



ФИЗИЧЕСКИЙ  
ФАКУЛЬТЕТ  
МГУ ИМЕНИ  
М.В. ЛОМОНОСОВА

*teach-in*  
ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

# КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ. ЧАСТЬ 1. СЕМИНАРЫ

ПАРФЕНОВ  
КОНСТАНТИН ВЛАДИМИРОВИЧ

ФИЗФАК МГУ

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

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



БЛАГОДАРИМ ЗА ПОДГОТОВКУ КОНСПЕКТА  
СТУДЕНТКУ ФИЗИЧЕСКОГО ФАКУЛЬТЕТА МГУ  
**СМОЛЬСКУЮ ДИАНУ ВЛАДИМИРОВНУ**



## Оглавление

<b>Семинар 1. Операторы и коммутаторы.....</b>	<b>6</b>
Контрольный опрос .....	6
Ответы на контрольный опрос .....	6
Задача 1. Коммутатор оператора с функцией операторов .....	9
Задача 2. Производная от оператора.....	12
Унитарные операторы.....	16
<b>Семинар 2. Теория представлений.....</b>	<b>21</b>
Контрольный опрос .....	21
Ответы на контрольный опрос .....	21
Задача 1. Гамильтониан частицы в пространстве координатных и импульсных функций.....	25
Удобные представления для одномерных задач .....	28
Задача 2. Средние значения и дисперсии координаты и импульса частицы.....	29
Соотношение неопределённостей.....	33
Аксиома 4. Об эволюции .....	34
<b>Семинар 3. Эволюция квантовых систем и смешанные состояния .....</b>	<b>38</b>
Контрольный опрос .....	38
Ответы на контрольный вопрос .....	39
Задача 1. Эволюция волновой функции частицы в одномерном ящике .....	41
Задача 2. Эволюция гайзенберговских операторов координаты и импульса линейного гармонического осциллятора.....	45
Задача 3. Эволюция смешанных состояний.....	48
Квантовая запутанность.....	50
<b>Семинар 4. Движение частицы в области потенциального барьера .....</b>	<b>54</b>
Контрольный опрос .....	54
Ответы на контрольный вопрос .....	55
Задача 1. Движение частицы в дельта-яме.....	58
Задача 2. Движение частицы в однородном электрическом поле .....	65
Задача 3. Эволюция волновой функция свободной частицы, совершающей одномерное движение.....	68
<b>Семинар 5. Гармонический осциллятор и симметрия .....</b>	<b>71</b>
Контрольный опрос .....	71

Ответы на контрольный вопрос .....	71
Задача 1. Испускание кристаллом гамма-кванта .....	76
Задача 2. Спектр частицы в дираковской гребёнке .....	80
<b>Семинар 6. Сферическая симметрия .....</b>	<b>88</b>
Контрольный опрос .....	88
Ответы на контрольный вопрос .....	89
Задача 1. Число $s$ -состояний в прямоугольной сферически-симметричной потенциальной яме .....	96
Задача 2. Спектр частицы в сферически симметричном кулоновском потенциале ...	100
<b>Семинар 7. Спин .....</b>	<b>104</b>
Контрольный опрос .....	104
Ответы на контрольный опрос .....	105
Прямая и обратная задачи про опыт Штерна – Герлаха .....	108
Спиновые матрицы плотности частиц и вектор поляризации .....	109
Задача 1. Отношение интенсивностей пятен в опыте Штерна-Герлаха.....	110
Эволюция спиновых состояний.....	113
Задача 2. Вероятность переориентации спина в переменном магнитном поле .....	114
<b>Семинар 8. Сложение моментов .....</b>	<b>121</b>
Контрольный опрос .....	121
Ответы на контрольный вопрос .....	121
Задача 1. Коэффициенты Клебша – Гордана и проекторы на состояния с определённым полным моментом .....	123
Задача 2. Спин системы из трёх частиц спина.....	128
Связь оператора перестановки частиц и квадрата оператора спина .....	128
Задача 3. Статистика измерений спина для системы двух частиц под углом друг к другу .....	129
Задача 4. Среднее значение орбитального момента для частиц определённого спина .....	132
<b>Семинар 9. Сложение моментов - 2 .....</b>	<b>136</b>
Контрольный опрос .....	136
Ответы на контрольный опрос .....	136
Задача 1. Спектр для гамильтониана с взаимодействием, зависящим от спинов.....	139
Задача 2. Вероятности реализации значений проекции спина в системе двух частиц .....	141

Задача 3. Матрицы плотности частиц в смешанном состоянии.....	143
<b>Семинар 10. Метод ВКБ.....</b>	<b>147</b>
Контрольный опрос .....	147
Ответы на контрольный вопрос .....	148
Формула Кембла.....	151
Задача 1. Уровни энергии частицы в потенциальной яме .....	153
Задача 2. Холодная эмиссия электронов из металла.....	156
<b>Семинар 11. Теория возмущений .....</b>	<b>165</b>
Выбор невозмущённого гамильтониана.....	165
Задача 1. Низколежащие уровни энергии частицы в потенциале с точкой минимума .....	166
Задача 2. Спектр низколежащих уровней энергии двумерной системы .....	176
<b>Семинар 12. Неравенство Белла.....</b>	<b>183</b>
Задача 1. Проверка неравенства Белла для распада частицы на два фермиона.....	183
Задача 2. Энергия низших уровней частицы в параболическом потенциале .....	188

## Семинар 1. Операторы и коммутаторы

### Контрольный опрос

1) Как определить среднее значение и дисперсию наблюдаемой, представленной оператором  $\hat{F}$ , в заданном состоянии  $|\psi\rangle$ ? Согласно нашей аксиоматике, все состояния описываются нормированными на единицу векторами в гильбертовом пространстве, а все наблюдаемые – определёнными в нём эрмитовыми операторами.

2) Что такое полный набор наблюдаемых? Ответ можно брать из материалов лекций или из других источников.

3) Пусть  $\hat{x}$  и  $\hat{p}_x$  – операторы координаты и соответствующей проекции оператора импульса. Их коммутатор в этом случае

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar \quad (1.1)$$

Вычислите коммутатор

$$[\hat{p}_x, \hat{x}^2], \quad (1.2)$$

где оператор  $\hat{x}^2$  является второй степенью оператора  $\hat{x}$ .

4) Дана замкнутая система из двух точечных квантовых частиц, которая характеризуется операторами координаты и импульса, имеющими индексы с номером частицы:  $\hat{x}_1, \hat{x}_2, \hat{p}_{1x}, \hat{p}_{2x}$ . Пары операторов координаты и импульса, относящихся к одной частице, подчиняются коммутационному соотношению (1.1), а операторы, относящиеся к разным частицам, и операторы координаты и импульса коммутируют между собой.

Вычислите коммутатор

$$\left[ \hat{p}_{1x} + \hat{p}_{2x}, \frac{\hat{p}_{1x}^2}{2m} + \frac{\hat{p}_{2x}^2}{2m} + u(\hat{x}_1 - \hat{x}_2) \right], \quad (1.3)$$

$m$  – масса каждой частицы.

Хорошо было бы узнать операторы наблюдаемых, написанные в коммутаторе, вспомнив принцип соответствия. Писать вычисления в «технических вопросах» 3) и 4) не обязательно, достаточно ответа.

### Ответы на контрольный опрос

1) Из лекции или более ранних курсов по квантовой теории известно, что среднее значение проще всего считать как матричный элемент от оператора  $\hat{F}$  между состояниями  $\psi$ :

$$\bar{F}_\psi = \langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle \quad (1.4)$$

То есть это скалярное произведение  $\psi$  на образ вектора  $\psi$  при действии оператора  $\hat{F}$ .

По индукции определим дисперсию наблюдаемой  $F$  в этом состоянии. Либо по определению, как среднее квадрата отклонения от среднего, либо, как чаще считают, как разность среднего в квадрате и квадрата среднего:

$$D_\psi F = \overline{F_\psi^2} - \overline{F}_\psi^2 \quad (1.5)$$

2) Понятие “полный набор наблюдаемых” редко формулируют в курсе введения в квантовую теорию, но на лекции были даны два эквивалентных определения. Одно говорило, что, если есть некий набор наблюдаемых, которые попарно коммутируют и функционально независимы, и это максимально широкий набор таких наблюдаемых для данной квантовой системы, они образуют для неё полный набор наблюдаемых. Второе определение гласило, что, если есть такой набор наблюдаемых, что каждому набору их собственных значений отвечает один с точностью до фазового множителя нормированный на единицу с точностью до фазового множителя общий собственных вектор, это тоже полный набор наблюдаемых.

Данными определениями мы комментируем физический смысл, что это такой набор наблюдаемых, измерения которых практически фиксируют состояния нашей системы. Каждый прибор выдал какое-то своё число, мы узнали набор собственных значений и знаем их общий собственный вектор, в который приборы вогнали систему совместным измерением. При этом важно, что эти наблюдаемые одновременно измеримы, есть общий собственный вектор, и они между собой попарно коммутируют. Это заложено в обоих определениях.

3) Мы можем действовать формально алгебраически и добавить и вычесть одно и то же выражение. Получится

$$[\hat{p}_x, \hat{x}^2] = \hat{p}_x \hat{x}^2 - \hat{x}^2 \hat{p}_x = \hat{p}_x \hat{x}^2 - \hat{x} \hat{p}_x \hat{x} + \hat{x} \hat{p}_x \hat{x} - \hat{x}^2 \hat{p}_x \quad (1.6)$$

После этого разобьём выражение (1.6) на две пары и в каждой вынесем за скобки общий множитель  $\hat{x}$ . Обратим внимание, что в первой паре этот множитель выносится направо, а во второй налево. Операторы не обязаны между собой коммутировать, а  $\hat{x}$  и  $\hat{p}_x$  точно не коммутируют, их коммутатор отличен от нуля, поэтому выносить за скобку можно только в определённом направлении. Нельзя вынести за скобку общий множитель, стоящий на разных местах в двух слагаемых.

Из первой скобки получится

$$(\hat{p}_x \hat{x} - \hat{x} \hat{p}_x) \hat{x}, \quad (1.7)$$

а из второй

$$\hat{x}(\hat{p}_x \hat{x} - \hat{x} \hat{p}_x) \quad (1.8)$$

В скобках в (1.7) и (1.8) стоит исходный коммутатор, взятый со знаком минус, то есть  $-i\hbar$ . Поэтому из выражения (1.6) получается

$$-2i\hbar \hat{x} \quad (1.9)$$

4) Надо было заметить, что (1.3) – коммутатор наблюдаемой, которая является полным импульсом системы

$$\hat{p}_x = \hat{p}_{1x} + \hat{p}_{2x} \quad (1.10)$$

и наблюдаемой, являющейся оператором полной энергии системы как суммы кинетических энергий и потенциальной энергии взаимодействия

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_{1x}^2}{2m} + \frac{\hat{p}_{2x}^2}{2m} + u(\hat{x}_1 - \hat{x}_2) \quad (1.11)$$

И действительно, по виду выражения для зависимости энергии от  $\hat{p}_x$  и  $\hat{x}$  мы видим, что это замкнутая система, потому что потенциальная энергия зависит только от разности координат двух частиц  $\hat{x}_1 - \hat{x}_2$ . Можно было бы даже написать  $|\hat{x}_1 - \hat{x}_2|$ . Слагаемых, зависящих от координаты одной частицы, нет. То есть нет внешних силовых полей и внешних сил, только взаимодействие между частицами.

В такой системе полный импульс является интегралом движения. Если знать, как это скажется на коммутаторе, можно просто записать ответ. Когда на мы лекции формулировали аксиому соответствия, обратили внимание, что в классической динамической версии разные операторы координаты и импульса имеют скобку Пуассона  $\{\hat{x}_\alpha, \hat{p}_\beta\} = \delta_{\alpha\beta}$ , а их коммутатор в квантовой версии этой теории был

$$[\hat{x}_\alpha, \hat{p}_\beta] = i\hbar\delta_{\alpha\beta} \quad (1.12)$$

То есть, если умножить коммутатор (1.12) на  $-\frac{i}{\hbar}$ , он превратится в  $\delta_{\alpha\beta}$ , и это будет некий квантовый аналог скобки Пуассона. Коммутаторы в квантовой версии теории и скобки в классической версии динамики, по сути, вещи, которые превращаются друг в друга в процессе квантования. Тогда достаточно вспомнить, что в гамильтоновой динамике для величины, явно не зависящей от времени, то, что скобка Пуассона с энергией равна нулю, и есть необходимое условие, чтобы величина была интегралом движения. Поэтому коммутатор (1.3) равен нулю, и это связано с тем, что полный импульс является интегралом движения, не зависящим явно от времени  $t$ .

Мы ещё будем отдельно обсуждать интегралы движения в квантовой теории, потому что прежний смысл требует комментариев. В классической динамике интегралом движения была величина, которая не меняется. С точки зрения экспериментатора, система эволюционировала, он померил у неё полный импульс в момент времени  $t_1$ , потом в момент  $t_2$ , потом в момент  $t_3$ , и всё время получал одно и то же значение.

В квантовом мире так не получится. Мы ещё даже не начали изучать эволюцию, а уже понимаем, что измерение одной и той же наблюдаемой над квантовой системой в одном и том же состоянии может вызывать разные результаты с разными вероятностями.

В принципе, данное обобщение с учётом аксиомы 2, где мы ввели вероятностную интерпретацию результатов измерения, довольно естественно. Можно сказать, что в квантовой теории интегралом движения следует признать величину, у которой не меняется распределение вероятностей реализации. То есть время идёт, а у неё возможны всё те же результаты измерений и для данного начального состояния с одними и теми же вероятностями в разные моменты времени.



Дальше надо будет ввести в нашу аксиоматику аксиому 4 об описании эволюции квантовой системы. И тогда мы сможем аккуратно с точки зрения методологии дать определение интеграла движения в квантовой теории и понять, как их обнаруживать у каждой квантовой системы.

Сегодня, по сути, задача развить эти навыки и вообще научиться работать с операторами. Главное в том, что, каждый раз, когда мы будем переставлять в формуле две буквы, нужно будет понимать, как после этого видоизменить выражение. То есть вспомнить о коммутаторах тех величин, которые переставляем.

Поэтому один из основных необходимых алгебраических навыков квантовой теории – умение вычислять коммутаторы. Обычно больше всего нас интересуют коммутаторы операторов, составленных из координат, импульсов и времени. Как следует из аксиомы соответствия, такой вид имеют квантовые операторы наблюдающих, имеющих классический аналог. То есть такая наблюдаемая есть в классической динамике, и она там написана как числовая функция координат, импульсов и времени, а теперь мы хотим построить соответствующий оператор, который является такой же функцией, но от операторов.

### Задача 1. Коммутатор оператора с функцией операторов

Данная задача из списка обязательных заодно продемонстрирует использование приёма, который только что применялся для вычисления одного из коммутаторов, но в более систематическом подходе.

Есть два оператора  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$ , коммутатором которых является оператор  $i\hat{C}$ :

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C} \quad (1.13)$$

Мы выделили  $i$ , чтобы  $\hat{C}$  тоже был эрмитовым оператором, если таковы  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$ . При этом известно, что коммутаторы

$$[\hat{A}, \hat{C}] = [\hat{B}, \hat{C}] = 0, \quad (1.14)$$

то есть  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  – пара эрмитовых операторов, коммутирующих со своим коммутатором.

Нам уже известна по крайней мере одна пара таких операторов, операторы координаты  $\hat{x}$  и импульса  $\hat{p}_x$ , которые коммутируют на оператор, кратный единичному  $i\hbar$ , а с единичным оператором коммутирует что угодно. Они очень важны с физической точки зрения, поэтому полезно исследовать их свойства.

Нужно вычислить коммутатор

$$[\hat{A}, f(\hat{A}, \hat{B})], \quad (1.15)$$

где  $f$  – произвольная функция. Частный случай этого вопроса может быть поставлен как вопрос о вычислении коммутатора оператора координаты с наблюдаемой, являющейся произвольной функцией операторов координаты и импульса.

Во-первых, мы должны вспомнить, что такое функция от оператора. Мы их определяем только как разложение в степенной ряд по соответствующим переменным. В

данном случае ограничимся рассмотрением случаев, когда функция  $f$  разлагается в степенной ряд по неотрицательным степеням  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$ , то есть когда она разложима в ряд Тейлора по обеим переменным в окрестности нуля, в точке  $(0,0)$ .

Тогда коммутатор (1.15) можно записать как коммутатор

$$\left[ \hat{A}, \sum_{nk} f_{nk} \hat{A}^n \hat{B}^k \right] \quad (1.16)$$

При этом мы понимаем, как коэффициенты  $n$  и  $k$  выражаются через производные по обеим переменным, соответствующее всегда будет степенью дифференцирования, и в этом выражении будет стоять коэффициент  $\frac{1}{n!}$  или  $\frac{1}{k!}$ . Но сейчас явный вид коэффициента не так важен.

Из линейной алгебры мы знаем, что коммутатор – это билинейная операция, то есть линейная по отношению к обоим своим аргументам. В частности, это означает, что из-под знака коммутатора всегда можно выносить суммы и числа. То есть из (1.16) можно вынести за знак коммутатора сумму и числовой коэффициент  $f_{nk}$ . Тогда получится

$$\sum_{nk} f_{nk} [\hat{A}, \hat{A}^n \hat{B}^k] \quad (1.17)$$

Ещё мы знаем, что коммутатор оператора с произведением операторов

$$[\hat{F}, \hat{G}_1 \hat{G}_2] \quad (1.18)$$

Прямой проверкой через определение коммутатора можно убедиться, что мы можем свести этот коммутатор с произведением к комбинации коммутатора с каждым сомножителем.  $\hat{g}_1$ , стоящий в произведении слева, вынесется налево, и при нём коэффициентом останется коммутатор  $\hat{f} \hat{g}_2$ . И к нему добавится коммутатор  $\hat{f} \hat{g}_1$ , в котором  $\hat{g}_2$  вынесен направо. Получится

$$\hat{G}_1 [\hat{F}_1, \hat{G}_2] + [\hat{F}, \hat{G}_1] \hat{G}_2 \quad (1.19)$$

Если применить это к (1.17), откроется ещё один замечательный момент. Прямо из определения коммутатора следует, что любой оператор коммутирует с любой степенью самого себя, поэтому коммутатор  $[\hat{A}, \hat{A}^n]$  равен нулю. И в (1.17) останется только коммутатор, где  $\hat{A}^n$  вынеслось, и осталось  $[\hat{A}, \hat{B}^n]$ . Поэтому из (1.17) получится

$$\sum_{nk} f_{nk} \hat{A}^n [\hat{A}, \hat{B}^n] \quad (1.20)$$

Коммутатор в (1.20) вычислим с помощью того же приёма, который использовался в вопросе 3) контрольного опроса. Распишем его по определению, прибавим и вычтем одно и то же слагаемое и снова будем выносить общие множители у двух пар слагаемых:

$$[\hat{A}, \hat{B}^k] = \hat{A} \hat{B}^k - \hat{B}^k \hat{A} = \hat{A} \hat{B}^k - \hat{B} \hat{A} \hat{B}^{k-1} + \hat{B} \hat{A} \hat{B}^{k-1} - \hat{B}^k \hat{A} \quad (1.21)$$

В первой общий множитель  $\hat{B}^{k-1}$ , стоящий справа, и при нём стоит  $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ , которое, согласно (1.13), равно  $i\hat{C}$ . Во второй общий множитель  $\hat{B}$ , стоящий слева, и при нём  $\hat{A}\hat{B}^{k-1} - \hat{B}^{k-1}\hat{A}$ , являющийся коммутатором  $[\hat{A}, \hat{B}^{k-1}]$ . Поэтому из (1.21) получится

$$i\hat{C}\hat{B}^{k-1} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{B}^{k-1}] \quad (1.22)$$

Из начала (1.21) и конца (1.22) выкладки мы получили рекуррентную формулу

$$[\hat{A}, \hat{B}^k] = i\hat{C}\hat{B}^{k-1} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{B}^{k-1}], \quad (1.23)$$

выражающую коммутатор  $[\hat{A}, \hat{B}^k]$  через коммутатор  $[\hat{A}, \hat{B}^{k-1}]$ . Теперь мы можем её рекуррентно применять уже к коммутатору  $[\hat{A}, \hat{B}^{k-1}]$ , и он превратится в  $i\hat{C}\hat{B}^{k-2} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{B}^{k-2}]$ , а потом к коммутатору в нём.

В конце концов в последнем слагаемом получится коммутатор  $[\hat{A}, \hat{B}^0]$ , то есть оператора  $\hat{A}$  с единичным оператором, который даст ноль. На каждой коммутации будет выскакивать оператор, содержащий  $i\hat{C}$ , и в этой конструкции всегда будет  $k - 1$  оператор  $\hat{B}$ . Например, второе слагаемое будет  $\hat{B}i\hat{C}\hat{B}^{k-2}$ . Но по условию (1.14)  $\hat{B}$  и  $\hat{C}$  коммутируют, значит, везде можно будет вынести  $i\hat{C}$  в начало, и конструкция (1.23) превратится в

$$i\hat{C}k\hat{B}^{k-1} \quad (1.24)$$

Возвращаясь к (1.19), можно заменить коммутатор  $[\hat{A}, \hat{B}^k]$  на (1.23). Более того, оператор  $\hat{C}$  постоянный, не зависит от индексов  $n$  и  $k$ , и коммутирует и с  $\hat{A}$ , и с  $\hat{B}$ , его можно переставлять с этими операторами в любой степени, поэтому можно вынести за знак суммы через все операторы. В результате из (1.23) получится

$$i\hat{C} \sum_{nk} f_{nk} \hat{A}^n k \hat{B}^{k-1} \quad (1.25)$$

Теперь сравним исходную запись для функции  $f(\hat{A}, \hat{B})$  (1.16) с (1.25). Очевидно, что из конструкции (1.25) получается формальным дифференцированием по  $\hat{B}$ , производная от  $\hat{B}^k$  как раз  $\hat{B}^{k-1}$ .

Сразу договоримся, что мы не пытаемся определить дифференцирование по оператору, потому что для этого сначала надо определить бесконечно малое приращение оператора. А для этого как минимум определить норму в пространстве операторов, чтобы знать, какое приращение является бесконечно малым. В пространствах операторов можно вводить какое-то понятие нормы, и так часто делается. Но мы этого не делали и не собираемся, для выстраивания теории это не нужно.

Мы как бы смотрим на функцию  $f$  от двух числовых переменных  $A$  и  $B$  и берём формальный результат дифференцирования. Если, например,

$$f(\hat{A}, \hat{B}) = \sin(\hat{A}, \hat{B}), \quad (1.26)$$

то нужно сначала взять числовую функцию  $\sin(\hat{A}, \hat{B})$  и продифференцировать её по  $\hat{B}$ , а потом назад расставить крышечки, получая уже

$$\frac{\partial f}{\partial B}(\hat{A}, \hat{B}) \equiv \hat{A} \cos(\hat{A}\hat{B}) \quad (1.27)$$

Тогда коммутатор (1.15) всегда будет

$$iC \frac{\partial f}{\partial B}(\hat{A}, \hat{B}) \quad (1.28)$$

Вычисляя аналогично, коммутатор

$$[\hat{B}, f(\hat{A}, \hat{B})] = -iC \frac{\partial f}{\partial A}(\hat{A}, \hat{B}), \quad (1.29)$$

Здесь в знаменателе производной будет стоять  $A$ , и вместо  $iC$  будет  $-iC$ , поскольку в аналогичной выкладке нужно будет использовать не коммутатор  $[\hat{A}, \hat{B}]$ , а  $[\hat{B}, \hat{A}]$ .

Таким образом возникает удобная схема вычисления довольно обширного класса коммутаторов. В частности, вопрос 4), если бы мы решали не по аналогии с классической динамикой, можно было бы легко посчитать по этой формуле. Там были бы главные проблемы с коммутаторами операторов  $\hat{p}_{1x}$  и  $\hat{p}_{2x}$  с  $u(\hat{x}_1 - \hat{x}_2)$ , потому что неизвестно, что за функция  $u$ . А так мы бы сразу заметили, что после вынесения  $i\hbar$  возникла бы  $\frac{\partial u}{\partial x_1} + \frac{\partial u}{\partial x_2}$ , и так как  $u$  – функция от  $\hat{x}_1 - \hat{x}_2$ , эта конструкция обратилась бы в ноль для любой дифференцируемой функции  $u$ .

## Задача 2. Производная от оператора

Использованный приём один из двух ключевых при вычислении коммутаторов и всевозможных операторных конструкций. Разберёмся со вторым. Мы всегда можем определить какой-то оператор, являющийся функцией от других операторов. Но довольно часто можем вставить внутрь этой функции ещё какую-нибудь вещественную переменную. И тогда, если операторы, от которых зависит конструкция, считаем постоянными операторами при изменении этой вещественной переменной, получим операторнозначную функцию вещественной переменной.

То есть мы всегда можем всегда определить некую  $\hat{F}(x)$ , в которой областью определения, то есть множеством значений аргумента, является вещественная ось,  $x \in \mathbb{R}^1$ , но при этом  $\hat{F}$  принадлежит алгебре эрмитовых операторов, определённых в конкретном гильбертовом пространстве  $H$ . Таких конструкций можно создать достаточно много. Но интересно то, что у этой функции можно определить производную обычным образом, ведь бесконечно малое приращение вещественного аргумента  $x$  хорошо определяется, и написать

$$F'_x = \left( \frac{\Delta \hat{F}}{\Delta x} \right)_{\Delta x \rightarrow 0} \quad (1.30)$$

Более того, можно доказать, что правила вычисления производных в случае, когда мы дифференцируем по нормальной вещественной переменной  $x$ , будут абсолютно

такими же, как всегда. Добавится только замечание, что, если в этом определении фигурируют операторные коэффициенты, их нельзя безнаказанно переставлять.

В качестве примера рассмотрим операторнозначную функцию вещественной переменной

$$\hat{F}(x) \equiv e^{x(\hat{A}+\hat{B})} e^{-x\hat{A}} e^{-x\hat{B}} \quad (1.31)$$

Здесь мы ввели два операторных коэффициента  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  и вещественную переменную  $x$ , а что такое экспонента от оператора, мы знаем. Каждую из экспонент мы воспринимаем как разложение в ряд Тейлора. Оно для экспоненты простое, например

$$e^x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!} \quad (1.32)$$

Пусть  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  не будут произвольными операторными коэффициентами, коммутатор

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}, \quad (1.33)$$

где  $\hat{C}$  – некий оператор, и при этом коммутатор

$$[\hat{A}, \hat{C}] = [\hat{B}, \hat{C}] = 0 \quad (1.34)$$

То есть мы хотим в качестве коэффициентов в конструкции (1.31) опять взять пару операторов, коммутирующих со своим коммутатором. С ними легче работать, чем с произвольной парой эрмитовых операторов.

Разберёмся, можем ли мы вычислить функцию (1.31) как функцию  $x$  в более простом виде, не содержащем операторных коэффициентов  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$ . Такая функция удобна тем, что мы можем её продифференцировать обычным образом. Считая  $\frac{d\hat{F}}{dx}$ , мы будем, как всегда, дифференцировать произведение как сумму с дифференцированием каждого сомножителя. Сначала будем дифференцировать первую экспоненту. Производная по  $x$  как по обычной координате будет экспонента на производную показателя по  $x$ , равную  $\hat{A} + \hat{B}$ . Эту сумму можно поставить и справа и слева от экспоненты, потому что всякий оператор коммутирует с любой функцией от самого себя, что очевидно из определения функции от оператора, ведь она – разложение в ряд по степеням оператора. А всякий оператор коммутирует с любой степенью от самого себя и, как следствие, с любой их суммой. Так что оператор  $\hat{A} + \hat{B}$  коммутирует с этой экспонентой. Поставим его справа. Остальные экспоненты пока не трогаем.

Во втором случае нужно дифференцировать следующую экспоненту  $e^{-x\hat{A}}$ , и на этот раз выскочивший оператор  $-\hat{A}$  поставим слева от соответствующей экспоненты. В последнем слагаемом, где дифференцируем последнюю экспоненту, выскакивающий  $-\hat{B}$  тоже поставим слева от неё. В целом получится конструкция

$$\frac{d\hat{F}}{dx} = e^{x(\hat{A}+\hat{B})}(\hat{A} + \hat{B})e^{-x\hat{A}}e^{-x\hat{B}} + e^{x(\hat{A}+\hat{B})}(-\hat{A})e^{-x\hat{A}}e^{-x\hat{B}} + e^{x(\hat{A}+\hat{B})}e^{-x\hat{A}}(-\hat{B})e^{-x\hat{B}} \quad (1.35)$$

Вынесем за скобки общий множитель, которым слева является  $e^{x(\hat{A}+\hat{B})}$ , а справа  $e^{-x\hat{B}}$ . Будет

$$e^{x(\hat{A}+\hat{B})}\{(\hat{A} + \hat{B})e^{-x\hat{A}} - \hat{A}e^{-x\hat{A}} - e^{-x\hat{A}}\hat{B}\}e^{-x\hat{B}} \quad (1.36)$$

В скобке сократятся два слагаемых, и останется коммутатор  $[\hat{B}, e^{-x\hat{A}}]$ , мы недавно это вычисляли.  $e^{-x\hat{A}}$  придётся дифференцировать по  $\hat{A}$  как по символу, а вытаскивать нужно  $[\hat{B}, \hat{A}] = -iC$ , поэтому

$$[\hat{B}, e^{-x\hat{A}}] = -i\hat{C}(-xe^{-x\hat{A}}) = i\hat{C}xe^{-x\hat{A}} \quad (1.37)$$

$x$  в (1.37) – число, которое можно вынести за все экспоненты. Оператор  $\hat{C}$ , хоть это и не число, коммутирует со всеми функциями от  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$ , потому что он коммутирует с ними по отдельности, так что его тоже можно вынести. Тогда из (1.36) получится

$$xi\hat{C}e^{x(\hat{A}+\hat{B})}e^{-x\hat{A}}e^{-x\hat{B}} = xi\hat{C}\hat{F} \quad (1.38)$$

Сравним начало (1.35) и конец (1.38). Производная  $\frac{d\hat{F}}{dx}$  равна  $xi\hat{C}$ , умноженному на тот же самый оператор  $\hat{F}$ . Дополним это дифференциальное уравнение для операторнозначной функции.

У нас есть обыкновенное дифференциальное уравнение на операторнозначную функцию обыкновенной вещественной переменной  $x$ . И есть очевидное начальное условие: если в определении этой функции положим  $x = 0$ , все экспоненты превратятся в  $e^0 = 1$ . Поэтому для функции  $\hat{F}(x)$  будет начальное условие

$$\hat{F}(0) = 1 \quad (1.39)$$

Такие дифференциальные уравнения с заданным начальным условием мы решать умеем. Функция, у которой производная пропорциональна самой функции, это экспонента. Так что можно написать

$$\hat{F}(x) \equiv e^{x(\hat{A}+\hat{B})}e^{-x\hat{A}}e^{-x\hat{B}} = e^{i\frac{x^2}{2}\hat{C}}, \quad (1.40)$$

потому что видно, что производная выражения справа по  $x$  выдаст как раз выражение (1.38).  $\int_0^x x dx = \frac{x^2}{2}$ . Эта другая операторнозначная функция вещественной переменной  $x$  имеет ровно такую же производную при каждом значении  $x$  и подчиняется тому же начальному условию (1.39). Математики в теории обыкновенных дифференциальных уравнений доказали теоремы существования и единственности, и, так как это функция обычной вещественной переменной, несмотря на операторные коэффициенты, мы можем распространить эти теоремы на данный случай. Раз эта функция подчиняется этому уравнению и удовлетворяет тому же начальному условию, данное уравнение первого порядка – та же самая функция.

Если в формуле (1.40) для упрощения записи положим  $x = 1$ , получится

$$e^{x(\hat{A}+\hat{B})}e^{-\hat{A}}e^{-\hat{B}} = e^{\frac{i}{2}\hat{C}} \quad (1.41)$$

Умножим (1.41) слева на  $e^{\hat{B}}e^{\hat{A}}$ . Тогда будет  $e^{-\hat{B}}e^{\hat{B}} = 1$ . Несмотря на то, что  $\hat{B}$  оператор, так как он коммутирует сам с собой, все алгебраические выкладки для такой конструкции, даже если мы запишем её в виде ряда Тейлора и перемножим, будут такими же, как для числовой функции. Поэтому также получим  $e^0 = 1$ . После этого  $e^{\hat{A}}$  умножим на  $e^{-\hat{A}}$  и опять получим 1. То есть слева остаётся просто  $e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\frac{i}{2}\hat{C}}$ .

Тем самым мы доказали утверждение. Для коммутирующих между собой  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$ , понятно, что  $e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}$  как для чисел. Для пары операторов, коммутирующих со своим коммутатором, можно записать

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\frac{i}{2}\hat{C}}e^{\hat{B}}e^{\hat{A}} \quad (1.42)$$

Изложенное доказательство можно немного переделать, чтобы доказать, что (1.42) можно записать как

$$e^{-\frac{i}{2}\hat{C}}e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}, \quad (1.43)$$

где  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  в более естественном порядке. Получается, что для пары операторов, коммутирующих со своим коммутатором, добавляется ещё одна экспонента с коммутатором  $i\hat{C}$  и множителем  $-\frac{1}{2}$ . А для общего случая, когда будет произвольная пара некоммутирующих операторов, не будет работать даже (1.42) и (1.43). Там связь  $e^{\hat{A}+\hat{B}}$  с  $e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}$  будет ещё сложнее.

Эта выкладка учит тому, что из-за некоммутативности операторов очень многие операторные формулы приобретают не совсем привычный вид, и мы каждый раз должны думать, что делать.

Для получения формулы (1.43) нужно было вместо (1.31) записать функцию

$$G(x) = e^{x(\hat{A}+\hat{B})}e^{-x\hat{B}}e^{-x\hat{A}}, \quad (1.44)$$

тогда она после аналогичных преобразований превратилась бы вместо (1.40) в

$$e^{-i\frac{x^2}{2}\hat{C}} \quad (1.45)$$

Из обеих функций (1.40) и (1.45) можно было бы выразить конструкцию  $e^{\hat{A}+\hat{B}}$  при  $x = 1$ , но из  $F(x)$  получилось бы выражение (1.42), а из  $G(x)$  (1.43)

Чтобы поработать с операторнозначной функцией вещественной переменной  $x$ , в качестве ещё одной дополнительной задачи, помимо той, что была на лекции, предложим ещё одну.

Докажите, что для любых эрмитовых операторов  $\hat{A}, \hat{B}$ , то есть не обязательно для коммутирующих со своим коммутатором, как было до сих пор, операторное тождество представимо в виде ряда

$$e^{\hat{A}} \hat{B} e^{-\hat{A}} = \hat{B} + \frac{1}{1!} [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2!} [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \dots + \frac{1}{n!} [\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, \dots, [\hat{A}, \hat{B}]]]] + \dots \quad (1.46)$$

В последнем написанном слагаемом  $n$  открывающихся и закрывающихся скобок, то есть это будет  $n$ -кратный коммутатор, когда мы  $n$  раз коммутируем оператор  $\hat{B}$  с  $\hat{A}$ .

Нужно доказать всё равенство, а не его часть. Иногда люди разлагают экспоненты слева до  $\hat{A}^2$ , потом занимаются преобразованиями, выкидывая  $\hat{A}^3$  и более высокие степени, в итоге получают равенство для первых трёх слагаемых ряда справа и говорят, что очевидно, что дальше тоже будет всё верно. Но доказательство предполагает, чтобы мы доказали, что такой вид имеет произвольный  $n$ -й член ряда. Мы будем часто пользоваться этой формулой в разных приложениях.

### Унитарные операторы

На лекции мы говорили, что помимо эрмитовых операторов есть ещё один особый класс операторов по отношению к операции эрмитова сопряжения – так называемые унитарные. По определению, это такие операторы, у которых обратный совпадает с эрмитово сопряжённым:

$$\hat{u}^{-1} = \hat{u}^+ \quad (1.47)$$

Мы понимаем это в наиболее общем смысле, что

$$\hat{u} \hat{u}^+ = \hat{u}^+ \hat{u} = 1, \quad (1.48)$$

1 – единичный оператор. Математики иногда определяют отдельно операторы, обратные слева и справа, в некоторых операторных алгебрах они даже могут не совпадать. Но в реальных приложениях это, как правило, не нужно.

Сделаем небольшое методологическое отступление. Мы уже второй раз говорим фразу, что не будем что-то делать по той причине, что в практических приложениях это не используется. Тогда мы говорили про то, что можно искать решение канонических коммутационных соотношений для нелинейной реализации операторов  $\hat{x}$  и  $\hat{p}_x$  в заданном представлении гильбертова пространства. В теоретической физике мы такие слова произносим очень часто.

