняется закон сохранения заряда. Странность и барионное число в данной реакции также сохраняются.

С  $K_0$  аналогичного процесса не существует, поскольку не существует гиперона с положительной странностью, а антигипероны не будут удовлетворять закону сохранения барионного числа.

В результате, во вторичной мишени с водородом активно взаимодействуют  $\bar{K}_0$  мезоны, а они являются компонентой долгоживущего  $K_L^0$ . В результате на выходе мы можем считать, что при прохождении мишени все  $\bar{K}_0$  исчезли. На выходе, таким образом, получим чистый пучок  $K_0$ , который представляет собой комбинацию  $K_L^0$  и  $K_S^0$ .

## Лекция 11. Трехмерная QM

В трехмерном случае рассмотрим следующую задачу:

$$H\psi = E\psi, \quad (11.1)$$

где гамильтониан  $H$  равен:

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}). \quad (11.2)$$

Общие свойства данной задачи уже были определены нами ранее. Далее прежде всего будет рассматриваться случай, когда  $V(\infty) = 0$ , т. е. случай потенциала, асимптотически стремящегося к нулю на пространственной бесконечности. В этом случае энергия  $E < 0$  соответствует области дискретного спектра, а  $E > 0$  - непрерывному.

В трехмерном случае в отличие от одномерного практически всегда выполняется условие:

$$\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} \geq 1. \quad (11.3)$$

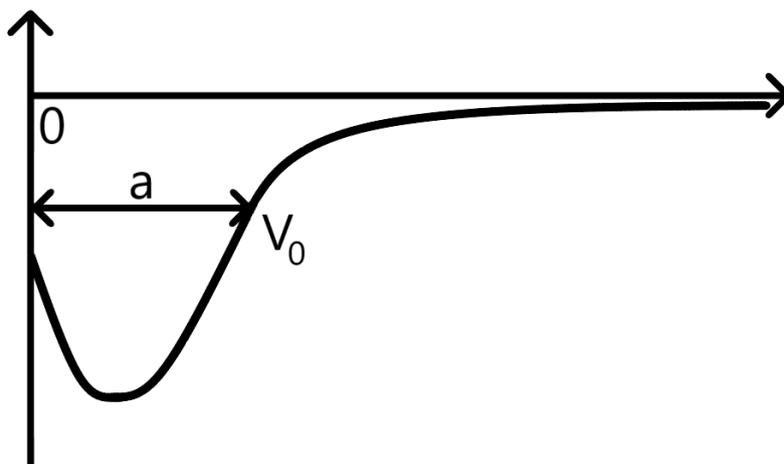


Рис. 11.1. Потенциальная яма ширины  $a$  с характерной высотой  $V_0$

### Центрально-симметричный потенциал

Наиболее важным для рассмотрения случаем, позволяющим выполнить наиболее качественное и полное исследование, является случай сферически симметричного потенциала, т. е.:

$$V(\vec{r}) = V(|\vec{r}|). \quad (11.4)$$

В этом случае в задаче присутствует симметрия вращения, которая может быть использована следующим образом: распишем оператор Лапласа в сферической системе координат:

$$\Delta = \Delta_r + \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta, \varphi} , \quad (11.5)$$

где  $\Delta_r$  - радиальный лапласиан, который записывается как

$$\Delta_r = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \dots \right) = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r \dots) , \quad (11.6)$$

где вместо многоточия должна стоять функция, на которую действует лапласиан.

$\Delta_{\theta\varphi}$  представляет собой угловой оператор Лапласа:

$$\Delta_{\theta\varphi} = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \dots \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \dots . \quad (11.7)$$

Структура оператора Лапласа в сферических координатах позволяет использовать сферическую симметрию с большой пользой: переменные могут быть разделены на радиальную и угловую части. Таким образом, при решении задачи (11.1) поиск волновой функции может быть осуществлен в следующем виде:

$$\psi(\vec{r}) = R(r) \Phi(\theta, \varphi) . \quad (11.8)$$

Далее используем стандартный метод разделения переменных, применение которого возможно в силу того, что оператор Лапласа представляется в виде (11.5). Для угловой части можно получить уравнение

$$\Delta_{\theta\varphi} \Phi = \lambda \Phi . \quad (11.9)$$

Данная задача известна из курса методов математической физики. Её решением является

$$\Phi = Y_{lm}(\theta, \varphi) , \quad (11.10)$$

при этом  $\lambda$  принимает значения:

$$\lambda = -l(l+1) , \quad (11.11)$$

где  $l$  обязательно является целым числом или нулем. Отметим, что величина  $m$  также является целым числом и лежит в диапазоне  $-l \leq m \leq l$ .

Структура сферических функций имеет несколько вариаций, отличающихся фазовым множителем, в силу того, что такие функции появились в приложениях очень

давно (ещё во времена Лапласа, что соответствует концу 18 века). Наиболее часто встречающимся определением сферических функций является:

$$Y_{lm} \underset{m \geq 0}{=} (-1)^m N_{lm} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}, \quad (11.12)$$

где  $N_{lm}$  - нормировочный коэффициент, равный:

$$N_{lm} = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}}, \quad (11.13)$$

а  $P_l^m(\cos \theta)$  - присоединенная функция Лежандра, которая может быть записана следующим образом:

$$P_l^m(\cos \theta) = \sin^m \theta \frac{\partial^m}{\partial \cos^m \theta} P_l(\cos \theta), \quad (11.14)$$

где  $P_l(\cos \theta)$  - полином Лежандра.

В выражении (11.12) присутствует множитель  $(-1)^m$ , представляющий собой фазу Шлефли. Данная фаза присутствует не во всех определениях сферических функций. Например, в задачнике по квантовой механике под авторством Флюгге фаза Шлефли отсутствует, хотя она является наиболее предпочтительной при описании сферических функций.

**Замечание 11.1.** В выражении (11.12) было дано определение сферических функций только для  $m \geq 0$ . Это сделано потому, что в выражении (11.14) присутствует частная производная  $m$ -ой степени.

Для отрицательных значений  $m$  сферические функции выражаются в следующем виде:

$$Y_{l,-|m|} = (-1)^{|m|} Y_{l,|m|}^*. \quad (11.15)$$

При таком определении вся система сферических функций представляет собой полный набор. При сдвиге волновой функции на угол  $2\pi$  для того, чтобы она была однозначно определена, необходимо, чтобы  $m$  являлось целым числом.

После получения решения для угловой части уравнения Шредингера необходимо подставить найденное СЗ уравнения (11.9) в задачу на радиальную часть, чтобы в конечном итоге получить следующее уравнение:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r + V(r) + \underbrace{\frac{\hbar^2}{2mr^2} l(l+1)}_{V_{\text{eff}}} \right] R = ER, \quad (11.16)$$

где второе слагаемое в  $V_{\text{eff}}$  имеет смысл центробежного потенциала, при этом  $\hbar^2 l(l+1)$  представляет собой угловой момент.

Далее удобно сделать замену переменных:

$$R = \frac{u(r)}{r} . \quad (11.17)$$

Используем второе представление радиального оператора Лапласа, в результате чего получим уравнение на функцию  $u$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} u'' + V_{\text{eff}}(r) u = Eu , \quad 0 \leq r \leq \infty . \quad (11.18)$$

Данное уравнение является очень похожим на уравнение для одномерного случая. Единственная разница заключается в том, что это уравнение должно рассматриваться на полуоси. Следовательно, для корректной постановки краевой задачи необходимо разобраться с граничным условием в нуле.

**Замечание 11.2.** *Требование ограниченности волновой функции в нуле является необязательным, поскольку физический смысл имеет не волновая функция, а интеграл от квадрата модуля волновой функции в ограниченной области:*

$$\int_{\Omega} d\vec{r} |\psi|^2 = \int_0^{r_0} r^2 |R|^2 dr , \quad (11.19)$$

где после подстановки волновой функции в выражение, в качестве пределов интегрирования выбраны точки  $r = 0$  и  $r = r_0$ , поскольку в рассматриваемом случае мы считаем, что  $\Omega$  представляет собой сферу малого радиуса (рис. 11.2).

В выражении (11.19) также должен присутствовать множитель, представляющий собой интеграл по сферической части волновой функции  $\psi$ . Он будет равен единице в силу следующего замечания:

**Замечание 11.3.** *Записанное ранее определение сферических функций позволяет утверждать, что сферические функции образуют ортонормированный набор:*

$$\int d\Omega Y_{l',m'}^* Y_{l,m} = \delta_{ll'} \delta_{mm'} . \quad (11.20)$$

Таким образом, любая угловая функция может быть разложена в ряд по сферическим функциям:

$$f(\theta, \varphi) = \sum_{lm} a_{lm} Y_{lm}(\theta, \varphi) , \quad (11.21)$$

где коэффициенты  $a_{lm}$  равны:

$$a_{lm} = \int d\Omega Y_{lm}^* f(\theta, \varphi) . \quad (11.22)$$

В (11.19) интегрирование должно производиться по сфере, поэтому в ответе для интеграла будет единица.

Для нормального ответа для волновой функции в точке  $r = 0$  сингулярность волновой функции в данной точке должна не превосходить  $1/r^3$ . В предельном случае, если подставить  $1/r^3$  в (11.19), то в ответе получится логарифм от величины  $r$ , который имеет сингулярность в нуле. При меньших степенях  $r$  в точке нуля в конечном ответе сингулярность будет отсутствовать.

Таким образом, требование ограниченности волновой функции в точке  $r = 0$  является избыточным. Так, например, волновая функция для атома водорода, получаемая из решения уравнения Дирака, имеет сингулярность в нуле.

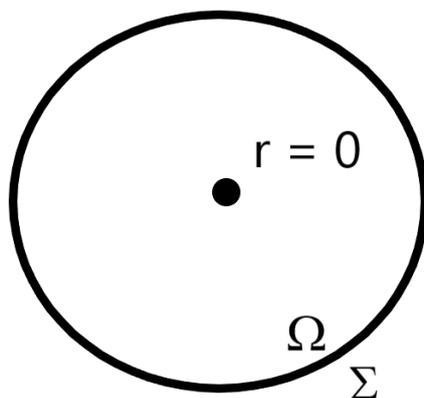


Рис. 11.2. Объем, окружающий точку  $r = 0$

В рассматриваемом нами случае необходимо вводить два условия на волновую функцию, которые связаны с тем, что частица, находящаяся в стационарном состоянии, не может падать на силовой центр. Во-первых, если мы будем рассматривать поток через поверхность  $\Sigma$  (рис. 11.2), то интеграл от потока через поверхность, который записывается следующим образом:

$$\int_{\Sigma} \vec{j} d\vec{\sigma} , \quad (11.23)$$

должен при стремлении объема к нулю также стремиться к нулю. Случай ненулевого интеграла соответствует падению частицы на силовой центр, поскольку поток характеризует перенос частицы.

Условие (11.23) может быть задано и более простым образом, если перевести его на условие конечности средней кинетической энергии, так как в случае падения на силовой центр частица должна обладать бесконечной кинетической энергией:

$$\int_{\Omega} d\vec{r} \frac{\hbar^2}{2m} |\vec{\nabla}\psi|^2 < \infty . \quad (11.24)$$

В рассматриваемом случае необходимо выполнить разделение переменных таким образом, чтобы интеграл (11.24) имел следующий вид:

$$\int_0^{r_0} \frac{\hbar^2}{2m} r^2 dr \int d\Omega |\vec{\nabla}\psi|^2 . \quad (11.25)$$

Оператор набла в сферических координатах имеет вид

$$\vec{\nabla} = \vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \vec{e}_\varphi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} , \quad (11.26)$$

где  $\vec{e}_r$ ,  $\vec{e}_\theta$ ,  $\vec{e}_\varphi$  - орты сферической системы координат.

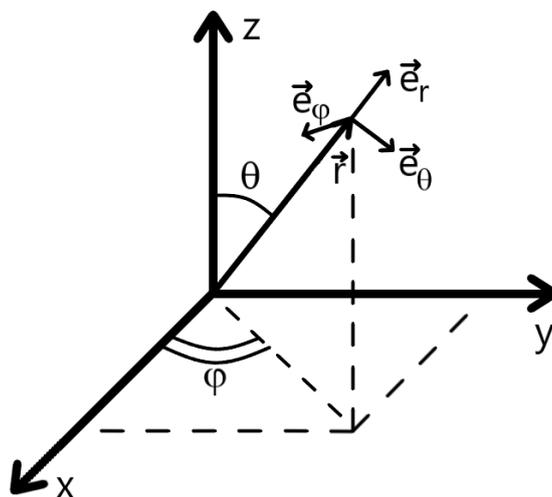


Рис. 11.3. Орты сферической системы координат

Угловые производные оператора набла при действии на сферическую функцию, ограниченную по углам, также будут давать ограниченную функцию, благодаря чему угловой интеграл не представляет для нас интереса, поскольку он будет конечным. Наибольший же интерес представляет радиальная часть, которая будет записываться следующим образом:

$$\int_0^{r_0} r^2 \left| \frac{\partial R}{\partial r} \right|^2 dr . \quad (11.27)$$

Исследуем критическое поведение радиальной части волновой функции:

$$r^2 \left| \frac{\partial R}{\partial r} \right|_{\text{cr}}^2 = \frac{1}{r}. \quad (11.28)$$

В критическом случае (условие (11.28)) при вычислении интеграла появится логарифм, который приведет к расходимости в точке  $r = 0$ . Если степень  $r$  в знаменателе будет больше, расходимость также будет больше, а если меньше, то расходимости вовсе будет отсутствовать.

Таким образом, в данном случае

$$\left| \frac{\partial R}{\partial r} \right|_{\text{cr}} = \frac{1}{r^{3/2}}. \quad (11.29)$$

Следовательно, с точностью до числового коэффициента

$$R_{\text{cr}} = \frac{1}{\sqrt{r}}. \quad (11.30)$$

Далее вспомним замену (11.17) и найдем функцию  $u$  для критического случая:

$$u_{\text{cr}}(r \rightarrow 0) = \sqrt{r}. \quad (11.31)$$

Из (11.31) следует, что в точке  $r = 0$  функция  $u$  равна нулю. Более того, можно сделать вывод, что для нормальной сходимости в нуле необходимо, чтобы функция  $u$  стремилась к нулю быстрее чем  $\sqrt{r}$ .

Для рассматриваемого случая может быть записана следующая краевая задача:

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} u'' + V_{\text{eff}}(r) u = Eu, & 0 \leq r \leq \infty \\ u_{\text{cr}}(r \rightarrow 0) = \sqrt{r} \end{cases} \quad (11.32)$$

**Замечание 11.4.** *Граничное условие на бесконечности для краевой задачи (11.32) зависит от типа задачи. Так, в случае дискретного спектра волновая функция на бесконечности должна убывать, а сама волновая функция должна быть квадратично интегрируемой. В случае же непрерывного спектра волновая функция на бесконечности должна представлять собой суперпозицию сходящейся и расходящейся волны.*

Разберем следующий принципиальный вопрос, имеющий отношение к стационарным состояниям. В нуле для функции  $u$  граничное условие может быть записано как  $u(0) = 0$ . С точки зрения квантовой механики данное условие означает, что в нуле

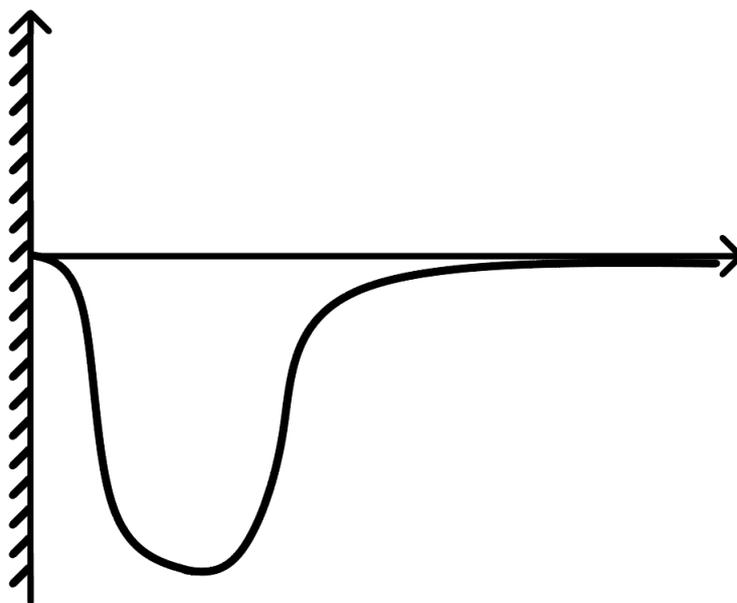


Рис. 11.4. Изображение центрально-симметричного потенциала с бесконечно высокой стенкой в  $r = 0$

расположена бесконечно высокая стенка, следовательно, любая задача может быть графически изображена, так как это показано на рис. 11.4.

Из рис. 11.4 следует, что для задач на центрально-симметричный потенциал в большинстве случаев не будет достигаться условие, которое вводилось в одномерном случае, а именно: условие наличия хотя бы одного уровня в яме, поскольку стенки ямы в центрально-симметричном случае никогда не будут равновысокими (левая стенка бесконечно высокая).

Перейдем к более детальному рассмотрению связанных состояний для центрально-симметричного потенциала. Если в задаче потенциал имеет вид схожий с изображенным на рис. 11.4, то связанные состояния возможны, и основным вопросом является именно количество этих состояний. Общего ответа на данный вопрос нет, а наиболее известным способом ответа на него является оценка Баргмана.

### Оценка Баргмана

Число связанных состояний с орбитальным моментом  $l$  может быть оценено как

$$N_l \approx \frac{1}{2l+1} \frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty r \tilde{V}(r) dr, \quad (11.33)$$

где  $\tilde{V}(r)$ :

$$\tilde{V}(r) = \begin{cases} |V(r)|, & V(r) \leq 0 \\ 0, & V(r) > 0 \end{cases} . \quad (11.34)$$

Исходя из вида выражений (11.33) и (11.34) следует, что интеграл Баргмана вычисляется по отрицательной области потенциала. Если же такая область отсутствует, то интеграл обращается в нуль, что означает отсутствие связанных состояний.

Если предположить, что рассматриваемый потенциал представляет собой яму размером  $a$  и магнитудой  $V_0$ , являющейся средней оценкой на высоту потенциала, то в области действия потенциала

$$N_l \sim \frac{1}{2l+1} \frac{2m}{\hbar^2} V_0 \frac{a^2}{2} , \quad (11.35)$$

где при взятии интеграла  $V_0$  необходимо вынести за интеграл, в результате чего останется интеграл по области отрицательности потенциала, т. е. в пределах от 0 до  $a$ , что и приводит к выражению (11.35).

Для того чтобы получить условие существования хотя бы одного уровня, необходимо найти  $N_0$ :

$$N_0 = 1 \sim \frac{2mV_0 a^2}{2\hbar^2} . \quad (11.36)$$

Отличие выражения (11.36) от того, что было ранее введено для одномерного случая, заключается лишь в коэффициенте 2, что не является существенным фактором, поскольку проделанные вычисления являются оценкой.

Далее разберемся с тем, как именно зависит количество связанных состояний от асимптотик потенциала. Рассмотрим асимптотики потенциала в окрестности нуля:

$$V(r) \underset{r \rightarrow 0}{\sim} -\frac{\alpha}{r^s} , \quad (11.37)$$

где в выражении стоит минус перед дробью, поскольку для образования связанных состояний необходимо, чтобы потенциал имел яму.

Самым простым вариантом является вычисление интеграла Баргмана для данной асимптотики в окрестности нуля:

$$\int r dr \frac{\alpha}{r^s} . \quad (11.38)$$

Из вида интеграла (11.38) видно, что в случае  $s < 2$  выполняется условие формирования связанных состояний, поскольку в точке  $r = 0$  ответ для интеграла будет равен нулю. Случай  $s = 2$  соответствует критическому поведению волновой функции,

так как в результате вычисления интеграла получится логарифм, который обратится в минус бесконечность в нуле. При  $s > 2$  интеграл Баргмана расходится в точке  $r = 0$ , что приводит к ответу, который соответствует бесконечному числу связанных состояний.

Для ещё более наглядного описания представим, что волновая функция локализована по радиальной переменной в шаре радиуса  $r_0$ . В таком случае средняя энергия будет оцениваться как

$$\bar{E} \sim \underbrace{\frac{\hbar^2}{2mr_0^2}}_{T+U} - \frac{\alpha}{r_0^s} . \quad (11.39)$$

Как легко видеть из выражения (11.39), в случае  $s < 2$  при  $r_0$ , стремящемся к нулю, превалирует положительный кинетический член, что приводит к увеличению энергии. Отсюда следует, что частице не выгодно коллапсировать в точку  $r = 0$ . При  $s = 2$  возникает конкуренция слагаемых одного и того же порядка, что необходимо разбирать отдельно. При  $s > 2$  сингулярность в нуле больше у потенциального члена  $U$ , что приводит к бесконечно глубокому опусканию уровня. Такое поведение уровня соответствует непрерывному падению частицы на центр. С точки зрения оператора Гамильтона, в последнем случае оператор перестает быть самосопряженным.

Рассмотрим далее критический случай, то есть случай, когда  $s = 2$ . Для этого вернемся к радиальной задаче и перепишем ее в следующем образом:

$$R'' + \frac{2}{r} R' + \frac{2m\alpha/\hbar^2 - l(l+1)}{r^2} R = 0 , \quad (11.40)$$

где в правой части выражения также должно присутствовать слагаемое с энергией, однако оно было опущено в силу того, что выражение интересует нас в окрестности точки  $r = 0$ , где слагаемые в левой части выражения много больше, чем в правой, поэтому за место нее можно написать 0.