Математические конструкции уже в 20-м веке были доведены до состояния, что теоретическая физика не может освоить даже их десятую часть. Причина в взятом ею на вооружение философском принципе бритвы Оккама: не умножай сущности без необходимости. Если что-то в мире можно объяснить простым набором сущностей, не надо рассматривать объяснения того же самого, используя гораздо более сложные и расширенные.

Мы вовсе не уверены, что этот принцип правильный. Он лишь экономит нам силы и позволяет формализовать путь развития науки. Потому, если придумывают что-то, значительно превышающее возможности современной математики, от этого обычно отказываются. Ведь непонятно, выйдет ли из этого что-то, и куда мы забредём, а сил будет потеряно очень много.



Примеров этого довольно много. В частности, мы пользуемся при построении теорий формальной логикой, все математические конструкции формально логичны. Если говорить точнее, мы пользуемся бинарной (бивалентной) формальной логикой, где логическая переменная имеет только два значения: true и false, на которой построена вся математика.

Но можно определить логическую переменную с тремя, пятью значениями или вообще со счётным количеством значений, чтобы была поливалентная логика. На её базе можно строить теоретическую физику, которая будет богаче. Но доказать какую-то теорему даже в рамках пентавалентной логики для человека будет чрезвычайно сложно, к тому же пока в этом нет необходимости.

Но опять же, мы часто пользуемся геометрией, и для определения метрических свойств локальной геометрии, как правило, используем метрику, то есть определение скалярного произведения. Через данную конструкцию в геометрии определяются расстояние и углы. Там будем какой-нибудь бесконечно малый элемент длины, расстояния, интервал – название зависит от того, какая геометрия нами используется, например, евклидова трёхмерная, минковского четырёхмерная или риманова четырёхмерная. От этого зависит, как мы построим конструкцию. Но мы всегда строим элемент  $ds^2$  как квадратичную комбинацию дифференциалов координат, которые ввели для арифметизации нашего пространства. То есть, например, всегда пишем квадрат длины как билинейную комбинацию произведений дифференциалов координат через метрический тензор,

$$ds^2 = g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu, \quad (1.49)$$

где мы использовали четырёхмерные обозначения, о которых знаем из курса электродинамики.

С такой конструкцией можно работать, но кто сказал, что  $ds^2$  – именно билинейная комбинация? Справа можно добавить какую-нибудь степень. Нечётные добавлять нехорошо, потому что в реальности будут получаться разные нехорошие геометрии. А финслеровы геометрии, где допускаются любые чётные степени, не плохие, просто другие.

Есть фундаментальный труд и десятка четыре статей, посвящённых им и их применению в теоретической физике. Над этим работало несколько энтузиастов. Они пришли к выводу, что на данном языке можно написать все имеющиеся теории и даже какие-то, которых у нас нет. Но пока это не нужно.

Мы не говорим про всякие разновидности. В своё время был математик Схоутен, который доказал, что разных дифференциальных геометрий даже в рамках подхода (1.49) существует 27 штук. Их так и называют геометриями схоутена. Но в теоретической физике используются максимум две – геометрия Римана и иногда геометрия Римана – Картана, где к обычному искривлению пространства добавляется кручение. Добавлять туда другие схоутены никто не хочет, потому что никто не может толком что-то

представить в других геометриях схоутена. Даже в четырёхмерной геометрии образно вообразить что-то сложно.

То есть теоретическая физика с одной стороны всегда использует математику на полную, а с другой сознательно ограничивает себя, говоря, что ей полезна не всякая математика, а лишь имеющая практическую ценность. Время от времени мы получаем неканонические теории в теоретической физике, которыми не занимается никто, кроме их автора и нескольких учеников. Их в действительности довольно много, и они ждут своего часа, который наступит, когда каноническая концепция столкнётся с непреодолимыми трудностями. Так в теоретической физике случаются научные революции и происходит смена генеральной парадигмы.

Рождение квантовой теории было одной из таких научных революций. Когда мы внесли вероятностную интерпретацию, поменяли представления людей о мире. Мы уже видели на некоторых примерах, что в квантовой теории возникают принципиально новые алгоритмы даже для описания каких-то человеческих действий. И они иногда работают в реальном мире несмотря на то, что построены на вероятностной динамике – теории, в которой предсказываются не исходы конкретных событий, а вероятности возможных вариантов этих исходов.

Это совсем другой мир, и мы будем учиться жить в нём. В качестве первого шага мы учимся работать с операторнозначными величинами, потому что это математика, которая понадобится нам для решения задач в этом мире.

Вернёмся к унитарным операторам. Если есть некий унитарный оператор  $\hat{u}$ , он практически всегда представим в виде

$$\hat{u} = e^{i\hat{F}}, \quad (1.50)$$

где  $\hat{F}$  – эрмитов оператор. Действительно, если  $\hat{F} = \hat{F}^+$ , то  $\hat{u}^+$  превращается в  $e^{-i\hat{F}^+}$ , то есть в  $e^{-i\hat{F}}$ . Тогда, разумеется, выполнится (1.48), исходя из нашего опыта работы с экспоненциальными функциями в степени оператора.

Но в математике к унитарным операторам часто применяют такое понятие как группы. Класс операций образует группу, если те обладают групповым свойством, то есть если любые две операции из этой группы можно определить как одну из этой же группы.

Пусть у нас есть унитарный оператор, являющийся функцией некоего вещественного параметра, причём он определён как

$$\hat{u}(\alpha) \equiv e^{i\alpha\hat{F}}, \quad (1.51)$$

где  $\hat{F}$  – некий эрмитов оператор, постоянный с точки зрения переменной  $\alpha$ , то есть не зависящий от неё. Тогда можно легко доказать, что эти унитарные преобразования в нашем гильбертовом пространстве образуют группу. Ведь если есть унитарные операторы  $\hat{u}(\alpha_1)$  и  $\hat{u}(\alpha_2)$ , и их произведение определено как последовательные действия, то, так как  $\hat{F}$  сам с собой коммутирует,

$$\hat{u}(\alpha_1)\hat{u}(\alpha_2) = e^{i\alpha_1\hat{F}} \cdot e^{i\alpha_2\hat{F}} = e^{i(\alpha_1+\alpha_2)\hat{F}} = \hat{u}(\alpha_1 + \alpha_2) \quad (1.52)$$

В общем курсе математики даётся не так много элементов теории групп, но понятие генератора группы преобразований там есть. Соотношение (1.51) – это запись группового элемента через генератор группы. Оно определяет группу, называемую группой  $U1$ , унитарной одномерной группой, а оператор  $\hat{F}$  является её генератором.

Понятно, что

$$\hat{u}(\alpha_1)\hat{u}(\alpha_2) = \hat{u}(\alpha_1 + \alpha_2) = \hat{u}(\alpha_2)\hat{u}(\alpha_1), \quad (1.53)$$

то есть преобразования коммутируют между собой. С нашей точки зрения, это следствие того, что у нас использовался всего один генератор, который сам с собой коммутирует. Такие группы в теории групп называются абелевы. Существуют и неабелевы группы, у которых преобразования не обязаны коммутировать между собой. С точки зрения унитарной группы это всегда означает, что у нас должны появиться несколько генераторов, которые могут не коммутировать между собой.

В этом случае можно определить общую унитарную группу, которая будет, допустим,  $\hat{u}(\alpha^i)$ , где  $i = 1, \dots, n$ . При этом число  $n$  естественным образом называют размерностью данной унитарной группы, которую мы записываем как

$$\hat{u}(\alpha^i) = e^{i\alpha^i\hat{F}_i}, \quad (1.54)$$

где есть  $n$  генераторов  $\hat{F}_1, \dots, \hat{F}_n$ . Это набор независимых генераторов, которые мы воспринимаем как разные операторы. И в (1.54) показатель экспоненты – их линейная комбинация с разными групповыми параметрами  $\alpha^i$ .

Свойства получившей группы будет однозначно определяться алгеброй генераторов группы, то есть тем, как выражается коммутатор  $[\hat{F}_i, \hat{F}_j]$  через линейную комбинацию тех же самых генераторов. Генераторы являются эрмитовыми операторами, коммутатор двух эрмитовых операторов антиэрмитов оператор. Так что, если мы вытащим множитель  $i$ , получится эрмитов оператор. Его можно разложить по той же самой системе генераторов и записать

$$[\hat{F}_i, \hat{F}_j] = iC_{ijk}\hat{F}_k, \quad (1.55)$$

подразумевая, как обычно, сумму по всем значениям индекса  $k$ .

Если это так, знание величин  $C_{ijk}$ , если нам их сообщили, будет означать, что мы знаем все свойства данной группы. Эти величины называют структурными константами данной группы унитарных преобразований, и они действительно однозначно определяют группу.

Например, если  $n = 3$ , то есть три описанных оператора, а

$$C_{ijk} = \varepsilon_{ijk}, \quad (1.56)$$

то есть обычный символ Леви-Чивиты, эта группа будет группой, называемой в математике  $SO_2$ . Специальной унитарной двумерной группой или группой матриц  $2 \times 2$ , которые подчинены двум условиям – унитарности и единичности детерминанта. Термин

«специальная» как раз означает, что мы нормируем всякую матрицу условием, что детерминант равен единице.

Любая комплексная матрица  $2 \times 2$ , вообще говоря, содержит 4 комплексных числа, то есть 8 вещественных. Но как только мы вводим условие унитарности (1.47), получаем 4 независимых уравнения, и из 8 независимых вещественных параметров остаётся 4. Когда добавляем условие единичности детерминанта, получаем ещё одно уравнение, так что остаётся всего 3 независимых параметра. Поэтому группа  $SO(2)$  является трёхмерной, у неё 3 независимых генератора, и мы можем любое такое преобразование, матрицу, записать в форме (1.54), где будет 3 вещественных параметра  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ , её задающих.

Данная математика нам понадобится, ведь группа  $SO(2)$  в частности группа спина, изоспина и нескольких других. А группа  $SO(3)$  с размерностью 8 – это группа цвета. То есть такие группы довольно часто имеют связь с реальными наблюдаемыми реальными систем микрочастиц. Поэтому мы будем использовать элементы теории групп в квантовой теории, и часть их мы сегодня изучили.

## Семинар 2. Теория представлений

### Контрольный опрос

1) Точечная частица может двигаться в трёхмерном евклидовом координатном пространстве  $\mathbb{R}^3$ . Сформулируйте для неё определение волновой функции импульсного представления.

2) Запишите действие трёхмерных операторов координаты  $\hat{r}$  и импульса  $\hat{p}$  на волновые функции, которые определите в вопросе 1), то есть на волновые функции импульсного представления для точечной частицы, движущейся в трёхмерном пространстве. На лекции мы говорили почти о том же, только о координатном представлении и для одномерного случая.

3) Гамильтониан линейного гармонического осциллятора прямо введён как функция операторов координаты и импульса одномерной системы

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{\mu\omega^2 \hat{x}^2}{2} \quad (2.1)$$

Запишите его в пространстве волновых функций импульсного представления  $\tilde{\psi}(p)$ .

4) В пространстве  $L_2$  волновых функций координатного представления для одномерной системы  $\psi(x)$  определён оператор  $\hat{T}_x(a)$ . Действуя на любую координатную волновую функцию, он преобразует её как

$$\hat{T}_x(a)\psi(x) \equiv \psi(x+a) \quad (2.2)$$

Поэтому его естественно назвать оператором трансляции, то есть сдвига по оси  $x$  на  $a$ .

Опишите действие этого оператора на волновую функцию импульсного представления, то есть  $\hat{T}_x(a)\tilde{\psi}(p)$  для той же точечной частицы, совершающей одномерное движение.

### Ответы на контрольный опрос

1) На лекции было дано определение волновой функции как функции, у которой областью определения является множество значений переменной:

$$\tilde{\psi}(\vec{p}) = \langle \vec{p} | \psi \rangle \quad (2.3)$$

В данном случае трёхмерный импульс  $\vec{p}$  пробегает всё трёхмерное вещественное пространство,  $\vec{p} \in \mathbb{R}^3$ . А множество значений – комплексные числа, даваемые скалярными произведениями, как в формуле (2.3).  $\vec{p}$  – общий собственный вектор трёх операторов  $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$ :

$$\hat{p}_{x,y,z}|\vec{p}\rangle = p_{x,y,z}|\vec{p}\rangle \quad (2.4)$$

Для трёхмерного движения число степеней свободы три, полный набор наблюдаемых содержит три попарно коммутирующих независимых оператора. И когда мы говорим об импульсном представлении, то предполагаем, что эти операторы как раз

$\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$ . Так что берём их общий собственный вектор, считаем скалярное произведение на вектор состояния  $\psi$  (2.3), и это даёт определение импульсной волновой функции.

Её можно определить и фактологически, сказав, что это некая функция, определённая в пространстве  $\mathbb{R}^3$ , у которой множество значений такая комплексная функция, что, например, квадрат её модуля даёт плотность вероятности обнаружения того или иного значения импульса. Но когда мы даём определение через плотность, добавляем дополнительные соображения, немного убираем интерференционные эффекты, так как говорим только о квадрате модуля волновой функции, а не о ней самой.

2) В своём собственном представлении любой оператор определяется как умножение на аргумент. Поэтому

$$\hat{p}\tilde{\psi}(p) = \vec{p}\tilde{\psi}(\vec{p}) \quad (2.5)$$

Разумеется, в (2.5) на самом деле определены три оператора,  $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$ , и каждый из них вытаскивает свою компоненту импульса  $\vec{p}$  в этой записи. Ведь это просто обобщённая запись в векторной форме для трёх разных соотношений. А действие оператора  $\hat{x}$  надо построить исходя из канонического коммутационного соотношения.

В этом случае решение будет строиться также, как в координатном пространстве, потому что математические задачи эквивалентны. Единственное отличие, что меняется порядок операторов. В каноническом коммутационном соотношении координата с импульсом коммутируют на  $i\hbar\hat{1}$ , если относятся к одному измерению, и на 0, если к разным.

Поэтому нужно записать его через оператор дифференцирования, но с другим знаком, так как при перестановке операторов в коммутаторе тот меняет знак. То есть вместо  $i\hbar\frac{\partial}{\partial r}$  надо написать

$$\hat{r} = +i\hbar\frac{\partial\tilde{\psi}}{\partial\vec{p}} \quad (2.6)$$

(2.6) опять в векторной форме записи, но можно записать и покомпонентно, например,

$$\hat{x} = +i\hbar\frac{\partial\tilde{\psi}}{\partial p_x} \quad (2.7)$$

(2.6) и (2.7) – определения операторов координаты и импульса в импульсном пространстве. Они почти такие же, как в координатном, только меняются местами, и в одном месте происходит замена знака.

3) После этого понятно, что, если в одномерном случае действовать на волновую функцию оператором  $\frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2}$ , первое слагаемое будет действовать как умножение на аргумент, а второе как раз через оператор дифференцирования. Тогда будет

$$\left(\frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2}\right) \tilde{\psi}(p) = \frac{p^2}{2m} \tilde{\psi} - \frac{m\omega^2 \hbar^2}{2} \frac{\partial^2 \tilde{\psi}}{\partial p^2} = \frac{p^2}{2m} \hat{\psi} - \frac{m\omega^2 \hbar^2}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial p^2}, \quad (2.8)$$

перед вторым слагаемым справа минус, потому что  $i^2$  даёт  $-1$ .

Очень важно сопоставить это с выражением, которое было в координатном представлении. В (2.8) та же самая комбинация операторов, первое слагаемое справа – умножение на квадрат аргумента, второе – вторая производная. Просто коэффициенты имеют немного другой вид из-за другой размерности переменной. В действительности самое важное, что эти операторы одинаковы по математическому содержанию. То есть вид оператора Гамильтона, оператора энергии для осциллятора, с точки зрения математика совершенно одинаков в координатном и импульсном представлении.

Поэтому, когда мы будем, например, решать спектральную задачу на собственные значения и собственные функции, те тоже окажутся совершенно одинаковы. Если собственные функции гамильтониана в координатном представлении – это присоединённые функции Эрмита, они же будут его собственными функциями в импульсном представлении. Только будет другая размерность переменной. Если полиномы Эрмита, экспоненты в координатном представлении мы пишем через обезразмеренную координату  $x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$ , для импульса будет обезразмеривание  $\frac{p}{\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}}$ . А внешний вид собственных функций в безразмерной форме будет одинаковым.

Это важное и уникальное свойство осцилляторной задачи. Такая симметрия зависимости от координаты и от импульса из всех одномерных задач в нерелятивистской механике характерна только для осциллятора.

**4)** В течение семестра в контрольных опросах всегда будет один вопрос, как правило, четвёртый, для которого нужно не просто знать тему, а ещё и придумать, как применить эти знания в конкретном случае.

Самый простой способ понять, как некий оператор действует на волновую функцию импульсного представления, – выразить его через оператор импульса. Потому что единственный оператор, который просто и понятно действует на  $\tilde{\psi}(p)$ , это оператор импульса, действующий как умножение на аргумент.

Мы можем записать оператор  $\hat{T}_x(a)$  через оператор импульса, вспоминая, что оператор импульса – это оператор дифференцирования. Если мы для  $\psi(x + a)$  пишем ряд Тейлора, разложение по  $a$  в окрестности точки  $x$ , и пишем там оператор дифференцирования, формальная запись

$$\psi(x + a) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^n \psi(x) a^n \quad (2.9)$$

Мы помним, что оператор

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (2.10)$$

Если заменить  $\frac{\partial}{\partial x}$  в (2.9) на выражение  $\frac{i\hat{p}_x}{\hbar}$ , полученное из (2.10), обнаружим, что в (2.9) будет стоять

$$\left( \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left( \frac{ia\hat{p}_x}{\hbar} \right)^n \right) \psi(x) \quad (2.11)$$

Вспоминая, как определяется функция от оператора, понимаем, что это в точности соответствует экспоненте в степени  $\frac{ia}{\hbar} \hat{p}_x$ . То есть наш оператор трансляции по координате может быть записан через оператор импульса как

$$\hat{T}_x(a) = e^{\frac{ia}{\hbar} \hat{p}_x} \quad (2.12)$$

Теперь его действие на  $\tilde{\psi}(p)$  тривиально, так как каждый оператор  $\hat{p}_x$ , подытожив на  $\tilde{\psi}(p)$ , выдаёт просто  $p$ . Следовательно, действие  $\hat{T}_x(a)$  на  $\tilde{\psi}(x)$  выдаёт просто умножение на такую экспоненту:

$$\hat{T}_x(a)\tilde{\psi}(x) = e^{\frac{iap}{\hbar}} \tilde{\psi}(p) \quad (2.13)$$

В некотором смысле можно заявить, что для нашего оператора трансляции любая  $\tilde{\psi}(p)$  является собственной функцией. Но при этом собственные значения – не постоянные числа,  $p$  в  $e^{\frac{iap}{\hbar}}$  – величина, связанная со значением аргумента функции. Данное утверждение не совсем корректное, но оно подчёркивает некоторые свойства данной функции. Мы будем пользоваться оператором трансляции и в реальных физических задачах.

Ещё обратим внимание на случай, когда мы действуем  $\hat{T}_x(a)$  на произвольную координатную функцию (можно и на импульсную, но для координатной будет интереснее) последовательно двумя операторами. Если мы действуем оператором  $\hat{T}_x(a_1)$  на результат действия  $\hat{T}_x(a_2)$  на произвольную функцию  $\psi(x)$ , воспользовавшись определением операторов (2.8), получим, что это  $\psi(x + a_1 + a_2)$  и то же самое, как если бы мы действовали оператором  $\hat{T}_x(a_1 + a_2)$  на функцию  $\psi(x)$ :

$$\hat{T}_x(a_1)\hat{T}_x(a_2)\psi(x) = \psi(x + a_1 + a_2) = \hat{T}_x(a_1 + a_2)\psi(x) \quad (2.14)$$

Это прямолинейное доказательство, базирующееся на определении операторов, которое доказывает, что данные операторы образуют группу. Мы проверили групповое свойство и теперь может утверждать, что операторы трансляции образуют группу в пространстве координатных волновых функций. И пространстве импульсных тоже.

Более того, когда мы поняли, что можем записать оператор в виде (2.12), фактически установили, что  $\frac{\hat{p}_x}{\hbar}$ , оператор импульса с точностью до размерного множителя  $\frac{1}{\hbar}$ , генератор группы трансляции. Ведь, как мы говорили, любое групповое



преобразование через генератор записывается как экспонента, у которой в степени  $i$ , какой-то параметр и генератор. Параметром трансляции здесь является величина сдвига, на которую мы сдвинули по координате аргумент нашей функции.

То есть мы видим, что импульс является генератором трансляции по координате. Если вспомнить курс теоретической механики, тогда, например, оператор момента импульса должен быть генератором поворота.

Впоследствии мы сразу должны будем догадываться, что если группы преобразований, например, группа трансляций, будут оставлять гамильтониан системы инвариантным, то есть не будут его изменять, то это будет как раз симметрия динамики системы. Теорема Нётера, с которой мы сталкивались в классической механике и которая существует и в квантовой, выдаст, что существует интеграл движения. И в данном случае он будет генератором данной группы, являющейся группой симметрии динамики.

Инвариантность относительно трансляций по координате означает, что в системе должен сохраняться импульс нашего объекта. Например, с точки зрения задачи об одномерной частице, движущейся в потенциальном поле с формой потенциальной энергии  $U(x)$ , требование, что  $U(x + a) = U(x)$  для произвольного  $a$ , для любой хоть немного нетривиальной функции фактически будет означать, что  $U$  от  $x$  не зависит. А там, где потенциальная энергия не зависит от координаты, внешняя сила равна нулю. А в отсутствие внешних сил импульс объекта сохраняется.

Так что здесь эта связь тоже будет реализовываться. И такая абстрактная математическая вещь, как теория групп, сможет много сказать о динамике каждой конкретной системы, если мы сумеем её туда каким-то образом втиснуть.

Посмотрим конкретный пример из списка обязательных задач, который позволит поработать с теорией представлений.

### Задача 1. Гамильтониан частицы в пространстве координатных и импульсных функций

Пусть гамильтониан одномерной точечной частицы во внешнем потенциальном поле имеет вид

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + u_0 \cos\left(\frac{\hat{x}}{a}\right), \quad (2.15)$$

где  $m, u_0, a$  – константы, характеризующие данную систему.  $m$  – масса,  $u_0$  и  $a$  задают потенциальную энергию.  $u_0$  – как бы амплитуда её изменения,  $2\pi a$  – период, так как косинус – периодическая функция с периодом  $2\pi$ . То есть это некий периодический потенциал.

Предлагается записать этот оператор в пространстве координатных и импульсных волновых функций.

1) Если начать с координатного представления, будет видно, что мы имеем дело с тривиальным техническим упражнением. В данном представлении оператор  $\hat{p}_x$

превратится в  $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ , а оператор  $\hat{x}$  просто в  $x$ , значение аргумента. Поэтому, учитывая, что система одномерная, в  $\psi(x)$  одна переменная, так что не нужна даже частная производная, будет

$$\hat{H}\psi(x) = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + u_0 \cos\left(\frac{\hat{x}}{a}\right) \psi \quad (2.16)$$

То есть действие нашего оператора является действием линейного однородного дифференциального оператора второго порядка. И, например, уравнение на собственные значения и собственные функции

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x), \quad (2.17)$$

где  $E$ , как обычно обозначают, собственные функции гамильтониана, так как он оператор энергии, приведёт нас к обыкновенному дифференциальному уравнению второго порядка на собственные функции.

Оно будет внешне простым, но решения в элементарных функциях у него не будет, коэффициентная функция с косинусом для аналитического дифференциального уравнения второго порядка создаст некоторые проблемы. Но через спецфункции решение записать будет можно, так что это будет просто некая техническая задача.

2) Более интересно построить действие данного гамильтониана в импульсном представлении. В этом случае мы должны заметить  $\hat{p}_x^2$  просто на  $p^2$  при действии на функцию  $\tilde{\psi}(p)$ , а оператор  $\hat{x}$  надо заменить на  $i\hbar \frac{d}{dp}$ . То есть гамильтониан

$$\hat{H}\tilde{\psi}(p) = \frac{p^2}{2m} \tilde{\psi}(p) + u_0 \cos\left(\frac{i\hbar}{a} \frac{d}{dp}\right) \tilde{\psi}(p) \quad (2.18)$$

Сложно сказать, что мы уже записали этот оператор, потому что в (2.18) нужно подействовать на функцию косинусом от оператора дифференцирования. К счастью, мы знаем, как определяется функция от оператора через разложение в ряд. Функция косинуса хорошо разлагается в ряд Тейлора в окрестности нуля.

Но здесь для более простого понимания, что происходит на самом деле, лучше сразу воспользоваться для косинуса представлением через эйлеровы экспоненты. То есть написать

$$\cos\left(\frac{i\hbar}{a} \frac{d}{dp}\right) = \frac{1}{2} \left( e^{i\frac{\hbar}{a} \frac{d}{dp}} + e^{-i\frac{\hbar}{a} \frac{d}{dp}} \right) \quad (2.19)$$

В результате  $-ii$  даёт  $-1$ , и получается просто сумма экспонент, первая с минусом, вторая с плюсом. А мы уже видели, что разложение экспоненты, как только мы её распишем в ряд Тейлора, по сути даст ряд Тейлора. В данном случае каждая из двух экспонент будет рядом Тейлора по разложению функции  $\tilde{\psi}(p)$  (2.18), на которую она действует, в окрестности точки  $p$  со сдвигами в первом случае  $-\frac{\hbar}{a}$ , во втором  $+\frac{\hbar}{a}$ .

Поэтому, например, вторая экспонента, действуя на  $\tilde{\psi}(p)$ , выдаёт

$$e^{\frac{\hbar}{a} \frac{d}{dp}} \tilde{\psi}(p) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left( \frac{d}{dp} \right)^n \tilde{\psi}(p) \left( \frac{\hbar}{a} \right)^n = \tilde{\psi} \left( p + \frac{\hbar}{a} \right) \quad (2.20)$$

А первая выдаст такой же ряд, но с разложением по степеням  $-\frac{\hbar}{a}$ , и, следовательно,  $\tilde{\psi} \left( p - \frac{\hbar}{a} \right)$ . Тогда окончательная версия описания действия нашего гамильтониана на  $\tilde{\psi}(p)$

$$\hat{H} \tilde{\psi}(p) = \frac{p^2}{2m} \tilde{\psi}(p) + \frac{u_0}{2} \tilde{\psi} \left( p + \frac{\hbar}{a} \right) + \frac{u_0}{2} \tilde{\psi} \left( p - \frac{\hbar}{a} \right) \quad (2.21)$$

В случае 1) мы сразу сказали, что получился линейный однородный дифференциальный оператор второго порядка. Но здесь, если мы будем интерпретировать этот оператор как дифференциальный, он окажется линейным однородным дифференциальным оператором бесконечного порядка.

В выражении (2.21) мы видим, что действие оператора на функцию выдаёт вполне линейное выражение, но через нашу функцию и её значение по крайней мере в трёх точках. Математики называют операторы, которые, действуя на функцию, выдают комбинацию счётного числа значений функции в разных точках, квазилокальными. Локальный оператор – который в результате действия на функцию выдаёт что-то, связанное с самой функцией в точке и, может быть, конечное число производных в этой точке. Если он выдаёт просто через функцию в одной точке, это алгебраический локальный оператор. То есть перед нами алгебраический квазилокальный оператор.

В курсе математики была теория дифференциальных и интегральных уравнений, но не было теории квазилокальных, потому что она сложнее с точки зрения математических методов решения. С позиции дифференциальных исчислений уравнение  $H\psi = E\psi$  – дифференциальное уравнение бесконечного порядка, или просто квазилокальное. Но, тем не менее, возникает довольно обширный класс операторов, которые задают операторы наблюдаемых в пространствах волновых функций.

Если нам будет нужно искать собственные функции и значения нашего гамильтониана, мы предпочтём координатное представление, пусть даже там решение запишется не через элементарные функции. Надо лишь воспользоваться справочником или пакетом вроде вольфрам математика, чтобы узнать, через какие спецфункции можно записать фундаментальную систему решений этого линейного дифференциального уравнения второго порядка.

Поэтому, если нам захочется построить собственные функции в импульсном представлении, большинство математиков предпочтёт решить уравнение в координатном, а потом сделать Фурье-преобразование. Интегральная запись через Фурье-преобразование от некой спецфункции будет проще, чем решение уравнения (2.21) напрямую.

Это комментарий к тому, что выбор представления для каждой конкретной задачи, в целом, вопрос удобства. Причём мы уже сейчас готовы сказать, какие выборы надо делать во всех одномерных задачах данного типа. Проведём на базе опыта данной задачи их классификацию.

### Удобные представления для одномерных задач

Рассмотрим выбор «удобного» представления для решения задачи, если в общем виде,

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (2.22)$$

с гамильтонианами вида

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + u(\hat{x}) \quad (2.23)$$

(2.23) – произвольный гамильтониан для точечной частицы, совершающей одномерное движение в поле потенциальных сил.

$$0) u(x) = const \quad (2.24)$$

означает отсутствие внешних сил, свободное движение. Эту задачу можно решать в любом представлении, она слишком простая. Более того, в данном случае гамильтониан (2.23) просто функция от  $p_x$ . Она коммутирует с  $p_x$ , так что у него существует общая полная система собственных функций с оператором  $p_x$ . А эти собственные функции нам хорошо известны. Например, в координатном представлении это обычные плоские волны.

1) Пусть  $u(x)$  линейная функция

$$u(x) = -F(x - x_0) \quad (2.25)$$

Можно было бы записать и просто  $-F(x)$ , потому что это потенциальная энергия частицы в поле однородных сил, которые в каждой точке оси  $x$  равняются  $F$ , их  $x$ -проекция равняется  $F$ . Это движение точечной частицы под действием постоянной силы.

И в координатном, и в импульсном представлении (2.23) – линейный дифференциальный оператор. В импульсном представлении – первого порядка, а в координатном – второго. Линейное дифференциальное уравнение первого порядка проще, чем второго, поэтому этот случай проще решать в импульсном представлении.

Более того, мы рассмотрим данную задачу, когда будем обсуждать общую теорию одномерных систем. И сразу отметим, что в координатном представлении, как ни парадоксально, несложное обыкновенное дифференциальное уравнение второго порядка (2.23) не решается в элементарных функциях. Там собственными функциями будут так называемые функции Эйри. А в импульсном представлении (2.23) моментально интегрируется и решается гораздо проще.

2) Параболу

$$u(x) = \alpha + \beta x + \gamma x^2 \quad (2.26)$$

всегда можно свести сдвигом начала отсчёта по координате и по энергии к гармоническому осциллятору. Опять будет всё равно, брать координатное или импульсное представление, потому что задачи будут одинаковыми.

Но на самом деле мы будем использовать особое представление, которое по сути по нашей терминологии является энергетическим, то есть нам выгоднее всего будет использовать базис из собственных векторов оператора энергии. Мы назовём его представлением повышающих и понижающих операторов и рассмотрим позднее.

3) Для всех остальных  $u(x)$  удобнее брать координатное представление, потому что в нём в задаче из-за первого слагаемого в (2.23) всегда будет дифференциальный оператор второго порядка. А импульсном благодаря второму слагаемому он будет более сложным, так как  $u(x)$  будет зависеть сложнее, чем квадратичным образом.

В следующих задачах мы будем работать с конкретными волновыми функциями, координатными.

## Задача 2. Средние значения и дисперсии координаты и импульса частицы

Точечная частица совершает одномерное движение, описываемое координатной волновой функцией

$$\psi_{Dp}(x) = \frac{1}{(2\pi D)^{\frac{1}{4}}} e^{-\frac{x^2}{4D} + \frac{i}{\hbar} px}, \quad (2.27)$$

где  $D, p$  – два вещественных параметра, причём  $D$  положителен.

Нужно исследовать её состояние – найти средние значения и дисперсии координаты и импульса частицы в нём, то есть  $\bar{x}_\psi, \bar{p}_{x\psi}, D_\psi x, D_\psi p_x$ .

Здесь нужно действовать максимально прямолинейно. Например, если интересуется  $\bar{x}_\psi$ , мы либо идём от прямого определения среднего

$$\bar{x}_\psi = \langle \psi | \hat{x} | \psi \rangle, \quad (2.28)$$

а потом пользуемся записью для этой конструкции координатного представления. Либо, сразу вспоминая физический смысл волновой функции координатного представления, что  $|\psi|^2$  как раз плотность вероятности выпадения разных значений координаты, пишем (2.27) как интеграл

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot x |\psi(x)|^2 \quad (2.29)$$

После этого нужно не подставлять в (2.29)  $\psi(x)$  и не расписывать, а сказать, что  $|\psi|^2$ , квадрат модуля  $e^{\frac{i}{\hbar} px}$  из (2.27), которая будем иметь мнимый показатель, даст 1, а квадрат модуля остального выдаст чётную функцию от  $x$ , быстро сходящуюся при

$x \rightarrow \pm\infty$  из-за  $e^{-x^2}$ . Тогда (2.29) – сходящийся симметричный интеграл от нечётной функции за счёт множителя  $x$ . Поэтому среднее значение координаты в этой задаче ноль.

Тогда легко посчитать и дисперсию координаты, потому что квадрат среднего будет равен нулю, а среднее от  $x_\psi^2$  будет выражаться таким же интегралом, как (2.27), только на месте  $x$  будет стоять  $x^2$ . И, расписывая функцию (2.27) в явном виде,

$$D_\psi x = \overline{x_\psi^2} - \bar{x}_\psi^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot x \frac{1}{\sqrt{2\pi D}} e^{-\frac{x^2}{2D}} \quad (2.30)$$

Пусть мы не помним наизусть нормированных гауссовых распределений и пытаемся посчитать всё честно. Удобнее всего будет перейти к безразмерной переменной

$$t = \frac{x}{\sqrt{2D}} \quad (2.31)$$

Тогда в показателе экспоненты в (2.28) мы получим  $-t^2$ . Чтобы переделать  $dx$  в  $dt$ , есть  $\sqrt{2\pi D}$  в знаменателе. А чтобы переделать  $x^2$  в  $t^2$ , придётся поставить  $2D$  в знаменатель, как и перед интегралом, чтобы его сократить. Тогда из (2.30) получится

$$2D \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dt t^2 e^{-t^2} \quad (2.32)$$

Можно один раз проинтегрировать по частям, взяв 2 перед интегралом и понимая, что  $2t$  – как раз дифференциал от  $t^2$ . Чтобы было нагляднее, (2.32) можно переписать как

$$-\frac{D}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} t d(e^{-t^2}) \quad (2.33)$$

Когда мы воспользуемся формулой интегрирования по частям  $udv = uv - \int v du$ , свободная подстановка произведения  $t$  на  $e^{-t^2}$  на обоих пределах пределах занулится из-за экспоненты при  $t \rightarrow \pm\infty$ , и получится просто взятый со знаком минус интеграл с перекинутым дифференциалом. То есть из (2.33) получится

$$+\frac{D}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-t^2} dt \quad (2.34)$$

Дальше можно перемножить два таких интеграла и вычислить их в квадрате, перейдя потом к полярным координатам в повторном интеграле. А можно увидеть, что в (2.34) стоит интеграл Пуассона, равный  $\sqrt{\pi}$ , поэтому (2.34) выдаст  $D$ .

То есть автор задачи попросил найти то, что сообщил в условии. Он сделал  $D$  одним из параметров этих функций, а она оказалась одним из ответов – дисперсией координаты в данном состоянии. В целом, это формально математическая выкладка, и здесь специально придуманная функция, которую называют гауссовым волновым пакетом.

В задаче нужно найти ещё среднее значение импульса, а мы видим, что у этой функции в качестве параметра использована буква  $p$ . Похожее подозрение оправдается, когда произведём расчёт.

Тут придётся писать честно. В координатном представлении соответствующее скалярное произведение пишем как  $\int_{-\infty}^{+\infty} dx$ . Сопряжённая волновая функция  $\psi^*$  выдаст  $\frac{1}{(2\pi D^{\frac{1}{2}})^2} e^{-\frac{x^2}{4D} - \frac{i}{\hbar} px}$ . Минус перед вторым слагаемым в показателе экспоненты возник из-за сопряжения. Возведём нормировочный множитель в квадрат, чтобы не писать его дальше, он всё равно легко выскочит из-под знака дифференцирования. Дальше возникнет оператор импульса  $(-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x}$ , который, если учитывать вынос множителя, действует на экспоненту. То есть получится

$$\bar{p}_x \psi = \langle \psi | \hat{p}_x | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{1}{(2\pi D^{\frac{1}{2}})^2} e^{-\frac{x^2}{4D} - \frac{i}{\hbar} px} (-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x} \left\{ e^{-\frac{x^2}{4D} + \frac{i}{\hbar} px} \right\} \quad (2.35)$$

Производная экспоненты выдаст ту же экспоненту. Та, умножившись на сопряжённую, даст квадрат модуля, то есть  $e^{-\frac{x^2}{2D}}$ . И на производную показателя. Производная показателя экспоненты по  $x$  это  $-\frac{x}{2D} + \frac{i}{\hbar} p$ . Всё это надо будет умножить на  $-i\hbar$ .

Если умножить  $-\frac{x}{2D}$  на  $-i\hbar$ , получится  $+\frac{i\hbar x}{2D}$ . А дальше идёт умножение на сплошные вещественные функции, так как стоит квадрат модуля экспоненты. Так что это слагаемое должно было бы дать мнимый вклад в среднее значение импульса. Но среднее значение импульса должно быть вещественным числом. Уже из этого ясно, что интеграл, возникающий от первого слагаемого в производной показателя экспоненты, должен быть нулём.

С другой стороны, из нормировочного множителя и квадрата модуля экспоненты образуется чётная функция, быстро стремящаяся к нулю на бесконечностях, а множитель  $x$  из  $-\frac{x}{2D}$  превращает её в нечётную. Так что с этой точки зрения тоже понятно, что интеграл от первого слагаемого выдаст ноль.

А  $\frac{i}{\hbar} p$ , умноженное на  $-i\hbar$ , выдаёт просто  $p$ , которое выносится из-под знака интеграла. Получается

$$p \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{1}{\sqrt{2\pi D}} e^{-\frac{x^2}{2D}} \quad (2.36)$$

Как мы уже видели, это интеграл Пуассона, нормированный на единицу. Он равен единице, поэтому (2.34) выдаёт  $p$ , и ещё один параметр, загруженный в конструкцию функции, тоже является ответом на один из вопросов. Среднее значение импульса оказалось равно  $p$ .

Заложенные в функцию параметры закончились, так что на последний вопрос мы должны получить нетривиальный ответ. Дисперсию импульса надо честно вычислить, она должна уже быть функцией параметров заданной волновой функции (2.27).

В выражении для неё  $\overline{p_x^2}$  выдаст  $p^2$ . Для  $\overline{p_x^2}$  надо написать такой же интеграл, как (2.35), но с оператором  $p_x^2$ , то есть с  $(-i\hbar)^2$ , который даст  $-\hbar^2$ , и второй производной по  $x$ . Для краткости запишем просто через  $\psi_{Dp}^*$  и  $\psi_{Dp}$ . Будет

$$D_{\psi} p_x = \overline{p_x^2} - \overline{p_x^2} = -p^2 - \hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_{Dp}^* \frac{\partial^2}{\partial x^2} (\psi_{Dp}) \quad (2.37)$$

Вместо того, чтобы два раза дифференцировать экспоненту, сразу в интеграле (2.37) произведём интегрирование по частям. При таких интегрированиях по частям все свободные подстановки за счёт экспонент будут зануляться. Поэтому оно сведётся к изменению знака – перед интегралом в (2.37) окажется плюс, и к перекидыванию одной производной на вторую функцию  $\psi_{Dp}^*$ .

Получится  $\frac{\partial \psi^*}{\partial x} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial x}$ , то есть квадрат модуля производной. Когда мы один раз дифференцируем экспоненту, получается та же экспонента, умноженная на производную показателя. Та же экспонента, возведённая по модулю в квадрат, даст  $\frac{1}{\sqrt{2\pi D}} e^{-\frac{x^2}{2D}}$ , будет

$$-p^2 + \hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{\sqrt{2\pi D}} e^{-\frac{x^2}{2D}} \quad (2.38)$$

При дифференцировании показателя экспоненты выходит  $-\frac{x}{2D} + \frac{i}{\pi} p$ , тогда его квадрат модуля, учитывая, что это сумма вещественной и мнимой части,

$$\left| -\frac{x}{2D} + \frac{i}{\pi} p \right|^2 = \frac{x^2}{4D^2} + \frac{p^2}{\hbar^2} \quad (2.39)$$

При этом  $\frac{p^2}{\hbar^2}$  снабжён интегралом из (2.38), как уже знаем, равным единице. И множитель  $\hbar^2$  сократит  $\hbar^2$  в (2.39). И в целом интеграл с  $\frac{p^2}{\hbar^2}$  выдаст  $+p^2$ , который сократит  $-p^2$  в (2.38).

Выживет выражение с  $\frac{x^2}{4D^2}$  из (2.39). Получится, если выносить константы,

$$\frac{\hbar^2}{4D^2} \int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 \frac{1}{\sqrt{2\pi D}} e^{-\frac{x^2}{2D}} \quad (2.40)$$

Мы уже считали сегодня этот интеграл, когда вычисляли среднее от  $x^2$ , которое равняется дисперсии и, как выяснили,  $D$ . Поэтому интеграл в (2.40) равняется  $D$ , а само выражение, дисперсия импульса в гауссовом пакете,  $\frac{\hbar^2}{4D}$ . Она действительно считается нетривиально, но напрямую связана с дисперсией координат.



## Соотношение неопределённостей

Вычислим для гауссова пакета произведение дисперсии координаты на дисперсию импульса:

$$D_{\psi}x \cdot D_{\psi}p_x = \frac{\hbar^2}{4} \quad (2.41)$$

Мы доказали соотношение неопределённостей, в котором утверждалось, что для любой функции  $\psi(x)$

$$D_{\psi}x \cdot D_{\psi}p_x \geq \frac{\hbar^2}{4} \quad (2.42)$$

А для функции (2.27) оно строго равно  $\frac{\hbar^2}{4}$ . Как сказали бы теоретики, гауссов пакет минимизирует соотношение неопределённости координаты и импульса. То есть именно в состояниях, описываемых такими волновыми функциями, произведение дисперсий координаты и импульса имеет наименьшее возможное значение.

Сделаем два замечания. Во-первых, есть и другие функции, минимизирующие соотношение неопределённости, функция (2.27) – частный случай более общего вида. В качестве второй дополнительной задачи нужно найти наиболее общий вид волновой функции, минимизирующей соотношение неопределённости координаты и импульса для точечной частицы, совершающей одномерные движения. Так что нужно вставить все возможные изменения функции, при которых сохраняется свойство (2.41). Видно, что первые дополнительные задачи имеют отчётливый математический оттенок, так что лучше их выполнять на математическом уровне строгости, а не на физическом.

Во-вторых, мы обнаружили замечательный класс состояний, минимизирующих соотношение неопределённости, и ещё увидим примеры, как они проявляются в разных задачах. Самый интересный пример будет ждать нас, когда мы будем разбирать линейный гармонический осциллятор.

На физфаке есть группа на кафедре физики колебаний, которая занимается темой сверхточных измерений. У них ставится задача произвести измерение над макроскопическим телом с точностью до квантового предела, то есть чтобы ошибки были порядка тех, которые дают квантовые соотношения неопределённости.

Это не абстрактно-теоретическая, а вполне конкретная задача. Больше половины российских членов коллаборации LIGO, которые регистрировали гравитационные волны, состоит из сотрудников нашей кафедры физики колебаний. Для них это очень важные состояния, так как, когда нужно описать движение макроскопического тела на уровне квантовой точности, требуется умение находить у классических тел состояния с максимально маленькими дисперсиями интересующих нас переменных.

Существует теория сверхточных измерений, в которой используются такие состояния, обычно называемые когерентными состояниями макроскопических тел. Есть

даже обобщённые когерентные состояния для систем, где точно когерентные построить нельзя, но можно построить нечто, очень похожее на них.

Действительно, изучая теоретическую физику, мы постоянно должны помнить, что технические методы, которые мы рассматриваем, очень часто имеют важное физическое значение при описании реальных процессов и даже при изготовлении реальных установок. Например, добротность подвески зеркал резонатора в детекторе LIGO порядка  $10^9$ , то есть это устройство забывает, что его толкнули, только через миллиард периодов колебаний, только тогда амплитуда убывает в  $e$  раз. Да и отношение сигнала к шуму порядка  $10^{-6} - 10^{-7}$ , то есть из шума можно выделить сигнал, который слабее его в десять миллионов раз.

Мы посмотрели примеры изучения подобных систем и, поняв, как устроена теория представлений, готовы изучать следующую тему, которая позволит завершить формулирование системы аксиом. Нам пока не хватает аксиомы об эволюции. Мы её сейчас сформулируем, но основную часть обсуждения перенесём на следующую лекцию.

#### Аксиома 4. Об эволюции

Эволюция квантовой системы описывается соотношениями «картины» Шредингера, Газенберга, Дирака, ...

Кавычки в теоретической физике ставят, когда хотят подчеркнуть некоторую жаргонность введённого термина. В большинстве книг на этом месте встретится слово «представления», но мы не будем так делать, а то получится, что это слово используется в двух разных смыслах. Оно уже применялось для способа построения конкретной реализации гильбертова пространства чистых состояний.

Мы сформулировали аксиому, а сами уравнения не написали, но намекнули, что они будут определены неоднозначно. Даже более того, что тут будет бесконечный произвол формулировки этих уравнений, бесконечное число вариантов их записи.

Мы выделили три наиболее известных картины как самые общеупотребимые и примерно расположили их в порядке употребимости. Исторически сначала появились картины Шредингера и Гайзенберга, почти одновременно в районе 1925 года, и теоретики даже некоторое время обсуждали, какая картина правильная, а какая нет. Говорили о существовании двух квантовых механик – волновой Шредингера и матричной Гайзенберга. Чуть больше года спустя фон Нейман доказал унитарную эквивалентность этих картин, что существует унитарное преобразование, переводящее вектора состояний и операторы наблюдаемых из картины Шредингера в картину Гайзенберга и назад.

Узнав про эту эквивалентность, математики поняли, что она позволяет построить бесконечно много унитарно эквивалентных картин описания. Мы на следующей лекции как раз займёмся рассмотрением существующих картин описания, их соотношений, и обсуждением, почему они эквивалентны и как эту эквивалентность использовать.

А всё началось, если верить легенде, бытующей в теоретической физике, с размышления Шредингера о том, как описать эволюцию квантового объекта. В начале 1920-х годов ещё не было никакой вероятностной интерпретации, так что, когда говорили о квантовых объектах, подразумевалось что-то вроде ранней наивной интерпретации корпускулярно-волнового дуализма. То есть говорили, что это какие-то особенные объекты, которые не являются ни волнами, ни частицами, но для описания которых надо определённым образом синтезировать корпускулярные и волновые представления.

Согласно легенде, Шредингеру в пришедшем к нему журнале попала статья, которая, по сути, была кратким резюме диссертации де Бройля о волнах материи. На следующее утро на семинаре по теоретической механике он вместо предмета стал рассказывать студентам об этом. Те спросили, как поведёт себя волна материи, если на неё подействовать силой. Шредингер отменил семинар и к вечеру написал уравнение.

Базисные и качественные рассуждения выглядели примерно следующим образом. Всё началось с идеи, что микрообъект обладает волновыми свойствами, и каждому его состоянию должна отвечать некая волна. И частота, и длина этой волны должны быть связаны с её корпускулярными характеристиками, а именно с энергией и импульсом, соотношениями Планка – де Бройля.

То есть у нас есть волна, и для состояния с определённой энергией  $E$  и определённым импульсом  $\vec{p}$  она должна записываться как волна с частотой, представленной соотношением Планка  $\frac{E}{\hbar}$ . И длиной волны  $\lambda = \frac{h}{|\vec{p}|}$  или волновым вектором  $\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$  в этом уравнении будет фигурировать соотношение де Бройля. То есть мы должны будем получать для таких состояний плоскую волну вида

$$\psi \sim e^{\frac{i}{\hbar}Et + \frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}} \quad (2.43)$$

Ставим задачу написать для неё волновое уравнение. Нужно ориентироваться на то, что если это нерелятивистская частица с определённой массой  $m$ , энергия и импульс в данной волне должны быть связаны соотношением

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad (2.44)$$

для состояния с определённой энергией и импульсом частицы. Это должны быть состояния свободной частицы, на которую не действуют внешние силы, иначе данные величины не будут иметь определённого значения, не зависящего от времени.

Тогда в принципе, из любой функции, имеющей вид (2.43) можно вытащить значение  $E$ , если подействовать на неё оператором  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ . Он выдаст

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}(\psi) = E\psi \quad (2.45)$$

Параллельно с этим заметим, что

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{r}} (\psi) = \vec{p}\psi \quad (2.46)$$

Шредингер как бы предвосхитил наше построение для координатных волновых функций, ведь он и выводил уравнение для этих функций нашей частицы. Стоит теперь подставить операторные выражения (2.45) и (2.46) в выражение связи энергии с импульсом (2.44), и мы получим, что

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \right)^2 \psi \quad (2.47)$$

Дальше нужно обобщить это уравнение на случай наличия внешних сил. С точки зрения Шредингера, надо к кинетической энергии (2.44) добавить потенциальную  $u(\vec{r})$ . Тогда будет выражение

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[ \frac{1}{2m} \cdot \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \right)^2 + u(\vec{r}) \right] \psi \quad (2.48)$$

В квадратных скобках стоит оператор энергии в координатном представлении. Уравнение (2.48) можно записать непосредственно для векторов состояния в абстрактном гильбертовом пространстве, перейдя от координатных волновых функций к векторам состояний. Тогда уравнение, которое описывает эволюцию координатных функций, уравнение Шредингера, будет иметь вид

$$i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = \hat{H} |\psi\rangle \quad (2.49)$$

Но это не значит, что мы выписали все уравнения картины Шредингера. В нашем описании квантовой системы есть два класса объектов – вектора состояний и операторы наблюдаемых. На эвристическом уровне понятно, что множественность картин описаний берётся именно из того, что мы можем двояким образом описать эволюционные изменения, происходящие в квантовой системе, двумя способами. В первом будем считать, что операторы наблюдаемых, определённые в начальный момент времени, сохраняют своё определение в любой другой момент. Это и будет дополнением к уравнению (2.49), которое мы должны произвести, чтобы получить картину Шредингера.

Уравнение (2.50) описывает эволюцию шредингеровых векторов состояния

$$i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle_m}{\partial t} = \hat{H} |\psi\rangle_m, \quad (2.50)$$

а эволюция шредингеровских операторов наблюдаемых говорит, что это всегда некая функция от операторов координаты, импульса и, может быть, времени, которое фигурирует в (2.51):

$$\hat{F}_m = F(\hat{x}, \hat{p}_x, t) \quad (2.51)$$

То есть шредингеровский оператор может меняться с течением времени, но только за счёт явной зависимости от  $t$ . А операторы  $\hat{x}$  и  $\hat{p}_x$  при этом не должны явно зависеть от времени. Это уже будет общее соотношение картины Шредингера.

То есть для любой картины, любого способа описания эволюции квантовой системы мы должны сообщить, как эволюционируют вектора состояний и операторы наблюдаемых. На следующей лекции мы напишем это и для других картин и тогда разберёмся, как это работает.

## Семинар 3. Эволюция квантовых систем и смешанные состояния

### Контрольный опрос

В данном семинаре будут рассмотрены примеры на изучение эволюции квантовых систем и примеры, связанные со смешанными состояниями. Поэтому в контрольном опросе первые два вопроса затронут первую тему, а вторые – вторую.

1) У нас есть кубиты – объекты, у которых пространство состояний образовано линейными комбинациями двух базисных элементов. Их можно записывать в виде двумерного столбца из двух комплексных чисел:

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \equiv \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \quad (3.1)$$

Пусть у такого кубита оператор энергии, гамильтониан, имеет в базисе из данных двух состояний вид

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} +\frac{\hbar\omega}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar\omega}{2} \end{pmatrix} \quad (3.2)$$

И пусть в момент времени  $t = 0$  состояние задано столбцом

$$|\psi(0)\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\sqrt{5}}{2i} \\ \frac{1}{\sqrt{5}} \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

У него правильная нормировка, норма суммы квадратов модулей его компонент  $\frac{1}{5} + \frac{4}{5} = 1$ .

Как записать эволюционирующий шредингеров вектор состояния этого кубита  $|\psi(t)\rangle$ ?

2) Есть система двух точечных частиц, взаимодействующих между собой и совершающих движение по оси  $x$ . Запишем её гамильтониан в форме суммы двух кинетических энергий для частиц с импульсами  $\hat{p}_1$  и  $\hat{p}_2$  и потенциальной энергии взаимодействия. Взаимодействие гармоническое, только между частицами, так что энергия зависит только от расстояния между ними:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{m_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{m_2} + \frac{k}{2}(\hat{x}_1^2 - \hat{x}_2^2) \quad (3.4)$$

Предлагается рассмотреть список из четырёх наблюдаемых, характеризующих эту систему. Будем каждую из них обозначать буквой и расписывать её явный вид через координаты, импульсы и время:

$$\hat{P} \equiv \hat{p}_1 + \hat{p}_2 \quad (3.5)$$

$$\hat{X} \equiv \frac{m_1 \hat{x}_1 + m_2 \hat{x}_2}{m_1 + m_2} \quad (3.6)$$

$$\hat{K} \equiv m_1 \hat{x}_1 + m_2 \hat{x}_2 - t(\hat{p}_1 + \hat{p}_2), \quad (3.7)$$

$$\hat{R} \equiv \hat{x}_1 - \hat{x}_2 - t \frac{m_2 \hat{p}_1 - m_1 \hat{p}_2}{m_1 + m_2} \quad (3.8)$$

Видно, что все приведённые наблюдаемые имеют понятный физический смысл. Какие из них являются интегралами движения системы с гамильтонианом (3.4) в том смысле, в каком мы обычно определяем интеграл движения для квантовых систем? В ответе достаточно просто их назвать.

3) Есть кубит в состоянии, задаваемом матрицей плотности  $2 \times 2$

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{i}{4} \\ -\frac{i}{4} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (3.9)$$

Она удовлетворяет всем требованиям: эрмитова, неотрицательно определённая, её след равен единице.

Зададим в том же базисе наблюдаемую  $\hat{F}$ , матрица которой выглядит как

$$\hat{F} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

Чему равняется среднее значение наблюдаемой  $\hat{F}$  в состоянии кубита (3.9), то есть  $\bar{F}_\rho$ ?

4) Данный вопрос качественный. Чем смешанные состояния отличаются от чистых?

### Ответы на контрольный вопрос

Вопросы с 1) по 3) были техническими задачами, у которых возможно прямолинейное выполнение. С другой стороны, каждая была сформулирована так, чтобы при более внимательном рассмотрении можно было дать ответы достаточно быстро и не проводя объёмных вычислений.

1) Мы написали гамильтониан (3.2) в виде диагональной матрицы, значит, наш базис из состояний  $|0\rangle$  и  $|1\rangle$  – это собственные вектора гамильтониана. А когда мы разбирали общий подход в шредингеровской картине, поняли, что разлагаем любой начальный вектор по собственным векторам. В (3.3) начальный вектор по ним уже разложен, и мы уже знаем  $\alpha$  и  $\beta$ , стоящие в (3.2).

Каждый собственный вектор эволюционирует с течением времени за счёт умножения на энергетическую экспоненту, и каждое состояние с определённой энергией  $|E\rangle$  превращается в

$$|E\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}Et}, \quad (3.11)$$

если  $t$  отсчитывается от нуля. В общем случае в показателе должно стоять  $(t - t_0)$ . Значения энергии в (3.11) – это  $\pm \frac{\hbar\omega}{2}$ . Поделив на  $\hbar$ , получаем ответ,

$$|\psi(0)\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{5}} e^{-i\frac{\omega}{2}t} \\ 2i \\ \frac{1}{\sqrt{5}} e^{+i\frac{\omega}{2}t} \end{pmatrix} \quad (3.12)$$

2) Рассмотрим общий подход к ответу на вопрос, является ли заданная наблюдаемая интегралом движения. Можно взять её гайзенбергов оператор и проверить, равняется ли сумма дифференцирования явной зависимости от времени и слагаемого, описывающего эволюционную скорость изменения данного оператора, нулём, то есть выполняется ли

$$\frac{\partial \hat{F}}{\partial t} + i\hbar[\hat{H}, \hat{F}] = 0 \quad (3.13)$$

Если это так, то перед нами интеграл движения. Для каждой из наблюдаемых (3.5) – (3.8) можно проверить выполнение данного равенства.

С другой стороны, физика система (3.4) нам хорошо понятна. Полный импульс (3.5) у замкнутой системы, очевидно, интеграл движения. Оператор координаты центра масс (3.6) не интеграл движения: у замкнутой системы центр масс движется равномерно прямолинейно, но не обязательно константа.

Пример (3.7) приводился на лекции как пример наблюдаемой, которая явно зависит от времени и при этом является интегралом движения. В данном случае можно было либо напрямую проверять (3.13), либо подумать о физическом смысле. Ведь, если разделить (3.7) на  $m_1 + m_2$ , получится разность координаты центра масс и полного импульса, умноженного на время и поделённого на полную массу системы. Если данная величина константа, это эквивалентно верному утверждению, что центр масс системы движется равномерно прямолинейно.

В выражении (3.8) написаны относительная координата и импульс  $\mu$ -точки, то есть импульс, канонически сопряжённый к относительной координате. Если бы данное выражение было константой, это было бы эквивалентно утверждению, что относительная координата в системе (3.4) изменяется равномерно прямолинейно. Что неверно, так как в ней относительная координата должна совершать гармонические колебания.

Таким образом, интегралами движения являются  $\hat{P}$  и  $\hat{K}$ .

3) Можно перемножить матрицы (3.9) и (3.10)  $2 \times 2$  по правилу матричного умножения, а потом посчитать среднее значение как след их произведения:

$$\bar{F}_\rho = \text{Tr}(\hat{\rho}\hat{F}) \quad (3.14)$$



С другой стороны, матрица  $\hat{F}$  (3.10) опять диагональна в базисе из состояний  $|0\rangle$  и  $|1\rangle$ , то есть эти состояния – её собственные вектора с собственными значениями 0 и 2 соответственно. Поэтому диагональные элементы матрицы плотности (3.9), равные  $\frac{1}{2}$ , это вероятность того, что результаты измерения в состоянии  $\hat{\rho}$  совпадут с результатами измерения в состояниях  $|0\rangle$  или  $|1\rangle$ . Поэтому надо умножить 0 на первую вероятность и 2 на вторую. В сумме получится  $0 \cdot \frac{1}{2} + 2 \cdot \frac{1}{2} = 1$ , то есть выражение (3.14) будет равно единице.

4) Этот вопрос был явно произнесён на лекции. Мы тогда сказали, что теперь имеем много возможностей ответить на вопрос, чем чистые состояния отличаются от смешанных. Например, сказать, что чистым состояниям отвечают вектора состояния, а смешанным матрицы плотности, вектор состояния поставить им в соответствие нельзя. Или что оператор плотности для чистых состояний удовлетворяет критерию

$$\hat{\rho}^2 = \rho \tag{3.15}$$

а для смешанных нет. Можно придумать и другие способы, но два названных встречаются в литературе чаще всего.

На лекции мы в какой-то степени ставили задачу объяснить, что в этой теме много понятийных сложностей и сложностей, интересных для практических приложений квантовой теории. На семинаре поставим противоположную задачу – убедить в том, что все задачи по этим темам решаются довольно легко, если понимать базовые принципы. В качестве примеров возьмём задачи из списка обязательных.

### Задача 1. Эволюция волновой функции частицы в одномерном ящике

Данный пример будет посвящён системе, которая подробно изучалась в других курсах до того, как мы стали рассматривать основы теоретического подхода в квантовой теории. Возьмём одномерный ящик с непроницаемыми стенками. Область движения точечной частицы, совершающей одномерное движение по оси  $x$ , будет ограничена с помощью двух непроницаемых стенок отрезком от 0 до  $L$  данной вещественной оси (рис. 3.1).

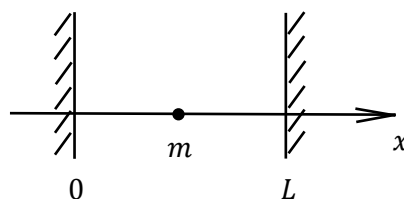


Рис. 3.1. Движение частицы в ящике с непроницаемыми стенками

В момент времени  $t = 0$  координатная волновая функция частицы  $\psi(x, 0)$  описывается в области движения, где  $0 < x < L$ , выражением

$$\psi(x, 0) = \frac{4}{\sqrt{5L}} \sin^3\left(\frac{\pi x}{L}\right) \tag{3.16}$$

Предполагается, что 0 за пределами этой области, там, где частица по условию находиться не может и не способна появиться впоследствии, так как её не пускают туда непроницаемые стенки.

Как будет выглядеть волновая функция частицы  $\psi(x, t)$  в момент времени  $t$ ?

Произвола в выборе, например, картины описания эволюции системы у нас нет, так как вопрос явно задан про шредингеровскую эволюционирующую волновую функцию. Поэтому разумно решать задачу в рамках картины Шредингера.

Система из данной задачи стационарная. Нерелятивистская точечная частица массы  $m$  перемещается между стенками как свободная, поэтому её гамильтониан состоит только из оператора кинетической энергии и явно не зависит от времени:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} \quad (3.17)$$

На лекции мы разобрались, каков общий подход для стационарных систем в шредингеровской картине. Нужно просто разложить начальное состояние по собственным функциям гамильтониана, раз мы работаем в координатном представлении, а потом учесть эволюцию каждой собственной функции в соответствии с энергетической экспонентой. То есть решение в общем случае выглядит как

$$\psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \cdot \psi_n(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \quad (3.18)$$

$c_n$  – константы разложения начальной функции (3.16) по собственным функциям гамильтониана.  $\psi_n(x)$  – собственная функция гамильтониана (3.17), то есть решение спектральной задачи

$$\frac{\hat{p}_x^2}{2m} \psi_n = E_n \psi_n, \quad (3.19)$$

Мы будем использовать индекс  $n$  для нумерации уровней энергии и собственных функций, ведь при финитном одномерном движении все собственные значения дискретного спектра гамильтониана обязательно невырождены. Поэтому каждому уровню энергии  $E_n$  будет отвечать единственная собственная функция  $\psi_n$ , и  $n$  действительно можно нумеровать натуральными числами от 1 до  $\infty$ .

Мы знаем решение этой задачи, но сейчас быстро получим ещё раз. В координатном представлении оператор импульса – это оператор дифференцирования, поэтому для (3.19) получается уравнение

$$\frac{d^2 \psi_n}{dx^2} + \frac{2mE_n}{\hbar^2} \psi_n = 0 \quad (3.20)$$

Это линейное однородное уравнение второго порядка с постоянными коэффициентами, его решения синусы и косинусы.

Оператор (3.17) неотрицательно определённый: раз  $\hat{p}_x$  эрмитов оператор, его собственные значения вещественны, и при  $\hat{p}_x^2$  они неотрицательны, так как квадрат вещественного числа отрицательным быть не может. Поэтому можно обозначить

$$k^2 \equiv \frac{2mE_n}{\hbar^2}, \quad (3.21)$$

считая  $k$  вещественным положительным числом.

Тогда решения – синусы и косинусы от  $kx$ . Ограничивающие условия задаются наличием непроницаемых стенок, волновая функция должна всегда в 0 и на  $L$  обращаться в ноль. Поэтому добавляем к (3.20) граничное условие

$$\psi_n(0) = \psi_n(L) = 0 \quad (3.22)$$

Тогда косинус не подходит из-за того, что он в нуле не ноль. Остаётся константа, умноженная на  $\sin kx$ ,

$$c \cdot \sin kx \quad (3.23)$$

А условие  $\sin kL = 0$  вырезает допустимые значения

$$k = \frac{\pi n}{L}, \quad (3.24)$$

чтобы  $kL = \pi n$ , где  $n$  пробегает значения 1, 2, 3...  $n = 0$  не подходит, так как в этом случае  $\sin kx$  превратится в 0, а нам нужны нетривиальные собственные функции, не равные тождественно нулю.

Тогда, подставляя (3.24) в (3.23), получим, что собственные функции – это  $\sin\left(\frac{\pi nx}{L}\right)$ . Нормировочный множитель подбираем из условия, что  $\int_0^L |\psi(x)|^2 dx = 1$ . Квадрат модуля гармонической функции на любом отрезке, кратном полупериоду этой функции, имеет среднее значение  $\frac{1}{2}$ , поэтому интеграл будет просто квадратом нормировочной константы, умноженным на  $\frac{L}{2}$ . Значит, константа – это  $\sqrt{\frac{2}{L}}$ , и тогда

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi nx}{L}\right) \quad (3.25)$$

А энергии находим из условия (3.21), с учётом допустимых значений  $k$  (3.24) получается

$$E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\pi n^2}{2mL^2} n^2 \quad (3.26)$$

$\frac{\pi n^2}{2mL^2}$  – размерный множитель размерности энергии, спектр пропорционален квадрату номера уровня. Таким образом, теперь известны собственные значения и собственные функции.

$c_n$  из 3.18 – это скалярные произведения

$$c_n = \langle \psi_n | \psi^{(0)} \rangle, \quad (3.27)$$

$\psi^{(0)}$  – начальная функция. То есть это интеграл от 0 до  $L$  от собственной функции (3.25), умноженной на (3.16).

Его можно честно вычислить, там получится произведение  $\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \sin^3\left(\frac{\pi x}{L}\right)$ . С другой стороны, данная задача допускает чисто алгебраическое решение без интегралов, если знать или вывести тригонометрическую формулу для синуса тройного угла:

$$\sin^3 \alpha = \frac{3}{4} \sin \alpha - \frac{1}{4} \sin 3\alpha \quad (3.28)$$

Даже если мы не помним коэффициенты, их легко восстановить из соображения, что при маленьких  $\alpha$  будет  $\sin \alpha \approx \alpha^3$ . Поэтому линейное слагаемое в линейной комбинации  $\sin \alpha$  и  $\sin 3\alpha$  должно сократиться, а кубическое в сумме должно давать единицу. Коэффициент при линейном будет  $\frac{3}{4} - \frac{3}{4} = 0$ , а коэффициент при кубическом получится  $-\frac{1}{8} + \frac{9}{8} = 1$ .

Это означает, что начальная функция (3.16) на самом деле есть

$$\frac{3}{\sqrt{10}} \sqrt{\frac{\pi}{L}} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) - \frac{1}{\sqrt{10}} \sqrt{\frac{\pi}{L}} \sin\left(\frac{3\pi x}{L}\right) \quad (3.29)$$

Мы специально выделили множитель  $\sqrt{\frac{\pi}{L}}$ , потому что он входит в волновую функцию (3.25).  $\sqrt{\frac{\pi}{L}} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)$  в (3.29) в точности  $\psi_1$ , а  $\sqrt{\frac{\pi}{L}} \sin\left(\frac{3\pi x}{L}\right)$  это  $\psi_3$ . И мы сразу видим значения коэффициентов:  $c_1 = \frac{3}{\sqrt{10}}$ ,  $c_3 = -\frac{1}{\sqrt{10}}$ . Их сумма квадратов модулей опять 1, значит, всё посчитано правильно.

Дальше мы должны к каждой из собственных функций в (3.25) добавить соответствующую энергетическую экспоненту. Уже не будет разбивать коэффициенты на два множителя. Поэтому, подставляя в показатель экспоненты (3.26), получим ответ

$$\psi(x, t) = \frac{3}{\sqrt{5L}} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) e^{-i\frac{\pi^2 \hbar}{2mL^2}t} - \frac{1}{\sqrt{5L}} \sin\left(\frac{3\pi x}{L}\right) e^{-i\frac{9\pi^2 \hbar}{2mL^2}t} \quad (3.30)$$

Выражение (3.30) и есть эволюционирующая шредингера волновая функция. То есть всё решение сводится в основном к нахождению собственных функций и собственных значений гамильтониана. После того, как мы решили стационарную задачу, где гамильтониан явно не зависит от времени, в её рамках решение нестационарной строится таким образом, что мы берём построенное разложение начальной функции по собственным функциям гамильтониана и добавляем в каждый член разложения энергетическую экспоненту. То есть все такие задачи технически решаются довольно просто, если мы смогли решить спектральную задачу для гамильтониана.

## Задача 2. Эволюция гайзенберговских операторов координаты и импульса линейного гармонического осциллятора

Мы обсуждаем разные возможные картины описания эволюции, поэтому теперь приведём пример работы в картине Гайзенберга. Нам в такой ситуации обычно нужны фундаментальные уравнения Гайзенберга для стационарных систем, то есть уравнения Гайзенберга для операторов координаты и импульса. А мы их всегда решим, если задача решается в классической механике. Поэтому нужно проиллюстрировать данный пример конкретным вычислением: взять систему, решаемую в классической механике, и увидеть, чем гайзенбергово решение отличается от её привычного решения.

Пусть это будет одномерная задача о движении точечной частицы массой  $m$  в потенциале, квадратичном по координате, вида

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2}, \quad (3.31)$$

то есть о линейном гармоническом осцилляторе.

Надо найти эволюционирующие гайзенберговские операторы координаты  $\hat{x}_H(t)$  и импульса  $\hat{p}_H(t)$  для такой системы.

В данной задаче мы рассматриваем гайзенберговские операторы, поэтому индексы  $\hat{H}$  писать не будем. Напишем фундаментальные уравнения Гайзенберга. Уравнение для координаты

$$\frac{\partial \hat{x}}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{x}] \quad (3.32)$$

Мы уже производили вычисление в общем случае. Со вторым слагаемым в (3.31)  $\hat{x}$  из (3.32) коммутирует, а в первом вынесется  $\frac{1}{2m}$ , и коммутатор с  $\hat{p}_x^2$  выдаст  $2\hat{p}_x[\hat{p}_x, \hat{x}] = 2\hat{p}_x(-i\hbar)$ . В результате мы увидим, что останется то, что уже обнаруживали для осциллятора в общем виде. Что производная координаты, то есть скорость, это импульс, поделённый на массу, (3.32) будет равно

$$\frac{\hat{p}_x}{m}, \quad (3.33)$$

А соответствующее уравнение Гайзенберга для проекции импульса, которое тоже будет записываться через коммутатор гамильтониана с ней, выдаст, что производная от импульса – это сила. То есть для (3.31)

$$\frac{\hat{p}_x}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{p}_x] = -m\omega^2 x \quad (3.34)$$

Путь решения системы уравнений (3.32) и (3.34) нам известен. Если мы ещё раз продифференцируем первое уравнение и подставим в него производную от импульса из второго, получим уравнение гармонического осциллятора. Масса сократится, и получится, что должно быть

$$\frac{d^2\hat{x}}{dt^2} + \omega^2\hat{x} = 0 \quad (3.35)$$

Тогда оператор  $\hat{x}$  должен записываться через слагаемые с синусом и косинусом. Дифференцирование превратит  $\cos(\omega t)$  в  $\sin(\omega t)$ , которой в нуле ноль, а  $\sin(\omega t)$  в  $\cos(\omega t)$ , умноженный на  $\omega$ , который в нуле даёт единицу. Поэтому  $\omega$  на коэффициент, который будет во втором слагаемом в выражении для  $\hat{x}$  при синусе в нуле, должен выдать значение производной (3.32) в нуле, то есть начальное значение оператора импульса, поделённое на массу.

Так что мы должны записать решение уравнения (3.35) в виде

$$\hat{x}(t) = \hat{A} \cos(\omega t) + \hat{B} \sin(\omega t) \quad (3.36)$$

Это выражение для нас привычно, но мы теперь говорим, что константы интегрирования – это операторы. Подставляя в (3.36)  $\hat{x}(0)$ , обнаружим, что

$$\hat{x}(0) = \hat{A} \quad (3.37)$$

Производная от (3.36)

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = -\omega\hat{A} \sin(\omega t) + \omega\hat{B} \cos(\omega t), \quad (3.38)$$

из чего

$$\frac{d\hat{x}}{dt}(0) = \omega\hat{B}, \quad (3.39)$$

а в соответствии с (3.32) это

$$\frac{\hat{p}_x(0)}{m} \quad (3.40)$$

Таким образом,

$$\hat{x} = \hat{x}(0) \cos(\omega t) + \frac{\hat{p}_x(0)}{m\omega} \sin(\omega t) \quad (3.41)$$

То есть мы явно записали выражение для оператора координаты. Тогда, зная из (3.32), что  $\hat{p}_x = m \frac{d\hat{x}}{dt}$ , напомним

$$\hat{p}_x(t) = -m\omega\hat{x} \sin(\omega t) + \hat{p}_x(0) \cos(\omega t) \quad (3.42)$$

Итак, решение записано в выражениях (3.41) и (3.42). В них фигурируют никак не выбранные нами постоянные операторы  $\hat{x}(0)$  и  $\hat{p}_x(0)$ . Так как мы собираемся описывать осциллятор, на их место можно подставить любые два линейных эрмитовых оператора, удовлетворяющих каноническому коммутационному соотношению.