Выражение (11.40) представляет собой однородное уравнение Эйлера, решением которого является степенная функция. Для того чтобы найти ее предварительно, необходимо выполнить замену переменных

$$\gamma = \frac{2m}{\hbar^2} \alpha - l(l+1) , \quad (11.41)$$

таким образом, чтобы (11.40) можно было записать в следующем виде:

$$R'' + \frac{2}{r} R' + \frac{\gamma}{r^2} R = 0 . \quad (11.42)$$

Как уже было оговорено ранее, общее решение уравнения необходимо искать в виде степенной подстановки:

$$R = A r^\beta . \quad (11.43)$$

После подстановки (11.43) в (11.42) получим уравнение на нахождение коэффициента  $\beta$ :

$$\beta(\beta - 1) + 2\beta + \gamma = 0 . \quad (11.44)$$

Далее раскроем скобки в (11.44) и получим квадратное уравнение на определение  $\beta$ :

$$\beta^2 + \beta + \gamma = 0 . \quad (11.45)$$

Таким образом, запишем ответ для  $\beta$  следующим образом:

$$\beta = -\frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4} - \gamma} . \quad (11.46)$$

Далее разберемся с подкоренным выражением (11.46). Для этого подставим обратно коэффициент  $\gamma$  и получим

$$\frac{1}{4} - \gamma = l(l + 1) + \frac{1}{4} - \frac{2m\alpha}{\hbar^2} = \left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - \frac{2m\alpha}{\hbar^2} . \quad (11.47)$$

Дальнейшие рассуждения связаны с выбором знака подкоренного выражения. В первом случае  $1/4 - \gamma \geq 0$ , что означает выполнение неравенства

$$\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 \geq \frac{2m\alpha}{\hbar^2} . \quad (11.48)$$

Таким образом, корень является вещественным, и из двух возможных решений для  $R$  мы выберем то, которое содержит корень со знаком плюс, поскольку в нуле у него сингулярность по  $r$  будет лучше чем  $-1/2$ .

Неравенство (11.48) означает, что величина орбитального момента оказывается больше константы притяжения частицы к точке  $r = 0$ , что соответствует случаю удержанию частицы на орбите.

Второй же случай соответствует неравенству  $1/4 - \gamma < 0$ . Так, величина орбитального момента оказывается меньше константы притяжения частицы к точке  $r = 0$ , что соответствует мнимому корню в выражении (11.46). Таким образом, выражение для  $R$  можно записать в виде:

$$R = A_1 r^{-1/2+i\xi} + A_2 r^{-1/2-i\xi} , \quad (11.49)$$

где  $\xi$  соответствует модулю от подкоренного выражения.

Рассмотренный случай соответствует падению частицы на силовой центр, а также подразумевает стремление кинетической энергии к бесконечности.

Прделаем аналогичные действия для случая  $r \rightarrow \infty$ . Пусть потенциал имеет следующий вид:

$$V(r) \rightarrow -\frac{\alpha}{r^s}. \quad (11.50)$$

В качестве оценки снова будем использовать интеграл Баргмана:

$$\int_0^\infty r dr \frac{\alpha}{r^s}. \quad (11.51)$$

Из выражения (11.51) видно, что в случае, когда  $s > 2$ , интеграл является сходящимся по верхнему пределу, в результате чего число связанных состояний оказывается конечным ( $N_l < \infty$ ). Если же  $s < 2$ , то, поскольку в знаменателе окажется степень меньше единицы, интеграл будет расходиться по верхнему пределу ( $N_l = \infty$ ). Таким образом, для второго случая число связанных состояний является бесконечным.

Типичным примером второго случая является кулоновский потенциал ( $V(r) = \frac{1}{r}$ ). Интеграл Баргмана в данном случае расходится, и, как известно, энергия кулоновских уровней будет равняться:

$$E_n = -\frac{me^4 Z^2}{2\hbar^2 (n_r + l + 1)^2}. \quad (11.52)$$

Из (11.52) видно, что для любого  $l$  энергетический нуль представляется в виде точки сгущения уровней по радиальному числу ( $n_r$ ), и для каждого  $l$  число связанных состояний - бесконечно.

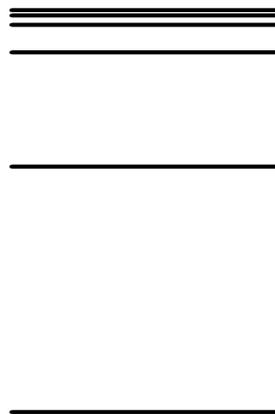


Рис. 11.5. Сгущение энергетических уровней в кулоновском потенциале

## Квазиклассическое приближение для центрально-симметричного потенциала

Квазиклассическое приближение уравнения Шредингера для радиального случая является не менее интересным, чем для одномерного. При этом существует широкий спектр задач, которые могут быть решены с помощью использования данного приближения для радиального случая, например, задача на термоядерный синтез, где для того, чтобы синтез начался, необходимо, чтобы частица сначала протуннелировала. Оценка вероятности данного процесса производится с использованием именно квазиклассического приближения, поскольку условия квазиклассичности в данной задаче вполне выполняются.

Квазиклассические решения для волновой функции в рассматриваемом случае будут иметь вид аналогичный волновым функциям для одномерного случая с единственной разницей, заключающейся в условии того, что для потенциала в нуле находится бесконечно высокая стенка, благодаря чему решение может быть записано в виде

$$u = \frac{A}{\sqrt{p}} \sin \left[ \frac{1}{\hbar} \int_0^r p(r') dr' \right], \quad (11.53)$$

где фаза  $\pi/4$  отсутствует, поскольку граничное условие в нуле требует, чтобы  $u(0)$  было равно нулю.

Условием применимости квазиклассического приближения для данной задачи удобнее всего оценивать следующим образом:

$$\left| \frac{d\lambda}{dr} \right| \ll 1, \quad (11.54)$$

где величина  $\lambda$  равна:

$$\lambda = \frac{r}{l}, \quad (11.55)$$

где  $l$  представляет собой безразмерный орбитальный момент.

Таким образом, в результате вычисления производной удалось получить условие  $l \gg 1$ . Так, условие квазиклассичности предполагает именно большие значения величины  $l$ , а не маленькие, как изначально могло казаться.

Для квазиклассического приближения существует хорошо оправдывающее себя отождествление. Так, введем классический момент, который, по определению, записывается в виде

$$\vec{L} = [\vec{r} \times \vec{p}], \quad (11.56)$$

где  $p$  представляет собой классический импульс.

Квантовое же описание в основном построено на использовании  $l$ , которое всегда целочисленно, по определению. Покажем, как классический момент  $L$  отождествляется с квантовой величиной  $l$ . Величине  $L$  в квантовой механике сопоставляется момент  $l + \frac{1}{2}$ . Грамотного обоснования данного приема не существует, однако, например, для модели Томаса-Ферми подстановка  $l + \frac{1}{2}$  приводит к физически правильному ответу.

Далее выполним операцию по замене величины  $l(l + 1)$  на величину  $l(l + 1) + \frac{1}{4}$ . В таком случае после раскрытия скобок и выделения полного квадрата получим  $(l + \frac{1}{2})^2$ .

## Группа вращений

Перейдем к рассмотрению группы вращений, которая позволяет очень часто кардинально упрощать решаемую задачу.

Любой поворот будет характеризоваться вектором  $\varphi$ , направленным по оси вращения и равным по модулю величине поворота (рис. 11.6).

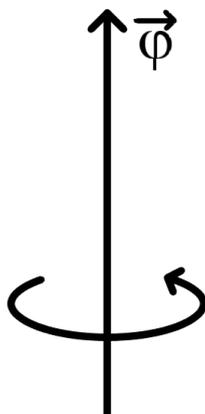


Рис. 11.6. Направление вектора поворота  $\varphi$

**Замечание 11.5.** Существует множество других способов описать вращение. Так, по теореме Эйлера поворот любого тела может быть сведен к повороту вокруг некоторой оси вращения. Такая параметризация является не самой удобной для работы, и, например, существует параметризация в терминах углов Эйлера, которая является более конкретной и в дальнейшем будет использована для ряда

задач. Помимо уже перечисленных, существует также и параметризация Кэли-Клейна.

Все перечисленные параметризации являются не очень удачными и являются очень громоздкими при описания вращения.

Стоит отдельно выделить параметризацию Федорова, в терминах которой закон композиции вектора является простейшим законом после Абелева.

Для нашего описания вращения достаточно вектор-параметра, в терминах которого существует известное соотношение, заключающееся в том, что если провести бесконечно малое преобразование на угол  $\delta\varphi$  (инфинитезимальное преобразование), то изменение радиус-вектора будет равно

$$\delta\vec{r} = [\delta\vec{\varphi} \times \vec{r}] . \quad (11.57)$$

Далее нарисуем стандартный рисунок, который удобно изображать для иллюстрации любых групповых преобразованиях (рис. 11.7). Пусть есть две системы координат с центрами:  $O$  и  $O'$ . Системы координат отличаются друг от друга поворотом, но для удобства разнесены друг относительно друга на рисунке. Обе системы координат имеют свой вектор, направленный в точку  $P$ .

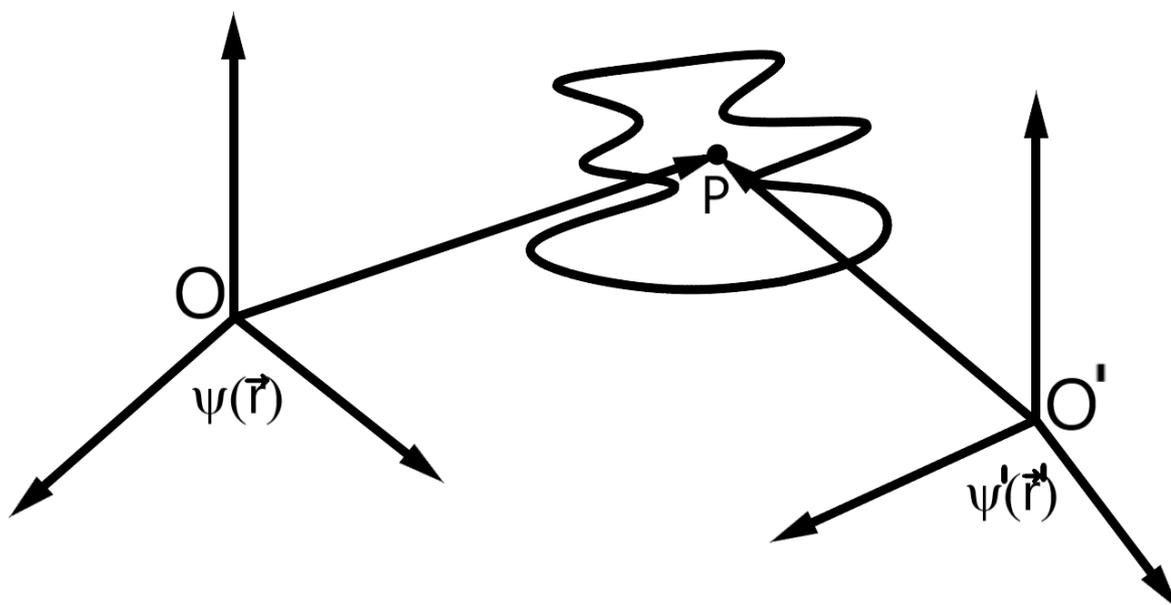


Рис. 11.7. Групповое преобразование перехода из одной системы координат в другую

В точке  $P$  должно выполняться условие равенства волновых функций  $\psi$  и  $\psi'$ ,

поскольку рассматриваемый объект является одним и тем же:

$$\psi(\vec{r}) = \psi'(\vec{r}') . \quad (11.58)$$

Из выражение (11.58) следует, что в точке  $P$  при рассмотрении в разных системах координат должна быть одна и та же амплитуда вероятности. В таком случае, волновые функции  $\psi$  и  $\psi'$  могут быть связаны между собой через бесконечно малое преобразование.

Для бесконечно малого преобразования, связывающего системы  $O$  и  $O'$ , возникает следующее равенство:

$$\psi'(\vec{r}) = \psi(\vec{r} - \delta\vec{r}) . \quad (11.59)$$

Вектора  $r$  и  $r'$  связаны между собой поворотом, что означает равенство

$$\vec{r}' = \vec{r} + \delta\vec{r} . \quad (11.60)$$

Выразим из (11.60) вектор  $r$ :

$$\vec{r} = \vec{r}' - \delta\vec{r} . \quad (11.61)$$

Выражение в правой части (11.59) может быть разложено в ряд Тейлора следующим образом:

$$\psi'(\vec{r}) = \psi(\vec{r}) - \delta\vec{r} \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r}) - [\delta\vec{\varphi} \times \vec{r}] \cdot \vec{\nabla} \psi , \quad (11.62)$$

где рассматриваются члены вплоть до первого порядка в силу того, что в нашем случае рассматривается инфинитезимальное преобразование.

Далее осуществим подстановку (11.57) в (11.62), в результате чего получим

$$\psi'(\vec{r}) = \psi(\vec{r}) - [\delta\vec{\varphi} \times \vec{r}] \cdot \vec{\nabla} \psi . \quad (11.63)$$

Распишем векторное произведение через символ Леви-Чивита и выполним ряд преобразований:

$$\epsilon_{jki} \delta\varphi_j r_k \nabla_i = \delta\vec{\varphi} \cdot [\vec{r} \times \vec{\nabla}] = \frac{i}{\hbar} \delta\vec{\varphi} \cdot [\vec{r} \times \vec{p}] , \quad (11.64)$$

где было использовано свойство перестановочности индексов в символе Леви-Чивита ( $\epsilon_{jki} = \epsilon_{kij}$ ), в результате чего был осуществлен переход от  $[\delta\vec{\varphi} \times \vec{r}] \cdot \vec{\nabla}$  к  $\delta\vec{\varphi} \cdot [\vec{r} \times \vec{\nabla}]$ . В конечном итоге в выражении  $\vec{\nabla}$  был выражен через  $\vec{p}$  ( $\vec{\nabla} = \frac{i}{\hbar} \vec{p}$ ), а как известно

векторное произведение  $[\vec{r} \times \vec{p}]$  по определению равно орбитальному моменту. Таким образом, волновая функция  $\psi'(\vec{r})$  представима в виде

$$\psi'(\vec{r}) = \psi(\vec{r}) + \delta\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r}) - \frac{i}{\hbar} (\delta\vec{\varphi} \cdot \vec{l}) \psi(\vec{r}) , \quad (11.65)$$

где  $\vec{l}$  - квантовомеханический оператор орбитального момента.

Сопоставим центральную и правую части выражений (11.65) и найдем изменение волновой функции  $\delta\psi(\vec{r})$ :

$$\delta\psi(\vec{r}) = -\frac{i}{\hbar} (\delta\vec{\varphi} \cdot \vec{l}) \psi(\vec{r}) . \quad (11.66)$$

Далее разберемся с оператором орбитального момента  $l$ . Каждая компонента данного оператора, как легко можно убедиться, обладает свойством эрмитовости:

$$l_i^+ = l_i . \quad (11.67)$$

Помимо этого, как известно из других курсов, верно следующее коммутационное соотношение между компонентами  $l$ :

$$[l_i, l_j] = i \hbar \epsilon_{ijk} l_k . \quad (11.68)$$

Ранее нами было рассмотрено бесконечно малое преобразование волновой функции за счёт инфинитезимальных преобразований  $\delta\vec{\varphi}$ . Однако в общем случае необходимо рассматривать не бесконечно малые, а конечные преобразования. Для данного вида преобразований существует способ их восстановления по бесконечно малым преобразованиям.

Пусть был выполнен поворот на конечный угол  $\varphi$ . Очевидно, что раз преобразование на этот угол представляет собой преобразование симметрии, то ему должно соответствовать унитарное преобразование волновой функции:

$$\psi \rightarrow \psi' = U(\vec{\varphi}) \psi , \quad (11.69)$$

где унитарное преобразование удовлетворяет условию  $U^+(\vec{\varphi}) U(\vec{\varphi}) = 1$ . Записанное ранее инфинитезимальное преобразование волновой функции соответствует унитарному преобразованию на бесконечно малый угол  $\delta\vec{\varphi}$ :

$$U(\delta\vec{\varphi}) = 1 - \frac{i}{\hbar} \delta\vec{\varphi} \cdot \vec{l} . \quad (11.70)$$

Оператор  $U$  с очевидностью является эрмитовым, и если найти  $U^+$ , то получим следующее выражение:

$$U^+(\delta\vec{\varphi}) = 1 + \frac{i}{\hbar} \delta\vec{\varphi} \cdot \vec{l} . \quad (11.71)$$

Если перемножить операторы  $u^+$  и  $U$ , то линейные члены сократятся, и останется квадратичное слагаемое, которое мы можем отбросить, поскольку рассматривали члены вплоть до первого порядка малости. Таким образом, произведение двух операторов даст в ответе единицу.

Далее разберемся с тем, как по бесконечно малому повороту найти ответ для конечного случая. Зафиксируем ось вращения и будем рассматривать фиксированные повороты вокруг данной оси вращения.

Пусть  $\vec{n}$  - единичный вектор, фиксирующий ось вращения:

$$\vec{n}^2 = 1 . \quad (11.72)$$

В таком случае  $\vec{\varphi}$  представим в виде

$$\vec{\varphi} = \vec{n} \varphi . \quad (11.73)$$

Если рассматривать вращение только вокруг фиксированной оси на углы  $\varphi$ , то такие вращения представляют собой подгруппу группы вращения. При этом вращения обладают свойством абелевости, т. е. любые два вращения могут быть выполнены в любой последовательности.

Таким образом,  $U(\vec{\varphi}_1 + \vec{\varphi}_2)$  может быть представлен в виде

$$U(\vec{\varphi}_1 + \vec{\varphi}_2) = U(\vec{\varphi}_1) U(\vec{\varphi}_2) = U(\vec{\varphi}_2) U(\vec{\varphi}_1) . \quad (11.74)$$

Рассмотрим поворот на угол  $\varphi + \delta\varphi$ :

$$U(\varphi + \delta\varphi) = U(\delta\varphi) U(\varphi) = U(\varphi) U(\delta\varphi) , \quad (11.75)$$

где в выражении аргументами операторов  $U$  являются скалярные величины, поскольку все преобразования рассматриваются вокруг одной фиксированной оси вращения.

Ранее в (11.70) было записано выражение для  $U(\delta\vec{\varphi})$ . С учетом (11.73) выражение (11.70) можно переписать следующим образом:

$$U(\delta\varphi) = 1 - \frac{i}{\hbar} \delta\varphi (\vec{n} \vec{l}) . \quad (11.76)$$

В таком случае (11.75) с учетом (11.76) будет иметь вид

$$U(\varphi + \delta\varphi) = \left( 1 - \frac{i}{\hbar} \delta\varphi (\vec{n} \vec{l}) \right) U(\varphi) . \quad (11.77)$$

Далее составим дифференциальное уравнение на определение оператора  $U(\varphi)$ :

$$\frac{U(\varphi + \delta\varphi) - U(\varphi)}{\delta\varphi} = U'(\varphi) = -\frac{i}{\hbar} (\vec{n}\vec{l}) U(\varphi) . \quad (11.78)$$

Уравнение (11.78) может быть легко решено, поскольку величина  $l$  не зависит от угла  $\varphi$ , а величина  $\vec{n}$  - фиксирована, следовательно

$$U(\vec{\varphi}) = \underbrace{U(0)}_{=1} e^{-\frac{i}{\hbar}\varphi(\vec{n}\vec{l})} = e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{\varphi}\vec{l}} . \quad (11.79)$$

Выражение (11.79) представляет собой окончательный ответ для оператора конечного поворота.

Для того чтобы показать схожесть разного рода преобразований, разберем пример с оператором трансляции по координате  $S(\vec{a})$ , который был получен нами в предыдущих лекциях и записывается следующим образом:

$$S(\vec{a}) = e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{a}} , \quad (11.80)$$

где  $a$  - параметр трансляции по координате.

Тогда для оператора (11.80) выполняется следующее соотношение:

$$S^+(\vec{a}) \vec{r} S(\vec{a}) = \vec{r} + \vec{a} . \quad (11.81)$$

Таким образом, в случае осуществления операций вращения и трансляции преобразования производятся одним и тем же образом. Немаловажным аспектом являются и коммутационные свойства операторов. Для случая трансляционных преобразований выполняется следующее коммутационное соотношение:

$$[p_i, p_j] = 0 . \quad (11.82)$$

Из соотношения (11.82) следует, что из точки А в точку В можно двигаться любым способом, однако в конечном итоге все равно прийти в нее же. Такое свойство трансляционного преобразования обусловлено тем, что операторная экспонента, благодаря равенству нулю коммутатора, может быть разложена на отдельные экспоненты.

$$S(\vec{a}) = e^{-\frac{i}{\hbar}p_x a_x} e^{-\frac{i}{\hbar}p_y a_y} e^{-\frac{i}{\hbar}p_z a_z} , \quad (11.83)$$

где порядок записи экспонент не имеет значения, поскольку операторы коммутируют между собой.



Собственные значения оператора  $\vec{l}^2$  равны:

$$\vec{l}^2 = \hbar^2 l(l+1) , \quad (11.88)$$

где  $l$  - целое число.

Собственные функции оператора  $\vec{l}^2$  являются собственными функциями углового Лапласиана, т. е. сферическими функциями.

Далее рассмотрим более общий случай, в котором равенство (11.58) уже не будет выполняться. Группа вращения предполагает не только наличие координатных степеней свободы, но ещё и спиновых, природа которых неизвестна. Следовательно, необходимо перейти к обобщению - оператору углового момента  $J$ , для которого выполняется следующее коммутационное свойство:

$$[J_i, J_j] = i \epsilon_{ijk} J_k . \quad (11.89)$$

**Замечание 11.6.** В выражении (11.89), а также и в последующих формулах используются безразмерные операторы, благодаря чему в частности в выражении (11.89) опущен множитель  $\hbar$ .

По способу введения, оператор  $J$  является генератором поворотов системы с наличием спиновых степеней свободы. Поскольку операторная экспонента с  $J$  отвечает за поворот и относится к той же группе преобразований - группе вращений, то коммутационное соотношение (11.89) оказывается аналогичным (11.84).

Введем оператор  $\vec{J}^2$ , который равен:

$$\vec{J}^2 = J_x J_x + J_y J_y + J_z J_z , \quad (11.90)$$

где  $J_i = J_i^+$ , откуда следует, что  $\vec{J}^2$  - эрмитов оператор.