Например, если мы хотим написать гайзенбергов операторы  $\hat{x}$  и  $\hat{p}_x$  в координатном представлении, в качестве начальных значений можно выбрать умножение волновой функции на аргумент

$$\hat{x}(0) = x \quad (3.43)$$

и

$$\hat{p}_x(0) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (3.44)$$

Тогда, восстановив гайзенбергов индекс, запишем, что в пространстве координатных волновых функций в качестве гайзенбергова оператора координаты можно выбрать

$$\hat{x}_H(t) = \hat{x}(0) \cos(\omega t) + \frac{i\hbar}{m\omega} \sin(\omega t) \frac{\partial}{\partial x} \quad (3.45)$$

В математике нехорошо писать операторы дифференцирования в выражениях не последними. Мы поставили  $\frac{\partial}{\partial x}$  в конец выражения, а не перед  $\sin(\omega t)$ , чтобы подчеркнуть, что на функцию  $\psi(x)$  будет действовать именно этот оператор.

При этом

$$\hat{p}_H(t) = -m\omega x \cdot \sin(\omega t) - i\hbar \cos(\omega t) \frac{\partial}{\partial x} \quad (3.46)$$

(3.45) и (3.46) – два конкретных оператора, которые могут быть использованы в качестве гайзенберговых операторов координаты и импульса линейного гармонического осциллятора. Они действуют в конкретном пространстве координатных волновых функций  $L_2$  – квадратично интегрируемых комплекснозначных функций вещественного переменного.

Это один из официальных ответов на вопрос данной задачи, ведь  $\hat{x}(0)$  и  $\hat{p}_x(0)$  можно было выбрать, наоборот, в импульсном представлении. Тогда  $x$  в (3.46) превратился бы в  $i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \dots$

Итак, мы сначала решили задачу, записав  $\hat{x}(0)$  и  $\hat{p}_x(0)$  как некоторые абстрактные постоянные операторы, про которые знали только то, что они линейны, эрмитовы и удовлетворяют каноническому коммутационному соотношению, и не требуя от них больше ничего. Далее мы должны записать эти операторы в более конкретном виде, используя конкретное представление нашего гильбертова пространства чистых состояний осциллятора.

По сути, смысл этой задачи именно в том, чтобы без сложных вычислений проиллюстрировать мысль, что, если мы умеем решать классические уравнения, то, скорее всего, теми же методами сможем решить и фундаментальные уравнения Гайзенберга для неё.

Данная задача решалась легко из-за линейности уравнений, но начальное состояние может быть задано как смешанное. Мы отдельно проанализировали концепцию смешанных состояний, отдельно описание эволюции квантовой системы для чистых состояний, написали эволюционные уравнения в шредингеровой и гайзенберговской картине. Теперь разберёмся, как описывать эволюцию смешанных состояний.

### Задача 3. Эволюция смешанных состояний

Здесь опять можно описывать эволюцию квантовой системы разными способами, в частности, в гайзенберговской или шредингеровской картинах. Рассмотрим, что будет происходить с операторами плотности, описывающими смешанные состояния, в гайзенберговской картине.

Матрица плотности описывает состояние, а эволюционные изменения квантовой системы мы описываем с помощью переопределения операторов наблюдаемых. В гайзенберговской картине операторы наблюдаемых эволюционируют, но, хотя оператор плотности эрмитов и может тоже считаться наблюдаемой, он описывает состояние, а их мы считаем неэволюционирующими. Поэтому при эволюции в гайзенберговской картине с операторами плотности ничего не происходит:

$$\hat{\rho}_H = \text{const} \equiv \hat{\rho}(t_0), \quad (3.47)$$

$\hat{\rho}(t_0)$  – начальное значение оператора плотности.

То есть мы задаём его в момент времени  $t_0$  и говорим, что все операторы эволюционируют в соответствии с уравнениями Гайзенберга, а статистику результатов измерений мы всегда предсказываем по одному и тому же в любые моменты времени оператору плотности, но с разными переопределёнными для каждого момента операторами наблюдаемых.

А в картине Шредингера оператор плотности как раз должен эволюционировать. Чтобы понять, как это происходит, можно вспомнить, что одним из примеров оператора плотности является проектор. И вообще его всегда можно записать либо как проектор, либо как их линейную комбинацию:

$$\hat{\rho} = \sum_i \omega_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \quad (3.48)$$

Тогда эволюция оператора плотности в записи (3.48) будет определяться эволюцией векторов состояний  $|\psi_i\rangle$  и  $\langle\psi_i|$ , через которые записан проектор  $|\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ . Выделим из линейной комбинации (3.48) одно слагаемое  $|\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ , то есть рассмотрим  $\hat{\rho}_s$ , являющееся просто проектором. Так можно делать, потому что мы будем строить уравнение, линейное по  $\rho$ . Производная  $\frac{\partial \hat{\rho}_s}{\partial t}$  от него будет, как обычно, дифференцирование либо слагаемого  $|\psi_i\rangle$ , либо  $\langle\psi_i|$ . То есть, опуская индексы, получится

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}_s}{\partial t} = i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} \langle\psi| + |\psi\rangle i\hbar \frac{\partial \langle\psi|}{\partial t} \quad (3.49)$$

В соответствии с эволюционным уравнением Шредингера для вектора чистого состояния

$$i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = \hat{H}|\psi\rangle \quad (3.50)$$



Если записать для  $i\hbar \frac{\partial \langle \psi |}{\partial t}$  сопряжённое шредингерово уравнение, в котором при эрмитовом сопряжении  $i$  меняется на  $-i$ , будет  $-\langle \psi | \hat{H}$ . Поэтому для оператора плотности, являющегося оператором проектирования, из (3.48) получится

$$\hat{H}\hat{\rho}_s - \hat{\rho}_s\hat{H} = [\hat{H}, \hat{\rho}_s] \quad (3.51)$$

Так как мы получили эволюционное уравнение, линейное по  $\hat{\rho}_s$ , для линейной комбинации операторов проектирования будет такое же. Обобщая всё перечисленное, в картине Шредингера операторы наблюдаемых не эволюционируют,  $\hat{x}$  и  $\hat{p}_x$  остаются постоянными, а остальные могут зависеть от времени только явно в силу включения  $t$  в их определение. А операторы плотности эволюционируют в соответствии с уравнением (3.49). Уравнение Шредингера для смешанных состояний выглядит как

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}_s}{\partial t} = [\hat{H}, \hat{\rho}_s] \quad (3.52)$$

Как решать дальше, более-менее понятно. Более, того, операторы  $\hat{\rho}_s$  мы можем расписывать в любом базисе, в том числе из собственных векторов гамильтониана. В качестве начального условия нужно взять такое же, как и в шредингеровской картине, то есть считать, что

$$\hat{\rho}_s(t_0) = \hat{\rho}^{(0)}, \quad (3.53)$$

Если задача стационарна, то есть гамильтониан системы явно не зависит от времени:

$$\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0, \quad (3.54)$$

опять можно решить задачу на собственные значения и собственные вектора гамильтониана

$$\hat{H}|\psi_{n\alpha}\rangle = E_n|\psi_{n\alpha}\rangle \quad (3.55)$$

Индекс  $\alpha$  добавляется, если собственное значение  $E_n$  вырождено. Он тогда нумерует вектора, относящиеся к одному и тому же собственному значению.

Из  $|\psi_{n\alpha}\rangle$  можно построить полный ортонормированный базис, а это значит, что можно разложить оператор  $\hat{\rho}_s$  по данным собственным векторам. То есть записать  $\hat{\rho}^{(0)}$  из (3.53) через его матрицу в базисе из собственных векторов гамильтониана:

$$\hat{\rho}^{(0)} = \sum_{nan'\alpha'} c_{nan'\alpha'} |\psi_{n\alpha}\rangle \langle \psi_{n'\alpha'}|, \quad (3.56)$$

где  $c_{nan'\alpha'}$  – коэффициенты разложения начальной матрицы  $\hat{\rho}^{(0)}$ , матричные элементы  $\hat{\rho}^{(0)}$  в этом базисе, то есть

$$c_{nan'\alpha'} = \langle \psi_{n\alpha} | \hat{\rho}^{(0)} | \psi_{n'\alpha'} \rangle \quad (3.57)$$

Дальше с течением времени собственные вектора эволюционируют путём умножения на энергетическую экспоненту. То есть мы просто будем умножать  $|\psi_{n\alpha}\rangle$  из

(3.56) на  $e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)}$ , а сопряжённый вектор  $\langle\psi_{n'\alpha'}|$  на сопряжённую экспоненту  $e^{+\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)}$ .

Теперь можно записать общий ответ для шредингера эволюционирующего оператора плотности также, как мы его писали для чистых состояний, через коэффициенты разложения начального вектора:

$$\rho_s(t) = \sum_{n\alpha n'\alpha'} \langle\psi_{n\alpha}|\hat{\rho}^{(0)}|\psi_{n'\alpha'}\rangle e^{\frac{i}{\hbar}(E_{n'}-E_n)(t-t_0)} |\psi_{n\alpha}\rangle\langle\psi_{n'\alpha'}| \quad (3.58)$$

До  $|\psi_{n\alpha}\rangle\langle\psi_{n'\alpha'}|$  в выражении (3.58) стоит коэффициент разложения в момент времени  $t$ , а сам  $|\psi_{n\alpha}\rangle\langle\psi_{n'\alpha'}|$  – оператор, записанный через базисные вектора гамильтониана. Они проекторы только для  $n' = n, \alpha' = \alpha$ , но, когда те не равны, всё равно бра-вектор  $\langle\psi_{n'\alpha'}|$  домножается на вектор  $|\psi\rangle$ , на который этот оператор действует, и соответствующее комплексное число умножается на кет-вектор  $|\psi_{n\alpha}\rangle$ . То есть это всё равно некий оператор с известным действием для любого вектора состояния из нашего гильбертова пространства.

В конструкции (3.58) вся зависимость от времени находится в экспонентах, а коэффициент  $\langle\psi_{n\alpha}|\hat{\rho}^{(0)}|\psi_{n'\alpha'}\rangle$  и вектора  $|\psi_{n\alpha}\rangle\langle\psi_{n'\alpha'}|$  от него не зависят. То есть решение задачи для эволюции оператора плотности, для описания эволюции смешанных состояний, и в шредингеровской, и в гайзенберговской картине не сложнее описания эволюции чистых состояний. В гайзенберговской всё сводится к решению фундаментальных уравнений Гайзенберга, потому что эволюцию  $\hat{\rho}_H$  описывать не надо, только эволюцию операторов наблюдаемых. А в шредингеровской к решению стационарного уравнения (3.55), потому что после того, как  $E_n$  и  $|\psi_{n\alpha}\rangle$  найдены, задача об эволюции  $\rho_s$  уже решена. Ведь для любого  $\hat{\rho}^{(0)}$  остаётся только вычислить его матрицу в базисе из собственных векторов гамильтониана.

То есть смешанные состояния конструктивно и понятийно сложнее, чем чистые, но вся техника работы с ними такая же. Математически в обеих картинах надо решать те же уравнения, по крайней мере для стационарных систем, где гамильтониан явно не зависит от времени. Но сложности, которые возникают в нестационарных системах, мы будем обсуждаться в следующем семестре.

Мы в обоих семестрах почти не будем вспоминать про смешанные состояния, решая почти все конкретные задачи для чистых и говоря, что со смешанными то же самое, только записывать надо через матрицу или оператор плотности. С чистыми состояниями гораздо проще понимать смысл происходящего.

## Квантовая запутанность

Введём важное понятие, связанное с физикой смешанных состояний. На лекции мы уже говорили, что они часто получаются при «усреднении» состояния составной замкнутой системы по состояниям одной из подсистем. Например, системы  $AB$ ,

состоящей из подсистем  $A$  и  $B$  так, что  $AB$  замкнута, а  $A$  и  $B$  между собой взаимодействуют, и по отдельности их считать замкнутыми нельзя, по подсистеме  $B$ . Тогда чистое состояние замкнутой системы  $AB$  можно получить путём конкретной математической операции, которую назвали вычислением частичного следа, матрицы плотности для системы  $A$ .

Мы рассматривали пример системы из двух кубитов  $A$  и  $B$ , взаимодействующих между собой. Взяли чистое состояние  $|\psi_{AB}\rangle$ , которое было когерентной смесью состояний, когда оба кубита находятся в состоянии 0, и когда оба в состоянии 1:

$$|\psi_{AB}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\{|00\rangle + |11\rangle\} \quad (3.59)$$

Потом усредняли по состояниям  $B$  и обнаружили, что, когда мы производим все измерения только над подсистемой  $A$  и не знаем, что происходит с подсистемой  $B$  в процессе измерений, то статистика измерений наблюдаемых, относящихся только к системе  $A$ , получится правильной, если мы будем описывать состояние системы  $A$  как смешанное. Оно получилось

$$\hat{\rho}_A = \frac{1}{2}\{|0_A\rangle\langle 0_A| + |1_A\rangle\langle 1_A|\}, \quad (3.60)$$

индексы  $A$  мы ставили, чтобы подчеркнуть, что это именно состояние одного кубита  $A$ .

В (3.60) получилась настоящая матрица плотности в том смысле, что она не удовлетворяет критерию чистоты,  $\hat{\rho}_A^2 \neq \rho_A$ . Но даже из общих соображений понятно, что теоретически существуют примеры, когда такая редукция к изучению состояния системы  $A$  выдаст в качестве  $\hat{\rho}$  проектор на какое-то состояние, то есть опять приведёт к чистому состоянию. Это будет означать, что на измерение, которое мы производим над системой  $A$ , состояние системы  $B$  практически не оказывает влияния, и мы работаем с системой  $A$  как с чистым состоянием, с замкнутой системой.

Возникают две принципиально разные ситуации.  $\{|0_A\rangle\langle 0_A| + |1_A\rangle\langle 1_A|\}$  из (3.60) – деление нередуцированных состояний,  $\{|00\rangle + |11\rangle\}$  из (3.59) – деление исходных. У каких-то из них после редукции получаются настоящие смешанные состояния, у каких-то чистые. Под редукцией мы понимаем взятие частичного следа, когда мы переходим от исходного вектора чистого состояния полной системы  $|\psi_{AB}\rangle$  (3.59) к оператору плотности одной из подсистем (3.60). Редукция – это всегда сведение от чего-то более общего к чему-то более частному, в данном случае от более обширного пространства в менее обширное.

Эти состояния исходной системы решили различать. Состояния, которые при описанной редукции приводят к смешанным состояниям, называют спутанными состояниями системы  $AB$ . (3.59) именно такое. Само явление, что такое возможно и существует, называют квантовой спутанностью или запутанностью.

Эта идеология в значительной степени связана с дискуссией, которая существовала ещё на раннем этапе развития квантовой теории, насчёт её

онтологического статуса. Одним из знаменитых фрагментов этого обсуждения была история с парадоксом Эйнштейна-Розена-Подольского.

В исходной статье он был сформулирован следующим образом. Пусть есть процесс, в котором рождаются две частицы с суммарным полным импульсом, равным нулю. Например, какой-то спинор распадается на два гамма-кванта, и они летят в разные стороны. Также есть два наблюдателя, для которых благодаря авторам закрепились названия  $A$  и  $B$  и имена Alice и Bob в английской версии. Они знают расстояние между своими детекторами, так как промерили его настолько точно, насколько это возможно.

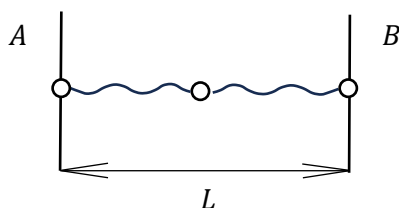


Рис. 3.2. Рождение пары фотонов и их разлёт к наблюдателям

Alice и Bob одновременно производят измерения над прилетевшими к ним фотонами. При этом Alice, например, измеряет только координату своего фотона и не пытается измерить импульс. Тогда у неё с точки зрения Эйнштейна и его коллег нет никакой причины, по которой ограничивалась бы дисперсия измерения координаты. Но из-за того, что точно известно расстояние между детекторами, а фотоны из-за выбора распада с конкретной кинематикой летят по прямой, их соединяющей, мы точно знаем координату фотона у Bob в момент измерения. А Bob измеряет импульс у своего фотона, и поскольку сумма импульсов обязательно ноль, после этого мы знаем импульс фотона Alice. Таким образом, мы у обоих фотонов знаем и координату, и импульс с любой наперёд заданной точностью. Тем самым опровергается соотношение неопределённостей. По замыслу авторов, это описывало неполноту описания мира с точки зрения квантовой теории.

Поскольку мерить координаты и импульсы у фотонов не так легко, дальше были придуманы, в первую очередь Бомом, практически выполнимые реализации подобных измерительных процедур, в основном связанные с измерениями спинов. Самое главное, что существует в таком эксперименте, что Эйнштейн называл дурным или мистическим быстроедействием, заключается в том, что в момент, когда Alice производит измерение над своим фотоном, информация, что с ним сделала Alice, мгновенно попадает к фотону Bob. Казалось бы, информация, пришедшая от первого фотона, никак не могла бы догнать второй, они разлетались с максимально возможной скоростью, скоростью света. Но рассуждения квантовой теории говорят о том, что измерения, произведённые Alice, должны влиять на результат измерения, производимый Bob.

В данном эксперименте у системы из двух фотонов возникает то самое запутанное состояние, потому что получается, что, например, суммарный импульс, да и суммарный момент импульса для неё при определённых условиях зафиксированы. Гораздо удобнее,

чем импульсы и координаты этих фотонов, мерить проекцию спина на импульс, так называемую спиральность, потому что суммарно законы сохранения момента импульса и импульса приводят к тому, что она у данных фотонов обязательно одинакова. Хотя родившиеся фотоны изначально вообще не были обязаны иметь определённую проекцию спина на импульс, но, когда Alice измерила проекцию своего фотона на импульс, которая, как мы знаем, измеряется в единицах  $\hbar$ , как любая проекция спина, станет известна проекция спина фотона Bob. Например, если у неё получилось  $-1$ , она с достоверностью может сказать, что Bob получит то же число, если произведёт измерение на секунду позже неё, хотя от момента разлёта фотонов прошло 100 секунд, и находились они на расстоянии в 200 световых секунд. Потом Alice сможет отправить свои данные по классическому каналу связи, и Bob убедится, что она правильно предсказала его результат измерения.

Способов реализовать такие эксперименты было придумано много, и в целом вывод в том, что всё, что наблюдали экспериментаторы, вполне укладывалось в парадигму квантовой теории и контрастировало с парадигмой концепции, предложенной Эйнштейном, Розеном и Подольским, которую стали называть концепцией локального реализма. Та гласит, что все возможные результаты измерения должны были определиться в момент рождения фотонов и дальше не меняться. То есть фотоны с самого начала имели определённые проекции спина на импульс, просто мы об этом не знали. Такой подход внешне выглядит вполне допустимым, но, как выяснилось, можно предложить реальные серии измерений и даже отдельные измерения, которые концепция локального реализма описывает неправильно.

Но это уже повод для более подробного разговора. А здесь хотелось обратить внимание, что такого рода проблемы возникают именно из-за явления квантовой запутанности, которое пока просто сформулировали.

## Семинар 4. Движение частицы в области потенциального барьера

### Контрольный опрос

1) График потенциальной энергии  $u(x)$  выглядит как на рис. 4.1. Предельное значение по  $x$  на  $-\infty$  некое  $u_1$ , на  $+\infty$  ноль, минимальное значение на всём диапазоне  $u_{\min}$ , а максимальное  $u_{\max}$ . График непрерывный и гладкий.

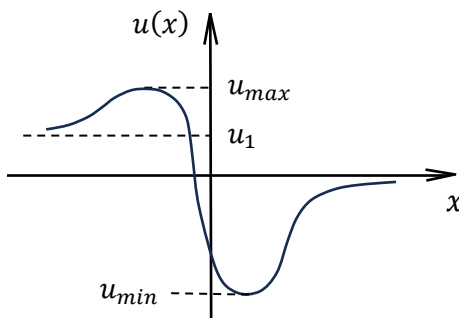


Рис. 4.1. График потенциальной энергии

Известно, что параметры графика находятся в соотношении

$$u_{\max} > u_1 > 0 > u_{\min} > -\infty \quad (4.1)$$

Укажите области расположения по энергии уровней энергии дискретного и непрерывного спектра с указанием кратности вырождения  $s_E$ . Нужно написать, что в определённом диапазоне энергии находятся определённые уровни энергии с определённой кратностью вырождения, и так разбить по всем возможным диапазонам, где они могут или должны быть.

2) Частица массы  $m$  движется в потенциале

$$u(x) = u_0 th\left(\frac{x}{a}\right) + u_0 \theta(x - a) \quad (4.2)$$

Ступенчатая функция Хевисайда или просто ступенька определяется как

$$\theta(z) = \begin{cases} 1, & z \geq 0 \\ 0, & z < 0 \end{cases} \quad (4.3)$$

Запишите условие сшивки для стационарной волновой функции  $\psi_E(x)$  в точке  $x = a$ .

3) Условие и вопрос такие же, как в 2), но

$$u(x) = u_0 th\left(\frac{x}{a}\right) + u_0 a \delta(x - a), \quad (4.4)$$

где  $\delta$  – дельта-функция Дирака. Видно, что в обоих случаях потенциал в окрестности точки  $a$  нерегулярен.

4) Потенциальная энергия  $u(x)$  – ступенька высотой  $u_0$ , на которую слева налетает частица массой  $m$  с энергией  $E$  (рис. 4.2).

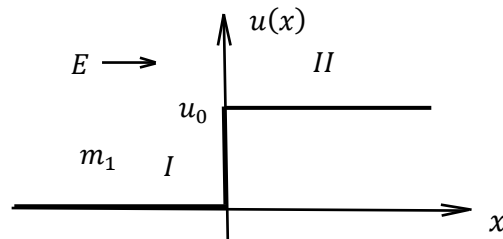


Рис. 4.2. Налёт частицы на потенциальный барьер

Энергия налетающей частицы

$$E = \frac{9 \hbar^2}{8 m a^2}, \tag{4.5}$$

$a$  – константа размерности длины. А высота барьера

$$u_0 = \frac{5 \hbar^2}{8 m a^2} \tag{4.6}$$

Для решения, где падающая волна налетает из  $-\infty$  слева направо, найдите коэффициент отражения частицы. В терминологии, принятой на лекции, это  $R^{(+)}$ .

### Ответы на контрольный вопрос

1) Первая интересная область лежит ниже  $u_{\min}$ . Здесь нет никаких уровней, потому что оператор кинетической энергии неотрицательно определен. Его среднее значение для любого локализованного состояния всегда положительно, и потенциальная тоже не может быть ниже  $u_{\min}$ . Поэтому все собственные значения, которые есть, выше него.

Следующая интересная зона – между  $u_{\min}$  и нижним из предельных значений на бесконечности, нулём, потому что здесь движение финитно в обе стороны и, соответственно, могут быть уровни дискретного спектра. Если они там есть, то обязательно невырожденные, как и всегда в одномерных задачах. Поэтому в этой области дискретный спектр с  $s_E = 1$ .

Следующая характерная полоса располагается между предельными значениями, нулём и  $u_1$ . Максимум  $u_{\max}$  был нарисован, чтобы подчеркнуть, что от него ничего не зависит. Важно, какие предельные значения, может ли частица удаляться на бесконечность или нет. В данной области она может удаляться на бесконечность только в одну сторону, вправо, и это означает, что спектр здесь непрерывный. Но кратность вырождения по-прежнему  $s_E = 1$ .

А в области выше  $u_1$  спектр непрерывный и двукратно вырожден, так что  $s_E = 2$ .

Вопросы 2) и 3) мы фактически разобрали на лекции. Случай 2) – это случай скачка конечной величины, ведь  $\theta$ -функция Хевисайда скачет на  $u_0$ . На графике потенциальной энергии до точки  $a$  будет гиперболический тангенс, а в ней произойдет подъём до  $u_0$  (рис. 4.3)

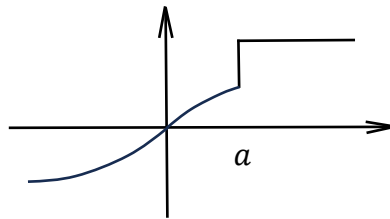


Рис. 4.3. Потенциал, со ступенькой, в котором движется частица

Скачок конечной величины, поэтому, как было установлено на лекции, условие сшивки – непрерывность самой функции

$$\psi_E(x_0 + 0) = \psi_E(x_0 - 0) \tag{4.7}$$

и её первой производной

$$\psi_E(x_0 + 0) = \psi'_E(x_0 - 0) \tag{4.8}$$

А в случае 3) есть интегрируемая сингулярность, дельта-функция  $\delta$  её классический пример в учебных задачах. На графике потенциальной энергии будет гиперболический тангенс, потом дельта-выброс – бесконечно узкий и высокий выброс в точке  $a$ , а дальше тангенс продолжится (рис. 4.4).

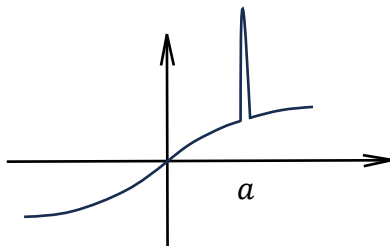


Рис. 4.4. Потенциал с сингулярностью, в котором движется частица

В этом случае функция по-прежнему непрерывна, то есть сначала напишем (4.7). Но, как говорит общая теория, для интегрируемых сингулярностей будет скачок первой производной. Исходя из формулы с лекции,

$$\psi_E(x_0 + 0) - \psi'_E(x_0 - 0) = \frac{2m}{\hbar^2} \tag{4.9}$$

Справа от знака равенства в (4.9) ещё должен стоять интеграл от произведения  $u$  на  $\psi_E$  в бесконечно малой окрестности точки  $x_0$ . Понятно, что в такой окрестности всякие постоянные под знаком интеграла нас не будут волновать, регулярная функция  $th\left(\frac{x}{a}\right)$  фактически будет давать в этой точке слабо меняющийся, почти постоянный вклад. Поэтому сработает интеграл от дельта-функции, который даст произведение единицы на  $u_0 a$ . И справа в (4.9) добавится  $u_0 a$  и  $\psi_E(x_0)$ , которую можно брать из любого предельного значения справа или слева, так как они равны друг другу в силу равенства (4.7).



4) У нас есть две области, где потенциал регулярен: первая, где  $x < 0$ , и вторая, где  $x > 0$ . Более того, потенциал постоянен в обеих областях. Это означает, что стационарные функции в них – просто плоские волны, и не надо брать предельное значение  $k$ , поскольку оно совпадает с самим значением в первой области.

В первой области  $u = 0$ , и поэтому, учитывая (4.5),

$$k_I = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = \frac{3}{2a} \quad (4.10)$$

Соответственно, во второй, где высота барьера  $u_0$ , с учётом (4.5) и (4.6),

$$k_{II} = \sqrt{\frac{2m(E - u_0)}{\hbar^2}} = \frac{1}{a} \quad (4.11)$$

Нужно сшить в первой области падающую и отражённую волну, поскольку у нас решение, где частица налетает слева, а во второй области только прошедшую. То есть надо записать две функции, слева и справа:

$$Ae^{ik_I x} + Be^{-ik_I x} = Ce^{ik_{II} x} \quad (4.12)$$

И поскольку мы пишем их в точке  $x = 0$ , где должны записать условие непрерывности самой функции и её первой производной, все экспоненты дадут единицу, и мы в качестве условия непрерывности функции получим

$$A + B = C, \quad (4.13)$$

А когда будем дифференцировать, из экспоненты, например, в первой области при  $Ae^{ik_1 x}$ , выскочит  $i \cdot \frac{3}{2a}$ , а при  $Be^{-ik_1 x}$  выскочит  $-i \cdot \frac{3}{2a}$ . А во второй из  $Ce^{ik_2 x}$  выскочит  $i \cdot \frac{1}{a}$ . После сокращения второе уравнение будет записано как

$$\frac{3}{2}(A - B) = C \quad (4.14)$$

Чтобы найти  $R^{(+)}$ , не нужно решать систему уравнений (4.13), (4.14) и условия нормировки на дельта-функцию. Надо только найти отношение  $\frac{B}{A}$ , поскольку

$$R = \left| \frac{B}{A} \right|^2 \quad (4.15)$$

Проще всего исключить из системы (4.13) и (4.14)  $C$ , например, вычтёшь из второго уравнения первое. Получится  $\frac{1}{2}A - \frac{5}{2}B = 0$ . То есть будет

$$\frac{B}{A} = \frac{1}{5}, \quad (4.16)$$

и из (4.15) получится  $R = \frac{1}{25}$ . Тогда коэффициент отражения

$$T = 1 - R = \frac{24}{25} \quad (4.17)$$

Но при этом, если бы просили найти  $T$ , решение было бы чуть длиннее, потому что надо было бы не только найти из системы  $\frac{C}{A}$ , но и не забыть, что в выражении для  $T$  отношение коэффициентов волновых чисел (4.11) к (4.10).

Видно, что мы всегда получаем систему линейных уравнений, условий сшивки относительно коэффициентов интегрирования, и нам из неё, по сути, надо найти одно число. Легче всего найти либо  $\frac{B}{A}$ , либо  $\frac{C}{A}$ . То есть, даже если бы между первой и второй областями была бы какая-то промежуточная область, для которой мы бы ещё писали условия сшивки на границах, и были бы и другие коэффициенты  $A_1$  и  $B_1$ , скорее всего, мы их выразили бы через  $C$  из условий на второй границе и подставили в уравнения на первой, чтобы получить линейную связь  $B$  с  $C$  и из неё выразить  $\frac{B}{A}$  или  $\frac{C}{A}$ . Так как

$$R + T = 1, \quad (4.18)$$

надо находить коэффициент, который легче найти, и уже через него выразить нужный.

### Задача 1. Движение частицы в дельта-яме

Разберём одномерную задачу, которая интересная, легко считается и в которой получаются естественные с точки зрения физического смысла результаты. Она не совсем тривиальная, потому что в ней есть барьер, содержащий дельта-функцию, чтобы была интегрируемая сингулярность в потенциале. Данной задачей мы будем активно пользоваться в дальнейшем, в том числе в следующем семестре в качестве стационарной части для нестационарных задач, потому что это некое общее описание ситуации, когда частица находится в связанном состоянии в потенциальной яме, а мы потом пытаемся на неё воздействовать и что-то с ней сделать.

Но пока просто частица сидит в потенциальной яме. Такие ямы бывают самые разнообразные, но часто возникает задача, где частица находится в очень узкой и глубокой. Все подобные ямы немного похожи на яму в виде дельта-функции.

Возьмём задачу из списка обязательных. Частица массы  $m$  с энергией  $E$  налетает на потенциальный барьер как на рис. 4.5 или движется в таком потенциале, ведь у неё энергия может быть как положительная, так и отрицательная. Ситуация с  $E > 0$  описывает инфинитное движение, а с  $E < 0$  соответствует финитному.

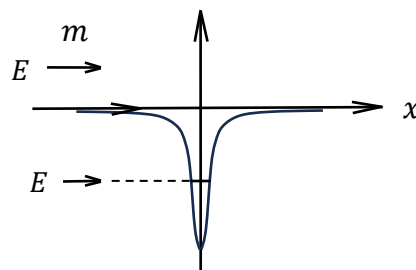


Рис. 4.5. Движение частицы с положительной и отрицательной энергией в дельта-яме

Нужно изучить движение частицы массой  $m$  в потенциале

$$u(x) = -V_0\delta(x), \quad (4.19)$$

то есть яма располагается в начале координат. Размерность дельта-функции обратная к размерности аргумента,  $x$  – это координата, так что у  $\delta(x)$  размерность обратной длины, и тогда константа  $V_0$  имеет размерность энергии на длину. По сути,  $V_0$  – это площадь нашей потенциальной ямы, произведение глубины на ширину. То есть яма очень глубокая и очень узкая с произведением глубины на ширину  $V_0$ .

1) Рассмотрим случай  $E < 0$ . В этой области могут быть уровни дискретного спектра, поэтому нас интересуют уровни энергии и соответствующие им стационарные волновые функции. В этом случае мы должны решить задачу

$$\hat{H}\psi_E = E\psi_E \quad (4.20)$$

и получить уравнение

$$\psi_E'' + \frac{2m}{\hbar^2} [E - u(x)]\psi = 0 \quad (4.21)$$

Видно, что в области интегрирования есть сингулярность, прямо в точке  $x = 0$ . Поэтому разобьём область определения на две подобласти  $I$  и  $II$ . В обеих потенциал не только регулярен, но и константа, равная нулю. Поэтому в них из (4.21) получается уравнение с постоянным коэффициентом

$$\psi_E'' + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi = 0 \quad (4.22)$$

И поскольку по условию  $E < 0$ , этот коэффициент отрицателен. А значит, фундаментальную систему решений образуют вещественные экспоненты.

В этом случае можно обозначить

$$\frac{2mE}{\hbar^2} \equiv -\kappa^2, \quad (4.23)$$

где  $\kappa$  - некое вещественное число. По умолчанию будем считать его вещественным положительным.

Тогда для обеих подобластей фундаментальная система решений

$$\psi_E^{(I,II)} = A_{I,II}e^{x\kappa} + B_{I,II}e^{-x\kappa} \quad (4.24)$$

Индексы у констант интегрирования ставятся, потому что они разные в разных подобластях.

Из-за финитности движения возникает граничное условие. Частица с такой энергией не может убежать на бесконечность из этой ямы в стационарном состоянии, без дополнительных внешних воздействий. То есть

$$\psi_E \rightarrow 0 \quad (4.25)$$

и при  $x \rightarrow +\infty$ , и при  $x \rightarrow -\infty$ .

Эти условия вырезают в каждой области одну из экспонент, ненулевой коэффициент остаётся при убывающей, а при неограниченно растущей будет нулевые константы интегрирования. То есть

$$\psi^{(I)} = A_I e^{x\kappa} \quad (4.26)$$

$$\psi^{(II)} = B_{II} e^{-x\kappa} \quad (4.27)$$

Остаются условия сшивки и нормировки. Для условия сшивки в этой точке есть условие

$$\psi(+0) = \psi(-0) \quad (4.28)$$

$\psi(-0)$  в первой области, а  $\psi(+0)$  во второй. В нуле экспоненты из (4.26) и (4.27) превращаются в единицы, и тогда получается

$$B_{II} = A_I \quad (4.29)$$

Константа, которая являются общим множителем у всего решения, может быть определена только из условия нормировки. Второе условие сшивки тоже однородное, и константа просто сократится в правой и левой части. Обозначим (4.29) как  $N$ .

Разберёмся с условием для скачка производных. Для  $\psi'(+0)$ , когда мы дифференцируем  $Ne^{-x\kappa}$  из (4.27), получается  $-\kappa Ne^{-x\kappa}$ , которая превращается в точке  $x = 0$  в  $-\kappa N$ . В силу очевидной симметрии волновой функции  $\psi'(-0)$  окажется  $\kappa N$ . И в соответствии с условиями сшивки это должно быть  $\frac{2m}{\hbar^2}$ , умноженное на константу  $-V_0$ , которая выскочит в (4.19), и на значение самой функции в нуле, которое  $N$ . Получится

$$\psi'(+0) - \psi'(-0) = -\kappa N - \kappa N = \frac{2m}{\hbar^2} (-V_0) N \quad (4.30)$$

Константа  $N$  в (4.30) сократится, зато из него определится  $\kappa$ . Видно, что для данного стационарного случая  $\kappa$  имеет единственное стационарное значение

$$\kappa = \frac{mV_0}{\hbar^2} \quad (4.31)$$

Тогда из (4.23) можно определить уровни энергии. В такой яме весь дискретный спектр состоит из одного уровня энергии. Так как для многих задач важно указать среди всех дискретных уровней энергии самый низкий, который в квантовой теории обычно называют основным или ground состоянием, напишем

$$E_0 \equiv E_{gr} = -\frac{mV_0^2}{2\hbar^2} \quad (4.32)$$

То есть мы нашли дискретный спектр и соответствующую волновую функцию. Она равна  $Ne^{x\kappa}$  в области  $E < 0$  и  $Ne^{-x\kappa}$  в области  $E > 0$ . Объединим эти две записи в

$$\psi_0(x) = Ne^{-\kappa|x|} \quad (4.33)$$

А последнее неиспользованное уравнение – условие нормировки – используется для определения общей константы в решении  $N$ . Должно быть

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx N^2 \cdot e^{-2\kappa|x|} = 1 \quad (4.34)$$

Из-за чётности подынтегральной функции можно написать два интеграла от 0 до  $\infty$ , а на них можно снять модуль с  $x$ . Поэтому из (4.34) получится

$$2N^2 \cdot \int_0^{\infty} dx e^{-2\kappa x} = \frac{N^2}{\kappa}, \quad (4.35)$$

так как прямой подстановкой

$$\int_0^{\infty} dx e^{-ax} = \frac{1}{a} \quad (4.36)$$

Таким образом, если мы выбираем начальную фазу так, чтобы функция была вещественная, как мы обычно делаем в дискретном спектре, получается

$$N = \sqrt{\kappa}, \quad (4.37)$$

и (4.33) записывается как

$$\psi_0(x) = \sqrt{\kappa} e^{-\kappa|x|} \quad (4.38)$$

2) Рассмотрим случай положительных энергий. Собственные значения искать бессмысленно, это любое значение от 0 до  $\infty$ , так как спектр непрерывный. Можно найти для каждого значения энергии соответствующую собственную функцию, но в данном случае это будет громоздко из-за громоздкости нормировки на дельта-функцию, там будут разные выражения справа и слева. Уровни энергии двукратно вырождены, для каждого можно будет найти две линейно независимые собственные функции.

К счастью, в большинстве реалистичных задач не требуется детальное нахождение всего множества решений. Как правило, чаще всего просят найти коэффициенты прохождения  $R$  и отражения  $T$ . Поэтому найдём их для любой  $E > 0$ .

Даже без вычислений понятно, что они не зависят от того, с какой стороны частица налетает, потому что препятствие симметричное. Традиционно будем смотреть поток частиц, налетающих слева, то есть волну вероятностей, налетающую слева. Опять разобьём область определения на подобласти  $I$  и  $II$ .

В каждой из них потенциальная энергия  $u(x) = 0$ , поэтому соответствующее дифференциальное уравнение имеет вид

$$\psi''_{I,II} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi_{I,II} = 0 \quad (4.39)$$

Только теперь  $\frac{2mE}{\hbar^2} > 0$ , и логично ввести волновое число  $k$  для волн вероятности для заданной энергии  $E$  и обозначить

$$k^2 \equiv \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad (4.40)$$

будем считать  $k$  вещественным положительным числом.

Фундаментальную систему решений теперь можно и удобно писать не через синусы и косинусы, а через осциллирующие экспоненты, потому что, как мы помним, они отвечают определённому постоянному потоку, плотности потока вероятности. Вообще

$$\psi_I = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \tag{4.41}$$

$$\psi_{II} = Ce^{ikx} + De^{-ikx} \tag{4.42}$$

Но надо помнить про двукратную вырожденность. В системе уравнений (4.41) и (4.42) целых четыре константы интегрирования, в то время как из уравнений есть условие нормировки на дельта-функцию и два условия сшивки, ведь условия на бесконечности здесь нет ввиду инфинитности движения. Этого не хватит для однозначной фиксации решения.

Мы можем сами добавить ещё какое-то условие, но уже выбирая конкретное решение. Будем рассматривать решение  $\psi(+0)$ , отвечающее волне, налетающей слева и рассеивающейся на яме. То есть в области I есть падающая и отражённая волна, а в области II только прошедшая (рис. 4.6), в ней в (4.42)  $D = 0$ .

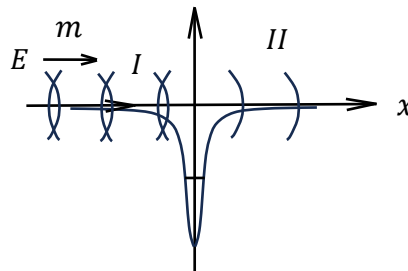


Рис. 4.6. Налетающая, отражённая и прошедшая волны в дельта-яме

Теперь можно написать два условия сшивки, которые выразят ещё две константы через третью, которая станет нормировочной константой. По традиции, волна  $Ae^{ikx}$  является падающей, волна  $Be^{-ikx}$  отражённой, а  $Ce^{ikx}$  прошедшей. В качестве амплитудной константы обычно выбирают амплитуду падающей волны  $A$ . Выразим через неё  $B$  и  $C$  и потом определим её из условия нормировки.

Если вспомнить определение коэффициентов отражения и прохождения, что условие нормировки для их определения не понадобится, потому что как только мы выразим  $B$  и  $C$  через  $A$ , зная при этом, что волновые числа одинаковы на  $+\infty$  и  $-\infty$ , мы сразу найдём  $R$  и  $T$  даже без использования условия нормировки.

Условие сшивки функций в первой и второй области:

$$\psi(+0) = \psi(-0), \tag{4.43}$$

оно выдаст уравнение на связь констант

$$C = A + B \tag{4.44}$$

А уравнение для скачка производной

$$\psi'(+0) - \psi'(-0) = -\frac{2mV_0}{\hbar^2} \psi(0) \quad (4.45)$$

Вспоминая (4.32), снова обозначим также. При дифференцировании в (4.45) при  $A$ , согласно (4.41), будет высказывать  $ik$ , при  $B - ik$ , а при  $C$ , согласно (4.42),  $ik$ . То есть из (4.45) получится

$$ikC - ik(A - B) = -2\aleph C \quad (4.46)$$

Вместо  $C$  в (4.46), согласно (4.44), можно было поставить  $A + B$ , но так короче. Разделим (4.46) на  $ik$  и перенесём слагаемые:

$$C \left(1 - 2i \frac{\aleph}{k}\right) = A - B \quad (4.47)$$

Мы получили систему уравнений (4.44) и (4.47). Это один из очень рациональных путей, потому что в правых частях оказались выражения  $A + B$  и  $A - B$ , и уравнения можно легко почленно сложить или вычесть и сразу получить связь  $A$  и  $C$  или  $B$  и  $C$ . С точки зрения коэффициентов отражения и прохождения удобнее находить первую. Почленно складываем уравнения (4.44) и (4.47) и получаем

$$C \left(2 - 2i \frac{\aleph}{k}\right) = 2A \quad (4.48)$$

Тогда выходит

$$\frac{C}{A} = \frac{1}{1 - i \frac{\aleph}{k}} = \frac{k}{k - i\aleph} \quad (4.49)$$

$k$  и  $\aleph$  имеют одинаковые размерности. И тогда

$$T = \left|\frac{C}{A}\right|^2 = \frac{k^2}{k^2 + \aleph^2} \quad (4.50)$$

Вспоминая (4.40) и (4.32), получим из (4.50)

$$\frac{E}{E + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}} \quad (4.51)$$

Знаменатель (4.51) – это  $-E_0$ , где  $E_0$  – энергия связанного состояния в данном потенциале. Поэтому можно записать коэффициент прохождения через наше препятствие как

$$T = \frac{E}{E - E_0} \rightarrow 1 \quad (4.52)$$

То есть он, как функция энергий, имеет полюс в точке, отвечающей энергии связанного состояния. Этот полюс физически недостижим, потому что данное решение нами построено для случая  $E > 0$ , то есть значения энергии налетающей частицы  $E - E_0$  в действительности нет. Здесь нет сингулярного коэффициента прохождения, но сам результат не случаен. В более сложных задачах такое свойство у него тоже может быть, точнее, для всех нормальных задач обычно так и есть.

А коэффициент отражения в данной задаче

$$R = 1 - T = \frac{-E_0}{E - E_0}, \quad (4.53)$$

$-E_0$  в данном случае  $> 0$ .

У коэффициентов отражения и прохождения достаточно естественное поведение. Если мы рассмотрим налетающую частицу с энергией, значительно превосходящей её энергию связи с данным силовым центром, то есть с  $E \gg (E_0)$ , то частица не будет замечать препятствие. Ведь в этом пределе будет  $T \rightarrow 1$  и  $R \rightarrow 0$ , для таких  $E$  последний обратно пропорционален  $E$ . То есть по физике можно разобраться, что означает результат, и убедиться, что всё правильно.

Условие нормировки нам не понадобилось, но разберёмся, как бы оно выглядело. Мы обнаружили, что

$$C = \frac{k}{k - i\aleph} \cdot A, \quad (4.54)$$

и, в соответствии с (4.44),

$$B = C - A = \frac{i\aleph}{k - i\aleph} \quad (4.55)$$

И решение  $\psi_E^{(+)}(x)$ , которое мы использовали в данном случае, может быть записано как

$$\psi_E^{(+)}(x) = A \cdot \begin{cases} e^{ikx} + \frac{i\aleph}{k - i\aleph} e^{-ikx}, & x < 0 \\ \frac{k}{k - i\aleph} e^{ikx}, & x > 0 \end{cases} \quad (4.56)$$

Это честная запись, общая структура полного решения для энергии  $E$  и  $\psi^{(+)}$ , когда частица, поток вероятности налетает из  $-\infty$ .

Можно было вместо нумерации решения энергией  $E$  нумеровать его индексом  $k$ , который с ней связан простым соотношением (4.40). Как правило, его оставляют в одном из этих двух вариантов, потому что дальше мы хотим написать условие нормировки. Мы не можем записать интеграл от квадрата модуля волновой функции, потому что он разойдётся, на  $+\infty$  квадрат модуля волновой функции второго уравнения системы (4.56) константа. Так что в пределе непрерывного спектра можно использовать только условие нормировки на дельта-функцию. Например,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_E^{(+)*} \psi_{E'}^{(+)}(x) dx = \delta(E - E') \quad (4.57)$$

В итоге мы всё приведём к интегралам от произведений экспонент. Для этих экспонент мы можем использовать интегральное представление дельта-функции, то есть выражения



$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{i\alpha x} = 2\pi\delta(\alpha) \quad (4.58)$$

Но из-за несимметрии поведения функции (4.56) сплошных интегралов от  $-\infty$  до  $+\infty$  не будет, в разных половинах оси  $x$  под ними будут разные выражения. Поэтому в действительности (4.58) придётся разбивать в смысле главного значения на интегралы от  $\cos \alpha x$  и  $\sin \alpha x$ . В этом смысле косинус чётная функция, поэтому  $\int_{-\infty}^0 dx \cos \alpha x = \pi\delta(\alpha)$ .  $\int_{-\infty}^{+\infty} dx \sin \alpha x = 0$  из-за симметрии, а  $\int_0^{+\infty} dx \sin \alpha x$  будет сложнее.

И даже где мы всё приведём к интегралам, например, от косинуса, будет возникать что-то вроде  $\delta(k - k')$ , а  $k$  и  $k'$  – функции от энергии  $E$ . Они простые, из третьего семестра математического анализа выражение для дельта-функции от функции

$$\delta[f(\alpha)] = \sum_{\alpha_i} \frac{\delta(\alpha - \alpha_i)}{|f'(\alpha_i)|}, \quad (4.59)$$

где  $\alpha_i$  – корни  $f(\alpha) = 0$ .

То есть задача по вычислению коэффициента нормировки не сложная, но долгая из-за количества технических действий. С другой стороны, в реальных задачах часто нужны именно коэффициенты отражения и прохождения, а их мы строим, не зная общей константы нормировки, просто по соотношения констант – амплитуд падающей, прошедшей и отражённой волн.

Можно разделить все задачи для области непрерывного двукратно вырожденного спектра на задачи про коэффициенты прохождения и отражения, которые обычно относительно простые и встречаются в учебных курсах, до полного исследования системы стационарных волновых функций эта задача очень сложная и в основном нужна тем, кто хочет потом строить из этих функций волновые пакеты. То есть, если мы захотим исследовать рассеяние волнового пакета даже на относительно простом препятствии, придётся строить честное решение. Ведь разлагать волновой пакет по плоским волнам в интеграл Фурье будет нужно, используя честное выражение для этих плоских волн – базисных волн, по которым ведётся разложение.

## Задача 2. Движение частицы в однородном электрическом поле

Из проведённого анализа и приведённых примеров выпадают две особенные задачи, с которыми надо действовать немного по-другому. Это однородное поле и гармонический осциллятор. В списке обязательных задач есть задача про однородное поле.

Частица массы  $m$  с зарядом  $q$  движется в однородном электрическом поле, направленном вдоль оси  $x$ . Напряжённость поля

$$\vec{\varepsilon} = \varepsilon \vec{e}_x, \quad (4.60)$$

Мы обозначили её буквой  $\varepsilon$ , так как хотим искать стационарную волновую функцию с определённым значением энергии  $E$  и сохранить для неё прежнее обозначение.

Надо найти полную систему собственных функций гамильтониана, то есть решить спектральную задачу

$$\hat{H}\psi_E = E\psi_E \quad (4.61)$$

для нашего гамильтониана, который будет иметь вид

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} - q\varepsilon\hat{x} \quad (4.62)$$

Потенциальная энергия в этом случае сведётся к линейному слагаемому  $q\varepsilon\hat{x}$ . Выбор потенциальной энергии всегда с точностью до константы, и мы здесь выбрали так, чтобы она в нуле равнялась нулю.

Эта задача особенна тем, что, как мы уже замечали, для её решения гораздо проще использовать импульсное представление, то есть искать стационарную волновую функцию  $\tilde{\psi}_E(p)$ . Учитывая, что на место  $\hat{x}$  в (4.62) ставим  $i\hbar \frac{d}{dp}$ , в нём уравнение (4.61) превратится в

$$\frac{p^2}{2m}\tilde{\psi} - i\hbar q\varepsilon \frac{d\tilde{\psi}}{dp} = E\tilde{\psi} \quad (4.63)$$

Это обыкновенное дифференциальное уравнение первого порядка, причём с уже разделёнными переменными. Перенесём первое слагаемое слева направо, вынесем общий множитель  $\tilde{\psi}$  и получим

$$\frac{d\tilde{\psi}}{dp} = \frac{i}{\hbar q\varepsilon} \left[ E - \frac{p^2}{2m} \right] \tilde{\psi}, \quad (4.64)$$

знак минус в (4.63) использовали, чтобы переделать в (4.64) знак в скобке.

Дальше отправляем  $\tilde{\psi}$  к  $d\tilde{\psi}$ , а  $dp$  вправо, и получается легко интегрируемое уравнение. Проинтегрировав вышедшее равенство, получим

$$\ln(\tilde{\psi}) = const + \frac{i}{\hbar q\varepsilon} \left( E_p - \frac{p^3}{6m} \right) \quad (4.65)$$

Константа даёт нормировочный множитель, и после потенцирования получается функциональный вид решения

$$\tilde{\psi}_E(p) = C \cdot e^{\frac{i}{\hbar q\varepsilon} \left( E_p - \frac{p^3}{6m} \right)} \quad (4.66)$$

Мы получили элементарную функцию достаточно лёгким интегрированием. Если у нас просят полный ортонормированный базис, то из-за невырожденности спектра ортогональность функций с разными значениями  $E$  гарантируется. Но так как здесь непрерывный спектр, нужно, чтобы здесь была нормировка на дельта-функцию, то есть было

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp \tilde{\psi}_E^* \tilde{\psi}_{E'} = \delta(E - E') \quad (4.67)$$

Константы из значений при  $\tilde{\psi}_E^*$  и  $\tilde{\psi}_{E'}$  в итоге должны получиться при одном и том же значении энергии, поэтому, подставляя (4.66) в (4.67), мы сразу вынесем  $|C|^2$  за знак интеграла. Иметь под интегралом в показателе экспоненты  $p^3$  очень неприятно, но, к счастью, слагаемое с ним не содержит  $E$ , поэтому в функциях  $\tilde{\psi}_E^*$  и  $\tilde{\psi}_{E'}$  она одинаковая, а так как они взаимно сопряжённые, эти экспоненты просто сокращаются. Из сопряжённой остаётся  $\frac{i}{\hbar q \varepsilon}(-E)$ , из несопряжённой  $\frac{i}{\hbar q \varepsilon} E'$ . И из (4.67) получается

$$|C|^2 \cdot \int_{-\infty}^{\infty} dp e^{\frac{i}{\hbar q \varepsilon}(E-E')} = |C|^2 \cdot 2\pi \delta\left(\frac{E' - E}{\hbar q \varepsilon}\right), \quad (4.68)$$

если  $e^{\frac{i}{\hbar q \varepsilon}(E-E')} = \alpha$ .

Дельта-функция определена как чётная, поэтому  $E' - E$  или  $E - E'$ , не важно. А константу  $\frac{1}{\hbar q \varepsilon}$  лучше вынести, если мы хотим получить условие нормировки (4.67).  $\delta(\alpha x) = \frac{1}{|\alpha|} \delta(x)$ , то есть константу из аргумента дельта-функции всегда можно вынести и поставить перед ней в минус первой степени. Поэтому из (4.68) получается, если мы меняем знак в скобке, чтобы удобнее было сравнивать,

$$|C|^2 2\pi \hbar q \varepsilon \delta(E - E') \quad (4.69)$$

Сравнивая (4.67) и (4.69), говорим, что должно быть

$$|C|^2 2\pi \hbar q \varepsilon = 1 \quad (4.70)$$

$C$  определено соотношением (4.70) с точностью до фазы, но мы её выберем так, чтобы оно было положительным вещественным числом. Понятно, что будет

$$C = \frac{1}{\sqrt{2\pi \hbar q \varepsilon}} \quad (4.71)$$

Итак, система нормированных на дельта-функцию по энергии собственных функций гамильтониана для этой задачи, если подставить (4.71) в (4.66), может быть записана как

$$\tilde{\psi}_E(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi \hbar q \varepsilon}} e^{\frac{i}{\hbar q \varepsilon}(E p - \frac{p^3}{6m})} \quad (4.72)$$

Если бы мы решали эту задачу в координатном представлении, тоже бы решили её, но скорее всего через сведение к этому выражению, потому что на самом деле координатная волновая функция является фурье-образом импульсной. И мы бы написали

$$\psi_E(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi \hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp e^{\frac{i}{\hbar} p x} \tilde{\psi}(p) \quad (4.73)$$

То есть мы уже сейчас можем записать  $\psi_E(x)$  в виде интегрального представления, но данный интеграл не берётся в элементарных функциях, так что мы бы на этом остановились. Математики называют эту формулу интегральным представлением функции Эйри. Соответствующая функция определяется или через решение данного уравнения в координатном представлении, или через интеграл. Это одна из спецфункций, внесённых в реестр спецфункций математики, функций Эйри. Она специально придумана для данной задачи.

Дальше, если нам интересно, мы смотрим в справочнике её свойства, графики и т. д. Стоит обратить внимание, что она не вещественная, потому что в форме (4.72) экспонента с мнимым показателем разбивается на вещественную и мнимую часть. Теоретически в этом случае можно записать всё через косинусы и синусы, но, если уж данная задача потребует для практических целей, удобнее всего будет работать с импульсным представлением, с импульсной волновой функцией стационарного состояния. Именно по ним удобнее всего разлагать, например, произвольные пакеты, которые здесь будут взаимодействовать с однородным полем.

Главное, что мы знаем, как строить базис стационарных состояний, то есть полный ортонормированный базис собственных векторов гамильтониана, собственных функций, по которому можно будет разложить любую интересующую нас волновую функцию, в каком бы представлении её ни задали. Если её задали в координатном, мы сможем сначала перебросить её в импульсное.

Важно заметить, что общая схема решений, как правило, для непрерывного спектра, выглядит именно таким образом, что мы берём начальное распределение, заданное нам либо в импульсном, либо в координатном пространстве, и раскладываем по собственным функциям гамильтониана. Это самый простой путь, потому что мы знаем, как собственные функции гамильтониана дальше будут эволюционировать.

### Задача 3. Эволюция волновой функция свободной частицы, совершающей одномерное движение

Рассмотрим последний пример, который есть в большинстве книг и в списке обязательных задач. Мы не будем решать его целиком, потому что в нём очень большой объём вычислений. Свободная частица совершает одномерное движение по оси  $x$  (рис. 4.7), то есть

$$u(x) \equiv 0 \quad (4.74)$$

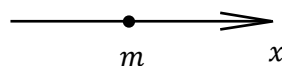


Рис. 4.7. Одномерное движение свободной частицы

Координатная волновая функция в момент времени  $t = 0$  описывается гауссовым пакетом, для которого мы исследовали дисперсию координаты и импульса и обнаружили, что она минимизирует соотношение неопределённостей:

$$\psi(0, x) = \frac{1}{(2\pi D)^{1/4}} e^{-\frac{x^2}{4D} + \frac{i}{\hbar} p x} \quad (4.75)$$

Нужно найти, как выглядит  $\psi(x, t)$ , то есть что происходит с этим гауссовым пакетом.

На общем уровне мы понимаем, что его центр будет перемещаться равномерно прямолинейно, поскольку частица свободная и должна двигаться именно так. То есть среднее значение координаты будет ехать с постоянной скоростью (рис. 4.8). Так как  $p$  – средний импульс, скорость движения центра масс окажется  $\frac{p}{m}$ .

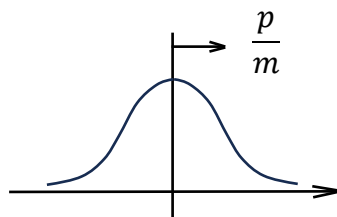


Рис. 4.8. Перемещение гауссова пакета

Ещё тут должна быть дисперсия, то есть пакет будет расплываться. Дисперсия должна расти, причём на больших временах как  $\sqrt{t}$ , если вспомнить общую динамику таких процессов диссипации.

Мы можем получить этот результат, разложив (4.75) по плоским волнам в момент времени  $t = 0$ , а в момент  $t$  к каждому коэффициенту разложения добавить временную экспоненту  $e^{-\frac{i}{\hbar} E t}$ . Тогда, убирая  $\hbar$  из  $\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$ , чтобы писать интеграл по волновому числу  $k$ , и учитывая, что энергия для волны с заданным волновым числом  $k$  – это  $\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$  для свободной частицы, получим

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{ikx} e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m} t} \tilde{\psi}(k), \quad (4.76)$$

$\tilde{\psi}(k)$  – фурье-образ исходного гауссова пакета (4.75).

Вспомним из опыта работы с фурье-преобразованиями, что фурье-образ гауссова пакета тоже гауссов пакет. Также именно он является собственной функцией оператора Фурье. Так что в  $\tilde{\psi}(k)$  в (4.72) получится гауссов пакет.

После умножения на  $e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m} t}$  всё равно останется гауссов пакет, потому что множитель квадратичный по  $k$ , и надо будет просто выделить полный квадрат в показателе экспоненты. И тогда обратное преобразование будет тем же самым фурье-преобразованием гауссова пакета. Так что на выходе мы снова получим гауссов пакет, но

у которого дисперсия уже будет зависеть от времени  $t$  из-за вычисления этого интеграла. Там как раз будет корень из константы плюс что-то, умноженное на  $t$ . То есть в итоге мы получим ожидаемое поведение, но придётся проводить преобразование Фурье в одну и другую сторону по одним и тем же формулам.

## Семинар 5. Гармонический осциллятор и симметрия

Данный семинар будет посвящён двум темам – гармоническому осциллятору и использованию симметрии. Но контрольный опрос будет целиком по первой, поскольку про вторую мы ещё будем говорить на следующих семинарах.

### Контрольный опрос

Есть одномерная система с гамильтонианом

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2} \quad (5.1)$$

Договоримся, что мы знаем уровни энергии для этого гамильтониана:

$$\hat{H}|n\rangle = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) |n\rangle, \quad (5.2)$$

$|n\rangle$  – стационарные вектора состояний, где  $n = 0, 1, 2, \dots$

Мы сегодня в основном хотим показать, как работать с помощью представления повышающих и понижающих операторов. Первые два вопроса будут теоретическими, последние два – техническими, где можно всё посчитать алгебраически.

1) Опишите связь понижающего оператора  $\hat{a}$  и повышающего  $\hat{a}^+$  с операторами координаты  $x$  и импульса  $\hat{p}_x$  для данной задачи.

2) Опишите действие этих операторов на собственные вектора гамильтониана, то есть  $\hat{a}|n\rangle$  и  $\hat{a}^+|n\rangle$ .

3) Пусть у осциллятора в момент времени  $t = 0$  состояние  $|\psi\rangle$  описывается линейной комбинацией с коэффициентами  $\frac{1}{\sqrt{2}}$ ,

$$|\psi\rangle|_{t=0} = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle \quad (5.3)$$

Это некое чистое состояние. Найдите при таком начальном состоянии зависимость от времени среднего значения координаты осциллятора  $\bar{x}(t)$ .

4) Теперь задано другое начальное состояние, вместо смеси  $|0\rangle$  и  $|1\rangle$  взята смесь  $|0\rangle$  и  $|2\rangle$  и добавлен сдвиг по фазе, главным образом для того, чтобы увидеть, что от него ничего не зависит:

$$|\psi\rangle|_{t=0} = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|2\rangle \quad (5.4)$$

Найдите зависимость дисперсии координаты от времени  $Dx(t)$ .

### Ответы на контрольный вопрос

1) Можно написать связь в обе стороны.

$$\hat{a} = \frac{m\omega\hat{x} + i\hat{p}_x}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \quad (5.5)$$

$\hat{a}^+$  получается из (5.5) эрмитовым сопряжением:

$$\hat{a}^+ = (\hat{a})^+ \quad (5.6)$$

Интереснее, как выглядят обратные соотношения. Оператор координаты может быть записан через  $\hat{a}$  и  $\hat{a}^+$  как

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^+), \quad (5.7)$$

а оператор импульса как

$$\hat{p}_x = \sqrt{\frac{\hbar m \omega}{2}} \frac{1}{i} (\hat{a} - \hat{a}^+) \quad (5.8)$$

2) Соотношения действия тоже простые.  $\hat{a}$  и  $\hat{a}^+$  называются понижающим и повышающим операторами, потому что вытаскивают нормировочный множитель и понижают или повышают номер:

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad (5.9)$$

$$\hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \quad (5.10)$$

3) Поскольку нам нужна эволюция с течением времени, первый шаг состоит в том, чтобы из  $|\psi(0)\rangle$  сделать  $|\psi(t)\rangle$ . Для этого надо каждое слагаемое в (5.3) умножить на энергетическую экспоненту. Поскольку энергия состояния  $E_0$  – это  $\frac{\hbar\omega}{2}$ , то в первой экспоненте будет  $\frac{E}{\hbar} = \frac{\omega}{2}$ , а во второй  $\frac{E}{\hbar} = \frac{3\omega}{2}$ , и получится

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle e^{-i\frac{\omega}{2}t} + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle e^{-i\frac{3\omega}{2}t} \quad (5.11)$$

По определению по этому состоянию нужно усреднить оператор  $\hat{x}$ . Для наглядности выпишем всё подробно. Подставим на место  $\hat{x}$  выражение (5.7), тогда

$$\bar{x}(t) = \langle\psi(t)|\hat{x}|\psi(t)\rangle = \left\langle\psi(t)\left|\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^+)\right|\psi(t)\right\rangle \quad (5.12)$$

$\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$  сразу можно вынести. Множитель  $\frac{1}{\sqrt{2}}$  есть и в  $\langle\psi(t)|$ , и в  $|\psi(t)\rangle$ , они оба выносятся и дают  $\frac{1}{2}$ . Дальше пишем сопряжённый вектор, умножаем его на  $(\hat{a} + \hat{a}^+)$  и на такой же несопряжённый вектор. Тогда из (5.12) получается

$$\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{1}{2} \left( \langle 0|e^{+i\frac{\omega}{2}t} + |1\rangle e^{-i\frac{3\omega}{2}t} \right) (\hat{a} + \hat{a}^+) \left( |0\rangle e^{-i\frac{\omega}{2}t} + |1\rangle e^{-i\frac{3\omega}{2}t} \right) \quad (5.13)$$

Разберёмся, как дальше действовать рационально. Из формул действия (5.9) и (5.10) понятно, что матричный элемент от операторов  $\hat{a}$  и  $\hat{a}^+$  в первой степени не равен



нулю только в случае, если номер справа и слева от равенства отличается на единицу. Причём для  $\hat{a}$  нужно, чтобы справа он был на единицу больше, а у  $\hat{a}^+$  меньше.

То есть, если взять в (5.13) оператор  $\hat{a}$  из второй скобки, обнаружим, что среди всех, стоящих в обкладках компонент, единственный вектор, который подходит, чтобы слева стояло на единицу меньше, это  $\langle 0|$  из первой скобки. А единственный вектор на роль правого –  $|1\rangle$  из третьей. То есть просто возникает матричный элемент  $\langle 0|\hat{a}|1\rangle$ , который равен единице, потому что  $\hat{a}$ , действуя на  $|1\rangle$ , выдаёт  $|0\rangle$ , и скалярное произведение  $\langle 0|0\rangle = 1$ . Произведение экспоненциальных коэффициентов, которые там вынесутся,  $e^{+i\frac{\omega}{2}t} \cdot e^{-i\frac{3\omega}{2}t} = e^{-i\omega t}$ . Аналогично, для  $\hat{a}^+$  получится только вариант из  $\langle 1|$  из первой скобки и  $|0\rangle$  из второй,  $\langle 1|\hat{a}^+|0\rangle = 1$  с коэффициентом  $e^{+i\omega t}$ . То есть из (5.13) будет

$$\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{1}{2} \left( e^{-i\frac{\omega}{2}t} + e^{-i\frac{3\omega}{2}t} \right) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \cos(\omega t) \quad (5.14)$$

Если мы один раз получили такой результат, все промежуточные выкладки становятся больше не нужны, из выражения (5.12) надо писать (5.14). Потому что когда в обкладках стоит комбинация 0 и 1, а внутри первая степень  $\hat{x}$ , для  $\hat{a}$  останется только вариант  $\langle 0|\hat{a}|1\rangle$ , а для  $\hat{a}^+$  вариант  $\langle 1|\hat{a}^+|0\rangle$ .

**4)** Из-за  $i$  в (5.4) выражении (5.13) в первой скобке для сопряжённого вектора будет не  $+i$ , а  $-i$ , так как при вычислении сопряжённого вектора у  $i$  нужно будет поменять знак. Но это техническая вещь, причём, если мы забудем это сделать, сама процедура это покажет, так как ответ получится странным, например, комплексным, или среднее значение  $x^2$  будет отрицательным.

Среднее значение координаты в момент времени  $t$  для выражения (5.4) равняется нулю:

$$\bar{x} \equiv 0 \quad (5.15)$$

С опытом это можно будет сказать без вычислений, потому что между  $|0\rangle$  и  $|2\rangle$  и у  $\hat{a}$ , ни у  $\hat{a}^+$  все матричные элементы ненулевые. Тогда дисперсия – просто среднее значение от  $x^2$ .

Вернёмся к вопросу **3)**. Если бы мы захотели узнать дисперсию здесь, нужно было бы вычислить среднее от  $x^2$ . В выражении для него в обкладках будет стоять тот же самый  $\psi(t)$ , а между обкладками – квадрат оператора координаты, при раскрытии которого нельзя использовать биномы Ньютона и надо писать все возможные вторые степени:

$$\overline{x^2} = \left\langle \psi(t) \left| \frac{\hbar}{2m\omega} (\hat{x}^2) \right| \psi(t) \right\rangle = \left\langle \psi(t) \left| \frac{\hbar}{2m\omega} (\hat{a}^2 + \hat{a}^{+2} + \hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a}) \right| \psi(t) \right\rangle \quad (5.16)$$

Не расписывая  $\psi(t)$ , скажем, что матричный элемент от  $\hat{a}^2$  может быть ненулевым, только если справа номер на 2 больше, чем слева. Здесь таких слагаемых нет,

так как нет номеров, отличающихся на 2. Поэтому  $\hat{a}^2$  даст ноль, как и  $\hat{a}^{+2}$ . А комбинация  $\hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a}$  даст ненулевой вклад только от векторов с одинаковыми  $n$ , то есть тут останутся только диагональные элементы. При диагональных элементах произведения энергетических экспонент, например, сопряжённого нуля на обычный, дадут единицы. Поэтому уже на этой стадии понятно, что результат (5.16) не будет зависеть от времени.

Дальше можно честно посчитать среднее от  $\hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a}$  для 0 и 1. Тем более можно быстро убедиться вычислением, что для любого  $n$

$$\langle n | \hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a} | n \rangle = 2n + 1 \quad (5.17)$$

Но есть ещё один способ подсчёта, специфический для осциллятора.  $\overline{x^2}$  не зависит от времени, но  $\hat{x}^2$  – это почти потенциальная энергия. Раз она не зависит от времени, можно переписать (5.16) как среднее по  $\psi^{(0)}$  от потенциальной энергии  $u(\hat{x})$ , умноженное на коэффициент:

$$\frac{2}{m\omega^2} \langle \psi^{(0)} | u(\hat{x}) | \psi^{(0)} \rangle \quad (5.18)$$

Здесь работает теорема Вириала, потому что все рассуждения, заложенные в гамильтоновой формулировке классической механики при доказательстве этой теоремы, сработают и здесь, в гайзенберговой картине. Так что  $u(\hat{x})$  – это половина полной энергии. То есть, если  $\overline{x^2}$  не зависит от времени, оно равно произведению  $\frac{1}{m\omega^2}$  на среднюю энергию состояния. Энергия – интеграл движения, и среднее тоже не меняется. Поэтому из (5.18) получается

$$\frac{1}{m\omega^2} \left( \frac{1}{2} \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{1}{2} \frac{3\hbar\omega}{2} \right) = \frac{\hbar}{m\omega} \quad (5.19)$$

Тогда дисперсия как функция времени, если подставить квадрат (5.14),

$$Dx(t) = \overline{x^2} - (\bar{x})^2 = \frac{\hbar}{m\omega} - \frac{\hbar}{2m\omega} \cos^2(\omega t) = \frac{\hbar}{2m\omega} (1 + \sin^2(\omega t)) \quad (5.20)$$

При переписывании в последнем виде понятно, что дисперсия всегда положительная и что она осциллирует, неопределённость координаты периодически растёт и убывает с частотой, удвоенной по отношению к частоте колебаний среднего. То есть у данного пакета по гармоническому закону колеблется центр и осциллирует ширина. Поэтому это не похоже на классический осциллятор, который мы смотрели для когерентного состояния.

Найдём в данном состоянии среднее значение импульса. В картине Гайзенберга оно равно произведению массы на среднее значение производной координаты. Тогда, подставляя (5.14), получим

$$\bar{p}_x(t) = m \frac{d\bar{x}}{dt} = -\sqrt{\frac{\hbar m \omega}{2}} \sin(\omega t) \quad (5.21)$$

Дисперсия импульса в этом состоянии будет меняться по тому же гармоническому закону в противофазе с координатой, поэтому в (5.20) меняем синус на косинус и в коэффициенте по размерности пишем  $\frac{\hbar m \omega}{2}$ .

А энергия – интеграл движения, поэтому её среднее, дисперсия и т. д. не меняется. Среднее значение энергии, исходя из выражения в скобках в (5.19), будет  $\hbar \omega$ , точно посередине между  $\frac{\hbar \omega}{2}$  и  $\frac{3\hbar \omega}{2}$ . А поскольку равновероятно отклонение на  $\frac{\hbar \omega}{2}$ , это и есть с вероятностью единица корень из дисперсии. Поэтому дисперсия будет  $\frac{\hbar^2 \omega^2}{4}$ .