Основное свойство оператора  $\vec{J}^2$  аналогично квадрату оператора орбитального момента заключается в том, что он коммутирует со всеми тремя проекциями  $J_i$ :

$$\begin{aligned} [\vec{J}^2, J_i] &= [J_k J_k, J_i] = J_k [J_k, J_i] + [J_k, J_i] J_k = \\ &= J_k i \epsilon_{kil} J_l + i \epsilon_{kil} J_l J_k = i \epsilon_{kil} (J_k J_l + J_l J_k) = 0 , \end{aligned} \quad (11.91)$$

где было использовано следующее свойство коммутаторов:

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B . \quad (11.92)$$

В выражении (11.91) было использовано свойство равенства нулю свертки симметричного и антисимметричного тензоров:

$$A_{mn} B_{mn} = 0 , \quad (11.93)$$

где  $A$  - симметричный относительно перестановки тензор, а  $B$  - антисимметричный.

В представлении группы вращения в качестве основы необходимо использовать два коммутирующих оператора, одним из которых является  $\vec{J}^2$ , а вторым - одна из трех возможных проекций  $J$ . В большинстве задач в качестве второго оператора выбирается  $J_z$ .

Для того чтобы лучше понимать представление группы вращений, необходимо рассуждать следующим образом. Зафиксируем  $\vec{J}^2$  и введем базис собственных значений оператора  $J_z$  с помощью буквы  $M$ :

$$J_z |M\rangle = M |M\rangle . \quad (11.94)$$

Далее введем два оператора  $J^+$  и  $J^-$ , которые равны:

$$J_{\pm} = J_x \pm i J_y . \quad (11.95)$$

Данные операторы не являются эрмитовыми, для них выполняются следующие соотношения:

$$J_+ = J_-^\dagger; \quad J_- = J_+^\dagger . \quad (11.96)$$

Найдем коммутатор между оператором  $J_z$  и операторами  $J_{\pm}$ :

$$[J_z, J_{\pm}] = [J_z, J_x \pm i J_y] = i J_y \pm i (-i J_x) = \pm J_x + i J_y = \pm (J_x \pm i J_y) = \pm J_{\pm} . \quad (11.97)$$

Вторым полезным для нас коммутатором является коммутатор между  $J_+$  и  $J_-$ , ответ для которого, если расписать по определению операторы, будет равен:

$$[J_+, J_-] = 2J_z . \quad (11.98)$$

Наиболее значимым для рассмотрения является первый из коммутаторов, потому что благодаря нему можно получить, что

$$J_z J_{\pm} = J_{\pm} (J_z \pm 1) . \quad (11.99)$$

Выражение (11.99) означает, что если есть исходный собственный вектор оператора  $J_z$  с собственным значением  $M$ , то, если построить  $\widetilde{M}$ , такой, что

$$|\widetilde{M}\rangle = J_{\pm} |M\rangle , \quad (11.100)$$

при действии  $J_z$  на  $\widetilde{M}$  удастся получить, что

$$J_z |\widetilde{M}\rangle = J_z J_{\pm} |M\rangle = J_{\pm} (M \pm 1) |M\rangle . \quad (11.101)$$

Таким образом, при действии на собственный вектор  $\widetilde{M}$  оператора  $J_z$ , получим следующий ответ:

$$J_z|\widetilde{M}\rangle = (M \pm 1)|\widetilde{M}\rangle . \quad (11.102)$$

Пусть собственные вектора операторов  $J_{\pm}$  являются нормированными на символ Кронекера:

$$\langle M|M'\rangle = \delta_{MM'} . \quad (11.103)$$

В таком случае при действии на собственный вектор  $M$  операторов  $J_{\pm}$  будет получаться

$$J_{\pm}|M\rangle = C_{\pm}(M)|M \pm 1\rangle , \quad (11.104)$$

где  $C_{\pm}(M)$  - константы, которые должны быть такими, чтобы выполнялось условие нормировки (11.103).

Заметим, что если зафиксировать собственные значения оператора  $J^2$ , где  $J^2$  может быть разложен на следующие компоненты:

$$\vec{J}^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 , \quad (11.105)$$

то в силу того, что в данном выражении стоят квадраты эрмитовых операторов, т. е. неотрицательные операторы, очевидно, что собственные значения оператора  $J^2$  могут быть больше, чем любое разрешенное значение  $J_z^2$ . Другими словами, собственное значение  $J_z$  всегда ограничено сверху и снизу. При этом выполняется следующее неравенство:

$$\langle \vec{J}^2 \rangle \geq \langle J_z \rangle^2 . \quad (11.106)$$

Если зафиксировать  $J^2$ , то все  $J_z$  будут ограниченными, однако, с другой стороны, полученные алгебраические соотношения подтверждают, что можно повышать и понижать номер состояния по  $M$  формально неограниченное количество раз. Единственное естественное ограничение возникает для нижнего порога энергии  $\hbar\omega/2$ . Далее необходимо обратить в нуль собственные вектора, соответствующие значениям превышающим  $J$ , поскольку невозможно повышать энергию бесконечно, откуда следует, что

$$J_+|J\rangle = 0 . \quad (11.107)$$

Условие (11.107) означает, что выше значения  $J$  по моменту подняться нельзя, в предельном же случае

$$J_z|J\rangle = J|J\rangle . \quad (11.108)$$

Аналогичные рассуждения можно провести и для случая действия оператора  $J_-$ :

$$J_-|J'\rangle = 0, \quad (11.109)$$

где  $J'$  - собственный вектор наинизшего состояния.

Из (11.109) следует, что для нижнего предельного случая

$$J_z|J'\rangle = J'|J'\rangle. \quad (11.110)$$

Для того чтобы связать  $\vec{J}^2$  со значениями  $J$  и  $J'$ , перепишем выражение для оператора  $\vec{J}^2$  в удобном виде

$$\vec{J}^2 = \frac{1}{2}(J_+J_- + J_-J_+) + J_z^2 = J_+J_- + J_z^2 - J_z = J_-J_+ + J_z^2 + J_z, \quad (11.111)$$

где при преобразованиях  $J_x^2$  и  $J_y^2$  были выражены через  $J_+$  и  $J_-$ , определением для которых является (11.95). Помимо этого, было использовано коммутационное соотношение (11.98).

Далее возьмем старший вектор по  $J_z$  и подействуем на него оператором  $\vec{J}^2$ :

$$\vec{J}^2|J\rangle = (J_z^2 + J_z)|J\rangle = J(J+1)|J\rangle, \quad (11.112)$$

где использовалась правая форма записи  $\vec{J}^2$ , представленная в (11.111).

Из (11.112) следует, что собственным значением оператора  $\vec{J}^2$  в терминах старшего значения  $J_z$  является произведение  $J(J+1)$ .

Подействуем также оператором  $\vec{J}^2$  на собственный вектор  $J'$ :

$$\vec{J}^2|J'\rangle = (J_z^2 - J_z)|J'\rangle = (J'^2 - J')|J'\rangle, \quad (11.113)$$

где для  $\vec{J}^2$  было использовано другое определение из (??), которое позволяет обратиться в нуль слагаемое с парой операторов  $J_+J_-$ .

Тогда для собственного значения  $\vec{J}^2$ , которое является одним и тем же для двух рассмотренных случаев, можно записать следующее соотношение:

$$J(J+1) = J'(J'-1), \quad (11.114)$$

откуда получается равенство:

$$J' = -J. \quad (11.115)$$

Для того чтобы изменить момент с  $J'$  до  $J$ , необходимо  $2J+1$  раз воспользоваться оператором  $J_+$ , и, наоборот, для того, чтобы изменить момент с  $J$  до  $J'$ , необходимо

$2J + 1$  раз подействовать  $J_-$ . В данном случае важно, что между  $J'$  и  $J$  существует разница в целое число. При таком дополнительном условии величина  $J$  должна быть либо целым, либо полуцелым числом ( $J = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots$ ), поскольку выполняется равенство (11.115). Собственные значения оператора  $J^2$  принимают значения:

$$J^2 \longrightarrow J(J + 1) , \quad (11.116)$$

а собственные значения  $J_z$ :

$$J_z \longrightarrow -J \leq M \leq J . \quad (11.117)$$

Далее перейдем к определению коэффициентов  $C_{\pm}(M)$ . Для этого используем выражение для  $\vec{J}^2$  в следующей форме:

$$\vec{J}^2 = J_+ J_- + J_z^2 - J_z . \quad (11.118)$$

Далее вычислим матричный элемент  $\vec{J}_{mm}^2$ . С одной стороны, данный матричный элемент, как уже было показано ранее, будет равен

$$\langle M | \vec{J}^2 | M \rangle = J(J + 1) \langle M | M \rangle = J(J + 1) . \quad (11.119)$$

С другой стороны, если воспользоваться выражением (11.118), то матричный элемент будет равен:

$$\langle M | \vec{J}^2 | M \rangle = \langle M | J_+ J_- | M \rangle + M^2 - M , \quad (11.120)$$

где было учтено, что собственным значением оператора  $J_z$  является  $M$ .

Вычислим матричный элемент  $\langle M | J_+ J_- | M \rangle$  с помощью разложения по проекторам  $\sum |M\rangle \langle M| = 1$ . Для этого вставим это разложение между  $J_+$  и  $J_-$ , и, поскольку базис собственных векторов  $M$  является ортонормированным, опустим сумму, оставив тем самым только

$$\langle M | \vec{J}^2 | M \rangle = \langle M | J_+ | M - 1 \rangle \langle M - 1 | J_- | M \rangle + M^2 - M . \quad (11.121)$$

Из выражения (11.104) установим связь между матричным элементом  $\langle M - 1 | J_- | M \rangle$  в (11.121) и коэффициентом  $C_-(M)$ :

$$\langle M - 1 | J_- | M \rangle = C_-(M) . \quad (11.122)$$

Матричный элемент  $\langle M | J_+ | M - 1 \rangle$  является эрмитово сопряженным к  $\langle M - 1 | J_- | M \rangle$ , следовательно, можно найти квадрат модуля коэффициента  $C_-(M)$ , используя (11.119) и (11.121):

$$|C_-(M)|^2 = J^2 + J - M^2 + M = (J + M)(J - M + 1) . \quad (11.123)$$

Таким образом, с точностью до фазового множителя коэффициент  $C_-(M)$  равен:

$$C_-(M) = C_+(M-1) = \sqrt{(J+M)(J-M+1)}, \quad (11.124)$$

где фазовый множитель был выбран равной единице.

## Лекция 12. Операторы угловых моментов. Конечные повороты. Неприводимые тензоры.

На предыдущей лекции нами были введены операторы  $J_+$  и  $J_-$ , которые при действии на собственный вектор, характеризующийся квантовыми числами полного момента  $J$  и его третью проекцию  $M$ , дают в ответе

$$J_{\pm}|JM\rangle = C_{\pm}(M)|JM \pm 1\rangle, \quad (12.1)$$

где базис собственных векторов  $|JM\rangle$  является ортонормированным, и выполняется следующее условие:

$$\langle JM|J'M'\rangle = \delta_{JJ'} \delta_{MM'}. \quad (12.2)$$

Коэффициенты  $C_{\pm}$ , которые появляются в (12.1) и обеспечивающие выполнение условия нормировки (12.2), равняются

$$C_{\pm}(M) = \sqrt{(J \mp M)(J \pm M + 1)}. \quad (12.3)$$

В случае, если  $M = J$ , то при действии оператора  $J_+$  в ответе должен получаться нуль, следовательно, коэффициент  $C_+$  должен быть равен нулю. Аналогичная ситуация получается и при  $M = -J$ . Как видно из равенства (12.3), данное условие выполняется.

В таком случае матричный элемент  $\langle M-1|J_-|M\rangle$  оказывается равным:

$$\langle M-1|J_-|M\rangle = \sqrt{(J+M)(J-M+1)} = \langle M|J_+|M-1\rangle, \quad (12.4)$$

где равенство матричному элементу  $\langle M|J_+|M-1\rangle$  выполняется, поскольку операторы  $J_+$  и  $J_-$  являются комплексно сопряженными, а так как сам матричный элемент вещественный, знак сопряжения ставить не обязательно.

Знание матричных элементов (12.4) позволяет восстановить в явном виде матрицу операторов  $J_{\pm}$ .

Перейдем к рассмотрению оператора  $J_z$ . По определению, в рассматриваемом нами базисе оператор  $J_z$  является диагональным, откуда следует, что

$$\langle JM|J_z|J'M'\rangle = \delta_{JJ'} \delta_{MM'} M. \quad (12.5)$$

**Замечание 12.1.** Стоит помнить, что матрицы  $J_{\pm}$  и  $J_z$  строятся при фиксированном квантовом числе  $J$  и изменяющемся  $M$ . Эти матрицы имеют размерность

$(2J + 1) \times (2J + 1)$ , и при этом строчки и столбцы матриц нумеруются буквой  $M$ . Верхний левый элемент матриц соответствует значению  $M = J$ , а правый нижний -  $M = -J$ . Данное замечание стоит помнить, чтобы не получить неправильный ответ при работе с данными матрицами.

Выразим операторы  $J_x$  и  $J_y$  через операторы  $J_+$  и  $J_-$ :

$$\begin{cases} J_x = \frac{J_+ + J_-}{2} \\ J_y = \frac{J_+ - J_-}{2i} \end{cases} \quad (12.6)$$

С учетом (12.6) матричный элемент  $\langle M | J_x | M - 1 \rangle$  будет равен:

$$\langle M | J_x | M - 1 \rangle = \langle M - 1 | J_x | M \rangle = \frac{1}{2} \sqrt{(J + M)(J - M + 1)}. \quad (12.7)$$

Из полученного в (12.7) выражения следует, что матрица  $J_x$  будет отлична от нуля над и под главной диагональю, а на главной диагонали будут нули, поскольку

$$\langle JM | J_{\pm} | JM \rangle = 0. \quad (12.8)$$

Далее вычислим матричный элемент  $\langle M | J_y | M - 1 \rangle$  с учетом того, что  $J_y^* = -J_y$ :

$$\langle M | J_y | M - 1 \rangle = -\langle M - 1 | J_y | M \rangle = \frac{1}{2i} \sqrt{(J + M)(J - M + 1)}. \quad (12.9)$$

Для матрицы оператора  $J_y$  аналогично  $J_x$  матрица будет трехдиагональной с ненулевыми матричными элементами над и под главной диагональю, диагональные же элементы будут нулевыми в силу равенства (12.8):

$$\langle JM | J_y | JM \rangle = 0. \quad (12.10)$$

В результате, если фиксировать значение  $J_z$ , в рассматриваемом базисе средние значения  $J_x$ ,  $J_y$  будут равны нулю, и при этом состояние  $|JM\rangle$  является чистым состоянием, поскольку оно представляет собой собственный вектор операторов  $J^2$  и  $J_z$ , который по отношению к главным степеням свободы образует полный набор. Собственное значение  $J_z$  при этом равняется  $M$ , а у  $J^2 - J(J + 1)$ . Значения  $J_x$ ,  $J_y$  в каждом отдельном акте измерения будут такими же, как у  $J_z$ . Так, в качестве исходных квантовых чисел, используемых для создания полного набора по углам, могли бы выступать квантовые числа  $J^2$ ,  $J_x$ ,  $J_y$ . Для  $J_x$ ,  $J_y$  получалось бы все то же самое, поскольку они одинаково входят во все коммутационные соотношения. Таким

образом, при каждом отдельном измерении  $J_x$  или  $J_y$  будут выпадать все те же самые целые или полуцелые числа в от минус  $M$  до  $M$ .

Если решать задачу на собственные значения матриц  $J_x$  или  $J_y$  в базисе  $|JM\rangle$ , то, несмотря на то, что матрицы не являются диагональными, собственные значения все равно могут быть легко найдены.

Далее рассмотрим орбитальный момент в качестве частного случая общего углового момента. Для компонент  $l$  выполняется следующее коммутационное соотношение:

$$[l_i, l_j] = i \epsilon_{ijk} l_k . \quad (12.11)$$

Коммутирующей парой операторов, образующих при этом полный набор, является набор операторов:

$$\{\vec{l}^2, l_z\} . \quad (12.12)$$

При этом операторы орбитального момента являются координатными операторами, поэтому, как известно из курса атомной физики, все три оператора:  $l_x$ ,  $l_y$  и  $l_z$  являются угловыми операторами дифференцирования по  $\theta$  и  $\varphi$ , а оператор  $l^2$  может быть представим в виде:

$$\vec{l}^2 = -\Delta_{\theta\varphi} . \quad (12.13)$$

Наиболее простым образом также представим и оператор  $l_z$ :

$$l_z = -i \frac{\partial}{\partial \varphi} . \quad (12.14)$$

При этом при действии на сферические функции, являющиеся собственными функциями угловой части уравнения Шредингера, получаются следующие соотношения:

$$\begin{cases} \vec{l}^2 Y_{lm} = l(l+1) Y_{lm} \\ l_z Y_{lm} = m Y_{lm} \end{cases} \quad (12.15)$$

где, как уже было показано ранее, функции  $Y_{lm}$  могут быть записаны в следующем виде:

$$Y_{lm} = (-1)^m N_{lm} P_m^l(\cos \theta) e^{im\varphi} . \quad (12.16)$$

При таком способе введения физических функций для них будет выполняться следующее соотношение:

$$l_{\pm} Y_{lm} = \sqrt{(l \mp m)(l \pm m + 1)} Y_{l, m \pm 1} . \quad (12.17)$$

Вторым частным случаем общего углового момента является спин. Рассмотрим частицу, например, электрон, протон, нейтрон или любую другую частицу, у которой есть спин, и перейдем в систему её центра масс. В системе центра масс орбитальный момент частицы будет равен нулю, поскольку импульс равен нулю, а орбитальный момент равен  $l = [\vec{r} \times \vec{p}]$ . Если при таком переходе угловой момент частицы оказывается отличным от нуля, то это означает, что у частицы есть спин. Для обозначения спина используется буква  $s$ . Компоненты спина удовлетворяют такому же коммутационному соотношению, что и полный и орбитальный моменты:

$$[s_i, s_j] = i \epsilon_{ijk} s_k . \quad (12.18)$$

При этом по способу введения спин не является координатной степенью свободы, поэтому для него обязательно выполняется условие равенства нулю коммутаторов спина с координатными операторами:

$$[s_i, r_j] = [s_i, p_j] = [s_i, l_j] = 0 . \quad (12.19)$$

Тем не менее, для спина могут быть проведены рассуждения, абсолютно аналогичные тем, что были сделаны для оператора полного и углового моментов. Операторы  $s^2$  и  $s_z$  коммутируют между собой и образуют полный набор состояний:

$$\{\bar{s}^2, s_z\} . \quad (12.20)$$

**Замечание 12.2.** В качестве обозначения проекции спина на выделенную ось будем использовать букву  $\sigma$ .

При этом действие операторов  $s^2$  и  $s_z$  на чистое состояние  $|s \sigma\rangle$  может быть записано в следующем виде:

$$\begin{cases} \bar{s}^2 |s \sigma\rangle = s(s+1) |s \sigma\rangle \\ s_z |s \sigma\rangle = \sigma |s \sigma\rangle \end{cases} \quad (12.21)$$

Отметим, что для фиксированного  $s$  значения проекции  $\sigma$  пробегается в диапазоне  $-s \leq \sigma \leq s$ . В отличие от орбитального момента  $l$ , спин может быть как целым, так и полуцелым числом.

Также существуют и те частицы, спин которых равняется нулю, то есть отсутствует, однако для нас наибольший интерес будут представлять частицы со спином  $s = 1/2$ , поскольку мы сами состоим из них; со спином  $s = 1$ , так как данному значению спина соответствует фотон, посредством которого мы видим, а также и

промежуточные бозоны, которые переносят взаимодействие. Более того, возможно, существуют и частицы со спином  $s = 2$ , однако для того, чтобы это проверить, необходимо экспериментально доказать наличие такого спина у гравитонов.

Таким образом, для описания частицы с учетом спина необходимо использовать совокупный базис  $|\vec{r}, s \sigma\rangle$ , который может быть получен в результате прямого произведения координатного базиса на спиновый:

$$|\vec{r}, s \sigma\rangle = |\vec{r}\rangle \otimes |s \sigma\rangle . \quad (12.22)$$

В таком случае реализация вектора гильбертового пространства в данном базисе будет соответствовать матричному элементу гильбертового пространства с базисным состоянием, имеющим координату  $\vec{r}$  и число  $s$  в качестве спина:

$$\langle \vec{r}, s \sigma | \psi \rangle = \psi(\vec{r}, \sigma) . \quad (12.23)$$

Букву  $s$  в записи кет-векторов может быть опущена, поскольку в большинстве случаев спин частицы является фиксированной величиной. Изменить спин частицы не так просто, однако в случае атомов это возможно, если возбудить валентную оболочку так, чтобы она перестроилась. Для отдельных частиц, таких, как электрон, протон, изменение спина не возможно. В таком случае волновую функцию принято описывать столбцом вида:

$$|\psi\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} \psi_{+s}(\vec{r}) \\ \vdots \\ \psi_{-s}(\vec{r}) \end{pmatrix} , \quad (12.24)$$

где отдельные элементы столбца, соответствуют волновым функциям с фиксированной проекцией спина.

Такая волновая функция является координатной функцией по каждой из компонент и одновременно является спинором или просто спиновым столбцом.

Действие любого спинового оператора на волновую функцию (12.24) сводится к следующему равенству:

$$(s_i \psi)_\sigma = (s_i)_{\sigma\sigma'} \psi_{\sigma'} . \quad (12.25)$$

Стоит отметить, что спиновые операторы удобно записывать в виде матриц. Так, для спина  $s = \frac{1}{2}$  собственными значениями оператора  $s_z$  являются  $\sigma = \pm \frac{1}{2}$ . В таком случае матрица оператора  $s_z$  строится по такому принципу, что выполняется следующее равенство:

$$(s_z)_{\sigma\sigma'} = \delta_{\sigma\sigma'} \sigma . \quad (12.26)$$

Таким образом, матрица  $s_z$  представляет собой матрицу размера  $2 \times 2$  и определяется следующим выражением:

$$s_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \sigma_z, \quad (12.27)$$

где, как уже было прописано ранее, верхний левый элемент матрицы соответствует проекции спина  $\sigma = \frac{1}{2}$ , а правая нижняя -  $\sigma = -\frac{1}{2}$ . Матрица из выражения для  $\sigma_z$  соответствует  $\sigma_z$  или  $\sigma_3$  матрице Паули.