Все эти величины при правильном подходе считаются довольно легко. Для состояния  $\psi(t)$  при начальном состоянии (5.4)  $\bar{x} = 0$ , поэтому дисперсию как функцию времени надо считать аналогично (5.16). Правда, при подсчёте с  $\hat{a}^2$  появится ненулевой вклад, потому что матричный элемент от  $\hat{a}^2$  не равен нулю, когда мы вычисляем его между 0 и 2. При сопряжённом нуле будет по-прежнему стоять  $e^{+i\frac{\omega}{2}t}$ , при несопряжённой двойке  $e^{-i\frac{5\omega}{2}t}$ . Для  $\hat{a}^2$ , когда  $\hat{a}$  действует на  $|2\rangle$ , она вытаскивает  $\sqrt{2}$  и переводит в  $|1\rangle$ , когда  $\hat{a}$  действует на  $|1\rangle$ , вытаскивает  $\sqrt{1}$  и выдаёт  $|0\rangle$ , а  $\langle 0|0\rangle = 1$ . Поэтому общий нормировочный множитель будет  $\sqrt{2}$ , и он будет умножаться на  $e^{+i\frac{\omega}{2}t} e^{-i\frac{5\omega}{2}t}$ . От  $\hat{a}^{+2}$  получится сопряжённое выражение. А вклады  $\hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a}$  получаются между двумя нулями и двумя единицами, причём все экспоненты сокращаются, так что никакой зависимости от времени не будет. Но удобнее воспользоваться (5.17) и сказать, что для  $n = 0 \quad 2n + 1 = 1$ , а для  $n = 2 \quad 2n + 1 = 5$ . И поскольку в  $\psi(t)$  везде два раза стоял множитель  $\frac{1}{\sqrt{2}}$ , должен выйти ещё множитель  $\frac{1}{2}$  как квадрат нормировочного множителя. Наличие  $i$  в (5.4) в амплитуде не скажется, только в фазе, в первом слагаемом будет множитель  $i$ , а во втором  $-i$ , поскольку двойка была сопряжённой. Поэтому получится

$$Dx(t) = \overline{x^2(t)} = \frac{\hbar}{2m\omega} [i\sqrt{2}e^{-2i\omega t} - i\sqrt{2}e^{+2i\omega t} + 1 + 5] \frac{1}{2} \quad (5.22)$$

После вынесения множителя 2 в первых двух слагаемых останется с коэффициентом  $\frac{1}{2i}$  разность экспонент.  $\frac{e^{i\alpha} - e^{-i\alpha}}{2i} = \sin \alpha$ , поэтому из (5.22) получится

$$\frac{\hbar}{2m\omega} [3 + \sqrt{2} \sin(\omega t)] \quad (5.23)$$

Обратим внимание, что в рациональном подходе мы просто думаем, какие слагаемые надо оставлять, потому что всегда знаем, между какими слагаемыми будут вклады, отличные от нуля, то есть матричные элементы от  $\hat{a}$  или  $\hat{a}^+$  в любой определённой степени. Некоторая сложность возникает, когда появляется операторная конструкция, содержащая произвольные степени  $\hat{a}$  и  $\hat{a}^+$ . Тогда нужно либо работать в виде ряда, либо подумать, как с этим справиться на алгебраическом уровне, то есть использовать уже свойства конкретной конструкции. Но от конечной определённой степени все матричные элементы от  $(\hat{a})^n$  и  $(\hat{a}^+)^n$  между состояниями гармонического

осциллятора всегда считаются довольно просто, и легко сообразить, как выбрать ненулевые слагаемые. В выражении (5.22), если расписывать полностью, 4 слагаемых между обкладками и по 2 в обкладках, всего 16, но ненулевых из них только 4.

Чтобы понять, как работать в более сложных случаях, разберём обязательную задачу на использование осциллятора для приближённого описания реалистичной системы.

### Задача 1. Испускание кристаллом гамма-кванта

Есть идеальная кубическая решётка кристалла: её шаг по всем направлениям одинаковый, атомы в узлах обладают одинаковыми свойствами. Так что можно считать, что частоты колебаний ядра вблизи положения равновесия в гармоническом приближении одинаковы по всем трём осям.

То есть вводим оси  $x$ ,  $y$  и  $z$  (рис. 5.1) и говорим, что при описании движения ядра в хорошо замороженном кристалле его можно рассматривать в лидирующем приближении как гармонический осциллятор. Гамильтониан запишется как

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2}{2m} + \frac{m\omega^2(\hat{x}^2 + \hat{y}^2 + \hat{z}^2)}{2}, \quad (5.24)$$

$\omega$  – одна и та же частота для потенциалов по каждой оси из-за изотропности кристалла в гармоническом приближении.

Здесь, скорее всего, есть ангармонические поправки, содержащие  $x$ ,  $y$  и  $z$  в более высоких степенях, но мы считаем, что для хорошо замороженного кристалла их влияние мало.

Реальные кристаллы бывают очень разные, и частота связи  $\omega$  в них может отличаться на несколько порядков. Но для типичных средних кристаллов, чтобы заставить что-то в них колебаться, нужны фотоны, близкие к оптическому спектру, то есть  $\hbar\omega$  должна быть порядка 1 эВ. Хотя есть и кристаллы, где, чтобы что-то серьёзно начало раскачиваться, нужны рентгеновские кванты. У осциллятора эквидистантный спектр, и шаг равняется как раз  $\hbar\omega$ , поэтому минимальная энергия возбуждения в таком случае будет измеряться уже в кэВ. Реально сделать кристаллы, где она будет достигать десятков кэВ. Но для нормальных будем считать, что  $\hbar\omega$  в интервале от 1 до  $10^3$  эВ, хотя при рассмотрении не очень нормальных этот диапазон стоит расширить в обе стороны на порядок.

Мы так заморозили кристалл, что загнали все ядра в основное состояние. Гамильтониан (5.24) – это сумма трёх линейных гамильтонианов, описывающих колебания по осям  $x$ ,  $y$ ,  $z$ . Основное состояние осциллятора ground – это состояние с  $n = 0$  по всем трём осям. Движение по каждой отвечает движению линейного осциллятора в этом состоянии:

$$|Gr\rangle = |0\rangle_x |0\rangle_y |0\rangle_z \quad (5.25)$$

Ядро, находящееся в основном состоянии и совершающее нулевые колебания вблизи положения равновесия, за счёт внутреннего перехода, в котором высвобождается энергия  $\Delta E$ , испускает гамма-квант, улетающий в некотором направлении (рис. 5.1).

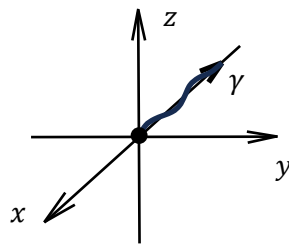


Рис. 5.1. Ядро, колеблющееся вблизи положения равновесия, испускает гамма-квант

Надо найти вероятность  $\omega_{Gr}$  того, что после такого испускания ядро останется в основном состоянии.

Это выглядит странно с точки зрения классической механики, ведь из-за закона сохранения импульса, испуская гамма-квант, ядро должно получить отдачу. Его состояние после испускания должно измениться за счёт получения импульса отдачи. Гамма-квант уносит импульс

$$\vec{p}_\gamma = \hbar \vec{k}, \tag{5.26}$$

где  $\vec{k}$  – волновой вектор улетающего гамма-кванта.

Соответственно, ядро должно приобрести импульс  $-\hbar \vec{k}$ . Поскольку колебания по всем трём осям происходят по одним и тем же законам, сразу редуцируем задачу до одномерной.

Для начала рассмотрим колебания вдоль оси  $x$ . При этом ядро, которое находилось в состоянии  $|0\rangle_x$ , в результате испускания гамма-кванта должно перейти в новое состояние, которое обозначим  $|\psi\rangle_x$ . Мы получали оператор трансляции по координате или импульсу. Если подействовать оператором трансляции по импульсу  $\hat{T}_{p_x}$ , который сдвигает импульс на  $-\hbar k_x$ , на исходное состояние  $|0\rangle_x$ , мы как раз должны получить состояние  $|\psi\rangle_x$ , в которое переходит ядро после испускания гамма-кванта:

$$|\psi\rangle_x = \hat{T}_{p_x}(-\hbar k_x)|0\rangle_x \tag{5.27}$$

Ядро, если не лезть в его внутреннюю структуру, где произошла какая-то перестановка нуклонов между их внутренними состояниями, просто получило импульс отдачи, с ним больше ничего не произошло. Поэтому при описании движения ядра мы можем считать, что знаем, в какое состояние оно перешло.

Оператор трансляции по импульсу

$$\hat{T}_{p_x} = e^{-\frac{i}{\hbar} q \hat{x}}, \tag{5.28}$$

где  $q$  – сдвиг по импульсу, поэтому из (5.27) получается

$$e^{ik_x \hat{x}} |0\rangle_x \tag{5.29}$$

Вероятность того, что ядро, находящееся в состоянии  $|\psi\rangle_x$  после испускания гамма-кванта, при взаимодействии с измерительным прибором или чем-то другим, способным повлиять на дальнейшую эволюцию системы, поведёт себя как ядро в состоянии  $|0\rangle_x$ , по нашей аксиоматике квадрат модуля соответствующего скалярного произведения. Вероятность того, что с точки зрения колебаний по оси  $x$  осциллятор останется в основном состоянии,

$$\omega_0^{(x)} = |\langle 0_x | \psi_x \rangle|^2 = |\langle 0_x | e^{ik_x \hat{x}} | 0_x \rangle|^2 \tag{5.30}$$

То есть для её нахождения достаточно в рамках данной гармонической модели посчитать матричный элемент от оператора  $e^{ik_x \hat{x}}$  между состояниями с  $n = 0$ . Мы видели, что все осцилляторные матричные элементы лучше считать с помощью представления повышающих и понижающих операторов  $\hat{a}$  и  $\hat{a}^+$ . Через них

$$e^{ik_x \hat{x}} = e^{ik_x \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^+)} \tag{5.31}$$

Обозначим числом

$$z = k_x \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \tag{5.32}$$

безразмерную конструкцию из параметров задачи.

Операторы в сумме всегда можно переставлять, это в произведении они могут быть некоммутативны, как те же  $\hat{a}$  и  $\hat{a}^+$ . Поэтому запишем (5.31) как

$$e^{iz\hat{a}^+ + iz\hat{a}} \tag{5.33}$$

Пусть в (5.33)  $iz\hat{a}^+ = \hat{A}$ , а  $iz\hat{a} = \hat{B}$ , тогда (5.33) – экспонента в степени суммы двух операторов  $e^{\hat{A} + \hat{B}}$ . А  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  – пара операторов, коммутирующих со своим коммутатором, потому что, если вынести  $iz$ , коммутатор будет  $-z^2[\hat{a}^+, \hat{a}]$ . Коммутатор  $[\hat{a}^+, \hat{a}] = -[\hat{a}, \hat{a}^+] = -1$ . Поэтому

$$[\hat{A}, \hat{B}] = z^2 \cdot (-1) = -z^2 \tag{5.34}$$

Это оператор, кратный единичному, с ним коммутирует что угодно, в том числе  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$ . А для пары операторов, коммутирующих со своим коммутатором, мы выводили формулу для разложения экспонент

$$e^{\hat{A} + \hat{B}} = e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} e^{-\frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}]} \tag{5.35}$$

Тогда оператор (5.33), если подставить (5.34) в (5.35), приводится к произведению числовой экспоненты и двух операторных

$$e^{iz\hat{a}^+} e^{iz\hat{a}} e^{-\frac{z^2}{2}} \tag{5.36}$$

Подставим (5.33) в (5.30), числовой коэффициент вынесем, будет

$$e^{-\frac{z^2}{2}} \langle 0 | e^{iz\hat{a}^+} e^{iz\hat{a}} | 0 \rangle \quad (5.37)$$

Экспоненту  $e^{iz\hat{a}}$  нужно записать как разложение в ряд

$$e^{iz\hat{a}} = 1 + iz\hat{a} + \dots \quad (5.38)$$

Любая степень  $\hat{a}$ , даже первая, действуя на  $|0\rangle$ , даёт 0. Только единичный оператор, действуя на  $|0\rangle$ , даёт вектор с номером 0, а остальное просто нули. Поэтому  $e^{iz\hat{a}}$ , действуя на  $|0\rangle$ , выдаёт ноль. В экспоненте  $e^{iz\hat{a}^+}$  перекинем действие  $\hat{a}^+$  налево, и он, действуя на  $\langle 0|$  как свой эрмитово сопряжённый, сделает то же самое. Тогда, подставляя в (5.36) (5.32), получим, что вероятность того, что осциллятор, описывающий колебания по оси  $x$ , не останется в основном состоянии,

$$e^{-\frac{z^2}{2}} \langle 0 | 0 \rangle = e^{-\frac{z^2}{2}} = e^{-\frac{\hbar k_x^2}{4m\omega}} \quad (5.39)$$

Тогда вероятность того, что ядро целиком останется в основном состоянии, есть произведение трёх вероятностей, что не возбуждись колебания по каждой из осей, трёх величин (5.39):

$$\omega_{Gr} = e^{-\frac{\hbar}{2m\omega}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)} \quad (5.40)$$

В знаменателе показателя экспоненты стоит 2, а не 4, так как для вероятности – квадрат модуля матричного элемента, и экспоненту возвели в квадрат.

Сумма  $k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$  даёт полный квадрат волнового числа  $\vec{k}^2$ . Энергия улетающего фотона равна  $c \cdot \vec{p}$ , то есть  $c\hbar\vec{k}$ , поэтому

$$\vec{k}^2 = \frac{\varepsilon^2}{\hbar^2 c^2} \quad (5.41)$$

Тогда (5.40) – это

$$e^{-\frac{\varepsilon^2}{2mc^2\hbar\omega}}, \quad (5.42)$$

где  $\varepsilon$  – энергия улетающего гамма-кванта,  $mc^2$  – характерная энергия покоя ядра.

Характерные энергии гамма-квантов, которые летят из гамма-активных ядер, в большинстве случаев от 1 до 5 МэВ, можно считать порядка 1 МэВ. Характерная энергия ядра  $mc^2$  даже для одного нуклона почти 1 ГэВ (938 МэВ у протона и 940 МэВ у нейтрона). А нормальное ядро содержит сотню нуклонов, поэтому  $mc^2$  порядка  $10^5$  МэВ.  $\hbar\omega$  маленькое, но, как мы допустили, может быть порядка  $10^3$  эВ, то есть  $10^{-3}$  МэВ. Так что в показателе степени в (5.42) стоит  $10^{-2}$ ,  $e^{-0,01} \approx 1$ .

То есть в достаточно жёстком кристалле, с большими  $\hbar\omega$  для связи ядра с положением равновесия, вероятность испускания без отдачи почти единица. А ведь чуть больше ста лет назад почти все были уверены, что такое невозможно.

Теперь мы понимаем, что дело в том, что у осциллятора из основного состояния можно шагнуть вверх только на  $\hbar\omega$  (рис. 5.2). Энергия отдачи порядка  $\frac{\varepsilon^2}{mc^2}$ , в (5.42)

фактически стоит величина порядка отношения классической энергии отдачи  $\frac{\varepsilon^2}{mc^2}$  к  $\hbar\omega$ . Если  $\frac{\varepsilon^2}{mc^2}$ , как здесь, в сто раз меньше  $\hbar\omega$ , скакнуть туда нельзя, до  $\hbar\omega$  нет этого уровня. Это просто следствие дискретности уровней разрешённых значений энергий ядра.

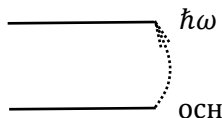


Рис. 5.2. Скачок вверх по энергии из основного состояния осциллятора

Причина понятная и простая, но сто с лишним лет назад это почти никто не мог заметить, поэтому что не было опыта работы с подобными системами. И даже совершённое значительно позже открытие у многих вызвало изумление. Потом выяснилось, что можно использовать мёссбауэрскую спектроскопию для измерения очень малых частотных сдвигов, ведь типичная ширина гамма-перехода для метастабильного состояния 1 эВ. И стоит внести на пути гамма-кванта от излучившего до поглотившего ядра погрешность больше этой величины, какой-то сдвиг его энергии, резонансное поглощение исчезнет, потому что мы развели линии излучения и поглощения. Например, если нагреть кристалл так, чтобы доплеровское уширение стало больше 1 эВ.

Мёссбауэровская спектроскопия до сих пор активно используется в науке, хотя прошло уже много лет с момента её открытия. Мёссбауэру вручили Нобелевскую премию скорее не за само открытие, которое было намного раньше, а за разработку нового метода экспериментального исследования, когда стало понятно его значение.

## Задача 2. Спектр частицы в дираковской гребёнке

Это одномерная задача, где в решении существенную роль играют соображения симметрии. Её называют «задачей о дираковской гребёнке», потому что потенциал в ней построен из дельта-функций Дирака.

Точечная частица массы  $m$  находится в потенциале, состоящем из бесконечного числа дельта-выбросов

$$u(x) = +V_0 \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(x - na) \tag{5.43}$$

Если изображать его вид, дельта-выбросы будут в точках  $x = 0, +a, +2a, -a$  и т. д. бесконечно в обе стороны (рис. 5.3)

Нужно найти спектр разрешённых значений энергии  $E$ .

Если мы подойдём к этой задаче с точки зрения стандартной классификации, гамильтониан здесь неотрицательно определённый, потому что потенциальная энергия неотрицательна – либо 0, либо  $+\infty$ , и кинетическая тоже. Так что уровни энергии всего спектра лежат в области  $E \geq 0$ . И вроде бы при любой положительной энергии у частицы



есть возможность улететь на бесконечность. Правда, для этого ей надо преодолеть бесконечное число препятствий. Спектр вроде бы должен быть непрерывным, так как движение инфинитно, то есть частица не заключена где-то. Но для получения точной картины надо разбираться.

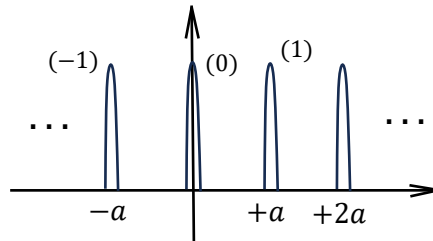


Рис. 5.3. Потенциал дираковская гребёнка

Разобьём всю область интегрирования от  $-\infty$  до  $+\infty$  на подынтервалы  $n$ , который по определению будет означать, что  $x \in (na, (n + 1)a)$ . Тогда интервал от 0 до  $a$  с номером  $n = 0$ , от  $a$  до  $2a$  с номером 1, от  $-a$  до  $-2a$  с номером  $-1$  и так далее в обе стороны. На каждом из них потенциал регулярен и равен нулю. И стационарное уравнение Шредингера для волновой функции говорит, что

$$\psi_n'' + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi_n = 0 \tag{5.44}$$

Причём  $E$ , как мы договорились,  $\geq 0$ , так что можно обозначить

$$k^2 \equiv \frac{2mE}{\hbar^2}, \tag{5.45}$$

считая  $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$  положительным вещественным числом для каждого значения энергии  $E$ .

Тогда сразу можно записать общее решение на  $n$ -м интервале:

$$\psi_n(x) = A_n e^{ikx} + B_n e^{-ikx} \tag{5.46}$$

Таким образом, мы знаем общее решение на каждой из бесконечной череды интервалов.

Теперь надо разобраться с появившимся бесконечным числом констант интегрирования. В данной задаче не существует граничных условия на плюс и минус бесконечностях, но есть условие сшивки, которое нужно написать в каждой точке  $x = (n + 1)a$ , где  $n$ -й интервал сшивается с  $(n + 1)$ -м. Поскольку дельта-функция – это интегрируемая сингулярность, в данной точке должен быть конечный скачок первой производной, а сама функция при этом должна быть непрерывной. То есть нужно написать условие непрерывности самой функции

$$A_n e^{ika(n+1)} + B_n e^{-ik(n+1)a} = A_{n+1} e^{ika(n+1)} + B_{n+1} e^{-ik(n+1)a} \tag{5.47}$$

и, дифференцируя правую часть (5.47), условие для скачка производной

$$ik(A_{n+1} e^{ika(n+1)} - B_{n+1} e^{-ika(n+1)}) - ik(A_n e^{ika(n+1)} - B_n e^{-ika(n+1)}) = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \psi \tag{5.48}$$

где справа в скобках стоит либо правая, либо левая часть (5.47).

Получилась система двух уравнений (5.47) и (5.48) для двух неизвестных  $A_{n+1}$  и  $B_{n+1}$ , в которых они выражаются через  $A_n$  и  $B_n$ . И таких уравнений бесконечно много, мы получаем бесконечномерную систему из них. Непонятно, как из такой системы получить ответ. Можно достать, например, учебник по теории матриц Гантмахера и посмотреть, можно ли что-то сделать с системой, у которой матрица зацепляющихся друг на друге уравнений. Там предложено преобразование этой системы к более удобному виду.

Но можно заметить, что у данной задачи есть симметрия динамики – сдвиг на  $a$  или число, кратное  $a$ , по координате, произвольная трансляция ей не является. При таком сдвиге гамильтониан не поменяется,  $\frac{\partial}{\partial \hat{x}}$  в операторе импульса в координатном представлении при замене  $\hat{x}$  на  $\hat{x} + \hat{a}$  не изменится, он инвариантен. И сам потенциал тоже не изменится, гребёнка перейдёт сама в себя.

Унитарным оператором данной симметрии динамики является оператор трансляции по  $x$  на  $a$   $\hat{T}_x(a)$ . Когда мы с помощью него преобразуем волновые функции, для них должна получиться та же самая задача. Это значит, что мы можем при построении собственных функций гамильтониана  $\psi_E(x)$  подчинить их требованию, что они являются собственными функциями данного оператора, то есть уравнению

$$\hat{T}_x(a)\psi_E(x) = \psi_E(x + a) = \lambda_T \cdot \psi(x), \quad (5.49)$$

$\lambda_T$  – собственное значение оператора  $\hat{T}_x(a)$ .

Это не эрмитов оператор, поэтому его собственные значения комплексны, но ввиду его унитарности модуль собственного значения равен единице. Все такие числа можно перечислить, записав  $e^{i\varphi}$ , где  $\varphi$  пробегает полный период изменения угла от 0 до  $2\pi$ . Но при этом точка  $2\pi$  отождествляется с нулём, поэтому мы обычно пишем интервал  $[0, 2\pi)$  или  $[-\pi, \pi)$ .

Поэтому введём новое квантовое число  $q$ , нумерующее возможные собственные значения. Пусть

$$\lambda_T = e^{iqa}, \quad (5.50)$$

то есть  $q$  имеет размерность обратной длины, раз  $a$ , период потенциала по координате, имеет размерность длины. Будем предполагать, что  $q \in \left[-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right)$ . Тем самым, перебирая все возможные значения  $q$ , переберём все возможные собственные значения  $\lambda$  оператора  $\hat{T}_x(a)$ .

Следовательно, вместо того, чтобы сразу решать уравнение

$$\hat{H}\psi_E(x) = E\psi_E(x), \quad (5.51)$$

можно решать систему уравнений (5.51) и

$$\psi_E(x + a) = e^{iqa} \cdot \psi(x), \quad (5.52)$$

Запишем уравнение (5.52) в терминах решений на  $n$ -м интервале. Если точка  $x_n$  принадлежит  $n$ -му интервалу, это значит, что  $x + a$  принадлежит  $(n + 1)$ -му. Тогда для любого  $x$ , принадлежащего  $n$ -му интервалу, решение на  $(n + 1)$ -м равняется

$$A_{n+1}e^{ik(x+a)} + B_{n+1}e^{-ik(x+a)} = e^{iqa}(A_n e^{ikx} + B_n e^{-ikx}) \quad (5.53)$$

На  $n$ -м интервале функции  $e^{ikx}$  и  $e^{-ikx}$  линейно независимы, поэтому приравняв их друг к другу при любом  $x$  можно только приравняв коэффициенты при них. Получается

$$A_{n+1} = A_n e^{i(q-k)a} \quad (5.54)$$

$$B_{n+1} = B_n e^{i(q+k)a} \quad (5.55)$$

Уравнения связи коэффициентов (5.54) и (5.55) гораздо проще тех, что получались раньше в виде громоздкой системы. Это простые рекуррентные соотношения, из которых можно сразу найти общий вид коэффициентов  $A_n$  и  $B_n$  через любые два выбранных, например,  $A_0$  и  $B_0$ . Решение данных уравнений даёт, что для решения с заданным значением энергии  $E$ , через которое вычислится волновое число  $k$ , и с заданным значением величины  $q$ ,

$$A_n = A_0 e^{in(q-k)a} \quad (5.56)$$

$$B_n = B_0 e^{in(q+k)a} \quad (5.57)$$

Величина  $\hbar k$  – реальный импульс,  $\hbar q$  – тоже величина размерности импульса, вслед за Блохом её называют квазиимпульсом. То есть мы ввели теорему Блоха в квантовой теории периодических потенциалов. Одна из её версий говорит о том, что можно записать собственную функцию гамильтониана в задаче с периодическим потенциалом в виде произведений функций  $e^{iqx}$  на периодическую функцию с периодом  $a$ ,  $\hbar q$  в этом случае как раз будет квазиимпульсом.

Под таким названием эта величина часто фигурирует в теории периодических потенциалов. Данная теория очень важна, чтобы описывать состояния, например, частицы, двигающейся в кристалле. Того же электрона проводимости в металлическом кристалле. С точки зрения этого электрона, который не привязан к конкретному иону решётки, а способен путешествовать по всему объёму кристалла, кристалл, то есть совокупность всех ионов решётки, связанных друг с другом, представляет собой периодический потенциал, в котором бегают свободные электроны. То есть электрон проводимости, по сути, движется в электрическом потенциале, созданном кристаллом.

Как только возникла молекулярно-кинетическая теория строения вещества и физики задумались, что происходит, когда ток течёт по проводнику, они сразу предположили, что есть какие-то частицы. Поначалу говорили об электрических жидкостях, но их всё равно рассматривали как состоящие из частиц, и некоторое время физики дискутировали, одна тип такой жидкости или для каждого знака заряда свой. Но в целом они предполагали, что есть носители заряда, которые движутся через вещество. Как только высказали идею, что вещество устроено как совокупность ионов решётки, по

которым бегают носители заряда, возникла простая модель, что носители заряда бегут через эту решётку и в каждом столкновении с её ионом теряют часть своего импульса. Поэтому возникает эффективная тормозящая сила, и получается простая модель движения носителя заряда в среде с линейной по скорости силой сопротивления. Логика в том, что, поскольку препятствия расставлены через определённые промежутки, чем быстрее движется частица, тем чаще она с ними сталкивается. Каждое отдельное столкновение разное по потере импульса, но за любую макроскопическую единицу времени происходит большое количество столкновений, и в среднем в них одна и та же потеря импульса.

Это элементарная теория проводимости, которая была в курсе общей физики. Но её проблемой в 19-м веке было то, что физики уже могли посчитать эту среднюю потерю импульса, опираясь на представления о заряде иона и его характерном радиусе. Соответственно, для любого реального металла, например, серебра или меди, можно было просчитать удельное сопротивление в такой модели. И физики не понимали, откуда у металлов проводимость, ведь ионы там так плотно упакованы и потери импульса такие большие, что реальные сопротивления, которые меряют, в среднем на три порядка меньше, чем расчётные в рамках классической модели, в элементарной теории проводимости. Как объяснить значения удельных сопротивлений металлов, не знали.

А у нас квантовый периодический потенциал, и теперь мы понимаем, как найти спектр значений энергии. Осталось записать условие сшивки в любой точке, например, в точке  $x = a$ , на границе нулевого и первого интервалов. Поскольку коэффициенты  $A_1$  и  $B_1$  выражаются через  $A_0$  и  $B_0$ , получится однородная система двух уравнений для двух неизвестных, и возникнет условие равенства нулю детерминанта, то есть существования нетривиальных решений. Это будет условие на  $k$ , то есть на энергии. То есть спектр вроде бы должен быть непрерывным, но с условием на энергии.

Условие непрерывности самой волновой функции в точке  $x = a$ , если расписать  $A_1$  и  $B_1$  как (5.56) и (5.57), выглядит как

$$A_0 e^{ika} + B_0 e^{-ika} = A_0 e^{iqa} + B_0 e^{iqa} \quad (5.58)$$

Напишем его в стандартном для однородного уравнения виде

$$[e^{ika} - e^{iqa}]A_0 + [e^{-ika} - e^{iqa}]B_0 = 0 \quad (5.59)$$

Это линейное однородное уравнение, связывающее  $A_0$  и  $B_0$ .

Запишем условие скачка производной. Для производной в точке  $a + 0$  дифференцируем левую часть (5.58), а для производной в точке  $a -$  правую, подставляя (5.56) и (5.57). Получится

$$ik(A_0 e^{iqa} - B_0 e^{iqa}) - ik(A_0 e^{ika} - B_0 e^{-ika}) = \frac{2mV_0}{\hbar^2} e^{iqa} (A_0 + B_0) \quad (5.60)$$

На месте  $e^{iqa} (A_0 + B_0)$  можно было написать левую часть равенства (5.58).

$\frac{2mV_0}{\hbar^2}$  – конструкция из параметров задачи, которая имеет такую размерность, как и волновое число  $k$ . Но это другая величина, константа, не зависящая от энергии частицы. Для краткости записи обозначим

$$\kappa \equiv \frac{mV_0}{\hbar^2} \quad (5.61)$$

Разделив всё выражение (5.60) на  $ik$ , получим

$$A_0 e^{iqa} - B_0 e^{iqa} - A_0 e^{ika} + B_0 e^{-ika} = -2i\kappa e^{iqa}(A_0 + B_0) \quad (5.62)$$

Если мы где-то случайно ошибёмся, то поймём это, так как работаем с комплексными числами, а для  $k$  должны получить вещественное уравнение.

Перенесём слагаемые из правой части (5.62) влево и сгруппируем, будет

$$\left[ e^{iqa} \left( 1 + 2i \frac{\kappa}{k} \right) - e^{ika} \right] A_0 + \left[ e^{iqa} \left( -1 + 2i \frac{\kappa}{k} \right) + e^{-ika} \right] B_0 = 0 \quad (5.63)$$

Получилась система двух линейных однородных уравнений (5.59) и (5.63). Она имеет нетривиальные решения тогда и только тогда, когда её определитель равен нулю. Перемножая выражение в скобках при  $A_0$  в (5.63) на скобку при  $B_0$  в (5.59) и вычитая выражение при  $B_0$  в (5.63) на выражение при  $A_0$  в (5.59), получим:

$$\begin{aligned} e^{-iqa} \left[ e^{-iqa} \left( 1 + 2i \frac{\kappa}{k} \right) - e^{-ika} \right] \left[ e^{ika} - e^{iqa} \right] - \\ - \left[ e^{iqa} \left( -1 + 2i \frac{\kappa}{k} \right) + e^{-ika} \right] \left[ e^{ika} - e^{iqa} \right] = 0 \end{aligned} \quad (5.64)$$

Когда раскроем скобки, возникнет четыре типа экспонент:  $e^{2iqa}$ ,  $e^0 = 1$ ,  $e^{(q+k)a}$  и  $e^{(q-k)a}$ . Поэтому удобно умножить (5.64) на  $e^{-iqa}$ , будет их наиболее эффективное разделение:

$$\begin{aligned} e^{iqa} \left[ -1 - 2ie^{-iqa} - 1 - 2i \frac{\kappa}{k} \right] \left[ -1 - 1 \right] + e^{-iqa} \left[ -1 - 1 \right] + \\ + e^{ika} (+1) + e^{-ika} \left[ 1 + \frac{2i\kappa}{k} + 1 \right] = 0 \end{aligned} \quad (5.65)$$

Разделив это уравнение на 4, его можно переписать в виде вещественного уравнения на  $k$ :

$$\cos(qa) = \cos(ka) + \frac{\kappa}{k} \sin(ka) \quad (5.66)$$

Построим график (5.66) как функции от переменной  $ka$ . При  $ka \rightarrow 0$  будет  $\cos(ka) \rightarrow 1$ , а  $\frac{\kappa}{k} \sin(ka) \rightarrow \kappa a$ . То есть предельное значение  $1 + \kappa a > 0$ .  $\frac{\kappa}{k} = \frac{\kappa a}{ka} \dots$

Выражение (5.66) можно записать с помощью приёма дополнительного угла, если вынести  $\sqrt{1 + \frac{\kappa^2}{k^2}}$ . Множитель  $\frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\kappa^2}{k^2}}}$  при  $\cos(ka)$  можно записать как  $\cos \varphi$ , а  $\frac{\kappa}{k} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\kappa^2}{k^2}}}$  как  $\sin \varphi$ , тогда получим из (5.66)

$$\sqrt{1 + \frac{\kappa^2}{k^2} \cos(ka - \varphi)} \tag{5.67}$$

Правда,  $\varphi$  будет зависеть от  $k$ . Но всё равно мы понимаем, что  $\cos(ka - \varphi)$  – просто косинус, который колеблется, он лишь чуть-чуть сдвинется из-за зависимости фазы  $\varphi$  от  $k$ . То есть это не совсем периодическая функция, но в целом происходят колебания. А  $\sqrt{1 + \frac{\kappa^2}{k^2}}$  – их огибающая. На графике 5.4 это огибающие, стремящиеся к 1 при  $ka \rightarrow 0$ . График стартует из точки  $1 + \kappa a$  в нуле и представляет собой колебания между ними.

$q$  из (5.66) пробегает значения от  $-\frac{\pi}{k}$  до  $+\frac{\pi}{k}$ . В этом интервале  $\cos(qa)$  пробегает все возможные значения от  $-1$  до  $+1$ . Если взять конкретное  $q$  и для него построить  $\cos(qa)$ , мы получим вроде бы дискретный спектр разрешённых значений  $ka$  (в точках пересечения прямой линии с графиком), а значит и разрешённых значений энергии. Ведь энергия

$$E = \frac{\hbar^2 k^3}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} (ka)^2 \tag{5.68}$$

Но так как  $\cos(qa)$  на самом деле пробегает все значения по оси  $y$  в интервале от  $-1$  до  $+1$ , разрешённые значения  $ka$  образуют отрезки в местах, где график входит внутрь полосы от  $-1$  до  $+1$ . То есть спектр имеет зонную структуру, состоит из цепочки энергетических зон. Чем дальше мы идём в область увеличения  $ka$ , поскольку огибающие стремятся к плюс и минус единица, колебания становятся ближе к этой полосе. И где-то на бесконечности эти зоны сливаются в сплошной спектр. То есть получается, что спектр – это счётный набор непрерывных отрезков.

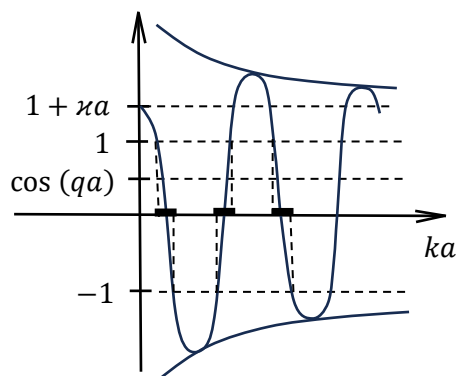


Рис. 5.4. Спектр в результате пересечения двух графиков

Чтобы вернуться к электронам проводимости, надо вспомнить, что каждый ион решётки – это маленькая яма для электрона, потому что он притягивает электроны решётки. Так что в кристалле возникнет в качестве потенциала периодическая гребёнка с зубцами вниз. Если поменять знак  $V_0$  в (5.43), то есть знак  $\kappa$  в (5.61), нижняя зона зайдёт

на графике в область отрицательных значений энергии и будет захватывать в себя значение  $E = 0$ . Эти состояния с  $E < 0$  в данном случае будут стационарными, данную зону обычно называют зоной проводимости. Там бегают электроны, находятся энергетические состояния электронов, которые могут двигаться сквозь решётку, находясь в стационарном состоянии.

Видно, что у квантовой элементарной теории проводимости, если мы захотим такую создать, возникнет другая проблема. Электрон в решётке с энергией, находящейся в пределах зоны проводимости, находится в стационарном состоянии и не обменивается энергией с решёткой, у него нет потерь. Поэтому сопротивление всех периодических кристаллов будет равно нулю. Если в классической теории возникал вопрос, откуда у них проводимость, в квантовой будет вопрос, откуда у них сопротивление.

Но на последний ответить гораздо проще. Можно сказать, что идеальный периодический кристалл имеет нулевое сопротивление, но у любого реального кристалла есть дефекты, и из-за этого у решётки будет сопротивление. Рассмотрев исследования, мы обнаружим, что типичная концентрация дефектов в металлической решётке порядка  $10^{-3}$  от концентрации атомов. Если в классической теории с самого начала сказать, что носитель теряет импульс только при столкновении с дефектами решётки, мы получим разумные оценки. И если мы будем решать задачу про дефектную решётку, и классическая, и квантовая теория дадут разумные результаты в описании характеристик реальных металлов.

## Семинар 6. Сферическая симметрия

### Контрольный опрос

Он будет посвящён в основном теме сферической симметрии, то есть мы будем говорить о задачах с гамильтонианом

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + u(|\hat{r}|) \quad (6.1)$$

В этом случае стационарные волновые функции можно нумеровать помимо квантового числа, нумерующего уровни энергии, ещё и квантовыми значениями  $l$  и  $m$ , задающими собственные значения операторов  $\hat{L}^2$  и  $\hat{L}_z$ . В сферических координатах они записываются в виде произведения радиальной части, которая зависит от вида потенциальной энергии, на стандартную сферическую гармонику, представленную известными функциями:

$$\psi_{Elm}(\vec{r}) = R_{El}(r)Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad (6.2)$$

1) Запишите уравнение, определяющее для задачи (6.1–6.2) собственные значения энергии  $E$  и вид радиальной части  $R_{El}(r)$ .

2) Частица массы  $m$  находится в потенциале  $u(|\hat{r}|)$  в состоянии с координатной волновой функцией  $\psi_{E10}(\vec{r})$ , то есть с  $l = 1$ ,  $m = 0$  в (6.2). Найдите среднее значение  $\langle l_x \rangle$  и дисперсию  $x$ -компоненты орбитального момента  $Dl_x$  частицы в этом состоянии. Радиальное квантовое число  $E$ , нумерующее уровни энергии, любое, предполагается, что в ответе от него ничего не зависит.

Здесь лучше опираться на естественные физические соображения, но можно и на хорошее владение алгеброй, ведь все операторы орбитального момента подчинены коммутационным соотношениям

$$[\hat{l}_i, \hat{l}_j] = i\varepsilon_{ijk}\hat{l}_k \quad (6.3)$$

$$[\hat{l}_i, \hat{l}^2] = 0 \quad (6.4)$$

Это накладывает ограничения на вид их матричных элементов по собственным векторам, ведь базис здесь составлен из собственных векторов операторов  $\hat{l}_z$  и  $\hat{l}^2$ .

3) Гамильтониан точечной частицы массой  $m$ , совершающей трёхмерное движение,

$$\hat{H} = \frac{\hat{\rho}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{\rho}^2}{2} + 2m\omega^2 \hat{z}^2, \quad (6.5)$$

$\hat{\rho}, \hat{\varphi}, \hat{z}$  – цилиндрические координаты. Это разумный выбор координат, учитывая аксиальную симметрию, ведь от  $\hat{\varphi}$  ничего не зависит. Если бы зависело, это был бы необычный потенциал, учитывая цикличность и квадрат этой координаты.



Найдите энергию  $E$  трёх самых нижних уровня энергии этого гамильтониана с указанием кратности вырождения  $s(E)$ , то есть основной и два низших возбуждённых. Значения квантовых чисел не спрашиваются, но они должны быть понятны для каждого уровня, и при подсчёте кратности вырождения надо смотреть, сколько разных комбинаций квантовых чисел дают определённое значение энергии.

4) Есть свободный жёсткий ротатор. Это частица массы  $m$ , которая может свободно вращаться в любом направлении вокруг некоторой закреплённой точки  $O$ , находясь всё время на расстоянии  $a$  от неё (рис. 6.1). То есть здесь жёсткий невесомый стержень длиной  $a$ , на конце которого сидит материальная точка массой  $m$  и который может вращаться вокруг одного из своих концов. Стержень свободный, то есть внешних сил на него не действует и жёсткий, то есть расстояние  $a$  неизменно, радиального движения быть не может. Нас интересует не классическая такая система, а квантовая.

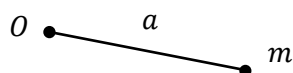


Рис. 6.1. Свободный жёсткий ротатор

Как выглядит спектр энергий свободного жёсткого ротатора? Напишите формулы для уровней энергии  $E$  и для их кратности вырождения  $s(E)$ .

Если задача кажется сложной, стоит подумать, как написать функцию Гамильтона для такого ротатора в классической физике, а потом заменить классические величины на их квантовый аналог, операторы, воспользовавшись принципом соответствия.

### Ответы на контрольный вопрос

1) Наиболее частая форма записи данного уравнения, если для краткости обозначать дифференцирование по переменной  $r$  штрихом,

$$R'' + \frac{2}{r}R' + \frac{2m}{\hbar^2} \left[ E - u(r) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m} \right] R = 0 \quad (6.6)$$

Это обыкновенное дифференциальное уравнение второго порядка. Данная задача является одной из основных для курса ММФ.

2) Из соображений симметрии очевидно, что среднее значение

$$\langle l_x \rangle = 0 \quad (6.7)$$

Если нужно это доказать, можно сказать, что данное состояние, очевидно, инвариантно относительно любых поворотов. И поворотом всегда можно перевести направление вдоль оси  $x$  на направление против оси  $x$ . Поэтому в таком симметричном состоянии средние значения  $\langle l_x \rangle$  и  $\langle -l_x \rangle$  должны совпадать. Единственное число, совпадающее с собой с другим знаком, это ноль.

Тогда дисперсия

$$Dl_x = \langle l_x^2 \rangle \quad (6.8)$$

Но из соображения, что всё инвариантно относительно поворотов, например, вокруг оси  $z$ , ось  $x$  переводится в ось  $y$  поворотом вокруг оси  $z$ . (6.2) – собственная функция операторов  $\hat{l}^2$  и  $\hat{l}_z$ , все посчитанные по ней средние должны быть инвариантным относительно вращения вокруг оси  $z$ . Значит, (6.8) равняется

$$\langle l_y \rangle^2 = \left\langle \frac{\hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2}{2} \right\rangle = \left\langle \frac{\hat{l}^2 - \hat{l}_z^2}{2} \right\rangle \quad (6.9)$$

А для операторов  $\hat{l}^2$  и  $\hat{l}_z^2$  в (6.8) стоит собственный вектор с собственными значениями  $l(l + 1)$ , которое для  $l = 1$  равняется 2, и нулём. Поэтому из (6.9) получается, что  $Dl_x = 1$ .

Мы бы могли доказать это и отталкиваясь от алгебры. Алгебра операторов момента – очень важная вещь, коммутационные соотношения эффективны для вычисления огромного количества комбинаций по состояниям, инвариантным относительно каких-то вращений.

Возьмём произвольное состояние с определёнными значениями квантовых чисел  $l$  и  $m$ , то есть произвольный общий собственный вектор векторов  $\hat{l}^2$  и  $\hat{l}_z$   $\langle lm | [\hat{l}_x] | lm \rangle$ . При подсчёте  $\hat{l}_x$  вспомним коммутационное соотношение (6.9). В частности, оно утверждает, что

$$[\hat{l}_z, \hat{l}_y] = -i\hat{l}_x \quad (6.10)$$

Если умножить (6.10) на  $i$ , получим как раз  $\hat{l}_x$ . Поэтому

$$\langle lm | \hat{l}_x | lm \rangle = i \langle lm | [\hat{l}_z, \hat{l}_y] | lm \rangle \quad (6.11)$$

А написав в (6.11)  $[\hat{l}_z, \hat{l}_y] = \hat{l}_z \hat{l}_y - \hat{l}_y \hat{l}_z$ , увидим, что в первом слагаемом действие эрмитова оператора  $\hat{l}_z$  можно перекинуть налево, и он вытащит своё собственное значение  $m$ . А во втором слагаемом со знаком минус  $\hat{l}_z$  будет действовать направо и тоже вытаскивать собственное значение  $m$ .  $m - m = 0$ , поэтому (6.11) тоже.

Впрочем, это можно было понять, даже не считая (6.11), потому что среднее значение от эрмитова оператора  $\hat{l}_x$  должно быть вещественно, а там оно равняется мнимой величине. А единственное вещественное число, которое одновременно и мнимое, это ноль.

Тогда дисперсия в любом состоянии  $lm$ , продолжая (6.9),

$$Dl_x = \left\langle lm \left| \frac{1}{2} (\hat{l}^2 - \hat{l}_z^2) \right| lm \right\rangle = \frac{1}{2} [l(l + 1) - m^2] \quad (6.12)$$

Мы говорили, что, если пишем коммутаторы оператора с  $\hat{l}_i$ , определяем трансформационные свойства этого оператора при преобразованиях поворота. В частности, если оператор коммутирует со всеми  $\hat{l}_i$ , он инвариантен относительно

преобразований любых поворотов. Такой оператор логично назвать скаляром. То есть скалярный оператор  $\hat{s}$  – такой оператор, что для любого  $\hat{l}_i$

$$[\hat{s}, \hat{l}_i] = 0 \quad (6.13)$$

Пусть у нас есть некий полный набор наблюдаемых для задачи, содержащей  $\hat{l}^2$  и  $\hat{l}_z$ , как, например, задача со сферически симметричным потенциалом. Тут может быть и больше степеней свободы.

То есть существует набор скалярных операторов  $\hat{F}_1, \hat{F}_2, \dots$ , то есть инвариантных относительно вращений, коммутирующих во всеми  $\hat{l}_i$ . Поэтому к нему можно безнаказанно добавить, например,  $\hat{l}^2, \hat{l}_z$ . Если брать в качестве  $\hat{F}_1, \hat{F}_2, \dots$  не скалярные операторы, не коммутирующие с  $\hat{l}_i$ , они, скорее всего, не будут коммутировать с  $\hat{l}^2$  или  $\hat{l}_z$ . Дальше можно сказать, что мы взяли столько скалярных операторов, что теперь получился полный набор наблюдаемых. Если мы взяли  $\hat{l}_z$ , то  $\hat{l}_x$  или  $\hat{l}_y$  уже брать не может и включаем в полный набор вместе с ним, например,  $\hat{l}^2$ , потому что он сам состоит из  $\hat{l}_x, \hat{l}_y, \hat{l}_z$  и со всеми ними коммутирует. Все  $\hat{F}_1, \hat{F}_2, \dots$  коммутируют с  $\hat{l}^2$  и  $\hat{l}_z$ , и если ещё все попарно коммутируют между собой, это действительно так, если их достаточное количество, равное числу степеней свободы системы. В случае точечной частицы, движущейся в сферически симметричном поле, нужен всего один скалярный оператор, например, энергия  $E$ , три оператора  $E, \hat{l}^2, \hat{l}_z$  уже образуют полный набор наблюдаемых.

Этому набору отвечает общий полный ортонормированный базис, однозначно определённый с точностью до выбора начальных фаз, который будем обозначать  $|\Gamma_1 \Gamma_2 \dots lm\rangle$ . Нужно посчитать матричный элемент от любого другого скалярного оператора, исследуемой наблюдаемой  $\hat{s}$ , про которую мы знаем (6.13), между двумя состояниями этого базиса с одинаковыми значениями скалярных наблюдаемых  $\hat{F}_1, \hat{F}_2$  и  $\hat{l}^2$ . А для компоненты, проекции векторного оператора  $\hat{l}_z$  допускаем, что в нём стоят разные собственные значения. Это может быть и диагональный матричный элемент, если  $m' = m$ , но мы хотим взять произвольный.

Матричный элемент надо считать от произвольного скалярного оператора  $\hat{s}$ , но для начала поставим между обкладками  $[\hat{s}, \hat{l}_z]$ . По условию (6.13) это ноль, а значит,

$$\langle \Gamma_1 \Gamma_2 lm' | [\hat{s}, \hat{l}_z] | \Gamma_1 \Gamma_2 lm \rangle = 0 \quad (6.14)$$

Дальше, как уже делали, запишем  $[\hat{s}, \hat{l}_z] = \hat{s} \hat{l}_z - \hat{l}_z \hat{s}$ . В первом слагаемом можно подействовать  $\hat{l}_z$  вправо, и он вытащит своё собственное значение  $m$ . А во втором слагаемом перекинем действие эрмитова оператора налево, и он вытащит  $m'$ . Значит, мы получим из (6.14)

$$(m - m') \langle \Gamma_1 \Gamma_2 lm' | \hat{s} | \Gamma_1 \Gamma_2 lm \rangle = 0 \quad (6.15)$$

Если  $m' = m$ , то есть матричный элемент диагональный, ноль может получиться в первой скобке. А если  $m' \neq m$ , то недиагональный матричный элемент обязательно равен нулю. То есть мы доказали, что любой скалярный оператор в таком базисе имеет диагональную матрицу. Поэтому

$$\langle \Gamma_1 \Gamma_2 \dots l m' | \hat{s} | \Gamma_1 \Gamma_2 \dots l m \rangle = \delta_{m' m} \quad (6.16)$$

для любого скалярного оператора  $\hat{s}$ .

Рассмотрим в (6.14) вместо коммутатора  $[\hat{s}, \hat{l}_z]$  коммутатор  $[\hat{s}, \hat{l}_\pm]$ , где операторы  $\hat{l}_\pm$  определяются как

$$\hat{l}_\pm = \hat{l}_x \pm i \hat{l}_y \quad (6.17)$$

Оператор  $\hat{s}$  коммутирует по отдельности с  $\hat{l}_x$  и  $\hat{l}_y$ , так что с их линейной комбинацией тоже, поэтому

$$[\hat{s}, \hat{l}_\pm] = 0, \quad (6.18)$$

Из коммутационных соотношений можно установить, что оператор  $\hat{l}_+$ , действуя на вектор  $|l m\rangle$ , занимается повышением проекции момента на ось  $z$ . То есть выдаст состояние, снова являющееся общим собственным вектором  $\hat{l}^2$  и  $\hat{l}_z$ , причём значение  $\hat{l}^2$  является тем же самым, а собственное значение  $m$  увеличится на единицу.

При этом вытаскиваемым нормировочным коэффициентом всегда будет квадратный корень из квадратичной функции  $m$ . Под корнем стоит знакомое выражение  $l(l+1)$ , в которое надо добавить  $+m$  и  $-m$  так, чтобы было правильное значение. Если  $m = +l$ , повысить у него проекцию нельзя, значит, коэффициент для такого случая должен зануляться. Тогда получится

$$\hat{l}_+ |l m\rangle = \sqrt{(l-m)(l+1+m)} |l m+1\rangle \quad (6.19)$$

Договоримся, что, когда мы пишем вектор, внутри которого только  $l m$ , это любой вектор из базиса, у которого квантовые числа  $l, m$  и какие-то квантовые числа скалярных операторов  $\Gamma_1, \Gamma_2 \dots$ . То есть

$$|l m\rangle \equiv |\psi_{\Gamma_1 \Gamma_2 \dots l m}\rangle \quad (6.20)$$

в том случае, если  $\Gamma_1, \Gamma_2 \dots$  оказались не важны. Если они важны, мы их допишем в  $|l m\rangle$ .

В (6.19) они не важны, потому что  $\hat{l}_+$  не будет менять квантовые числа скалярных операторов. Более того,  $\hat{l}_+$  не будет менять даже квантовое число  $l$ , нумерующее собственные значения скалярного оператора  $\hat{l}^2$ , так как любой скалярный оператор коммутирует с  $\hat{l}_+$ .

Аналогично (6.19),  $\hat{l}_-$  - понижающий оператор для проекции момента,

$$\hat{l}_- |l m\rangle = \sqrt{(l+m)(l+1-m)} |l m-1\rangle \quad (6.21)$$

Из (6.17), (6.19) и (6.21) можно увидеть, что

$$\hat{l}_+ \hat{l}_- = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 = \hat{l}^2 - \hat{l}_z \quad (6.22)$$

Мы получили множество полезных алгебраических соотношений, которыми всегда можно пользоваться. При вычислении матричных элементов от комбинации  $\hat{l}_x, \hat{l}_y$  можно выразить эти операторы из (6.17) через  $\hat{l}_+$  и  $\hat{l}_-$ , а уже их действие на собственные вектора этого базиса анализировать очень легко. Есть универсальные формулы (6.19) и (6.21), которые быстро выводятся из коммутационных соотношений.

Запишем в (6.14) вместо  $[\hat{s}, \hat{l}_z]$  коммутатор  $[\hat{s}, \hat{l}_+]$ , который меняет проекцию момента на единицу. Матричный элемент от любого скалярного оператора в данном базисе содержит конструкцию (6.16), то есть матрица диагональна. А стоящая на диагонали величина является функцией только  $\Gamma$  и  $l$  и не зависит от  $m$ , то есть это  $f(\Gamma l)$ . Ведь записав соотношение (6.14) с  $[\hat{s}, \hat{l}_\pm]$  и подбирая каждый раз нужное  $m'$ , мы обнаружим, что диагональный матричный элемент (6.16) с двумя  $m$  и двумя  $m + 1$  или  $m - 1$ , совпадают. То есть, если мы сдвигаем на единицу номер  $m$ , азимутальное число, матричный элемент не меняется. Из чего по индукции можно доказать, что все они совпадают.

В алгебре это называется теоремой Вигнера – Экарта для скалярного оператора. Для любого скалярного оператора матрица диагональна и стоящие на диагонали элементы не зависят от  $m$ , только от квантовых чисел скалярных операторов  $\hat{\Gamma}_1 \hat{\Gamma}_2 \dots$  и  $\hat{l}$ , поскольку  $\hat{l}^2$  тоже скалярный оператор.

Такие соотношения можно доказать и для векторного оператора. То есть для него существует утверждение теоремы Вигнера – Экарта, которое гласит, что матричный элемент от любого вектора можно выразить, алгебраически посчитав коэффициенты. Они будут считаться через матричные элементы от скалярных операторов, а коэффициент пропорциональности будет сводить матричный элемент от любого векторного оператора к матричному элементу от стандартного векторного оператора, точнее, от самого  $\hat{l}$ .

Также существуют теоремы Вигнера – Экарта для тензоров первого, второго, третьего рангов. Её можно даже записать в общем виде для тензора произвольного ранга. Это будет одной из дополнительных задач по теме данного семинара. Её надо решать, исходя из коммутационных соотношений, которым должны подчиняться эти операторы. Мы говорили, что векторный оператор – такой оператор, который коммутирует со всеми операторами момента в нашем пространстве как стандартный вектор, то есть как вектор координаты. Так что, если  $\hat{V}$  – вектор, для любой его компоненты  $\hat{V}_j$

$$[\hat{l}_i, \hat{V}_j] = i \varepsilon_{ijk} \hat{V}_k \quad (6.23)$$

Порядок в коммутаторе такой, так как при преобразовании был коммутатор генератора с преобразуемым вектором.

Такую алгебру можно обобщённо называть алгеброй операторов момента. Мы убедимся, что этим соотношениям удовлетворяют операторы орбитального момента, спинового момента, а также полного момента, являющегося суммой орбитального и спинового. В ядерной физике или физике частиц могут дать изотопический спин, говоря, что это тоже вращение в каком-то особенном изотопическом пространстве, и для него это тоже будет верно. Любой набор операторов, удовлетворяющих данным коммутационным соотношениям, можно объявить операторами момента в каком-то пространстве.

3) Из гамильтониана (6.5) понятно, что потенциал в задаче

$$\frac{m\omega^2\hat{\rho}^2}{2} + 2m\omega^2\hat{z}^2 \quad (6.24)$$

При работе с осциллятором проще всего переписать его в декартовых координатах, где

$$\hat{\rho}^2 = \hat{x}^2 + \hat{y}^2 \quad (6.25)$$

Поэтому здесь три линейных осциллятора: два по осям  $x$  и  $y$  с частотой  $\omega$  и один по оси  $z$  с частотой  $2\omega$ , так как в потенциале частота записывается в квадрате, и второе слагаемое (6.24) можно переписать как  $\frac{m(2\omega)^2z^2}{2}$ .

Здесь есть тонкий момент. Если мы введём квантовые числа  $n_x, n_y, n_z$  и скажем, что полная энергия, записанная через них, есть сумма энергий линейных осцилляторов, надо будет просуммировать  $\hbar\omega\left(n_x + \frac{1}{2}\right)$  и  $\hbar\omega\left(n_y + \frac{1}{2}\right)$ , что даст  $\hbar\omega(n_x + n_y + 1)$ , а для  $n_z$  придётся добавить  $2\hbar\omega\left(n_z + \frac{1}{2}\right)$ . В результате получим

$$E_{n_x n_y n_z} = \hbar\omega(n_x + n_y + 2n_z + 2) \quad (6.26)$$

Основное состояние будет, когда  $n_x, n_y$  и  $n_z$  нули, поэтому самая низшая энергия

$$E_0 = 2\hbar\omega, \quad (6.27)$$

и в этом случае кратность вырождения  $s = 1$ .

Для следующего уровня

$$E_1 = 3\hbar\omega \quad (6.28)$$

Здесь в (6.26) может быть только  $n_z = 0$ , иначе результат уже будет заведомо больше нужного. А для  $n_x, n_y$  возможны варианты 1, 0 и 0, 1. Поэтому у этого уровня кратность вырождения  $s = 2$ .

А для третьего уровня

$$E_2 = 4\hbar\omega \quad (6.29)$$

Здесь при  $n_z = 0$  для  $n_x, n_y$  возможны варианты 2, 0; 1, 1 и 0, 2. И ещё есть вариант 0, 0, 1. Поэтому кратность вырождения  $s = 4$ .

То есть как бы действительно из разных степеней свободы получаются одинаковые приращения энергии. На лекции говорилось, что иногда кратность

вырождения случайно увеличивается из-за таких совпадений, и данная задача является примером этого.

4) Здесь нет движения по радиусу, то есть это двумерная задача, где идёт произвольное вращение. В классической механике мы могли бы взять из сферической системы координат переменные  $r, \vartheta, \varphi$ , сказать, что  $r$  не является динамической переменной, потому что она зафиксирована, и характеризовать положение ротатора только переменными  $\vartheta, \varphi$ . А энергию вращательного движения стали бы вычислять как  $\frac{\vec{L}^2}{2I}$ , где  $I$  – момент инерции.

То есть гамильтониан в классическом случае был бы

$$\hat{H} = \left( \frac{\vec{L}}{2I} \right)^2, \quad (6.30)$$

а в квантовом случае в (6.30), если использовать принцип соответствия,  $\vec{L}$  заменится на  $\hat{l}$ , и получится

$$\frac{\hbar^2 \hat{l}^2}{2ma^2}, \quad (6.31)$$

где  $\hat{l}$  – оператор орбитального момента, а  $2ma^2$  – момент инерции для такого ротатора. Это именно физическое прочтение задачи, распознавание системы.

Собственные значения гамильтониана (6.31) – это собственные значения  $\hat{l}^2$ ,  $l(l+1)$ . Поэтому уровни энергии системы нумеруются квантовым числом  $l$  и имеют вид

$$E_l = -\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2ma^2} \quad (6.32)$$

На самом деле квантовые состояния нумеруются двумя квантовыми числами  $l$  и  $m$ .  $l$  пробегает значения от  $-l$  до  $+l$ , так что кратность вырождения  $s = 2l + 1$ .

Мы подробно обсудили разные вещи, потому что примеры по этой теме не очень показательны. Все они делятся на два типа. Первый – нормальные, в которых нужно выписать уравнение и разобраться с функциями, через которые будет записана его фундаментальная система решений. Если надо, разбить область на подобласти, решить в каждой и учесть условия сшивки на границах подобластей. То есть большинство задач в этой теме – просто примеры из ММФ, с которыми надо аккуратно разобраться. Они, как правило, неудобны для демонстрации на семинаре и не показательны.

Второй тип задач – где не надо использовать ММФ, потому что есть какой-то приём, позволяющий легко и быстро их решить. Их удобно разбирать на семинарах, но они тоже не показательны, потому что их очень мало, и в реальной практике гораздо чаще встречаются задачи первого типа. Но, тем не менее, мы будем разбирать именно их. Один класс задач, где всё решается легко и быстро, причём в элементарных функциях, про  $s$ -состояния, то есть состояния при  $l = 0$ , когда в уравнении исчезает центробежный

член. Тогда мы просто решим любую задачу с таким потенциалом, которую умели решать в одномерном случае. С любым кусочно-постоянным потенциалом, где просто ямы и прямоугольные барьеры, мы разберёмся.

### Задача 1. Число $s$ -состояний в прямоугольной сферически-симметричной потенциальной яме

Здесь речь идёт о сферически-симметричном потенциале вида

$$u(r) = \begin{cases} -u_0, & r \leq a \\ 0, & r > a \end{cases} \quad (6.33)$$

Его явный график выглядит как прямоугольник (рис. 6.2). Найдите число  $s$ -состояний в этой яме  $N_s$ .

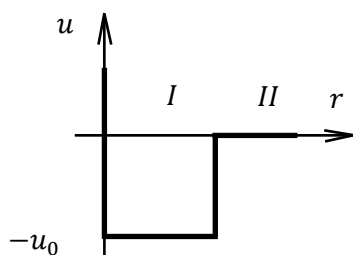


Рис. 6.2. График сферически-симметричного потенциала

Здесь, как и всегда в физике микромира, мы используем стандартные spectroграфические обозначения.  $s$ -состояния — это состояния с  $l = 0$ . Когда анализируем уравнение для  $R_0$

$$R_0'' + \frac{2}{r}R_0' + \frac{2m}{\hbar^2}[E - u(r)]R_0 = 0, \quad (6.34)$$

из-за отсутствия центробежного барьера удобно перейти от неизвестной функции  $R_0$  к неизвестной функции  $\chi(r)$ , записав

$$R_0 = \frac{1}{r}\chi(r) \quad (6.35)$$

Индексы у  $\chi$  писать не будем, в старых обозначениях это функция, отвечающая определённому значению энергии частицы и орбитальному моменту, равному нулю. При  $l = 0$  и  $m = 0$ , так что это состояние, скорее всего, окажется невырожденным.

Тогда уравнение для  $\chi(r)$  выглядит как

$$\chi'' + \frac{2m}{\hbar^2}[E - u(r)]\chi = 0 \quad (6.36)$$

с граничным условием

$$\chi(0) = 0 \quad (6.37)$$

Из общей классификации понятно, что дискретный спектр в данной задаче может быть между  $-u_0$  и  $0$ , потому что именно этот интервал отвечает финитному классическому движению, частица с такой энергией не может улететь на бесконечность.



Для энергии  $E > 0$  получается непрерывный спектр, поскольку движение становится инфинитным. Когда спрашивают число состояний, имеются в виду уровни дискретного спектра, так как уровней непрерывного бесконечного много.

Надо посчитать число собственных значений гамильтониана для состояний с  $l = 0$  с энергиями  $E$  в диапазоне от  $-u_0$  до  $0$ . Из-за наличия скачка потенциала конечной величины нужно разбить область интегрирования на две подобласти (рис. 6.2) в соответствии с (6.33) и решить задачу в каждой, где потенциал будет просто постоянен.

В области  $I$ , где  $0 \leq r \leq a$ ,  $u = -u_0$ , и в (6.36) второе слагаемое константа. Обозначим её

$$\tilde{k}^2 = \frac{2m(E + u_0)}{\hbar^2} \quad (6.38)$$

Эта величина заведомо неотрицательная:  $-u_0 \leq E \leq 0$ , поэтому  $E + u_0 > 0$ .

Тогда уравнение (6.36) в данной области приобретает вид

$$\chi_I'' + \tilde{k}^2 \chi_I = 0 \quad (6.39)$$

Фундаментальная система решений – просто  $\sin(\tilde{k}r)$  и  $\cos(\tilde{k}r)$ , а условие (6.37) исключает  $\cos(\tilde{k}r)$ . Поэтому

$$\chi_I = A \cdot \sin(\tilde{k}r), \quad (6.40)$$

$A$  – нормировочная константа.

В области  $II$  уравнение становится ещё проще, потому что потенциальная энергия равна нулю. В (6.36) второе слагаемое приобретает вид  $\frac{2mE}{\hbar^2}$ , но так как  $E < 0$ , коэффициент неположительный. Обозначим его

$$\frac{2mE}{\hbar^2} \equiv -\kappa^2 \quad (6.41)$$

Тогда уравнение (6.36) в этой области будет

$$\chi_{II}'' - \kappa^2 \chi_{II} = 0 \quad (6.42)$$

Его фундаментальную систему решений образуют вещественные экспоненты. А условие финитности, ограниченности движения, дискретный спектр, приводит к тому, что волновая функция должна стремиться к нулю на бесконечности:

$$\chi(\infty) = 0 \quad (6.43)$$

Это исключает растущую экспоненту, в решении остаётся только убывающая:

$$\chi_{II} = B e^{-\kappa r} \quad (6.44)$$

Сошьём решения в двух подобластях на границе, в точке  $r = a$ . Здесь скачок конечной величины, поэтому функция и её первая производная будут непрерывны. Условие непрерывности функции в точке  $a$  даст уравнение

$$A \sin(\tilde{k}a) = B e^{-\kappa a} \quad (6.45)$$

А равенство производных выдаст

$$\tilde{k}A \cos(\tilde{k}a) = -\kappa B e^{-\kappa r} \quad (6.46)$$

Из системы уравнений (6.45) и (6.46) можно выразить одну константу через другую, например,  $B$  через  $A$ , а потом использовать  $A$  как нормировочную константу для всего решения, чтобы интеграл по объёму от квадрата модуля функции равнялся единице. Технически написать нормированную на единицу собственную функцию можно, но нас просили найти число  $s$ -состояний. А для этого надо проанализировать уравнение, возникающее на энергии.

На самом деле это условие существования нетривиальных решений системы (6.45) и (6.46), то есть равенства нулю детерминанта. Но чтобы обойтись без него, можно разделить одно уравнение системы на другое. Система однородная, оба коэффициента сократятся, и получится уравнение на энергии

$$\operatorname{tg}(\tilde{k}a) = -\frac{\tilde{k}}{\kappa} \quad (6.47)$$

В нём неудобно то, что энергия содержится в двух разных конструкциях:  $\tilde{k}$ , задаваемом (6.38), и  $\kappa$ , которое пишется через (6.41). Дальше можно анализировать по-разному. Мы, чтобы не работать с тангенсом от сложного аргумента, введём переменную

$$z = \tilde{k}a \quad (6.48)$$

Тогда, подставляя (6.48) в (6.38) и выражая энергию, получим

$$E = -u_0 + \frac{\hbar^2}{2ma^2} z^2 \quad (6.49)$$

Из этого уравнения мы сможем определить  $E$  по  $z$ .

С другой стороны, подставив (6.49) в (6.47), получим уравнение на  $z$

$$\operatorname{tg}(z) = -\frac{z}{\kappa a} \quad (6.50)$$

Подставим в него (6.41), в которое, чтобы переделать его в  $\tilde{k}a$ , добавим в числитель  $u_0$  и вычтем. Из (6.50) получится

$$-\frac{z}{\sqrt{\frac{2mu_0a^2}{\hbar^2} - z^2}} \quad (6.51)$$

$\frac{2mu_0a^2}{\hbar^2}$  – параметр, составленный из глубины  $u_0$  и радиуса  $a$  сферически симметричной прямоугольной ямы. Его часто называют борновским параметром для данного потенциала, и мы поймём смысл этого названия, когда будем изучать борновское приближение в теории рассеяния. Но уже сейчас видно, что эта конструкция даёт существенную информацию о прямоугольной потенциальной яме.

Если обозначить

$$\frac{2mu_0a^2}{\hbar^2} = z_0^2, \quad (6.52)$$

из (6.51) получится

$$\operatorname{tg}(z) = -\frac{z}{\sqrt{z_0^2 - z^2}} \tag{6.53}$$

Это трансцендентное уравнение, мы, скорее всего, не решим его аналитически, в общем виде уж точно. А графически его легко проанализировать. Функция  $\operatorname{tg}(z)$  периодическая с периодом  $\pi$ , у неё точки сингулярности кратны  $\frac{\pi}{2}$ , а в точках, кратных  $\pi$ , нули (рис. 6.3). Величина  $-\frac{z}{\sqrt{z_0^2 - z^2}}$  при малых  $z$  равна  $-\frac{z}{z_0}$ , то есть выходит из нуля вниз как прямая линия с отрицательным наклоном с коэффициентом  $-\frac{1}{z_0}$ , а потом стремится к минус бесконечности при  $z \rightarrow z_0$ .

Если  $z_0$  расположен между 0 и  $\frac{\pi}{2}$ , график сразу уйдёт вниз и ни разу не пересечётся с графиком  $\operatorname{tg}(z)$ . В этом случае ни одного из уровней не будет. То есть  $N_s = 0$  при  $z_0 < \frac{\pi}{2}$ . Если  $z_0$  окажется, например, между  $\pi$  и  $\frac{3\pi}{2}$ , возникнет одно пересечение. Если на следующем интервале, между  $2\pi$  и  $\frac{5\pi}{2}$ , уже два пересечения и т. д.

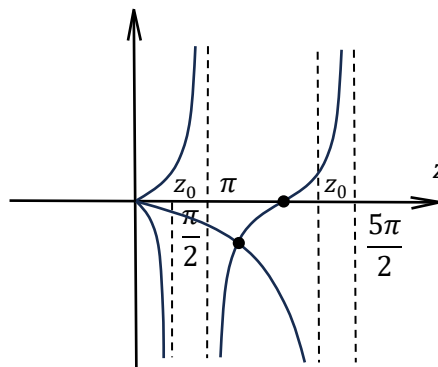


Рис. 6.3. Решения в результате пересечения двух графиков

Поэтому в общем случае можно записать число уровней, подставляя потом (6.52), как

$$N_s = \left[ \frac{z_0 - \frac{\pi}{2}}{\pi} \right] = \left[ \frac{\sqrt{2m\mu_0 a}}{\pi \hbar} - \frac{1}{2} \right] \tag{6.54}$$

квадратные скобки означают взятие целой части.

Посмотрев на построенное решение, заметим, что здесь замена  $\tilde{k}$  на  $-\tilde{k}$  не приведёт к появлению нового линейно независимого решения, которые нужны, чтобы было вырождение. Получится то же самое решение, умноженное на минус единицу.

(6.54) – правильный канонический ответ, и борновский параметр содержит информацию о количестве возможных состояний. Если он слишком маленький, связанных состояний в такой сферически симметричной прямоугольной потенциальной

яме может не быть. А когда он становится большим, число  $s$ -состояний тоже становится большим. Если  $\frac{z_0}{\pi}$  – очень большая величина,  $\frac{1}{2}$  можно практически пренебречь. И тогда число состояний получается примерно  $\frac{z_0}{\pi}$ .

Мы дали точный ответ на вопрос задачи, не оперируя никакими спецфункциями. Так получилось, потому что мы взяли  $s$ -состояние, то есть убрали центробежное слагаемое, а также взяли простой потенциал.

Некоторые задачи такого класса решаются алгебраически. Они обычно каким-то образом сводятся к одной из стандартных задач. Наибольшее число точно решаемых задач – которые функциональными преобразованиями, сложными или простыми, сводятся либо к кулоновской задаче, либо к изотропному осциллятору.

Можно, наоборот, взять кулоновскую задачу, произвести какое-то функциональное преобразование собственных функций и построить оператор, для которого собственные функции будут преобразованными. Он будет выглядеть сложно, но мы будем знать, что существует унитарное преобразование, которое переводит его в кулоновский. Однако найти его, не зная, может быть очень сложной задачей.

Но мы дальше посмотрим другой пример, считающийся одним из канонических на эту тему, потому что легко решается и активно используется при исследовании реалистичных систем. Когда мы описываем более-менее реалистичные квантовые системы, понимаем, что чисто кулоновский точечный потенциал не очень хорош для реального атома, так как электроны между собой взаимодействуют. Это фундаментальная проблема, которой мы будем много заниматься во втором семестре, потому что там надо будет учитывать специфические черты многочастичных задач.

Тем не менее, был популярный подход, когда пытались придумать потенциал, который моделировал бы влияние электронной оболочки на движение самих электронов. К кулоновскому добавляли дополнительные слагаемые так, чтобы соответствующий гамильтониан легко считался, и чтобы был свободный параметр, подбором которого можно приблизить ситуацию к реальности. Следующий потенциал довольно часто использовался в таких модельных построениях из-за того, что мы добавляем к реальному кулоновскому притяжению слабое отталкивание и он точно считаемый.

## Задача 2. Спектр частицы в сферически симметричном кулоновском потенциале

Частица массы  $m$  движется в сферически симметричном потенциальном поле

$$u(r) = -\frac{\alpha}{r} + \frac{\beta}{r^2}, \quad (6.55)$$

где  $\alpha$  и  $\beta$  – положительные константы.

Здесь появилось дополнительное отталкивание. График  $u(r)$  стремится к  $+\infty$  при  $r \rightarrow 0$  и к нулю при  $r \rightarrow \infty$ . Причём при маленьких  $r$  доминирует квадратичное слагаемое

$\frac{\beta}{r^2}$ , а при больших  $r$  кулоновское  $-\frac{\alpha}{r}$  (рис. 6.4). В точке минимума, если продифференцировать (6.55) и приравнять к нулю, координата по оси ординат  $-\frac{\beta^2}{4\alpha}$ . В таком потенциале будет непрерывный спектр при  $E > 0$  и может существовать дискретный в области  $-\frac{\beta^2}{4\alpha} \leq E \leq 0$ .