Матрица  $\sigma_x$  строится по аналогии с матрицей орбитального момента таким образом, что выполняется следующее равенство:

$$(s_x)_{\sigma, \sigma-1} = (s_x)_{\sigma-1, \sigma} = \frac{1}{2} \sqrt{(s + \sigma)(s - \sigma + 1)}. \quad (12.28)$$

В таком случае матрица  $s_x$  будет иметь вид:

$$s_x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \sigma_x. \quad (12.29)$$

Аналогичным образом построим матрицу и для  $s_y$ . Для величины  $s_y$  выполняется равенство

$$(s_y)_{\sigma, \sigma-1} = -(s_y)_{\sigma-1, \sigma} = \frac{1}{2i} \sqrt{(s + \sigma)(s - \sigma + 1)}. \quad (12.30)$$

Таким образом, матрица  $s_y$ :

$$s_y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \sigma_y. \quad (12.31)$$

Тогда запишем ответ для спина в виде

$$\bar{s} = \frac{1}{2} \bar{\sigma}. \quad (12.32)$$

Запишем также матричное представление операторов для случая, когда спин частицы:  $s = 1$ . Данный случай является очень важным с точки зрения практических приложений, поскольку существует много ситуаций, когда частица со спином, равным единице, присутствует в задаче. Примерами таких частиц являются фотоны, а также другие переносчики взаимодействий. Кроме того, спином  $s = 1$  обладает и биохимический дейтрон, который является основой всего термоядерного синтеза.

Для оператора  $s_z$  в случае  $s = 1$  выполняется равенство:

$$(s_z)_{\sigma, \sigma'} = \sigma \delta_{\sigma, \sigma'}. \quad (12.33)$$

В таком случае, поскольку собственные значения проекции спина равны 1, 0 и -1, матрица  $s_z$  имеет вид:

$$s_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (12.34)$$

**Замечание 12.3.** Равенство (12.33) выполняется только для массивных частиц. Для фотонов в силу их безмассовости (12.33) должны быть отделены только две вторичные степени свободы, которые соответствуют проекциям спина +1 и -1.

Матрица для  $s_x$  для  $s = 1$  записывается следующим образом:

$$s_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (12.35)$$

Для  $s_y$ :

$$s_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}. \quad (12.36)$$

## Конечные повороты

Далее вернемся к рассмотрению раздела, связанного с конечными поворотами. Ранее для орбитального момента нами было показано, как по бесконечно малому преобразованию восстановить конечное.

Очевидно, что для общего углового момента процедура ничем не будет отличаться, следовательно, общий вид унитарного оператора поворота имеет следующий вид:

$$U(\vec{\varphi}) = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{\varphi} \vec{J}}, \quad (12.37)$$

где выражение справедливо как для орбитального и спинового, так и для полного моментов. Напомним, что для унитарных операторов выполняется равенство  $U^\dagger U = 1$ .

Если осуществить поворот на конечный угол, то исходное состояние  $|JM\rangle$  будет преобразовано в  $U(\vec{\varphi})|JM\rangle$  так, что

$$|JM\rangle \longrightarrow U(\vec{\varphi})|JM\rangle = \sum_{M'} \underbrace{\langle JM'|U(\vec{\varphi})|JM\rangle}_{D_{M'M}^{(J)}(\vec{\varphi})} |JM'\rangle, \quad (12.38)$$

где результат поворота удобнее всего представлять или записывать в терминах матриц конечных поворотов. Так, например, задача на опыт Штерна-Герлаха для частиц со спином  $s = 1$  может быть решена очень просто путем разложения вектора по базису  $J'M'$ . Поскольку мы осуществляем операцию поворота, то при повороте оператор  $J^2$  обязательно будет сохраняться, что связано с тем, что  $J^2$  коммутирует с каждой из компонент  $J$ . Следовательно, результатом разложения будет сумма по  $M'$  из выражения (12.38), т. е. повернутый вектор  $|JM\rangle$  представляет собой суперпозицию состояний с теми же квантовыми числами  $J$ , но изменяющимися  $M$  с коэффициентами, которые называются матрицами конечных поворотов и обозначаются в обычной литературе по группе вращений как  $D_{M'M}^{(J)}(\vec{\varphi})$ .

Для матриц поворота существует специальная техника того, как с ними работать. Иметь базовое представление о данных матрицах является необходимостью, потому что так или иначе задачи с повернутыми системами координат возникают достаточно часто. Самый простой способ работы с  $D_{M'M}^{(J)}(\vec{\varphi})$  заключается в необходимости перехода в параметризацию углов Эйлера.

**Замечание 12.4.** В терминах углов Эйлера поворот представляет собой совокупность трех поворотов: сначала поворот  $\alpha$  вокруг исходной оси  $z$  ( $0 \leq \alpha < 2\pi$ ), далее поворот на угол  $\beta$  ( $0 \leq \beta < \pi$ ) вокруг новой оси  $Oy'$ , которая представляет собой уже повернутую ось  $y$ , и поворот вокруг оси  $z''$  на угол  $\gamma$  ( $0 \leq \gamma < 2\pi$ ).

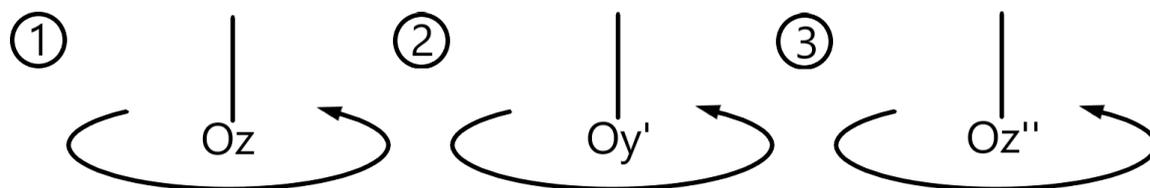


Рис. 12.1. Поворот в терминах углов Эйлера

Таким образом, исходный оператор поворота в параметризации углов Эйлера может быть записан в виде произведения операторов поворота по принципу, описанному выше в замечании 12.4. Тогда

$$U(\vec{\varphi}) = U(\alpha, \beta, \gamma) = e^{-\frac{i}{\hbar}\gamma J_z} e^{-\frac{i}{\hbar}\beta J_y} e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha J_z}, \quad (12.39)$$

где в показателе экспоненты расположены размерные операторы углового момента по аналогии с тем, как нами ранее был записан оператор конечного поворота. В дальнейшем мы перейдем к безразмерным  $J$  и уберем  $\hbar$  из показателя экспоненты.

Далее, после перехода к параметризации Эйлера и записи  $U$  в виде (12.39), сведем матрицы конечного поворота к более простой структуре. Матрица  $D_{M'M}^{(J)}$  будет зависеть от трех углов  $\alpha, \beta, \gamma$ , однако если расписывать  $D_{M'M}^{(J)}$ , то с левого и правого края операторы  $J_z$ , действуя на базисные вектора, будут давать собственные значения  $M$  и  $M'$ , следовательно,  $D_{M'M}^{(J)}$  будет иметь вид

$$D_{M'M}^{(J)}(\alpha, \beta, \gamma) = e^{-i\gamma M'} d_{M'M}^{(J)}(\beta) e^{-i\alpha M}, \quad (12.40)$$

где  $d_{M'M}^{(J)}$  имеет довольно сложную структуру, поскольку данный матричный элемент вычисляется по оператору  $J_y$ , который имеет недиагональную структуру.

Матрица  $d_{M'M}^{(J)}$  нужна для того, чтобы явно представить матрицу поворота. Так, в ряде задач она оказывается очень удобной и полезной. Данная матрица является вещественной, поскольку она записывается для оператора  $J_y$ , матрица которого состоит из мнимых единиц, и с учетом  $i$  в экспоненте, матрица  $d$  оказывается вещественной. В явном виде  $d_{M'M}^{(J)}$  может быть записана в следующей форме:

$$d_{M'M}^{(J)}(\beta) = \left[ \frac{(J+M')!(J-M)!}{(J+M)!(J-M)!} \right]^{\frac{1}{2}} \left( \cos \frac{\beta}{2} \right)^{M'+M} \left( \sin \frac{\beta}{2} \right)^{M'-M} \times \\ \times (-1)^{M'-M} P_{J-M'}^{(M'-M, M'+M)}(\cos \beta), \quad (12.41)$$

где  $P_{J-M'}^{(M'-M, M'+M)}(\cos \beta)$  - это полином Якоби, который, по определению, равен:

$$P_n^{(a,b)}(x) = \frac{(-1)^n}{2^n n!} (1-x)^{-a} (1+x)^{-b} \frac{d^n}{dx^n} \left[ (1-x)^{n+a} (1+x)^{n+b} \right]. \quad (12.42)$$

### Опыт Штерна-Герлаха для частиц со спином $s = 1$

Рассмотрим пример, демонстрирующий удобство использования матриц конечного поворота. Запишем в явном виде матрицу  $d^{(1)}(\beta)$ , которая соответствует спину  $s = 1$ :

$$d^{(1)}(\beta) = \begin{pmatrix} \frac{1+\cos \beta}{\sqrt{2}} & -\frac{\sin \beta}{\sqrt{2}} & \frac{1-\cos \beta}{\sqrt{2}} \\ \frac{\sin \beta}{\sqrt{2}} & \cos \beta & -\frac{\sin \beta}{\sqrt{2}} \\ \frac{1-\cos \beta}{\sqrt{2}} & \frac{\sin \beta}{\sqrt{2}} & \frac{1+\cos \beta}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}. \quad (12.43)$$

Будем рассматривать задачу на опыт Штерна-Герлаха. Направим поляризованный по оси  $z$  пучок частиц со спином  $s = 1$  в сторону экрана. При этом исходное состояние частицы задается столбцом

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (12.44)$$

Далее данный пучок попадает в отклоняющее поле, направленное под углом  $\theta$  к исходному полю.

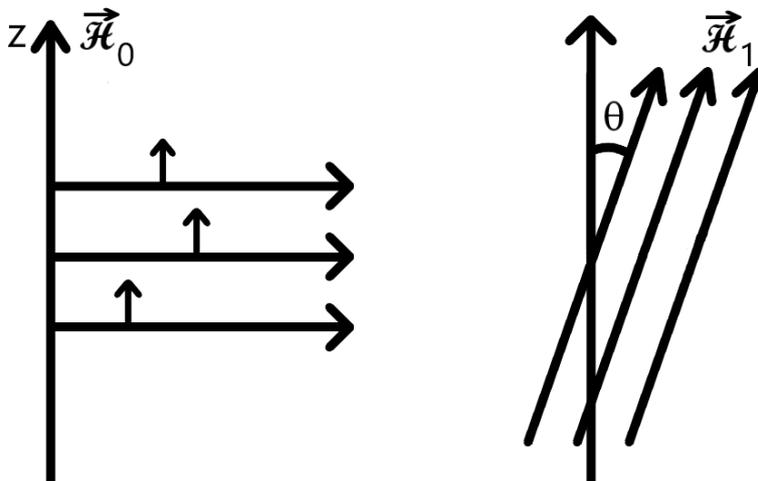


Рис. 12.2. Опыт Штерна-Герлаха

Очевидно, что в таком случае на экране будет наблюдаться три пятна, соответствующих проекциям магнитного момента на направление отклоняющего поля. В таком случае для  $s = 1$  одно пятно будет несмещенным, а два других - смещены. Так, они будут соответствовать проекциям  $\pm 1$ . Вопрос заключается в определении интенсивности пятен на экране.

Пусть система координат выбрана таким образом, что вектор напряженности  $\vec{H}_1$  отклоняющего поля будет лежать в плоскости  $xz$ , а вектор поляризующего поля  $\vec{H}_0$  будет направлен вдоль оси  $z$ .

Далее выполним поворот нашей системы координат таким образом, чтобы ось  $z$  была совмещена с направлением отклоняющего поля. Из рис. 12.3 видно, что для совмещения векторов необходимо выполнить поворот по часовой стрелке. В случае, если смотреть по направлению оси  $y$ , то поворот будет осуществляться против часовой стрелки, что соответствует положительному направлению поворота. Таким образом, исходный вектор состояния (12.44) после выполнения операции поворота превратится в вектор, который можно записать следующим образом:

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \longrightarrow d^{(1)}(\theta) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 + \cos \theta \\ \sin \theta \\ 1 - \cos \theta \end{pmatrix}, \quad (12.45)$$

где матрица  $d^{(1)}(\theta)$  умножается на исходный вектор состояния, поскольку поворот

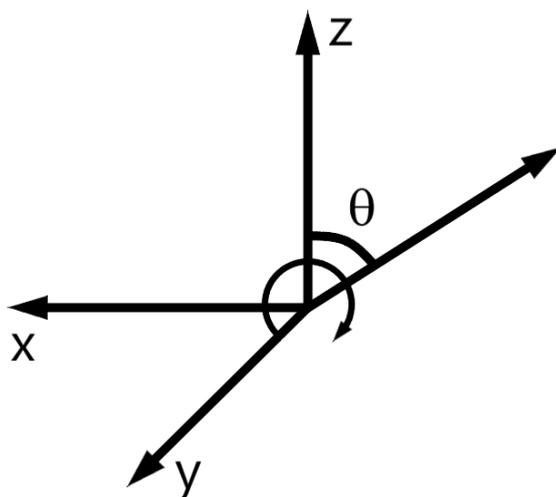


Рис. 12.3. Направление отклоняющего поля в декартовой системе координат

осуществляется только вокруг оси  $y$ , и никаких дополнительных поворотов не требуется.

Таким образом, вероятности обнаружить частицу в одном из трех возможных состояний будут определяться квадратом итогового выражения в (12.45).

Ещё один момент, который обязательно стоит отметить, заключается в том, что для случая  $s = \frac{1}{2}$  оператор конечного поворота может быть записан в виде строки:

$$U(\vec{\varphi}) = e^{-i\vec{\varphi}\vec{s}} = e^{-\frac{i}{2}\varphi\vec{n}\vec{\sigma}}. \quad (12.46)$$

В силу того, что  $\vec{n}$  - единичный вектор ( $\vec{n}^2 = 1$ ), для которого выполняется равенство  $(\vec{n}\vec{\sigma})^2 = 1$ , оператор конечного поворота  $U(\vec{\varphi})$  может быть переписан следующим образом:

$$U(\vec{\varphi}) = \cos \frac{\varphi}{2} - i\vec{n}\vec{\sigma} \sin \frac{\varphi}{2}. \quad (12.47)$$

Из (12.47) следует, что при повороте на угол  $\varphi = 2\pi$ ,  $U(2\pi) = -1$ . Отсюда следует, что при повороте на  $2\pi$  волновая функция изменяет свой знак, что вполне имеет место быть, поскольку  $-1$  влияет лишь на фазу волновой функции.

## Сложение моментов

Далее рассмотрим следующий немаловажный раздел, связанный со сложением моментов. Будем рассматривать две взаимодействующие системы, которые в результате их взаимодействия образуют некоторую совокупную систему (рис. 12.4).

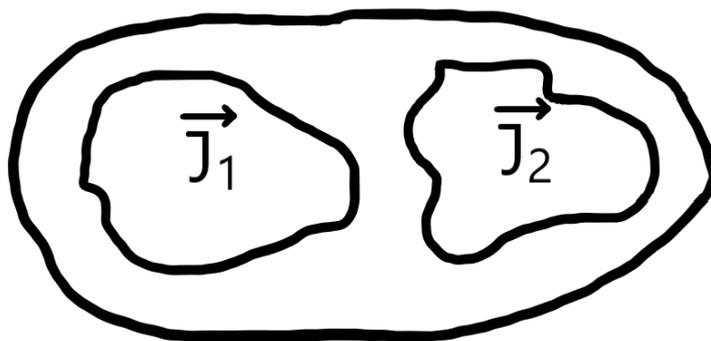


Рис. 12.4. Сложение моментов двух взаимодействующих систем

При этом системы взаимодействуют таким образом, что у каждой из них есть свой момент  $\vec{J}_1$  и  $\vec{J}_2$ , однако в результате взаимодействия модули моментов сохраняются.

**Замечание 12.5.** *Существуют случаи, когда в результате взаимодействия модули моментов не сохраняются. Так, например они могут не сохраняться в сильных взаимодействиях, где спины и изоспины связаны друг с другом.*

В ином виде условие сохранения модулей моментов может быть сформулировано так: должны сохраняться соответствующие квадраты моментов, а относительная ориентация моментов может изменяться. Такой случай называется стандартным случаем сложения моментов. Введем момент  $J$ , равный сумме двух векторов моментов:

$$\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2, \quad (12.48)$$

где  $\vec{J}_1^2 = \text{Const}$  и  $\vec{J}_2^2 = \text{Const}$  и являются квантовыми числами, характеризующими всю систему в целом. Буква  $J$  при этом имеет право изменяться. Состояние системы в целом будет определяться вектором  $|JM\rangle$ , где  $M$  - соответствующая третья проекция  $J_z$ , которая по общим правилам равна:

$$J_z = J_{1z} + J_{2z}. \quad (12.49)$$

Задача сложения моментов в таком каноническом варианте предполагает представление вектора  $|JM\rangle$  через состояние подсистем с определенными коэффициентами.

Предполагается, что подсистемы независимыми и обладают своими степенями свободы, откуда следует равенство нулю следующего коммутатора:

$$[J_{1i}, J_{2j}] = 0. \quad (12.50)$$

В таком случае очевидным базисом нашей совокупной системы будет являться:

$$|J_1 J_2 M_1 M_2\rangle = |J_1 M_1\rangle \otimes |J_2 M_2\rangle, \quad (12.51)$$

где  $J_1$  и  $J_2$  - фиксированы и в дальнейшем будут опущены при записи векторов состояний. Знак  $\otimes$  в выражении подразумевает тензорное произведение векторов состояний отдельных систем.

Таким образом, при фиксированных  $J_1$  и  $J_2$  базис совокупной системы представляет собой  $(2J_1 + 1)(2J_2 + 1)$  базисных векторов.

Далее выясним, какие значения  $J$  могут быть у совокупной системы. Величина  $J$  сама по себе также является моментом. Для проверки этого можно показать выполнение коммутационного соотношения:

$$[J_i, J_j] = [J_{1i} + J_{2i}, J_{1j} + J_{2j}] = i \epsilon_{ijk} (J_{1k} + J_{2k}) = i \epsilon_{ijk} J_k. \quad (12.52)$$

Следовательно, раз  $J$  - нормальный момент, то по значению третьей проекции можно сразу определить, каким может быть значение  $J$ , поскольку  $M$  всегда изменяется в пределах от  $-J$  до  $J$ . В таком случае  $M$  может быть получено путем сложения:

$$M = M_1 + M_2. \quad (12.53)$$

Максимальное значение  $M$  при этом получается в случае сложения максимальных значений  $M_1$  и  $M_2$ .

Составим таблицу, в которой будем выписывать значения проекций  $M_1$  и  $M_2$ , результирующее значение  $M$  и соответствующее значение  $J$ :

$M_1$	$M_2$	$M$	$J$
$J_1$	$J_2$	$J_1 + J_2$	$J_1 + J_2$
$J_1 - 1$	$J_2$	$J_1 + J_2 - 1$	$J_1 + J_2 - 1$
$J_1$	$J_2 - 1$		
$J_1 - 2$	$J_2$	$J_1 + J_2 - 2$	$J_1 + J_2 - 2$
$J_1 - 1$	$J_2 - 1$		
$J_1$	$J_2 - 2$		

(12.54)

При  $M_1 = J_1$  и  $M_2 = J_2$ , соответствующее значение максимальной проекции  $M$  составляет  $J_1 + J_2$ . Отсюда следует, что, поскольку выше по значению проекции подняться нельзя, квантовое число  $J$  также равняется  $J_1 + J_2$ . Далее понизим одно

из значений  $M_1$  или  $M_2$  на единицу. В таком случае возможны два способа: либо  $M_1 = J_1 - 1$ ,  $M_2 = J_2$ , либо  $M_1 = J_1$ ,  $M_2 = J_2 - 1$ . Оба данных способа равнозначны и оба дают разные состояния, поскольку, с точки зрения состояния подсистем, будут реализованы различные состояния. Однако в данном случае для суммы  $M_1$  и  $M_2$  будет получаться одинаковый ответ  $J_1 + J_2 - 1$ . Следовательно, итоговое состояние системы будет представлять собой линейную комбинацию состояний в случае, когда  $M_1 = J_1 - 1$ ,  $M_2 = J_2$  или  $M_1 = J_1$ ,  $M_2 = J_2 - 1$  с соответствующими коэффициентами.

Для того чтобы получить суммарное  $M = J_1 + J_2 - 2$ , необходимо воспользоваться одним из трех возможных способов выбора  $M_1$  и  $M_2$ . Все три данных варианта оказываются различными, откуда следует, что результирующее состояние представляет собой линейную комбинацию. При последующем уменьшении суммарного  $M$  можно достигнуть минимального значения момента  $J$ .

Таким образом, максимальное значение результирующего момента равно  $J_{\max} = J_1 + J_2$ , а минимального  $J_{\min} = |J_1 - J_2|$ . Для того чтобы проверить данное утверждение, можно сравнить совокупность базисных векторов в терминах подсистем:

$$N = (2J_1 + 1)(2J_2 + 1) , \quad (12.55)$$

с количеством базисных векторов результирующей системы:

$$\begin{aligned} N &= \sum_{J=J_1-J_2}^{J_1+J_2} (2J + 1) = 2J_2 + 1 + 2 \frac{J_1 - J_2 + J_1 + J_2}{2} (2J_2 + 1) = \\ &= (2J_1 + 1)(2J_2 + 1) , \end{aligned} \quad (12.56)$$

где для удобства  $J_1$  был выбран больше либо равным  $J_2$ .

Из (12.55) следует, что мы набрали необходимое число независимых базисных состояний в терминах квантовых чисел полного момента  $|JM\rangle$ . Коэффициенты линейной комбинации при этом нужны в реальных задачах и имеют специальное название коэффициентов векторного сложения, или коэффициентов Клеппи-Гордана. Более удобным способом введения операции сложения моментов является способ введения через  $3j$  символы Вигнера.

Вектор  $|JM\rangle$  должен быть разложен с помощью унитарной матрицы в линейную суперпозицию базиса  $|J_1 J_2 M_1 M_2\rangle$ :

$$|JM\rangle = \sum_{M_1 M_2} \langle M_1 M_2 | JM \rangle |M_1 M_2\rangle . \quad (12.57)$$

Коэффициенты  $\langle M_1 M_2 | JM \rangle$  называются коэффициентами векторного сложения. Аналогично тому, как было выполнено преобразование из базиса подсистем к базису результирующей системы, может быть выполнено и обратное преобразование,

поскольку базисы являются равноправными:

$$|M_1 M_2\rangle = \sum_{\substack{J=|J_1-J_2| \\ M=M_1+M_2}}^{J_1+J_2} \langle JM|M_1 M_2\rangle |JM\rangle, \quad (12.58)$$

при этом коэффициенты векторного сложения представляют собой унитарные матрицы, и для них имеет место следующее свойство:

$$\delta_{JJ'} \delta_{MM'} = \sum_{M_1 M_2} \langle J' M'|M_1 M_2\rangle \langle M_1 M_2|JM\rangle. \quad (12.59)$$

Условие (12.59) представляет собой условие ортогональности. Аналогично (12.59), может быть записано и следующее соотношение:

$$\delta_{M_1 M'_1} \delta_{M_2 M'_2} = \sum_{JM} \langle M'_1 M'_2|JM\rangle \langle JM|M_1 M_2\rangle. \quad (12.60)$$

Самой правильной формой записи для коэффициентов векторного сложения является следующий вид записи:

$$\langle M_1 M_2|JM\rangle = (-1)^{J_1+J_2-M} \sqrt{2J+1} \begin{pmatrix} J_1 & J_2 & J \\ M_1 & M_2 & -M \end{pmatrix}, \quad (12.61)$$

где была использована форма записи через  $3j$ -символы, которые являются основным предметом работы в теории групп.

## Неприводимые тензоры

Далее перейдем к следующему немаловажному разделу под названием неприводимые тензоры. Тензор представляет собой физическую величину, имеющую определенный закон преобразования при изменении системы координат. Тензорный анализ и тензорная классификация физических величин очень удобны, потому что тензорные законы изменения величин являются универсальными. Будем исследовать простейший случай, рассматривая преобразования тензоров с помощью группы вращений. Из общей физики известно, что тензора относительно группы вращений представляют собой классификацию по закону преобразования. Простейшим законом преобразования при поворотах является скаляр, за ним следует вектор, далее - квадруполь и т.д. .

## Скаляр

Начнем наше рассмотрение со скаляра. Скаляр является величиной, не меняющейся при поворотах. С точки зрения квантовой механики это означает, что если величина  $F$  реализована в качестве оператора, то поскольку любая величина при поворотах унитарно преобразуется соответствующим оператором поворота, величина  $F$  перейдет в величину  $F' = F$  следующим образом:

$$F \longrightarrow F' = U^+(\vec{\varphi}) F U(\vec{\varphi}) = F . \quad (12.62)$$

Рассмотрим инфинитезимальный поворот, для которого оператор  $U$  запишется в следующем виде:

$$U(\delta\vec{\varphi}) = 1 - \frac{i}{\hbar} \delta\vec{\varphi} \vec{J} . \quad (12.63)$$

В таком случае выражение (12.62) может быть переписано следующим образом:

$$F' = \left(1 + \frac{i}{\hbar} \delta\vec{\varphi} \vec{J}\right) F \left(1 - \frac{i}{\hbar} \delta\vec{\varphi} \vec{J}\right) = F + \frac{i}{\hbar} \delta\vec{\varphi} [\vec{J}, F] + O(\delta\varphi^2) . \quad (12.64)$$

Как видно из выражения (12.64), если оставлять в выражении члены вплоть до линейного, то в таком случае, для того чтобы величина  $F$  сохранялась, достаточно поставить условие на равенство нулю коммутатора:

$$[F, J_i] = 0 . \quad (12.65)$$

Следовательно, для того чтобы величина являлась скаляром, она должна коммутировать со всеми тремя компонентами углового момента.

Как только в квантовой механике появляется скалярная величина, для нее возникают так называемые правила отбора, которые являются очень удобными для конкретных практических приложений. Более того, для скаляра эти правила отбора являются очень показательными. Если рассматривать матричный элемент типа  $\langle \gamma', J' M' | F | \gamma, J M \rangle$ , где  $\gamma$  соответствует всем квантовым числам, которые не относятся к угловым (например, главное квантовое число, четность и т. д.), то для скаляра он будет равен:

$$\langle \gamma', J' M' | F | \gamma, J M \rangle = \delta_{J'J} \delta_{M'M} \langle \gamma' J' | F | \gamma J \rangle . \quad (12.66)$$

Матричный элемент (12.66) называется приведенным матричным элементом. Данный матричный элемент зависит от квантового числа  $J$  и не зависит от  $M$ .

Поскольку выполняются коммутационные соотношения (12.65), то и коммутатор:

$$[F, \vec{J}^2] = 0 . \quad (12.67)$$

Тогда вычислим матричный элемент  $\langle J' M' | [F, \vec{J}^2] | J M \rangle$ :

$$\langle J' M' | [F, \vec{J}^2] | J M \rangle = \langle J' M' | F \vec{J}^2 - \vec{J}^2 F | J M \rangle . \quad (12.68)$$

Оператор  $\vec{J}^2$  может действовать как налево, в результате чего получится слагаемое с  $J' (J' + 1)$ , так и направо, в результате чего появится слагаемое  $J (J + 1)$ . Следовательно, (12.68) может быть преобразовано к следующему виду:

$$\langle J' M' | [F, \vec{J}^2] | J M \rangle = (J (J + 1) - J' (J' + 1)) \langle J' M' | F | J M \rangle = 0 . \quad (12.69)$$

Поскольку ответ в (12.69) представляет собой произведение двух слагаемых, то либо один из них должен быть равен нулю, либо другой. В случае, если  $J \neq J'$ , то левая скобка в выражении не равна нулю, и нулю должен быть равен матричный элемент. В случае, когда  $J = J'$ , скобка  $J (J + 1) - J' (J' + 1)$  обращается в нуль, а матричный элемент может быть не равен нулю. Аналогичные действия можно выполнить и для оператора третьей проекции момента  $J_z$ , поскольку из (12.65) следует, что  $[F, J_z] = 0$ . В таком случае при действии налево оператора  $J_z$  будет появляться собственное значение  $M'$ , а при действии направо -  $M$ , и далее можно рассуждать аналогично случаю с оператором  $J^2$ .

Из (12.65) также следует равенство нулю следующего коммутатора с оператором  $J_+$ :

$$[F, J_+] = 0 . \quad (12.70)$$

Аналогичное соотношение выполняется и для  $J_-$ .

Рассмотрим матричный элемент  $\langle J M + 1 | [F, J_+] | J M \rangle$ , где матричный элемент выбран с учетом того, что действие оператора  $J_+$  изменяет квантовое число третьей проекции углового момента на единицу:

$$\langle J M + 1 | [F, J_+] | J M \rangle = \langle J M + 1 | F J_+ - J_+ F | J M \rangle . \quad (12.71)$$

Далее матричный элемент можно представить в виде разности матричных элементов:

$$\langle J M + 1 | [F, J_+] | J M \rangle = \langle J M + 1 | F J_+ | J M \rangle - \langle J M + 1 | J_+ F | J M \rangle . \quad (12.72)$$

В первом слагаемом (12.72) оператор  $J_+$  будет действовать направо, повышая при этом значение квантового числа  $M$  на единицу. Второе слагаемое может быть преобразовано следующим образом:

$$\langle JM + 1 | J_+ F | JM \rangle = \langle JM | F J_- | JM + 1 \rangle, \quad (12.73)$$

где была использована операция сопряжения, но, поскольку матричный элемент вещественный, знак сопряжения можно опустить.

После преобразования (12.73) оператор  $J_-$  будет действовать направо, понижая значение квантового числа  $M + 1$  на единицу. В результате  $\langle JM + 1 | [F, J_+] | JM \rangle$  преобразуется к виду (см. (12.1) и (12.3)):

$$\begin{aligned} \langle JM + 1 | [F, J_+] | JM \rangle &= \sqrt{(J - M)(J + M + 1)} \times \\ &\times (\langle JM + 1 | F | JM + 1 \rangle - \langle JM | F | JM \rangle). \end{aligned} \quad (12.74)$$

Из равенства нулю матричного элемента следует, что если сократить корень в выражении, то можно получить следующее равенство:

$$\langle JM + 1 | F | JM + 1 \rangle = \langle JM | F | JM \rangle. \quad (12.75)$$

Матричные элементы в (12.75) представляют собой приведенные матричные элементы, и, как следует из равенства в (12.75), приведенный матричный элемент не зависит от значения  $M$ .

## Вектор

Следующим по сложности неприводимым тензором является вектор. Вектор по своему смыслу является аналогом обыкновенного радиус-вектора, поскольку при преобразованиях поворота они ведут себя аналогичным образом.

В нашем случае вектор является трехиндексным оператором  $\{A_i\}_{i=1}^3$ , который обладает следующим свойством:

$$[J_i, A_j] = i \epsilon_{ijk} A_k. \quad (12.76)$$

Далее проверим, что наша трехиндексная величина  $A$  будет преобразовываться как вектор. Для этого рассмотрим преобразование вокруг произвольной оси, которую мы выберем за ось  $z$ . Тогда  $\vec{A}$  преобразуется к  $\vec{A}'$  следующим образом:

$$\vec{A} \longrightarrow \vec{A}' = U^+(\varphi) \vec{A} U(\varphi) = e^{i\varphi J_z} \vec{A} e^{-i\varphi J_z}. \quad (12.77)$$

Из выражения (12.77) сразу видно, что  $z$  компонента вектора  $\vec{A}$  не будет изменяться при повороте. Это можно получить и из (12.76), откуда следует следующее коммутационное соотношение:

$$[A_z, J_z] = 0 . \quad (12.78)$$

В силу равенства коммутатора (12.78) нулю может быть получено следующее равенство:

$$A'_z = A_z , \quad (12.79)$$

где данное выражение имеет такой вид, поскольку, благодаря (12.78), перестановка  $A_z$  с  $J_z$  становится возможной.

Для компонент  $A_x$  и  $A_y$  преобразование вращения для рассматриваемого случая будет записываться следующим образом:

$$\begin{cases} A'_x = e^{i\varphi J_z} A_x e^{-i\varphi J_z} \\ A'_y = e^{i\varphi J_z} A_y e^{-i\varphi J_z} \end{cases} . \quad (12.80)$$

Далее вычислим производные от выражений (12.80). Для компоненты  $A'_x$  можно записать:

$$\frac{dA'_x}{d\varphi} = i e^{i\varphi J_z} [J_z, A_x] e^{-i\varphi J_z} = -A'_y(\varphi) , \quad (12.81)$$

где коммутатор  $[J_z, A_x]$  вычисляется следующим образом:

$$[J_z, A_x] = i \epsilon_{zxy} A_y = i A_y . \quad (12.82)$$

Далее продифференцируем компоненту  $A'_y$ :

$$\frac{dA'_y}{d\varphi} = i e^{i\varphi J_z} [J_z, A_y] e^{-i\varphi J_z} = A'_x(\varphi) , \quad (12.83)$$

где коммутатор  $[J_z, A_y]$  равен:

$$[J_z, A_y] = i \epsilon_{zyx} A_x = -i A_x . \quad (12.84)$$

Далее продифференцируем выражения (12.81) и (12.83) ещё раз, после чего получим уравнения на компоненты  $A_x$  и  $A_y$ :

$$\begin{cases} \frac{d^2 A'_x}{d\varphi^2} + A'_x = 0 \\ \frac{d^2 A'_y}{d\varphi^2} + A'_y = 0 \end{cases} \quad (12.85)$$

Уравнения (12.85) могут быть решены с учетом начальных условий, при этом для каждого из уравнений необходимо учитывать два условия: на производную и на саму функцию:

$$\begin{cases} A'_x(0) = A_x \\ \frac{dA'_x}{d\varphi}(0) = -A_y \\ A'_y(0) = A_y \\ \frac{dA'_y}{d\varphi}(0) = A_x \end{cases} \quad (12.86)$$

Так, при учете начальных условий (12.86) решения для компонент  $A_x$  и  $A_y$  будет иметь следующий вид:

$$\begin{cases} A'_x(\varphi) = A_x \cos \varphi - A_y \sin \varphi \\ A'_y(\varphi) = A_x \cos \varphi + A_y \sin \varphi \end{cases} \quad (12.87)$$

Так образом, из (12.87) следует, что вектор  $\vec{A}$  ведет себя так же, как и радиус-вектор, что соответствует определению вектора.

Для вектора так же существуют правила отбора. Для их правильного вывода необходимо воспользоваться соображениями теории групп и с её помощью вывести дополнительные правила отбора. В нашем же рассмотрении мы будем использовать двойной коммутатор следующего вида:

$$[\vec{J}^2, [\vec{J}^2, A_i]] = 2(\vec{J}^2 A_i + A_i \vec{J}^2) - 4J_i(\vec{A} \vec{J}) . \quad (12.88)$$

**Замечание 12.6.** После выполнения проверки того, что коммутационные соотношения определяют величину  $\vec{A}$  в качестве вектора, следует отметить, что если есть два вектора  $\vec{A}$  и  $\vec{B}$ , то есть и два оператора с тремя компонентами, и, поскольку закон их преобразования при поворотах один и тот же, произведение  $\vec{A}$  и  $\vec{B}$ , как и для обычных векторов, будет скаляром:

$$F = \vec{A} \vec{B} . \quad (12.89)$$

Помимо этого, есть ещё одно очень полезное соотношение, которое связано с тем, что оператор  $J$  представляет собой вектор, поскольку он удовлетворяет коммутационным соотношениям (12.76), а следовательно его скалярное произведение с любым вектором будет давать в ответе скаляр. При этом будет верно следующее равенство:

$$\vec{J} \vec{A} = \vec{A} \vec{J} , \quad (12.90)$$

поскольку коммутатор операторов  $[\vec{J}, \vec{A}]$  равен нулю, так как символ Леви - Чивиты в (12.76) для всех трех компонент будет с двумя одинаковыми индексами, и, следовательно, он будет равен нулю.

Вычислим матричные элементы  $\langle JM | [\vec{J}^2, [\vec{J}^2, A_i]] | JM' \rangle$ :

$$\langle JM | [\vec{J}^2, [\vec{J}^2, A_i]] | JM' \rangle = \langle JM | \vec{J}^2 [\vec{J}^2, A_i] - [\vec{J}^2, A_i] \vec{J}^2 | JM' \rangle . \quad (12.91)$$

В выражении (12.91) один из операторов  $\vec{J}^2$  будет действовать налево, а второй оператор - направо, при этом возникнут множители  $J(J+1)$ . Поскольку квантовое число  $J$  в бра- и кет- векторах одно и то же, то ответом для (12.91) будет нуль. С другой стороны, если учесть соотношение (12.88), то ответ для матричного элемента будет иметь следующий вид:

$$\langle JM | [\vec{J}^2, [\vec{J}^2, A_i]] | JM' \rangle = 4J(J+1) \langle JM | A_i | JM' \rangle - 4 \langle JM | J_i | JM' \rangle \langle J | \vec{A} \vec{J} | J \rangle , \quad (12.92)$$

где было выполнено следующее преобразование для  $\langle JM | J_i (\vec{J} \vec{A}) | JM' \rangle$ , возникающего при вычислении матричного элемента от правой части (12.88):

$$\langle JM | J_i (\vec{J} \vec{A}) | JM' \rangle = \sum_{M''} \langle JM | J_i | JM'' \rangle \langle JM'' | \vec{J} \vec{A} | JM' \rangle = \langle JM | J_i | JM' \rangle \langle J | \vec{J} \vec{A} | J \rangle , \quad (12.93)$$

где было учтено, что  $J_i (\vec{J} \vec{A})$  является скаляром, для которого выполняются все правила отбора для скаляров, откуда следует, что матричный элемент можно свести к приведенному матричному элементу.

Далее приравняем правую часть (12.92) к нулю, сократим на множитель 4 и перепишем ответ в следующем виде:

$$\langle \gamma, JM | A_i | \gamma', JM' \rangle = \langle JM | J_i | JM' \rangle \frac{\langle \gamma J | \vec{A} \vec{J} | \gamma' J \rangle}{J(J+1)} , \quad (12.94)$$

где в матричных элементах было добавлено квантовое число  $\gamma$ , которое не имеет отношения к угловым квантовым числам, как это уже было оговорено ранее.

Выражение (12.94) представляет собой первую наиболее широко используемую формулу или частный случай теоремы Вигнера-Экхарта о неприводимых тензорах.

Если убрать обкладки матричных элементов, то частный случай теоремы будет выглядеть следующим образом:

$$\vec{A} = \vec{J} \frac{\vec{J} \vec{A}}{\vec{J}^2} . \quad (12.95)$$

## Лекция 13. Неприводимые тензоры (продолжение).

### Квантовая телепортация

#### Неприводимые тензоры

##### Векторы (продолжение)

В предыдущей лекции нами был рассмотрен такой неприводимый тензор, как вектор. Для того чтобы сформулировать правила отбора для векторов, необходимо было использовать двойной коммутатор следующего вида:

$$\left[ \vec{J}^2, \left[ \vec{J}^2, A_i \right] \right] = 2 \left( \vec{J}^2 A_i + A_i \vec{J}^2 \right) - 4J_i \left( \vec{J} \vec{A} \right). \quad (13.1)$$

Матричный элемент, где  $J$  слева и справа одинаковы, также был рассмотрен в предыдущей лекции. Также получена и основная формула Вигнера-Экхарта, которая часто используется в приложениях.

Помимо этого, была записана удобная для использования внутри матричных элементов замена

$$\vec{A} \longrightarrow \vec{J} \frac{\vec{J} \vec{A}}{\vec{J}^2}. \quad (13.2)$$

Далее рассмотрим другой тип матричных элементов:

$$\left\langle J' M' \left| \left[ \vec{J}^2, \left[ \vec{J}^2, A_i \right] \right] \right| J M \right\rangle, \quad (13.3)$$

где, по условию,  $J \neq J'$ . Случай  $J = J'$  также был рассмотрен нами ранее.

В случае  $J \neq J'$  второе слагаемое (13.1) в матричном элементе обратится в нуль, поскольку оно представляет собой скаляр, для которого, по правилам отбора,  $J$  слева и справа должно быть одинаковым. При вычислении матричного элемента от двойного коммутатора  $\left[ \vec{J}^2, \left[ \vec{J}^2, A_i \right] \right]$  будет получаться следующий коэффициент перед матричным элементом  $\langle J' M' | A_i | J M \rangle$ :

$$\left( J' (J' + 1) \right)^2 - 2J' (J' + 1) J (J + 1) + \left( J (J + 1) \right)^2, \quad (13.4)$$

где данный ответ может быть получен, если изначально расписать двойной коммутатор таким образом, чтобы получились следующие слагаемые:  $\vec{J}^2 \left[ \vec{J}^2, A_i \right] - \left[ \vec{J}^2, A_i \right] \vec{J}^2$ , после чего один оператор  $\vec{J}^2$  будет действовать налево, а другой - направо. Впоследствии же будет необходимо расписывать уже сам коммутатор  $\left[ \vec{J}^2, A_i \right]$  как  $\vec{J}^2 A_i -$

$A_i \vec{J}^2$ . В таком случае снова один из операторов будет действовать на состояние  $|J'M'\rangle$ , а второй - на  $|JM\rangle$ .

Если воспользоваться выражением (13.2), то для  $\langle J'M' | \left[ \vec{J}^2, \left[ \vec{J}^2, A_i \right] \right] | JM \rangle$  может быть получено следующее равенство:

$$\langle J'M' | \left[ \vec{J}^2, \left[ \vec{J}^2, A_i \right] \right] | JM \rangle = 2(J'(J'+1) + J(J+1)) \langle J'M' | A_i | JM \rangle . \quad (13.5)$$

Приравняем получившееся в правой части (13.5) выражение к (13.4) умноженному на матричный элемент  $\langle J'M' | A_i | JM \rangle$ , поскольку эти выражения были получены для одного и того же матричного элемента  $\langle J'M' | \left[ \vec{J}^2, \left[ \vec{J}^2, A_i \right] \right] | JM \rangle$ . В таком случае, после переноса выражения в одну сторону относительно знака равенства, после преобразования коэффициентов перед матричным элементом получим, что

$$\left[ (J' - J)^2 - 1 \right] \left[ (J + J' + 1)^2 - 1 \right] \langle J'M' | A_i | JM \rangle = 0 . \quad (13.6)$$

Из уравнения (13.6) следует, что равенство выполняется либо в случае, когда матричный элемент  $\langle J'M' | A_i | JM \rangle$  равен нулю, либо когда равно нулю произведение коэффициентов перед матричным элементом:

$$\left[ (J' - J)^2 - 1 \right] \left[ (J + J' + 1)^2 - 1 \right] = 0 . \quad (13.7)$$

Выражение (13.7) обращается в нуль в случае, когда либо  $J = J' = 0$ , либо

$$J' - J = \Delta J = \pm 1 . \quad (13.8)$$

Случай  $J = J' = 0$  был рассмотрен нами ранее, поэтому, поскольку мы считаем, что  $J \neq J'$ , правая скобка (13.7) не будет обращаться в нуль, откуда следует, что условие (13.8) представляет собой единственный случай, когда матричный элемент будет отличен от нуля.

Помимо сформулированных нами правил отбора, существует ещё целый набор дополнительных условий, которые представляют собой предмет изучения теории групп. В силу того, что нам интересны именно реальные практические приложения, связанные с переходами, данные дополнительные правила отбора не представляют для нас интереса.

## Квадрупольный электрический момент

Далее рассмотрим один конкретный пример квадрупольного оператора, однако, поскольку данный оператор встречается достаточно не часто, разбирать подробно его мы не будем.

Для начала разберемся с общей классификацией тензоров второго ранга по отношению к группе вращения. Будем рассматривать тензор только с пространственными компонентами, т. е. когда индексы при  $A_{ij}$  принимают значения 1, 2 и 3. Такой тензор всегда может быть представлен в следующем виде:

$$A_{ij} = \frac{1}{2} (A_{ij} + A_{ji}) + \frac{1}{2} (A_{ij} - A_{ji}) = T_{ij} + \bar{T}_{ij} . \quad (13.9)$$

Выражение (13.9) представляет собой разложение тензора на симметричную и антисимметричную части.  $T_{ij}$  представляет собой симметричный тензор, а  $\bar{T}_{ij}$  - антисимметричный.  $\bar{T}_{ij}$  имеет три независимые компоненты, потому что диагональные компоненты равны нулю. Таким образом, над и под главной диагональю матрицы имеются три компоненты. Следовательно,  $\bar{T}_{ij}$  может быть записан следующим образом:

$$\bar{T}_{ij} = \epsilon_{ijk} C_k , \quad (13.10)$$

где  $C_k$  - некоторый вектор.

При этом  $C_i$  выражается через  $\bar{T}$  следующим образом:

$$C_i = \frac{1}{2} \epsilon_{ijk} \bar{T}_{jk} . \quad (13.11)$$

Поскольку  $C$  представляет собой вектор, то и антисимметричная часть тензора  $A$  будет представлять собой вектор. При этом симметричная часть может быть представлена в следующем виде:

$$T_{ij} = \tilde{T}_{ij} + \frac{1}{3} \delta_{ij} \text{Tr} T , \quad (13.12)$$

где  $\tilde{T}_{ij}$  равно:

$$\tilde{T}_{ij} = T_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \text{Tr} T , \quad (13.13)$$

где по определению след от матрицы  $\tilde{T}$  будет равен нулю.

Таким образом, разложение тензора  $A$  может быть записано следующим образом:

$$A_{ij} = \tilde{T}_{ij} + \bar{T}_{ij} + \frac{1}{3} \delta_{ij} \text{Tr} T . \quad (13.14)$$

$\tilde{T}$  имеет 5 независимых компонент, в то время как у обычного симметричного тензора их 6, а именно: главная диагональ и то, что находится над или под ней. Именно условие бесследности тензора приводит к пяти независимым компонентам. Пять компонент соответствует спину или угловому моменту - 2, поскольку по моменту система имеет вырождение  $2J + 1$ .

Из (13.14) следует, что тензор второго ранга в общем виде имеет 9 компонент: 3 на главной диагонали, 3 над и 3 под главной диагональю. При этом первое слагаемое в выражении (13.14) представляет собой бесследный тензор второго ранга, второе - вектор, а третье - скаляр.

Вернемся к рассмотрению электрического квадрупольного момента. Данный момент участвует в процессах переходов между энергетическими уровнями. В случае, когда переход запрещен в дипольном приближении, следующими по порядку малости будут являться квадрупольные переходы.

Тензор квадрупольного момента представляет собой тензор второго ранга, который будет строиться из компонент радиус-вектора. Введем величину  $\vec{n}$ , равную:

$$\vec{n} = \frac{\vec{r}}{r}. \quad (13.15)$$

Из (13.15) следует, что тензор квадрупольного момента будет строиться следующим образом:

$$Q_{ij} = er^2 \left( n_i n_j - \frac{1}{3} \delta_{ij} \right). \quad (13.16)$$

Тензор  $Q$  представляет собой симметричный бесследный тензор. Далее разберемся с тем, как вычислять матричные элементы вида  $\langle lm|Q_{ij}|l'm'\rangle$ , где достаточно ограничиться лишь орбитальными степенями свободы, поскольку  $Q$  представляет собой чисто координатный оператор.

Для того чтобы вычислять матричные элементы от  $Q_{ij}$ , необходимо сразу оговорить правила отбора по  $l$ . Данные правила отбора следуют напрямую из правил отбора по  $n$ , где  $n$  представляет собой вектор, следовательно,  $\Delta l = \pm 1$ . Напомним, что для скаляра правилом отбора является условие  $\Delta l = 0$ . Следовательно, общие правила отбора будут такими, что произведение  $n$  в комбинации будет давать условие  $\Delta l = 0, \pm 2$ , что получается в результате того, что действие каждого из  $n$  будет приводить к изменению  $\Delta l = \pm 1$ .

Для наиболее удобного вычисления матричных элементов будем использовать метод эквивалентных операторов. Стоит отметить, что данный метод сам по себе не имеет смысла, поскольку заменять один вектор на другой так просто нельзя, однако внутри матричных элементов, фиксированных квантовыми числами углового момента, в рассматриваемом нами случае это сделать можно. Заменяем слагаемое в скобках из выражения (13.16) следующим образом:

$$n_i n_j - \frac{1}{3} \delta_{ij} \rightarrow a \left[ l_i l_j + l_j l_i - \frac{2}{3} \delta_{ij} l^2 \right], \quad (13.17)$$

где  $a$  - некоторый переводной коэффициент. В выражении суммируются  $l_i l_j$  с  $l_j l_i$ , поскольку  $Q$  представляет собой симметричный тензор, а комбинация  $l_i l_j$  сама по себе не является симметричной.

Далее заметим, что рассматриваемый тензор обладает следующим свойством:

$$\vec{l} \vec{n} = \vec{n} \vec{l} = 0 . \quad (13.18)$$

Выражение (13.18) следует из определения величины  $l$ , поскольку  $l = [\vec{r} \times \vec{p}]$ , следовательно, справедливо следующее соотношение:

$$\epsilon_{ijk} r_j p_k r_i / r = \frac{1}{r} \epsilon_{ijk} r_i r_j p_k = 0 . \quad (13.19)$$

Перепишем тензор  $Q$  в следующем виде:

$$\bar{Q}_{ij} = \left( n_i n_j - \frac{1}{3} \delta_{ij} \right) , \quad (13.20)$$

где полученный тензор отличается от исходного отсутствием множителя  $er^2$ , который в рассматриваемом нами случае можно не учитывать.

Из (13.18) следует, что будет выполняться равенство

$$l_i \bar{Q}_{ij} l_j = -\frac{1}{3} \vec{l}^2 . \quad (13.21)$$

Свойство (13.21) является общим свойством тензора и должно сохраняться. Более того, из (13.21) можно найти коэффициент  $a$ .

Далее вычислим матричный элемент для  $\bar{Q}_{ij}$  в (13.21) и получим, что

$$a l_i \left[ l_i l_j + l_j l_i - \frac{2}{3} \delta_{ij} \vec{l}^2 \right] l_j = a \left( \vec{l}^2 \vec{l}^2 + l_i l_j l_i l_j - \frac{2}{3} \vec{l}^2 \vec{l}^2 \right) . \quad (13.22)$$

Упростим полученное выражение, а далее воспользуемся коммутационным соотношением для  $[l_j, l_i]$  и в результате получим, что

$$a \left( \frac{1}{3} \vec{l}^2 \vec{l}^2 + l_i (l_i l_j + i \epsilon_{jik} l_k) l_j \right) = a \left( \frac{1}{3} (\vec{l}^2)^2 + \vec{l}^2 \vec{l}^2 + i \epsilon_{jik} l_i l_k l_j \right) . \quad (13.23)$$

Далее преобразуем слагаемое  $\epsilon_{jik} l_i l_k l_j$  следующим образом:

$$\epsilon_{jik} l_i l_k l_j = \frac{1}{2} (\epsilon_{jik} l_i l_k + \epsilon_{jki} l_k l_i) l_j = \frac{1}{2} (\epsilon_{jik} [l_i, l_k]) l_j = \frac{1}{2} (\epsilon_{jik} i \epsilon_{ikm} l_m) l_j . \quad (13.24)$$

Далее воспользуемся следующим свойством произведения символов Леви-Чивиты:

$$\epsilon_{ijk} \epsilon_{ilm} = \delta_{jl} \delta_{km} - \delta_{jm} \delta_{kl} . \quad (13.25)$$

В таком случае произведение  $\epsilon_{jik} \epsilon_{ikm}$  можно переписать следующим образом:

$$\epsilon_{jik} \epsilon_{ikm} = \epsilon_{ikj} \epsilon_{ikm} = 2\delta_{jm} . \quad (13.26)$$

Из (13.26) может быть получен окончательный ответ для  $\epsilon_{jik} l_i l_k l_j$ :

$$\epsilon_{jik} l_i l_k l_j = \frac{1}{2} (2i \delta_{jm} l_m) l_j = i \vec{l}^2 . \quad (13.27)$$

Далее подставим (13.27) в выражение для матричного элемента и получим, что

$$a l_i \left[ l_i l_j + l_j l_i - \frac{2}{3} \delta_{ij} \vec{l}^2 \right] l_j = a \left( \frac{4}{3} l(l+1) - 1 \right) l(l+1) . \quad (13.28)$$

Вспомним соотношение (13.21), с помощью которого получим следующее выражение для определения коэффициента  $a$ :

$$a \left( \frac{4}{3} l(l+1) - 1 \right) = -\frac{1}{3} , \quad (13.29)$$

откуда коэффициент  $a$  оказывается равным:

$$a = -\frac{1}{(2l+3)(2l-1)} . \quad (13.30)$$

Таким образом, для  $\bar{Q}_{ij}$  окончательное выражение будет иметь вид

$$\bar{Q}_{ij} = -\frac{1}{(2l+3)(2l-1)} \left[ l_i l_j + l_j l_i - \frac{2}{3} \delta_{ij} \vec{l}^2 \right] . \quad (13.31)$$

На семинарах будет разобрана тема вычисления матричных элементов от оператора квадрупольного момента. Данные матричные элементы имеют прямое отношение к матричным элементам от атомных электронов по кулоновскому состоянию  $|nlm\rangle$ . Стоит отметить, что при вычислении матричных элементов множитель  $er^2$  будет представлять собой скаляр, который не будет зависеть от квантового числа  $m$ .

Рассмотрим некоторые свойства тензора квадрупольного момента. Как известно

$$\langle Q_{xx} \rangle = \langle Q_{yy} \rangle = -\frac{1}{2} \langle Q_{zz} \rangle , \quad (13.32)$$

где осью квантования является ось  $z$  и по отношению к оси  $z$   $x$  и  $y$  являются равноправными компонентами.

$\langle Q_{zz} \rangle$  при этом задается выражением:

$$\langle Q_{zz} \rangle = a \left( 2m^2 - \frac{2}{3} l(l+1) \right) . \quad (13.33)$$

Для недиагональных компонент вклад в выражении от символа Кронекера будет отсутствовать, а второе слагаемое в выражении для компонент тензора  $Q$  будет обращаться в нуль, поскольку собственные значения  $l_x$  и  $l_y$  равняются нулю в базисе  $|lm\rangle$ . Таким образом, получим, что

$$\langle Q_{zx} \rangle = \langle Q_{zy} \rangle = 0. \quad (13.34)$$

Для вычисления  $\langle Q_{xy} \rangle$  необходимо перейти в координатное представление и выполнить интегрирование по радиальной и угловой части. Слагаемое с символом Кронекера, аналогично случаям вычисления  $\langle Q_{zx} \rangle$  и  $\langle Q_{zy} \rangle$ , будет обращаться в нуль. В оставшееся слагаемое необходимо в явном виде подставить компоненты  $n_x$  и  $n_y$ . В результате выполнения такой подстановки возникнет множитель  $\sin 2\varphi$ , который при интегрировании в пределах от 0 до  $2\pi$  обратится в нуль, откуда следует, что

$$\langle Q_{xy} \rangle = 0. \quad (13.35)$$

Важность рассмотрения квадрупольного момента заключается в том, что в задаче о переходах в случае, если дипольные переходы являются запрещенными, квадрупольные переходы разрешены. Если сравнивать квадрупольные переходы с дипольными, то они окажутся меньше по амплитуде в тысячу раз и, соответственно, в миллион раз слабее по интенсивности.

## Оператор четности

Далее рассмотрим оператор  $P$ , который называется оператором четности. Редукция задачи по четности в некоторых случаях позволяет сильно ее упростить. Так, например, правила отбора по четности в случае, если система состоит из двухсот уравнений, позволяют уменьшить количество уравнений до ста. Помимо этого, операция четности входит в набор СРТ, представляющий собой три базовые дискретные операции, которые фигурируют в качестве основных симметрий.

Само по себе действие оператора  $P$  эквивалентно выполнению операции пространственной инверсии, т. е. следующей замене:

$$\vec{r} \rightarrow -\vec{r}. \quad (13.36)$$

Операция пространственной инверсии различается в зависимости от числа измерений пространства. Так, если число измерений является нечетным, то операция

пространственной инверсии представляет собой дискретную операцию, которая не может быть сведена к вращению. В случае четного числа измерений можно свести операцию пространственной инверсии к повороту на угол  $\pi$ .

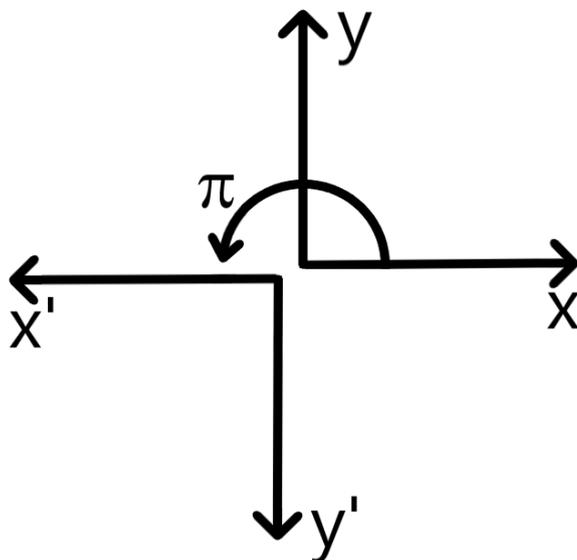


Рис. 13.1. Операция пространственной инверсии на плоскости

Стоит отметить, что четные пространства устроены отличным от нечетных пространств образом, благодаря чему, например, на плоскости могут существовать так называемые энионы, которые были предсказаны еще в конце 80-х годов прошлого века практически одновременно с обнаружением керамических сверхпроводников. Спустя некоторое время на рентгеноструктурном анализе выяснилось, что данный тип сверхпроводников устроен как совокупность отдельных плоскостей, т. е. имеет слоистую структуру. Обязательной компонентой любого керамического сверхпроводника при этом является слой  $\text{CuO}$ , а вторую плоскость составляют редкоземельные металлы. Самыми известными из керамических сверхпроводников являются  $\text{LaBaCuO}$  и  $\text{YBaCuO}$ . При этом сверхпроводники с  $\text{Y}$  имели критическую температуру сверхпроводника ( $\sim 90$  К) выше температуры кипения жидкого азота ( $\sim 70$  К). Объяснение такой высокой критической температуры связывали с квазиплоской структурой сверхпроводника. Стоит также отметить, что на плоскости из-за того, что операция пространственной инверсии может быть представлена как поворот на угол  $\pi$ , статистики Бозе-Эйнштейна и Ферми-Дирака не „работают“. Статистика энионов является промежуточной между статистиками ферми и бозе частиц, причем конкретный вид статистики зависит от типа квазиплоскости.

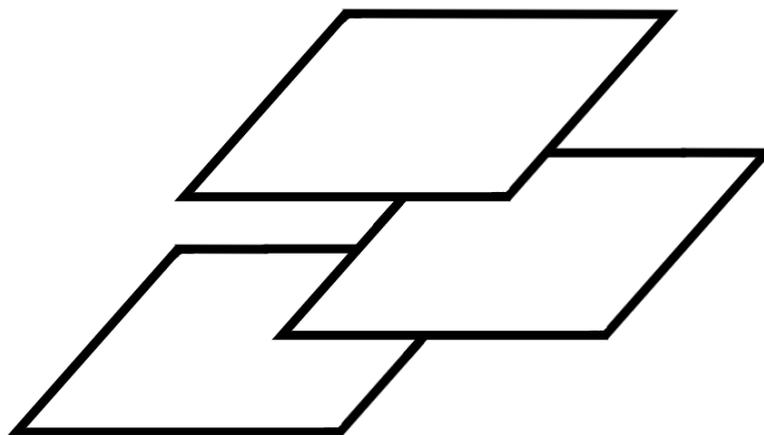


Рис. 13.2. Слоистая структура керамических сверхпроводников

Далее перейдем к более детальному рассмотрению оператора четности и будем рассматривать уже трехмерное пространство. При действии оператора  $P$  на волновую функцию радиус вектор в аргументе волновой функции поменяет свой знак на противоположный, откуда следует, что

$$\psi(\vec{r}) \longrightarrow P\psi(\vec{r}) = \psi(-\vec{r}) . \quad (13.37)$$

Оператор  $P$  при этом, по определению, является эрмитовым, т. е. для него верно следующее равенство:

$$P = P^+ . \quad (13.38)$$

Кроме того, квадрат от оператора  $P$  должен быть равен единице, поскольку при двойном пространственном отражении частица должна вернуться в начальное положение, откуда следует, что:

$$P^2 = 1 \longrightarrow P\psi_\lambda = \lambda\psi_\lambda , \quad (13.39)$$

где собственные значения оператора  $P$  оказываются равными:

$$\lambda = \pm 1 . \quad (13.40)$$

Таким образом, по отношению к оператору  $P$  возникает дополнительное деление всех тензоров по свойству реакции на преобразование четности.

Для скаляра нами было введено определение, основанное на группе вращений, т. е. на группе преобразований, которые могут быть как единичными, так и приводить к непрерывному повороту неприводимого тензора на любой угол. При этом для

скаляра существует общее утверждение, что при поворотах он не будет изменяться:

$$F \longrightarrow F' = U^+ F U = F . \quad (13.41)$$

Операция пространственной инверсии же в свою очередь при нечетной размерности пространства не может быть представлена как операция поворота, поскольку вращение начинается с единичного преобразования, а операция пространственной инверсии является дискретной и поэтому никак не может быть сведена к данному преобразованию. Таким образом, для операции пространственной инверсии возникает дополнительное разделение на скаляр и псевдоскаляр, которое возникает в случае, если преобразовать скаляр, подействовав на него оператором  $P$ :

$$F \longrightarrow F' = P^+ F P = \pm F . \quad (13.42)$$

Как видно из выражения (13.42), при действии оператора  $P$  возможны два значения  $F'$ . В таком случае, если в результате преобразования скаляр не изменяется, т. е. его СЗ  $\lambda$  равняется единице, то такой скаляр называется истинным. Случай же  $\lambda = -1$  соответствует псевдоскаляру.

Для вектора преобразование с использованием оператора  $P$  может быть записано в следующем виде:

$$\vec{A} \longrightarrow \vec{A}' = P^+ \vec{A} P = \mp \vec{A} . \quad (13.43)$$

Из (13.43) следует, что в случае изменения знака в результате преобразования перед вектором ( $\lambda = -1$ ), данный вектор будет называться истинным. Псевдовектор же при преобразовании своего знака не изменяет ( $\lambda = 1$ ).

Простейшими примерами псевдовектора являются магнитное поле, а также момент  $[\vec{r} \times \vec{p}]$ , примерами же истинного вектора могут служить радиус-вектор, вектор импульса и скорости. Для получения псевдоскаляра нужно скалярно умножить вектор на псевдовектор, а для получения истинного скаляра необходимо умножить либо истинный вектор на истинный вектор, либо псевдовектор на псевдовектор.

Для скаляров, векторов и других тензоров или псевдотензоров, имеющих определенный закон преобразования относительно четности, существуют простые и удобные правила отбора. Рассмотрим матричные элементы от различных видов тензоров. Начнем рассмотрение скаляра и запишем для него матричный элемент следующим образом:

$$\langle \psi_\lambda | F | \psi_{\lambda'} \rangle = \langle \psi_\lambda | P^{+2} F P^2 | \psi_{\lambda'} \rangle = \lambda \lambda' \langle \psi_\lambda | P^+ F P | \psi_{\lambda'} \rangle = \lambda \lambda' \langle \psi_\lambda | \pm F | \psi_{\lambda'} \rangle , \quad (13.44)$$

где изначально было использовано свойство равенства квадрата оператора  $P$  единице. Далее операторы  $P^+$  и  $P$  действовали на бра и кет вектора состояния, соответственно, в результате чего перед скобкой появился множитель  $\lambda \lambda'$ . Оставшуюся в матричном элементе конструкцию  $P^+ F P$  была преобразована на основе равенства (13.42).

Таким образом, из (13.44) следуют следующие условия на произведение  $\lambda \lambda'$  для того, чтобы матричный элемент  $\langle \psi_\lambda | F | \psi_{\lambda'} \rangle$  был отличен от нуля:

$$\begin{cases} \lambda \lambda' = 1 & - \text{ истинный скаляр} \\ \lambda \lambda' = -1 & - \text{ псевдоскаляр} \end{cases} \quad (13.45)$$

где в случае истинного вектора в матричном элементе в выражении (13.44) величина  $F$  будет со знаком плюс, в результате чего произведение  $\lambda \lambda'$  будет равняться единице, а в случае псевдоскаляра перед  $F$  появится знак минус, из-за чего произведение  $\lambda \lambda'$  будет равно -1.

Если провести аналогичные рассуждения для вектора, то ответ для произведения  $\lambda \lambda'$  будет записан в следующем виде:

$$\begin{cases} \lambda \lambda' = -1 & - \text{ истинный вектор} \\ \lambda \lambda' = 1 & - \text{ псевдовектор} \end{cases} \quad (13.46)$$

Далее ответим на следующий вопрос: какую четность имеет орбитальное состояние с фиксированным  $l$ ? Данный вопрос возникает в силу острой необходимости использования четности в атомной физике, поскольку все атомные состояния непосредственно связаны с ней. В рассматриваемом нами сферически симметричном случае, как известно, волновая функция может быть представлена в виде произведения радиальной части на сферическую функцию:

$$\psi(\vec{r}) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) . \quad (13.47)$$

При выполнении операции пространственной инверсии в сферической системе координат координаты будут заменяться следующим образом:

$$\begin{cases} r \rightarrow r \\ \theta \rightarrow \pi - \theta \\ \varphi \rightarrow \varphi + \pi \end{cases} \quad (13.48)$$

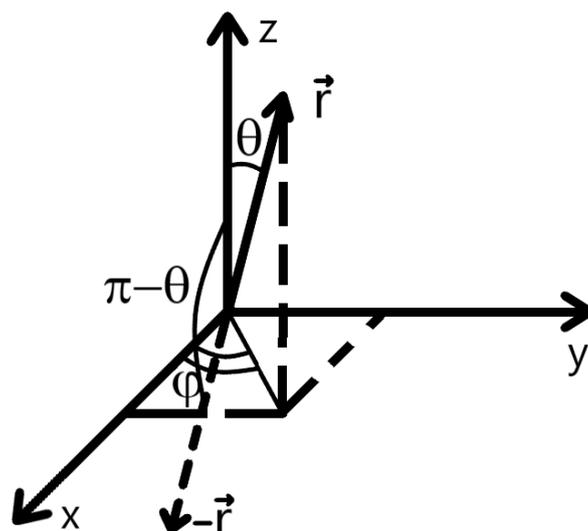


Рис. 13.3. Операция пространственной инверсии в сферической системе координат

Из системы замен (13.48) следует, что при выполнении операции пространственной инверсии радиальная часть волновой функции остается неизменной, в то время как угловая часть будет претерпевать следующие изменения:

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) \longrightarrow Y_{lm}(\pi - \theta, \varphi + \pi) . \quad (13.49)$$

Далее вспомним выражение для сферической функции и запишем его для новых аргументов:

$$Y_{lm}(\pi - \theta, \varphi + \pi) = (-1)^m N_{lm} P_l^m(-\cos \theta) e^{im(\varphi + \pi)} . \quad (13.50)$$

Из равенства (13.50) следует, что перед исходной сферической функцией возникнет множитель  $(-1)^l$ , откуда будет следовать, что

$$Y_{lm}(\pi - \theta, \varphi + \pi) = (-1)^l Y_{lm}(\theta, \varphi) , \quad (13.51)$$

где для нахождения множителя  $(-1)^l$  удобно использовать следующую запись для  $P_l^m$ :

$$P_l^m(\cos \theta) = \sin^m \theta \frac{\partial^m}{\partial \cos^m \theta} P_l(\cos \theta) \rightarrow (-1)^m (-1)^l . \quad (13.52)$$

Если рассматривать задачу об определении дипольного момента атома с внешним электроном над заполненной оболочкой в состоянии с квантовыми числами  $l$  и  $m$ , то ответ для среднего дипольного момента будет отличен от нуля только тогда, когда нечетный набор с очевидностью будет равен нулю, поскольку мы получим среднее по состоянию с одной и той же четностью. Полученный ответ верен и для

любой более сложной конфигурации оболочки. Если оболочка обладает фиксированной четностью, то любой средний дипольный момент будет равен нулю, в то время как среднее от магнитного момента будет отлично от нуля. Кроме того, суммарный момент в терминах орбитального момента меняется в пределах:

$$l = l_1 + l_2, \dots, |l_1 - l_2|. \quad (13.53)$$

Из (13.53) следует, что для всей совокупной системы выполняется следующее условие

$$(-1)^l \neq (-1)^{l_1} (-1)^{l_2} \dots (-1)^{l_n}. \quad (13.54)$$

Иными словами, если рассматриваемая система собирается из подсистем с фиксированной четностью, то четность конечного результата не будет равна  $(-1)^l$ , а будет определяться четностями отдельных подсистем.

## Дипольный момент нейтрона

Далее рассмотрим одну крайне интересную тему под названием „дипольный момент нейтрона“, являющуюся предметом исследования большинства крупных лабораторий.

По определению, дипольный момент равен:

$$\vec{d} = e\vec{r}. \quad (13.55)$$

Как известно, у нейтрона отсутствует заряд, однако это не запрещает ему иметь дипольный момент, поскольку, например, система  $e^+e^-$  имеет суммарный заряд нуль, но при этом у нее существует дипольный момент. Если существование дипольного момента у нейтрона будет подтверждено, то сразу же возникнет множество интересных фактов и ответов на большое количество вопросов, однако до сих пор дипольный момент найден не был.

Предположим, что дипольный момент нейтрона существует, а затем в рамках оценочного рассмотрения попытаемся разобраться в том, к чему это может привести. Во-первых, наличие дипольного момента будет означать существование вектора, построенного по типу произведения  $e$  на  $\vec{r}$ . Во-вторых, в силу того что дипольный момент является пространственным вектором, он будет связан с какой-либо пространственной характеристикой нейтрона, которая тоже должна иметь векторную природу.

Единственным пространственным вектором, имеющимся у нейтрона, является его спин. Если попытаться придумать какой-либо специальный вектор, то его существование будет означать, что есть какое-то дополнительное отдельное специальное направление, которое является выделенным. Тем не менее, в эксперименте такого направления замечено не было. Из данных выводов следует, что единственное выражение для дипольного момента, которое мы можем записать для нейтрона, будет иметь следующий вид:

$$\vec{d} = \alpha \vec{s}, \quad (13.56)$$

где  $\alpha$  представляет собой псевдоскаляр, поскольку вектор дипольного момента представляет собой истинный вектор, что верно в силу того, что  $\vec{r}$  в выражении (13.55) для дипольного момента представляет собой истинный вектор. Величина же  $s$  является псевдовектором, поскольку она представляет собой момент, а, как известно, момент получается в результате векторного произведения  $[\vec{r} \times \vec{p}]$ , то есть он будет представлять собой результирующий вектор, который всегда будет являться псевдовектором. Отсюда следует, что закон преобразования величины  $\alpha$  оператором  $P$  должен иметь следующий вид:

$$P^+ \alpha P \longrightarrow -\alpha. \quad (13.57)$$

При этом очевидно, что спин - это обычный пространственный вектор, который не имеет никакой информации относительно заряда частицы. Диполь же, по определению, „знает“ про заряд все, что необходимо, и при замене знака заряда диполь так же поменяет знак. Замена знака заряда представляет собой так называемое  $C$ -сопряжение, т. е. переход от частицы к античастице. Отсюда следует, что если бы существовал антинейтрон, то его дипольный момент был бы направлен в другую сторону. Таким образом, величина  $\alpha$  должна быть нечетной относительно  $C$ -преобразования. На нашем этапе рассмотрения  $C$ -преобразование серьезно не разбиралось, однако оно обязательно появится в уравнении Дирака, поскольку  $C$ -преобразование представляет собой естественную операцию, и без нее нельзя понять смысла того, что содержится в уравнении Дирака. Таким образом, закон преобразования  $\alpha$  оператором  $C$  запишется следующим образом:

$$C^+ \alpha C \longrightarrow -\alpha. \quad (13.58)$$

Последнее преобразование, которое непременно стоит разобрать более подробно, представляет собой обращение времени. Диполь при таком преобразовании никак из-

меняться не должен, поскольку он представляет собой произведение  $e\vec{r}$ , а величина  $\vec{r}$  на обращение времени никак не „реагирует“. Спин в свою очередь будет менять знак при таком преобразовании, поскольку момент получается в результате векторного произведения  $[\vec{r} \times \vec{p}]$ , в котором величина  $\vec{p}$ , по определению, равняется  $m\frac{dv}{dt}$ , и при обращении времени она поменяет знак, из чего следует, что и спин поменяет знак. Следовательно, закон преобразования  $\alpha$  в данном случае запишется как

$$T^+ \alpha T \rightarrow -\alpha . \quad (13.59)$$

Из написанного выше следует, что если ввести операцию  $CPT$ , которая известна в квантовой теории как  $CPT$ -преобразование, которое является наиболее надежной симметрией того, что знает человечество, поскольку  $CP$ -симметрия нарушается, например, в распадах каонов и ещё некоторых других процессах. Нарушения же  $CPT$  на данный момент обнаружено не было, и, кроме того,  $CPT$ -симметрия может быть доказана из самых общих принципов квантовой теории поля. Так, если доказать существование  $\alpha$ , то

$$(CPT)^+ \alpha CPT = -\alpha . \quad (13.60)$$

Из (13.60) следует, что коэффициент  $\alpha$  должен быть  $CPT$ -нечетной величиной, хотя с точки зрения того, что известно науке на сегодняшний день, все величины должны быть  $CPT$ -четными. Следовательно, в дипольном моменте дейтрона будет спрятан механизм нарушения  $CPT$ -симметрии. Однако дипольного момента нейтрона пока не был обнаружен, на данный момент известно лишь существовании квадрупольного момента, который является очень слабым, но существует за счет неидеального расположения кварков в нейтроне.

## Alice, Bob & Ancilla (Квантовая телепортация)

Далее перейдем к рассмотрению последней темы материала первого семестра, связанной с квантовой телепортацией. Рассмотрим простейший случай - компанию из трех предметов, объектов или существ. Одно из них исторически называется Алиса, второе - Боб, а третье Ансилла. Первоначальная работа, описание которой будет представлено далее, была написана в 1993 году и имеет название - Teleporting in simple systems.

Рассмотрим систему из трех спинов или трех фотонов. Проще всего работать со спинами, поскольку фотоны были рассмотрены нами не так подробно. Пусть изна-

чально летят три спина, которые мы будем называть либо Алиса, Боб, Ансилла, либо 1, 2 и 3.

Пусть первый спин - это Алиса. Тогда второй обязательно будет Ансиллой, что в переводе с греческого означает служанка, т. е. второй спин представляет собой служебную частицу или же служебный спин. В таком случае третий спин будет являться Бобом.

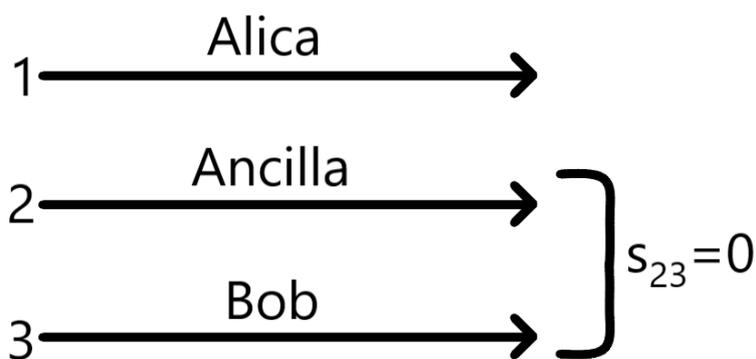


Рис. 13.4. Постановка задачи про квантовую телепортацию

Будем готовить трехспиновую конфигурацию таким образом, чтобы в исходном состоянии Ансилла и Боб были запутаны между собой в синглетное состояние.

Данное состояние может быть приготовлено многими способами. В частности, в настоящее время это очень качественно проделывается на фотонах с использованием нелинейных кристаллов. Процедура заключается в том, что один фотон запускается внутрь кристалла, где он за счет нелинейности кристалла делится на пару фотонов, которая образует перепутанную пару в виде синглета по поляризациям.

По-другому запутанность в синглет спинов 2 и 3 может быть записана в следующем виде:

$$s_{23} = 0, \quad (13.61)$$

где  $s_{23}$  представляет собой сумму  $s_2$  и  $s_3$ .

Состояние Алисы, или состояние  $s_1$ , будет записываться следующим образом:

$$|\phi_1\rangle = a|\uparrow_1\rangle + b|\downarrow_1\rangle, \quad (13.62)$$

где для коэффициентов  $a$  и  $b$  выполняется следующее условие:

$$|a|^2 + |b|^2 = 1. \quad (13.63)$$

Таким образом, состояние Алисы представляет собой суперпозицию двух чистых состояний с заранее неизвестными коэффициентами  $a$  и  $b$ .

После того, как мы приготовили начальное состояние, перемешиваем спин Ансиллы и спин Алисы и поставим прибор, который будет измерять их суммарный спин. В этот момент организуем у Боба измерение некоторой характеристики  $F$ , где под  $F$  можно понимать любую характеристику, относящуюся к Бобу и его спину.

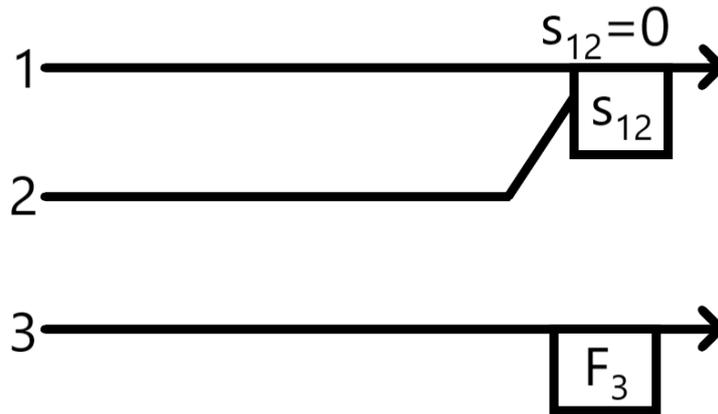


Рис. 13.5. Перемешивание состояний спинов 1 и 2 и измерение характеристики  $F$  у спина 3

В результате измерения суммарного спина Алисы и Ансиллы будем отбирать те события, для которых  $s_{12}$  будет равен нулю. Такой выбор отбора событий связан с тем, что нами рассматривается случай спинов  $1/2$ , и при их сложении возможно либо синглетное, либо триплетное состояние для  $s_{12}$ .

Далее поставим схему совпадений, которая при измерении величины  $F$  спина Боба будет отбирать те события, для которых  $s_{12}$  будет равен нулю.

Вспомним, что в случае  $s_1 = s_2 = 1/2$  суммарный спин  $S$  может принимать значения:

$$\vec{S} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2 = \begin{cases} 0 \\ 1 \end{cases} \quad (13.64)$$

Синглетное состояние при этом может быть записано в виде следующей комбинации:

$$|S = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [\uparrow_1 \downarrow_2 - \downarrow_1 \uparrow_2] . \quad (13.65)$$

Для триплетного состояния с нулевой третьей проекцией можно записать следу-

ющее выражение:

$$|S = 1, \sigma = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [\uparrow_1 \downarrow_2 + \downarrow_1 \uparrow_2] . \quad (13.66)$$

Для последующих выкладок так же рассмотрим скалярное произведение векторов  $\vec{s}_1$  и  $\vec{s}_2$ :

$$\vec{s}_1 \vec{s}_2 = \begin{cases} -\frac{3}{4}, & S = 0 \\ \frac{1}{4}, & S = 1 \end{cases} \quad (13.67)$$

где выражение для скалярного произведения может быть получено из выражения для квадрата суммарного спина  $S$ , который равен:

$$\vec{S}^2 = s_1^2 + s_2^2 + 2\vec{s}_1 \vec{s}_2 = \frac{3}{2} + 2\vec{s}_1 \vec{s}_2 = S(S + 1) , \quad (13.68)$$

откуда легко можно выразить следующее равенство:

$$\vec{s}_1 \vec{s}_2 = \frac{S(S + 1)}{2} - \frac{3}{4} . \quad (13.69)$$

Далее мы можем построить полезные для нас операторы проекции на синглет и триплет. Первый из операторов будет строиться следующим образом:

$$\Pi_{S=0} = \frac{1}{4} - \vec{s}_1 \vec{s}_2 . \quad (13.70)$$

В качестве проверки правильности построения оператора проекции можно подставить в (13.67) значение скалярного произведения для  $S = 0$  и убедиться в том, что в ответе будет получаться единица, а при подстановке  $S = 1$  - нуль. Для оператора проекции на триплетное состояние выражение будет иметь следующий вид:

$$\Pi_{S=1} = \vec{s}_1 \vec{s}_2 + \frac{3}{4} . \quad (13.71)$$

Аналогично случаю синглета, при подстановке  $\vec{s}_1 \vec{s}_2$  из (13.67) для  $S = 1$  получим в ответе единицу, а для  $S = 0$  - нуль.

Стоит также отметить, что сумма проекционных операторов будет равна единице, а скалярное произведение  $\vec{s}_1 \vec{s}_2$  сократится при суммировании.

Далее разберемся с тем, что происходит при работе схемы совпадений. Изначально нами было заготовлено трехспиновое состояние, или трехчастичное состояние: Алиса, Ансилла и Боб следующего вида:

$$\psi_{123} = |\phi_1\rangle \otimes |s_{23} = 0\rangle . \quad (13.72)$$

Измерение при этом может быть проведено в другом месте, в другое время, единственное условие заключается в том, чтобы не была потеряна когерентность, т. е., чтобы приготовленное в начальный момент времени состояние не было подвергнуто никаким воздействиям, которые бы испортили нам синглет по Алисе и Бобу, т. е. в момент измерения мы должны иметь дело с теми состояниями, которые мы создали в начальный момент времени. Как уже было написано ранее, измерение производится с учетом совпадения  $s_{12}$  с нулем, при этом, поскольку суммарный спин Алисы и Ансиллы измеряется на предмет того, является ли он синглетом или триплетом, то измерение должно дать единицу в случае, если состояние является синглетом, и нуль, если состояние является триплетом. Построим величину  $A$  как прямое тензорное произведение проектора на синглетное состояние по Алисе и Ансилле на измеряемое состояние некоторой величины, относящейся к Бобу:

$$A = \Pi_{s_{12}=0} \otimes F_3 . \quad (13.73)$$

Таким образом, процесс измерения соответствует поиску среднего от величины  $A$  по заготовленному нами состоянию  $\psi_{123}$ :

$$\langle \psi_{123} | A | \psi_{123} \rangle . \quad (13.74)$$

Для того чтобы понять каким будет ответ для среднего, необходимо переписать ответ для  $\psi_{123}$  в более удобном виде. Вспомним выражения (13.72) и (13.63) и запишем ответ для  $\psi_{123}$  в виде:

$$\psi_{123} = \frac{1}{\sqrt{2}} (a \uparrow_1 + b \downarrow_1) (\uparrow_2 \downarrow_3 - \downarrow_2 \uparrow_3) . \quad (13.75)$$

Далее преобразуем выражение (13.75) так, чтобы выделить из него синглетное состояние по Алисе и Ансилле. В таком случае  $\psi_{123}$  может быть записано как

$$\psi_{123} = \frac{1}{\sqrt{2}} [a \uparrow_1 (\uparrow_2 \downarrow_3 - \downarrow_2 \uparrow_3) + b \downarrow_1 (\uparrow_2 \downarrow_3 - \downarrow_2 \uparrow_3)] . \quad (13.76)$$

Раскроем скобки в (13.76) и получим, что

$$\psi_{123} = \frac{1}{\sqrt{2}} [a \uparrow_1 \uparrow_2 \downarrow_3 - a \uparrow_1 \downarrow_2 \uparrow_3 + b \downarrow_1 \uparrow_2 \downarrow_3 - b \downarrow_1 \downarrow_2 \uparrow_3] , \quad (13.77)$$

где в выражении зачеркнуты слагаемые  $a \uparrow_1 \uparrow_2 \downarrow_3$  и  $b \downarrow_1 \downarrow_2 \uparrow_3$ , поскольку они соответствуют триплету по состояниям Алисы и Ансиллы и поскольку при действии проектора на синглет по триплетному состоянию будет получаться нуль, из чего следует,

что и матричный элемент по данным состояниям будет равен нулю. Для двух оставшихся же состояний будем использовать запись в виде суперпозиции по синглетному и триплетному состояниям  $s_{12}$ . В таком случае для  $\uparrow_1\downarrow_2$  получим выражение

$$\uparrow_1\downarrow_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} [ |s_{12} = 0\rangle + |s_{12} = 1\rangle ] . \quad (13.78)$$

Для  $\downarrow_1\uparrow_2$  в свою очередь можно записать следующее:

$$\downarrow_1\uparrow_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} [ |s_{12} = 1\rangle - |s_{12} = 0\rangle ] . \quad (13.79)$$

В результате подстановки  $\psi_{123}$  в матричный элемент все, что связано с триплетом в выражениях (13.78) и (13.79), обратится в нуль, поэтому выражение для  $\psi_{123}$  может быть переписано в виде

$$\psi_{123} = \frac{1}{2} [ -a |s_{12} = 0\rangle \uparrow_3 - b |s_{12} = 0\rangle \downarrow_3 ] . \quad (13.80)$$

В таком случае матричный элемент от величины  $A$ , которую мы в реальности измеряем, можно записать как

$$\langle \psi_{123} | A | \psi_{123} \rangle = \frac{1}{4} \langle a \uparrow_3 + b \downarrow_3 | F_3 | a \uparrow_3 + b \downarrow_3 \rangle = \frac{1}{4} \langle \phi_3 | F_3 | \phi_3 \rangle , \quad (13.81)$$

где в выражении были опущены множители  $|s_{12} = 0\rangle$ , поскольку проектор  $\Pi_{s_{12}=0}$ , действуя на  $|s_{12} = 0\rangle$ , будет давать единицу. Таким образом, матричный элемент в выражении (13.81) будет вычисляться по состоянию  $|\phi_3\rangle$ , которое представляет собой суперпозицию чистых состояний спина Боба с коэффициентами  $a$  и  $b$ , которые были введены для состояния  $\phi_1$ . Более того, измерение представляет собой чистое измерение в том смысле, что если проверять дисперсию величины  $A$ , то мы убедимся в том, что дисперсия будет такой, как и в случае измерения дисперсии величины  $F$  в состоянии Алисы, что связано со следующим выражением:

$$A^2 = \Pi_{s_{12}=0}^2 F_3^2 = \Pi_{s_{12}=0} F_3^2 , \quad (13.82)$$

где было использовано свойство равенства:  $\Pi_{s_{12}=0}^2 = \Pi_{s_{12}=0}$ .

Таким образом, измерение со схемой совпадений выдаст нам ответ, заключающийся в том, что Боб окажется в квантовомеханическом состоянии Алисы, хотя напрямую никакой корреляции между данными спинами нет. При этом Алиса и Боб могут быть разнесены на большое расстояние, а передача при этом будет производиться через Ансиллу. В таком случае, если схема совпадений не будет испорчена

внешним вмешательством, то при измерении будет получена информация об исходном состоянии Алисы.

Далее разберемся с коэффициентом  $1/4$  в выражении (13.81). Данный коэффициент возникает потому, что из четырех возможных вариантов измерения мы выбираем только один, откуда следует, что измерение может быть осуществлено ещё тремя способами, каждый из которых так или иначе будет восстанавливать нам информацию о состоянии Алисы. В схеме совпадений можно задать измерение не только синглетное состояние, но и одно из трех возможных триплетных конфигураций. В таком случае для каждой конфигурации будет существовать соответствующее результирующее состояние. Данное состояние не будет содержать состояние Алисы напрямую, однако оно будет содержать его в преобразованном сигма-матрицей виде. Данную матрицу легко можно восстановить и найти по ней исходное состояние Алисы. Всего возможных вариантов измерений будет четыре, и если все получаемые состояния сложить вместе, то измерение будет таким, что схема совпадений работать не будет. В таком случае ответ будет соответствовать измерению величины  $F_3$ . Для описания измерения величины  $F_3$  при этом необходимо использовать приведенную матрицу плотности, про которую уже было рассказано ранее. В таком случае, если два спина запутаны вместе в синглет, то каждый из них описывается приведенной матрицей плотности. В частности, у Боба будет своя матрица плотности с равномерным смешиванием:

$$\rho_3 = \frac{1}{2} |\uparrow_3\rangle \left\langle \uparrow_3 \left| + \frac{1}{2} \right| \downarrow_3 \right\rangle \langle \downarrow_3 | . \quad (13.83)$$

Именно с использованием матрицы плотности (13.83) может быть вычислена величина  $F_3$ . Никакой информации о спине Алисы при этом нами получено не будет, а будет осуществляться только измерение величины  $F_3$  с матрицей плотности в виде равномерного смешивания.

## Лекция 14. Одномерный атом водорода. Парение атома водорода над плоскостью

### Одномерный атом водорода

Ранее нами уже был рассмотрен одномерный кулоновский потенциал. Для такого потенциала уравнение Шредингера имеет следующий вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} u'' - \frac{\alpha}{|x|} u = E u . \quad (14.1)$$

То, как возникает задача на одномерный кулоновский потенциал, было разобрано нами на семинарах. Напомним, что приближение одномерного атома становится корректным в случае, когда атом сжимается сильным магнитным полем. При этом радиус первой орбиты Ландау, т. е. радиус орбиты электрона в плоскости, перпендикулярной направлению магнитного поля, оказывается пропорциональным:

$$a_H \sim \frac{1}{\sqrt{\mathcal{H}}} . \quad (14.2)$$

Из (14.2) следует, что если увеличивать напряженность, то радиус первой орбиты Ландау будет уменьшаться, в результате чего у электрона остается движение лишь по одной оси, которая будет сонаправлена с направлением поля.

Гамильтониан рассматриваемой задачи не является самосопряженным. Выясним, что из себя представляет несамосопряженный гамильтониан.

Параметризуем энергию следующим образом:

$$E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2} \gamma^2 , \quad (14.3)$$

после чего перепишем уравнение (14.1) в более удобном виде:

$$u'' + \frac{\lambda}{|x|} u = \alpha^2 \gamma^2 u , \quad (14.4)$$

где  $\lambda$  равно:

$$\lambda = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} . \quad (14.5)$$

Будем рассматривать окрестность особой точки, т. е. устремим  $x \rightarrow +0$ . В данного случая мы вправе опустить слагаемое в правой части уравнения (14.4), в результате чего оно примет следующий вид:

$$u'' + \frac{\lambda}{x} u = 0 . \quad (14.6)$$

Уравнение (14.6) представляет собой частный случай целого класса уравнений вида

$$y'' + b x^m y = 0 . \quad (14.7)$$

Про уравнение (14.7) важно знать, что при целых  $m$  (причем не важно положительных или отрицательных), ответ будет выражаться через функции Бесселя. В общем виде ответ для  $y$  может быть записан в виде

$$y = \sqrt{x} Z_{\frac{1}{m+2}} \left( \frac{2\sqrt{b}}{m+2} x^{\frac{m+2}{2}} \right) , \quad (14.8)$$

где  $Z$  - цилиндрическая функция Бесселя.

**Замечание 14.1.** Если положить  $m = 1$ , то уравнение (14.7) будет представлять собой уравнение на линейный потенциал, и ответом для него будет являться следующее:

$$y = \sqrt{x} Z_{\frac{1}{3}} \left( \frac{2\sqrt{b}}{3} x^{\frac{3}{2}} \right) . \quad (14.9)$$

Ответ будет совпадать с тем выражением, которое мы использовали в квазиклассическом рассмотрении.

Рассматриваемый нами случай одномерного атома водорода соответствует случаю  $m = -1$ , в результате чего у уравнения будет существовать два решения:

$$\begin{cases} u_1 = C_1 \sqrt{x} J_1(2\sqrt{\lambda x}) \\ u_2 = C_2 \sqrt{x} Y_1(2\sqrt{\lambda x}) \end{cases} \quad (14.10)$$

Первое решение из (14.10) нам не подходит, поскольку если разложить функцию Бесселя в нуле, то от  $J_1$  останется только его аргумент, в результате чего решение будет представлять собой выражение  $C_1 \sqrt{\lambda x}$ , что не удовлетворяет условию на асимптотику решения в нуле. Во втором же решении присутствует функция Неймана  $Y_1(z)$ , которая в окрестности нуля строится через логарифм и может быть представлена в виде

$$\pi Y_1(z) \xrightarrow{z \rightarrow 0} 2 \left[ \gamma + \ln \frac{z}{2} \right] J_1(z) - \left( \sqrt{\frac{z}{2}} \right)^{-1} . \quad (14.11)$$

Из (14.11) следует, что решение  $u_2$  может быть записано в следующем виде:

$$u_2 \longrightarrow \frac{2}{\pi} (\gamma + \ln \lambda x) \sqrt{\lambda x} - \frac{1}{\pi \sqrt{\lambda}} , \quad (14.12)$$

где было использовано разложение функции Бесселя в окрестности нуля.

Далее вынесем за скобки общий множитель  $\sqrt{\lambda}/\pi$  и опустим слагаемое с  $\gamma$ , поскольку оно будет являться константой, которая сократится при подстановке в уравнение (14.6), следовательно, асимптотика  $u_2$  в окрестности точки  $x = 0$  будет иметь вид:

$$u_2 = x \ln x - \frac{1}{\lambda} \xrightarrow{x \rightarrow +0} -\frac{1}{\lambda}. \quad (14.13)$$

Из (14.13) следует, что при стремлении  $x$  к  $+0$ , важно поведение функции  $\ln x$ , который при стремлении аргумента к нулю стремится к минус бесконечности.

Далее вычислим вторую производную функции  $u_2$ . При её нахождении стоит учитывать, что для первой производной  $u_2$  получается следующее выражение:

$$u_2' \longrightarrow \ln x + 1. \quad (14.14)$$

При вычислении второй производной  $u_2$  производная от единицы обратится в нуль, в результате чего ответ для  $u_2''$  будет иметь вид:

$$u_2'' \longrightarrow \frac{1}{x}. \quad (14.15)$$

Далее найдем решение для асимптотики  $x \rightarrow -0$ , которую необходимо рассмотреть, поскольку мы имеем дело со всей числовой прямой. При этом ответы для функции  $u_2$  и её производных могут быть получены с помощью использования замены  $x \rightarrow -x$ , в результате чего вторая производная функции  $u_2''$  будет неизменной, а выражение для функции  $u$  в пределе  $x \rightarrow -0$  будет равно

$$u_2 \longrightarrow -\frac{1}{\lambda}. \quad (14.16)$$

Для производной же функции  $u$  ответ будет иметь такой вид:

$$u_2' \longrightarrow -\ln |x|. \quad (14.17)$$

Таким образом, мы получили, что функция в нуле является непрерывной, а её производная - разрывной. При этом, если в случае задачи с дельта-потенциалом скачок производной является конечным, то в рассматриваемой нами задаче скачок будет бесконечным. Если провести аналогию с дельта-потенциалом, то можно заметить, что случай бесконечного скачка производной соответствует задаче с потенциалом вида производной от дельта-функции, которая не может быть разрешима с помощью уравнения Шредингера.

Помимо сказанного выше, если записать функционал от энергии, имеющий следующий вид:

$$E[u] = \int dx \left[ \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{du}{dx} \right)^2 - \alpha \frac{u^2}{|x|} \right], \quad (14.18)$$

то будет видно, что в нуле, в силу особенности производной функции  $u$ , возникнет интеграл от квадратного логарифма, однако, как известно, логарифм растет медленнее, чем любая отрицательная степень. Интеграл от функции  $u$  в окрестности нуля будет сходиться и будет являться конечным, однако в силу того, что пределы интегрирования будут бесконечными, то интеграл (14.18) будет являться расходящимся, откуда следует, что функционал не будет ограничен снизу. Данный вывод свидетельствует о том, что нижний уровень формально лежит бесконечно глубоко, а уравнение для  $1/|x|$  не является самосопряженным.

Для решения рассматриваемой задачи существует способ, который заключается в самосопряженном расширении оператора Гамильтона. При этом наиболее оптимальным способом является добавление некоторого постоянного слагаемого  $a$  в знаменатель к  $|x|$ . Физическим обоснованием данного самосопряженного расширения является тот факт, что в реальности никогда не происходит сжатия магнитным полем до случая одномерного атома, поэтому в итоге атом представляет собой некоторую конечную трубку. Уравнение Шредингера в таком случае будет иметь вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} u'' - \frac{\alpha}{|x| + a} u = E u, \quad (14.19)$$

где в результате введения слагаемого  $a$  сингулярность в точке  $x = 0$  отсутствует. Переход к одномерному атому может быть осуществлен предельным переходом  $a \rightarrow 0$ .

Производная от потенциала при этом будет испытывать скачок в нуле, но поскольку, благодаря введению слагаемого  $a$ , данный скачок будет конечным, то задача станет нормально разрешимой. В силу того, что потенциальная яма является симметричной, возникнет разделение на четные и нечетные уровни энергии, однако мы будем искать четные решения, поскольку нас интересует поведение нижнего уровня энергии, который будет являться четным.

Раскроем модуль в выражении (14.19) и будем рассматривать задачу на положительной полуоси с дополнительным условием четного продолжения на отрицательную полуось, которое подразумевает введение дополнительного условия на равенство

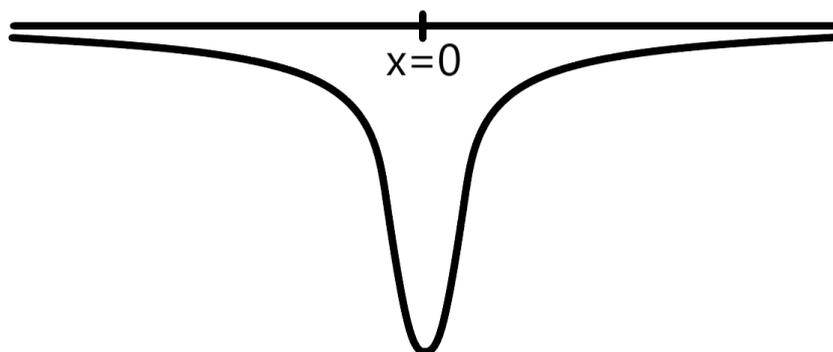


Рис. 14.1. Рисунок потенциала, являющегося самосопряженным расширением к одномерному кулоновскому потенциалу

нулю производной от функции  $u$  в точке  $x = 0$ :

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} u'' - \frac{\alpha}{x+a} u = E u \\ u'(0) = 0 \end{cases} \quad (14.20)$$

Далее осуществим сдвиг координатной прямой на величину  $a$  влево, в результате чего систему (14.20) можно будет переписать в следующем виде:

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} u'' - \frac{\alpha}{x} u = E u \\ u'(a) = 0 \end{cases} \quad (14.21)$$

Задача (14.21) решается известным всем способом, поскольку она представляет собой обыкновенную кулоновскую задачу с заменой радиальной функции  $R = u/r$ , но с другим условием на  $u'$ . Если для радиальной кулоновской задачи условие на равенство производной нулю ставилось в точке  $x = 0$ , в результате чего ответом для нее являлась функция Кумбера, позволяющая получить в ответе обычный кулоновский спектр, то в (14.21) условие на производную ставится в точке  $x = a$ , в связи с чем задача будет решаться иным способом.

Первым делом перейдем к безразмерным переменным, в результате чего уравнение примет следующий вид:

$$u'' + \left( \frac{2}{\rho} u - \gamma^2 \right) u = 0, \quad (14.22)$$

где в уравнении отсутствует слагаемое, ответственное за центробежный потенциал, поскольку в рассматриваемой задаче орбитальный момент равен нулю.

Ответ для уравнения (14.22) может быть получен в результате рассмотрения асимптотик в нуле и на пространственной бесконечности, после чего, аналогично кулоновской задаче на атом водорода, необходимо рассматривать ряд, который в конечном итоге будет представлять собой полином  $n$ -ой степени. Ответом для (14.22) будет не функция Куммера, которая получалась для обычного атома водорода, а функция Трикоми, в результате чего  $u$  имеет вид:

$$u = \rho e^{-\gamma\rho} \Psi \left( 1 - \frac{1}{\gamma}, 2, 2\gamma\rho \right), \quad (14.23)$$

где  $\Psi$  - обозначение функции Трикоми.

Стоит отметить, что функция Трикоми является вторым линейно независимым решением уравнения Куммера, которое имеет вид

$$x y'' + C(-x) y' - a y = 0. \quad (14.24)$$

Ответ для функции  $y$  из выражения (14.24) может быть записан в виде

$$y = c_1 {}_1F_1(a, c, x) + c_2 \Psi. \quad (14.25)$$

Как уже было написано в конспекте семинаров, функция  ${}_1F_1$  называется функцией Куммера, которая представима в виде ряда:

$${}_1F_1(a, c, x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n}{(c)_n} \frac{z^n}{n!} = \Phi, \quad (14.26)$$

где ряд расходится на бесконечности как экспонента в степени  $2\gamma\rho$ , из-за чего необходимо ограничивать ряд до ограниченной суммы, которая будет представлять собой полином  $n$ -ой степени.

Функция  ${}_1F_1$  не будет нам подходить из-за нового начального условия на производную  $u$ :  $u'(\xi) = 0$ , где  $\xi$  - преобразованное в ходе выполнения процедуры обезразмеривания значение  $a$ . Таким образом, решение для уравнения (14.22) выбирается таким образом, чтобы оно на бесконечности вело себя степенным образом, поскольку в таком случае волновая функция автоматически будет квадратично интегрируемой.

Уровень энергии в таком случае будет находиться из поставленного нами граничного условия продолжения решения на отрицательную вещественную ось четным образом. Для функции Трикоми со вторым целым аргументом существует отдельный способ записи функции, который носит название логарифмического случая:

$$\Psi \left( 1 - \frac{1}{\gamma}, 2, x \right) \rightarrow \frac{1}{\Gamma \left( 1 - \frac{1}{\gamma} - 1 \right)} \left\{ \Phi \left( 1 - \frac{1}{\gamma}, 2, x \right) \cdot \ln x \right\} + \frac{1}{\Gamma \left( 1 - \frac{1}{\gamma} \right)} \frac{1}{x}. \quad (14.27)$$

Далее для второго слагаемого (14.27) преобразуем  $\Gamma$ -функцию так, чтобы можно было вынести за скобки общий множитель:

$$\Gamma\left(1 - \frac{1}{\gamma}\right) = \left(-\frac{1}{\gamma}\right) \Gamma\left(-\frac{1}{\gamma}\right). \quad (14.28)$$

При подстановке (14.28) в (14.27) можно вынести за скобки общий множитель  $\frac{1}{\Gamma(-\frac{1}{\gamma})}$ , после чего и вовсе его опустить, поскольку нас интересует лишь асимптотика функции. Подставим полученное выражение в выражение (14.22) и учтем, что при стремлении  $\rho$  к нулю, функцию Куммера можно разложить в ряд по положительным степеням, и, поскольку ряд начинается с единицы, которая будет являться главным членом разложения, итоговый ответ для асимптотики функции  $u$  может быть записан в следующем виде:

$$u = \rho e^{-\gamma\rho} \left( \ln 2\gamma\rho - \frac{1}{2\rho} \right) \rightarrow \rho \ln \rho - \frac{1}{2}. \quad (14.29)$$

Для производной функции  $u$  ответ будет выглядеть более сложным образом, поскольку при вычислении производной необходимо также выполнить дифференцирование экспоненты:

$$u'(\rho) = (1 - \gamma\rho) \left( \ln 2\gamma\rho - \frac{1}{2\rho} \right) + \rho \left( \frac{1}{\rho} + \frac{1}{2\rho^2} \right), \quad (14.30)$$

где в выражении опущен множитель  $e^{-\gamma\rho}$ , поскольку нас интересует асимптотика производной при  $\rho \rightarrow 0$ .

Далее раскроем в (14.30) скобки и упростим выражение:

$$u'(\rho) = \ln 2\gamma\rho - \frac{1}{2\rho} - \gamma\rho \ln 2\gamma\rho + \frac{\gamma}{2} + 1 + \frac{1}{2\rho} = \ln 2\gamma\rho - \gamma\rho \ln 2\gamma\rho + \frac{\gamma}{2} + 1. \quad (14.31)$$

Опустим единицу и член  $\gamma\rho \ln 2\gamma\rho$  из соображений малости, в результате чего получим уравнение

$$\ln \xi + \frac{\gamma}{2} = 0, \quad (14.32)$$

откуда находим, что

$$\gamma \approx -2 \ln \xi. \quad (14.33)$$

Величина  $\xi$  представляет собой  $1/\sqrt{\mathcal{H}}$ , откуда следует окончательный ответ для величины  $\gamma$ :

$$\gamma \approx \ln \mathcal{H}. \quad (14.34)$$

Из выражения (14.34) следует, что если сжатие по координате магнитным полем происходит достаточно быстро, то уровень опускается очень медленно, как логарифм, поэтому эксперименты по сжатию атомов требуют очень сильной напряженности магнитного поля, которая в настоящее время недостижима.

## Парение атома водорода над жесткой плоскостью

Рассмотрим задачу на атом водорода, находящийся в  $1s$  состоянии высоко над плоскостью. Пусть плоскость при этом является абсолютно жесткой, т. е. потенциал поверхности представляет собой бесконечно высокую стенку (рис. 14.2).

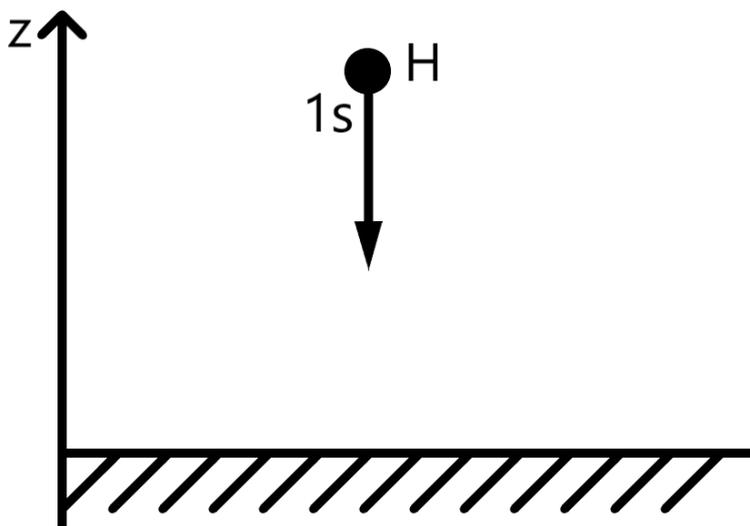


Рис. 14.2. Атом водорода над жесткой плоскостью

Попробуем ответить на вопрос: „в каком состоянии атом водорода сможет приземлиться на плоскость, и возможно ли его приземление в принципе?“

Для ответа на данные вопросы вспомним, что волновая функция атома водорода описывается произведением радиальной и угловой частей волновой функции. Тогда следующим шагом необходимо поставить граничные условия на волновую функцию в точке  $z = 0$ . В силу того, что стенка жесткая, волновая функция на поверхности должна быть обращена в нуль. Волновая функция при этом имеет следующий вид:

$$\psi = R(r) Y_{lm} \left( \frac{\pi}{2}, \varphi \right), \quad (14.35)$$

где  $\theta = \pi/2$ .

Следовательно, сразу должно быть понятно, что атом водорода в состоянии  $1s$  не сможет упасть на поверхность, поскольку его угловая часть волновой функции будет являться константой и не будет обращаться в нуль.

Для того чтобы угловая часть волновой функции обращалась в нуль в точке  $z = 0$ ,

необходимо выполнение условия

$$P_l^m(0) = 0, \quad (14.36)$$

где в аргументе  $P_l^m$  стоит нуль, поскольку  $\cos \frac{\theta}{2} = 0$ .

Из (14.36) следует, что полином Лежандра должен быть нечетным. Как уже было показано ранее, четность полинома Лежандра определяется значением  $(-1)^{l-m}$ , откуда следует, что для того чтобы функция была нечетной, необходимо, чтобы разность  $l - m$  была нечетной.

Для  $1s$  состояния атома водорода величины  $l$  и  $m$  равны нулю, откуда следует, что для данного состояния условие не удовлетворяется. Первым разрешенным состоянием будет являться состояние  $2p$  с  $m = 0$ . Последующие же состояния должны иметь разность  $l - m$  равную  $3, 5, 7, \dots$ . При этом, если изначально атом находился в  $1s$  состоянии, то его энергия будет равна  $E_{1s} = -13.6$  эВ, в то время как для  $2p$  -  $E_{2p} = -3.4$  эВ.

Таким образом, для того чтобы атом водорода упал на поверхность, ему необходимо сообщить энергию порядка  $10$  эВ.

**Упражнение 14.1.** *Прделаем следующее упражнение. Пусть изначально атом находился на высоте  $1$  метр над поверхностью. Гравитационная сила известна, масса атома известна. Может ли гравитационная сила совершить такую работу, чтобы сообщить атому энергию, достаточную для перехода с состояния  $1s$  в  $2p$ ?*

*Переведем энергию перехода из  $1s$  в  $2p$  из эВ в градусы. Величина  $10$  эВ соответствует температуре порядка  $100000$  градусов. Очевидно, что гравитационная сила не сможет совершить такую работу по нагреву атома. Следовательно, если атом отпустить на высоте в  $1$  метр, то он будет парить над поверхностью. Работа гравитационной силы сможет перевести состояние атома водорода с  $1s$  в  $2p$  только в том случае, когда он будет падать с пространственной бесконечности, при этом даже при падении с высоты в  $100000$  км энергии не будет достаточно.*

*Существуют работы, в которых в качестве стола была использована поверхность сверхтекучего  $He^4$ , который не пропускает атомы водорода, в которых наблюдался эффект парения над поверхностью.*



ФИЗИЧЕСКИЙ  
ФАКУЛЬТЕТ  
МГУ ИМЕНИ  
М.В. ЛОМОНОСОВА

*teach-in*  
ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