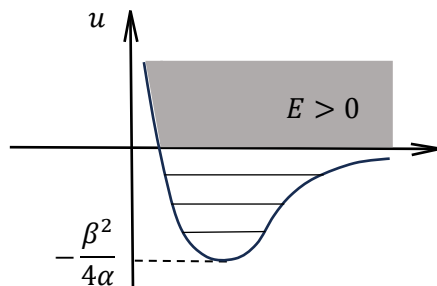


Рис. 6.4. Сферически симметричный потенциал и спектр в его частях

Нас интересует дискретный спектр, поэтому смотрим  $E < 0$ . Нужно записать уравнение для радиальной части волновой функции. Индексы  $E, l$  для краткости писать не будем, но подразумеваем. Заметим, что слагаемое  $\frac{\beta}{r^2}$  как бы искажает центробежный барьер  $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m r^2}$ . В итоге получится

$$R'' + \frac{2}{r}R' + \frac{2m}{\hbar^2} \left[ E + \frac{\alpha}{r} - \frac{\beta + \frac{\hbar^2}{2m} l(l+1)}{r^2} \right] R = 0 \quad (6.56)$$

Определим константу  $\lambda > 0$  как положительный корень уравнения

$$\frac{2m\beta}{\hbar^2} + l(l+1) = \lambda(\lambda+1) \quad (6.57)$$

Это простое квадратное уравнение относительно  $\lambda$ , его положительный корень, если учесть, что  $l^2 + l + \frac{1}{4} = \left(l + \frac{1}{2}\right)^2$ ,

$$\lambda = -\frac{1}{2} + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 + \frac{2m\beta}{\hbar^2}} \quad (6.58)$$

Тогда уравнение (6.56) превратится в

$$R'' + \frac{2}{r}R' + \frac{2m}{\hbar^2} \left[ E + \frac{\alpha}{r} - \frac{\hbar^2 \lambda(\lambda+1)}{2mr^2} \right] R = 0 \quad (6.59)$$

и полностью совпадёт с уравнением для радиальных частей кулоновской задачи, только в том на месте  $\lambda$  было  $l$ . Если положим в (6.58)  $\beta = 0$ ,  $\lambda$  как раз превратится в  $l$ .

Если мы разбирались в решении кулоновских задач и знаем, что нужно записать какую-нибудь вырожденную гипергеометрическую функцию Гаусса от определённых индексов, сразу должно быть понятно, что будет дальше.

Но даже если не разбирались, нам нужно, чтобы решение, которое получится в итоге, подчинилось условию нормировки, для кулоновской задачи оно должно иметь хорошую сходимость на бесконечности. Это определяется подбором таких энергий  $E$ , при которых решение дифференциального уравнения (6.59) имеет правильную асимптотику. Но параметр, квантовое число  $l$  для кулоновской задачи не используется в подборе асимптотики, это просто коэффициент, входящий в уравнение. Он уже задан, поэтому кулоновскому решению без разницы, что стоит на его месте.

Для кулоновской задачи, где  $\beta = 0$ , энергии будут записаны как

$$E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2(n_r + l + 1)^2} \quad (6.60)$$

$n_r$  – радиальная переменная, которая пробегает значений  $0, 1, 2, \dots, l$  как параметр пришёл из (6.58).

Тогда при  $\beta = 0$  надо просто заменить в (6.60)  $l$  на  $\lambda$ , остальные требования останутся такими же.  $n_r$  будет пробегать те же самые значения, потому что они как раз берутся для подбора  $E$  для правильного асимптотического поведения (6.59). Просто в кулоновской задаче мы, учитывая, что  $n_r$  и  $l$  были целыми неотрицательными числами, объединили  $n_r + l + 1$  в одно целое положительное число  $n$ , объявив его главным квантовым числом. Здесь так ввести новый индекс нельзя, потому что  $\lambda$  – не целое число, а конструкция (6.58), записанная через  $l$  и имеющая при неотрицательных  $l$  какие попало значения. Так что  $n_r$  и  $l$  здесь нельзя объединить. Это естественно, ведь у данной задачи нет дополнительного вырождения, которое было в кулоновской. Поэтому здесь уровни энергии должны зависеть от этих чисел по отдельности.

Поэтому уровни дискретного спектра энергии в потенциале (6.55) нумеруются квантовыми числами  $n_r$  и  $l$  и сохраняют вырождение по оставшемуся квантовому числу  $m$ . Кратность вырождения равна числу значений  $m$ ,

$$s = 2l + 1 \quad (6.61)$$

Тогда уровни энергии, если подставить (6.58) в (6.60), будут

$$E_{n_r l} = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2 \left( n_r + \frac{1}{2} + \sqrt{\left( l + \frac{1}{2} \right)^2 + \frac{2m\beta}{\hbar^2}} \right)^2} \quad (6.62)$$

Это точный ответ для собственных значений гамильтониана задачи, никаких приближений здесь нет. Таким образом, мы для задачи, где нет дополнительного вырождения, чисто алгебраическим приёмом нашли собственные значения более сложного гамильтониана. В основе приёма лежит сведение задачи к кулоновской. Можно

придумать и другие такие примеры, главное, чтобы дополнительное слагаемое, портящее хороший потенциал, можно было поместить в центробежный барьер.

Например, для потенциала

$$u(r) = \frac{m\omega^2 r^2}{2} + \frac{\beta^2}{r^2}, \quad (6.63)$$

таким образом можно всё свести к задаче про изотропный осциллятор, решение которой тоже известно.

Такие примеры очень эффектны, но несистемны. Как правило, задачи по описанию реальных систем не допускают подобных приёмов. Задачи из класса сферически симметричных чаще всего надо аккуратно считать методами ММФ и с помощью аппарата специальных функций.

## Семинар 7. Спин

### Контрольный опрос

Вопросы в основном будут посвящены прямолинейной технике. Все состояния будем записывать в базисе  $|sm_s\rangle$ , введённом на лекции, из состояний с определённым спином и его проекцией на ось  $z$ , которой мы всегда считаем выделенное направление.

1) Есть частица со спином  $s = \frac{1}{2}$ . Её состояние описывается спинорной двухкомпонентной волновой функцией, которая является произведением некой координатной волновой функции на определённый спинор:

$$\Psi = \phi(\vec{r}) \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\sqrt{5}}{2i} \\ \frac{\sqrt{5}}{2i} \end{pmatrix} \quad (7.1)$$

С какой вероятностью  $\omega$  при измерении наблюдаемой  $S_z$  будет получено значение  $+\frac{1}{2}$ ?

2) Есть частица со спином  $s = \frac{1}{2}$ . О её координатном состоянии информации нет, а спиновое является смешанным и описывается матрицей плотности

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & \frac{i}{4} \\ \frac{i}{4} & \frac{3}{4} \end{pmatrix} \quad (7.2)$$

Данная матрица эрмитова с единичным следом, так что это верная матрица плотности, причём положительно определённая.

С какой вероятностью  $\omega$  при измерении будет обнаружено, что спин частицы ориентирован против оси  $z$ ?

3) Частица со спином  $s = 1$  находится в состоянии  $|1 + 1\rangle$ , то есть со спином  $s = 1$  и его проекцией на ось  $z$   $m_s = +1$ . Найдите вероятность  $\omega$ , что при измерении, произведённом в этом состоянии, будет обнаружено, что спин ориентирован по оси  $x$ . То есть что при измерении проекции спина  $S_x$  получится максимально возможная, равная единице.

4) Частица со спином  $s = 1$  находится в состоянии  $|1 + 1\rangle$ . Направление  $\vec{n}$  задаётся сферическими углами  $\vartheta = \frac{\pi}{3}$ ,  $\varphi = \frac{\pi}{4}$ . Какова вероятность  $\omega$ , что при измерении проекции спина на ось  $\vec{n}$  в этом состоянии,  $S_{\vec{n}}$ , будет получено значение ноль? Это одно из трёх возможных значений проекции, равных  $+1, 0, -1$ .

В вопросах 1)–3) ответ либо очевиден, либо присутствует в вопросе, а в 4) надо считать.



## Ответы на контрольный опрос

3) Довольно популярным ответом оказался неверный ответ «ноль». В данном задании с самого начала понятно, что можно почти ничего не знать про спины и т. д., надо просто применить соображения симметрии. Если спин ориентирован строго вдоль оси  $z$ , это состояние в спиновом пространстве как-то симметрично относительно вращений вокруг неё. Поэтому направления осей  $x, -x, y, -y$  равноправны по отношению к данному. Так что на вопрос, каково среднее значение проекции спина на ось  $x$ , ответ «ноль» был бы очевидным.

Но здесь вопрос другой. Существование подобной симметрии означает, что вероятность, что спин будет ориентирован по оси  $x$  и при измерении получится  $s_x = +1$ , и вероятность, что он будет ориентирован против оси  $x$  и получится  $s_x = -1$ , должны быть друг другу равны. Это означает, что искомая вероятность  $\omega_+ = \omega_-$ .  $s_x$  может принять, как обычно для такого спина, одно из трёх значений:  $+1, 0, -1$ . Это позволяет заметить, что среднее значение от  $\hat{s}_x^2$  по данному состоянию

$$\langle \hat{s}_x^2 \rangle = \omega_+ \cdot (+1)^2 + \omega_- \cdot (-1)^2 = \omega_+ + \omega_- = 2\omega_+ \quad (7.3)$$

То есть искомая вероятность

$$\omega_+ = \frac{\langle \hat{s}_x^2 \rangle}{2} \quad (7.4)$$

$\langle \hat{s}_x^2 \rangle$  всегда заведомо положительная величина. И усредняя три возможных значения положительной величины, мы получили бы ноль, только если была бы равна единице вероятность выпадения значения 0, а у  $\omega_+$  и  $\omega_-$  были бы нули.

Из заключения о равной вероятности направлений

$$\langle \hat{s}_x^2 \rangle = \langle \hat{s}_y^2 \rangle = \frac{\langle \hat{s}_x^2 \rangle + \langle \hat{s}_y^2 \rangle}{2}, \quad (7.5)$$

Поэтому, если подставить (7.5) в (7.4), получится

$$\omega_+ = \frac{1}{4}(\hat{s}_x^2 - \hat{s}_z^2) \quad (7.6)$$

А  $\hat{s}_x^2$  и  $\hat{s}_z^2$  в состоянии  $|1 + 1\rangle$  известны:  $\hat{s}_x^2 = 1(1 + 1) = 2$ , а  $\hat{s}_z^2 = 1$ . Поэтому искомая вероятность  $\omega_+ = \frac{1}{4}$ .

Таким образом, если спин ориентирован вдоль какой-то оси и единичный, а мы измеряем его проекцию на направление, перпендикулярное этой оси, вероятность получить 0 оказывается равна  $\frac{1}{2}$ , а вероятность получить  $+1$  или  $-1$  по  $\frac{1}{4}$ . То есть общая вероятность, равная 1, делится пополам между нулём и не нулями, и не нули оказываются равноправны.

1) Стоящие в спиноре  $\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{5}} \\ \frac{2i}{\sqrt{5}} \\ \frac{1}{\sqrt{5}} \end{pmatrix}$  в (7.1) коэффициенты – это амплитуды разложения спинового состояния по базисным спинорам  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  и  $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ . Соответственно, квадраты их модулей и есть вероятности. Проекция спина  $s_z = +\frac{1}{2}$  соответствует спинор  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ , поэтому вероятность его реализации – это квадрат модуля верхнего коэффициента,  $\left(\frac{1}{\sqrt{5}}\right)^2 = \frac{1}{5}$ .

2) Нужно вспомнить, что такое матрица плотности в некотором базисе, и что диагональные элементы матрицы плотности – вероятности реализации базисных состояний. То есть верхний левый коэффициент в (7.2),  $\frac{1}{4}$ , это вероятность получения при измерении состояния  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ , а  $\frac{3}{4}$  – состояния  $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ . А спин, направленный против оси z, это как раз состояние  $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ . Поэтому ответ  $\frac{3}{4}$ .

4) Для уменьшения объёма вычислений заметим, что состояние  $|1 + 1\rangle$  аксиально симметрично относительно вращений вокруг оси z, поэтому ответ не будет зависеть от  $\varphi$ . Так что можно взять не  $\varphi = \frac{\pi}{4}$ , а какое удобно. Например, возьмём  $\varphi = 0$ , чтобы рассмотреть вектор  $\vec{n}$ , лежащий в плоскости  $xy$ . Угол между осью z и этим вектором будет  $\frac{\pi}{3}$  (рис. 7.1).

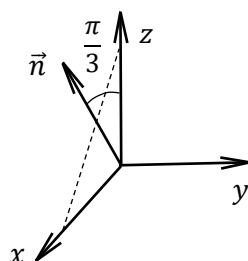


Рис. 7.1. Выбор удобного вектора  $\vec{n}$

А через проекции будет  $\vec{n} = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, 0, \frac{1}{2}\right)$ . Тогда наблюдаемая, которую мы собираемся измерять в состоянии  $|1 + 1\rangle$ ,

$$s_{\vec{n}} = \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{s}_x + \frac{1}{2} \hat{s}_z \tag{7.7}$$

Так как при спине  $s = 1$  возможны три реализации, а полная вероятность равна единице, то вероятность получить значение проекции спина ноль

$$\omega_0 = 1 - (\omega_+ + \omega_-), \tag{7.8}$$

где  $\omega_+$  – вероятность реализации значения  $+1$ ,  $\omega_-$  – значения  $-1$ .

В (7.3) было показано, что сумма  $\omega_+ + \omega_-$  равна среднему значению квадрата соответствующей проекции, поэтому из (7.8) получится

$$1 - \langle \hat{s}_{\vec{n}}^2 \rangle \quad (7.9)$$

Подставим в (7.9) выражение (7.7). Под знаком усреднения по нужному состоянию будут стоять квадраты слагаемых выражения (7.7) и их произведение.  $\hat{s}_x$  и  $\hat{s}_z$  не коммутируют, поэтому нельзя пользоваться биномом Ньютона, надо написать два возможных произведения. Получится

$$1 - \left\langle \frac{3}{4} \hat{s}_x^2 + \frac{1}{4} \hat{s}_z^2 + \frac{\sqrt{3}}{4} \hat{s}_x \hat{s}_z + \frac{\sqrt{3}}{4} \hat{s}_x \hat{s}_z + \frac{\sqrt{3}}{4} \hat{s}_z \hat{s}_x \right\rangle \quad (7.10)$$

Среднее значение  $\hat{s}_x$  в нашем состоянии ноль. А  $\hat{s}_z$  – оператор, для которого вектор, стоящий в обкладке, собственный. Так что он, умножаясь, просто даёт число, и дальше идёт вычисление среднего от  $\hat{s}_x$ . Поэтому два последних слагаемых под знаком среднего в (7.10) зануляются.  $|1 + 1\rangle$  – это состояние с определённым значением  $s_z = +1$ , поэтому  $\hat{s}_z^2 = 1$ . А учитывая формулы (7.4–7.6),  $\hat{s}_x^2 = \frac{\hat{s}^2 - \hat{s}_z^2}{2} = \frac{1}{2}$ . То есть под знаком среднего в (7.10) получается  $\frac{3}{8} + \frac{1}{4} = \frac{5}{8}$ , а само выражение (7.10), то есть  $\omega_0 = \frac{3}{8}$ .

Теперь мы знаем все вероятности реализации. В процессе вычисления (7.10) мы поняли, что

$$\omega_+ + \omega_- = \frac{5}{8} \quad (7.11)$$

С другой стороны, когда мы будем усреднять выражение (7.7), будет  $\langle \hat{s}_x \rangle = 0$  и  $\langle \hat{s}_z \rangle = 1$ . Поэтому, учитывая (7.4–7.6) и (7.7),

$$\langle \hat{s}_{\vec{n}}^2 \rangle = \omega_+ - \omega_- = \frac{1}{2} \quad (7.12)$$

Тогда из системы уравнений (7.11) и (7.12)

$$\omega_+ = \frac{9}{16} \quad (7.13)$$

$$\omega_- = \frac{1}{16} \quad (7.14)$$

Таким образом, мы посчитали вероятности реализации всех трёх возможных значений проекции спина. Если мы в состоянии  $|1 + 1\rangle$  измеряем  $s_{\vec{n}}$ , проекцию спина на направление  $\vec{n}$  с  $\vartheta = \frac{\pi}{3}$  и любым  $\varphi$ , всегда будем получать значение  $+1$  с вероятностью  $\frac{9}{16}$ ,  $-1$  с вероятностью  $\frac{1}{16}$  и  $0$  с вероятностью  $\frac{3}{8}$ .

Это прямолинейная схема вычислений. Мы всегда можем посчитать средние. И, вычислив их от нужного количества степеней интересующего нас оператора проекции спина, получаем систему уравнений относительно вероятностей реализации. Поскольку число возможных проекций всегда конечно, получается конечная система линейных уравнений. Её всегда можно решить, вопрос только в объёме вычислений. Например, для состояния частицы со спином  $s = \frac{7}{2}$  возможных проекций будет восемь, и в общем случае

мы получим систему из восьми уравнений для восьми неизвестных. Мы напишем, что сумма всех восьми вероятностей равна единице, а потом будем считать средние от семи степеней этой проекции, от  $s_{\vec{n}}^1, s_{\vec{n}}^2, \dots, s_{\vec{n}}^7$ , и тогда получим систему независимых уравнений на все вероятности реализации.

### Прямая и обратная задачи про опыт Штерна – Герлаха

На лекции мы в основном обсуждали пространство чистых состояний частицы со спином, то есть спинорных волновых функций. Мы обнаружили, что для довольно обширного класса состояний можем описывать волновую функцию в факторизованном базисе, где она произведение координатной функции без учёта спиновой структуры и спинора, описывающего спиновое состояние. Как мы поняли из уравнения Паули, такая факторизация не всегда сохраняется в процессе эволюции системы. С течением мы можем обнаруживать, что движение частицы в пространстве и изменение её спинового состояния завязаны друг на друга.

Но в заданный момент времени мы иногда можем произвести такую факторизацию. Например, мы видели, что, если магнитное поле, как раз и входящее в гамильтониан Паули в слагаемые, перепутывающие эволюцию координаты и спина, однородно, то такое разбиение можно произвести в любой момент времени. И тогда можно независимо изучать, как меняется распределение вероятности обнаружения частицы в пространстве и как меняются вероятности обнаружения заданных значений спиновых характеристик.

Существует классический опыт, в котором изучалось изменение спиновых характеристик частиц, хоть и использовалась связь с координатным движением. Это опыт Штерна – Герлаха, в котором и было доказано существование спина. В нём брали пучок частиц со спином и пропускали его через область сильно неоднородного магнитного поля (рис. 7.2). В классической интерпретации в таком поле на магнитный диполь действует сила, которая пытается затянуть его в область с большим значением магнитной индукции.

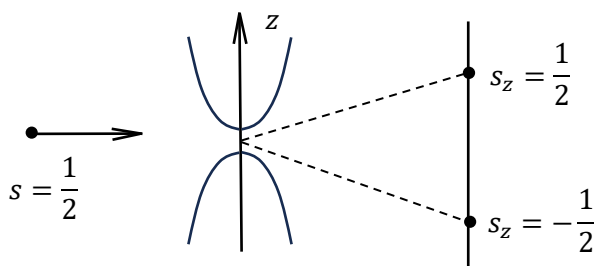


Рис. 7.2. Опыт Штерна – Герлаха

Когда мы будем пользоваться квантово-классической аналогией и писать соответствующие гамильтонианы, тоже увидим, что движение частицы в пространстве в случае сильно неоднородного магнитного поля будет чётко привязано к её спиновому состоянию. И в итоге, даже если мы не решаем соответствующих уравнений

Шредингера, это приводит к тому, что пучок после прохождения такого поля разбивается на несколько пучков.

Если был пучок частиц, например, со спином  $s = \frac{1}{2}$ , мы увидим два пятна на фотопластинке. Мы будем интерпретировать это так, что в зависимости от проекции спина на некоторое направление, выделенное для данного прибора, а в действительности на то, в котором действует сила, частица попадает либо в одно пятно, либо в другое. Если мы вдоль оси прибора, по которой происходит разделение движения частиц с разной проекцией спина на неё, направим ось  $z$ , в одно пятно попадут частицы с  $s_z = +\frac{1}{2}$ , в другое с  $s_z = -\frac{1}{2}$ . Потом, измеряя интенсивность данных пятен, мы фактически измерим отношение вероятностей реализации этих двух значений:

$$\frac{I_+}{I_-} = \frac{\omega_+}{\omega_-} \quad (7.15)$$

Прибор в данной задаче был создан именно для измерения отношения этих вероятностей.

Задачи про опыт Штерна – Герлаха бывают прямые, когда говорят, какое спиновое состояние частиц в исходном пучке, и нужно найти отношение интенсивностей пятен. Или обратные, когда мы получили определённое соотношение интенсивностей пятен, и надо сказать, что мы знаем про состояние частиц пучка. В обеих задачах для решения нужно связать спиновое состояние с вероятностями реализации по схеме, которую сейчас обсуждали.

Если мы зададим спиновое состояние в базисе, где  $s_z = +\frac{1}{2}$  это  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ , а  $s_z = -\frac{1}{2}$  это  $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ , в виде спинора, вероятностями будут просто квадраты модулей его компонент. Более интересно поговорить о ситуации, когда частицы пучка находятся в смешанном спиновом состоянии, и заодно обсудить, как записывается матрица плотности для спиновых состояний частиц спина  $s = \frac{1}{2}$ .

### Спиновые матрицы плотности частиц и вектор поляризации

Когда мы говорим «спиновые», речь идёт о том, что мы можем рассматривать спиновое состояние независимо от координатного движения. Мы хотим описать только его. Чистое состояние описывалось бы просто двухкомпонентным спинором  $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ , нормированным на единицу. Тогда любая спиновая матрица плотности  $\hat{\rho}$ , являющаяся некогерентной смесью таких чистых состояний, будет записываться в виде матрицы  $2 \times 2$ :

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{21} & \rho_{22} \end{pmatrix} \quad (7.16)$$

Она эрмитова, то есть  $\rho_{11}$  и  $\rho_{22}$  вещественны, а  $\rho_{21} = \rho_{12}^*$ . След у неё равен единице, то есть  $\rho_{11} + \rho_{22} = 1$ . Также она неотрицательно определённая, то есть у неё все угловые миноры неотрицательные, в частности  $\rho_{11}$  и  $\rho_{22}$ , и определитель тоже.

В связи с кубитами мы уже обсуждали, что, если эта матрица  $2 \times 2$  может быть записана в виде проектора, матричного произведения одного и того же столбца на строку, то определитель обязательно равен нулю.

Во всех случаях существует очень удобная параметризация для подобных матриц. В пространстве  $2 \times 2$  есть уже знакомый нам базис, состоящий из единичной матрицы  $2 \times 2$  и трёх матриц Паули. Они все эрмитовы, поэтому, если разложить нашу матрицу по этому базису, коэффициенты разложения будут эрмитовыми. Более того, поскольку все матрицы Паули бесследовые, а след матрицы (7.16) равен единице, при единичной матрице обязательно будет коэффициент  $\frac{1}{2}$ . Поэтому (7.16) можно записать как

$$\frac{1}{2}\{1 + \vec{\xi}\hat{\sigma}\}, \quad (7.17)$$

где как 1 обозначена единичная матрица  $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ .  $\vec{\xi}$  – некий вектор,  $\hat{\sigma}$  – матрицы Паули, и  $\vec{\xi}\hat{\sigma} = \xi_1 \cdot \hat{\sigma}_1 + \xi_2 \hat{\sigma}_2 + \xi_3 \hat{\sigma}_3$ , обычное скалярное произведение.

То есть любое смешанное состояние частицы со спином  $s = \frac{1}{2}$  мы можем задать, задав некий трёхмерный вектор

$$\vec{\xi} = \xi_1 + \xi_2 + \xi_3 \quad (7.18)$$

Он вещественный, чтобы обеспечить эрмитовость. Условие единичности следа уже выполнено, условие неотрицательной определённости означает, что  $|\xi| \leq 1$ . Причём легко проверить, что, если  $|\xi| = 1$ , будет  $\det = 1 - |\xi|^2 = 0$ , и это будет матрица плотности, на самом деле описывающая чистое состояние, где  $\rho$  можно записать в виде проектора. А если  $|\xi| < 1$ , это смешанное состояние, которое нельзя записать в виде проектора на чистое состояние.

Это общая информация, подсказывающая, как перенести всё, что мы знаем вообще про матрицы плотности, на спиновые матрицы плотности частицы со спином  $\frac{1}{2}$ . Оказывается, что их все можно записывать в виде (7.17).

Определим физический смысл вектора  $\vec{\xi}$ . Мы с его помощью задаём произвольное смешанное состояние. Рассмотрим, как это будет отражаться на последующих измерениях.

### Задача 1. Отношение интенсивностей пятен в опыте Штерна-Герлаха

Среди обязательных задач есть такая, где предлагается рассмотреть опыт Штерна – Герлаха в общем виде. Прибор разделяет пучок в зависимости от проекции спина пучка на направление произвольной оси  $\vec{n}$ . Частицы пучка находятся в произвольном смешанном состоянии, описанном матрицей (7.17) с произвольным вектором  $\vec{\xi}$ . Чистые состояния являются его частными случаями, когда  $|\xi| = 1$ .

Предскажите в этом случае отношение  $\frac{I_+}{I_-}$ .

Несмотря на общую постановку задачи, здесь частица спина  $s = \frac{1}{2}$ . У неё всего две возможные проекции на выделенное направление  $\vec{n}$ ,  $s_{\vec{n}} = +\frac{1}{2}$  и  $-\frac{1}{2}$ . Поэтому сумма вероятностей их получить

$$\omega_+ + \omega_- = 1 \quad (7.19)$$

Кроме того,

$$\omega_+ \left(+\frac{1}{2}\right) + \omega_- \left(-\frac{1}{2}\right) = \langle s_{\vec{n}} \rangle \quad (7.20)$$

А для смешанного состояния среднее значение всегда вычисляется как след произведения матрицы плотности на соответствующий оператор, то есть (7.20) равно

$$\text{Tr}\{\hat{\rho} \cdot \hat{s}_{\vec{n}}\} \quad (7.21)$$

Из (7.20) и (7.21) получается, что

$$\omega_+ + \omega_- = 2 \text{Tr}\{\hat{\rho} \cdot \hat{s}_{\vec{n}}\} \quad (7.22)$$

Вспомним, что для  $s = \frac{1}{2}$ , если мы пишем у  $\vec{n}$  произвольные компоненты через  $\vartheta$  и  $\varphi$ , то есть что  $n_x = \sin \vartheta \cos \varphi$ ,  $n_y = \sin \vartheta \sin \varphi$ , а  $n_z = \cos \vartheta$ , оператор

$$\hat{s}_{\vec{n}} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \cos \vartheta & \sin \vartheta e^{-i\varphi} \\ \sin \vartheta e^{i\varphi} & -\cos \vartheta \end{pmatrix} \quad (7.23)$$

Это самый общий способ записать эрмитову неотрицательно определённую матрицу  $2 \times 2$  с единичным следом.

Подставляя (7.16) и (7.23) в (7.22), получаем, что  $\omega_+ - \omega_-$  – это след произведения двух матриц  $2 \times 2$ . В общей матрице плотности  $\hat{\rho}$ , записанной через компоненты (7.18), на главной диагонали будут стоять  $1 + \xi_3$  и  $1 - \xi_3$ , где 1 от единичной матрицы, а  $\xi_3$  и  $-\xi_3$  от матрицы Паули  $\hat{\sigma}_3$ . А на побочной  $\xi_1$  от  $\hat{\sigma}_1$ , ведь там стоит, согласно (7.16),  $\xi_1 \hat{\sigma}_1$ , где  $\hat{\sigma}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ , и  $-i\xi_2$  и  $i\xi_2$  от  $\hat{\sigma}_2$ . Получится

$$\omega_+ - \omega_- = \frac{1}{2} \text{Tr} \left\{ \begin{pmatrix} 1 + \xi_3 & \xi_1 - i\xi_2 \\ \xi_1 + i\xi_2 & 1 - \xi_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \vartheta & \sin \vartheta e^{-i\varphi} \\ \sin \vartheta e^{i\varphi} & -\cos \vartheta \end{pmatrix} \right\} \quad (7.24)$$

Вектор  $\vec{\xi}$  обычно называют вектором поляризации смешанного состояния для частицы спина  $s = \frac{1}{2}$ . Он действительно характеризует спиновую поляризацию этого состояния.

В (7.24) надо честно перемножить две матрицы  $2 \times 2$  и посчитать след, сумму диагональных элементов матрицы произведения. Для вычисления следа нужно знать только элементы главной диагонали, элементы побочной обозначим крестами. Для получения верхнего левого элемента матрицы произведения нужно умножить первую строку первой матрицы в (7.24) на первый столбец второй. А для правого нижнего – вторую строку на второй столбец. Получится

$$\left( \begin{array}{c} (1 + \xi_3) \cos \vartheta + (\xi_1 - i\xi_2) \sin \vartheta e^{i\varphi} \\ \times \\ (\xi_3 - 1) \cos \vartheta + (\xi_1 + i\xi_2) \sin \vartheta e^{-i\varphi} \end{array} \right) \quad (7.25)$$

Просуммируем выражения на диагонали в (7.25), для удобства записав  $e^{i\varphi} = \cos \varphi + i \sin \varphi$ , а  $e^{-i\varphi} = \cos \varphi - i \sin \varphi$ . Все слагаемые с  $i$  должны сократиться, потому что должно получиться вещественное выражение, так что можно выписывать только вещественные конструкции. Получится

$$\omega_+ - \omega_- = \xi_3 \cos \vartheta + \xi_1 \sin \vartheta \cos \varphi + \xi_2 \sin \vartheta \sin \varphi \equiv (\vec{\xi} \cdot \vec{n}) \quad (7.26)$$

Почленно сложив выражения (7.19) и (7.26), получим

$$\omega_+ = \frac{1 + (\vec{\xi} \cdot \vec{n})}{2} \quad (7.27)$$

Учитывая (7.19),

$$\omega_- = \frac{1 - (\vec{\xi} \cdot \vec{n})}{2} \quad (7.28)$$

Тогда искомое отношение интенсивностей в виде общего ответа для всех задач про опыт Штерна – Герлаха, если подставить в соотношение (7.15) выражения (7.27) и (7.28),

$$\frac{I_+}{I_-} = \frac{1 + (\vec{\xi} \cdot \vec{n})}{1 - (\vec{\xi} \cdot \vec{n})} \quad (7.29)$$

Вектор  $\vec{\xi}$  параметризует любое спиновое состояние частицы со спином  $s = \frac{1}{2}$ , то есть любое смешанное или чистое.

В обязательных задачах задаётся вопрос, как надо сориентировать прибор, какое направление  $\vec{n}$  выбрать, чтобы соотношение (7.29) было максимальным. Очевидно, это надо сделать вдоль вектора  $\vec{\xi}$ . Тогда максимально возможное отношение интенсивностей пятен для смешанного состояния, у которого  $|\vec{\xi}| < 1$ ,

$$\frac{I_+}{I_-} = \frac{1 + |\vec{\xi}|}{1 - |\vec{\xi}|} \quad (7.30)$$

Для чистых спиновых состояний частиц пучка всегда можно сориентировать прибор так, что одно из пятен пропадёт. Так как  $|\vec{\xi}| = 1$ , можно выбрать  $\vec{n}$  так, чтобы он совпал с  $\vec{\xi}$ . В знаменателе (7.29) окажется ноль, соотношение обратится в бесконечность, но мы просто скажем, что в этом случае видим только одно пятно.

Таким образом, сама схема вычислений полностью копирует наши общие представления о том, как работать с чистыми и смешанными состояниями. Из-за того, что мы теперь работаем со спиновыми состояниями и вместо координатных или импульсных функций пишем спиноры или матрицы, всё технически проще: не надо считать интегралы, все вычисления алгебраические.



## Эволюция спиновых состояний

В первой половине семинара мы сосредоточились на изучении самих спиновых состояний, но не говорили об их эволюции. Задачи с ней возникают, по крайней мере в нерелятивистских задачах, когда мы включаем внешнее магнитное поле. Потому что у нерелятивистских частиц, в первую очередь заряженных, а также некоторых нейтральных, например, нейтронов, есть магнитный момент, связанный со спином. Специально для этой ситуации существует уравнение Паули, описывающее эволюцию спинорной волновой функции для частицы со спином  $s = \frac{1}{2}$  во внешнем электромагнитном поле:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}_p \Psi, \quad (7.31)$$

где  $\Psi$  – двухкомпонентная спинорная волновая функция.

Если расписывать  $\hat{H}_p$ , гамильтониан Паули для частицы с массой  $m$  и зарядом  $e$ , из (7.31) получится

$$\left\{ \frac{\left( \hat{p} - \frac{e}{c} \hat{H}(\hat{\vec{r}}, t) \right)^2}{2} + e\varphi(\hat{\vec{r}}, t) - 2\mu_0 \hat{\vec{s}} \operatorname{rot}(\vec{A}(\vec{r}, t)) \right\} \Psi \quad (7.32)$$

При записи  $\hat{H}_p$  для электронов с зарядом  $-e$  надо поменять знак у  $e$ . В аргументе потенциалов мы ставим значок оператора над координатой  $\hat{\vec{r}}$ , потому что по принципу локальности частица чувствует внешнее поле в точке, где сама находится. Так что  $\hat{\vec{r}}$  в аргументе потенциалов – это всегда оператор координаты заряженной частицы с зарядом  $e$ .  $2\mu_0$  – гиромангнитное отношение для точечных заряженных частиц. Поле в этом случае – это  $\operatorname{rot}(\vec{A}(\vec{r}, t))$ .

Последнее слагаемое в скобках в уравнении (7.31–7.32) перепутывает поведение спина и координаты частицы. Но мы в общей теории уже обнаружили, что существует случай, когда спиновая динамика и движение частицы в пространстве могут быть описаны независимо. Это случай однородного магнитного поля, когда  $\vec{B}$  не зависит от координаты  $\vec{r}$ , но может быть переменным, то есть зависеть от  $t$ . Мы работаем в нерелятивистском приближении, то есть не рассматриваем вихревые поля, и просто говорим, что есть переменное магнитное поле, которое действует на магнитный момент частицы. И тогда делим уравнение Паули на два независимых уравнения, для координатной части волновой функции, не содержащей спинового слагаемого  $2\mu_0 \hat{\vec{s}}$ , и для спиновой.

Итак, если

$$\vec{B} = \vec{B}(t), \quad (7.33)$$

мы можем в любой момент факторизовать волновую функцию  $\Psi$ , то есть записать её в виде произведения обычной координатной волновой функции  $\phi$  без спинорной структуры и спинора  $\chi$ , не зависящего от координаты, а только эволюционирующего с течением времени:

$$\Psi(\vec{r}, t) \equiv \phi(\vec{r}, t)\chi(t) \tag{7.34}$$

Тогда возникает спиновое уравнение Паули только для спинорной части волновой функции  $\chi(t)$

$$i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} = -2\mu_0 \vec{B}(t) \hat{s} \chi \tag{7.35}$$

с начальным условием, определяемым начальным спиновым состоянием частицы.

Задачи об эволюции спина в однородном непостоянном магнитном поле – класс задач, удобных для методического исследования. Ведь он учит, как изучать поведение спинового состояния с течением времени с минимальными техническими сложностями, когда нас не интересует движение частицы в пространстве и мы рассматриваем только эволюцию спинового состояния, простой вариант нетривиальной спиновой динамики. Разберём в качестве примера задачу из списка обязательных.

## Задача 2. Вероятность переориентации спина в переменном магнитном поле

Рассмотрите поведение электрона, то есть частицы с зарядом  $-e$  и массой  $m$ , помещённой в магнитное поле

$$\vec{B}(t) = B_0 \cdot \vec{e}_z + B_{\perp} [\cos(\omega t) \vec{e}_x + \sin(\omega t) \vec{e}_y] \tag{7.36}$$

В этом поле есть постоянная составляющая длиной  $B_0$ , направленная вдоль оси  $z$ , и переменная с модулем  $B_{\perp}$ , которая крутится вокруг данной оси (рис. 7.3). То есть вектор  $\vec{B}(t)$  прецессирует вокруг оси  $z$ , составляя с ней постоянный угол, определяемый соотношением  $B_{\perp}$  и  $B_0$ .

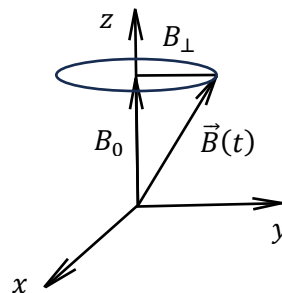


Рис. 7.3. Магнитное поле с постоянной и прецессирующей составляющими

В момент времени  $t = 0$  спин электрона  $s = \frac{1}{2}$  ориентирован по оси  $z$ , то есть начальная конструкция спинора

$$\chi(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{7.37}$$

С какой вероятностью в момент времени  $t$  спин будет ориентирован против оси  $z$ , то есть какова  $\omega_-(t)$ ?

У спина электрона возможны два направления, по и против оси  $z$ , когда  $s_z = +\frac{1}{2}$  или  $-\frac{1}{2}$ . Мы должны решать эту задачу на базе уравнения (7.35), подставив в него (7.36).

Запишем дальше  $\chi(t)$  через две обычные функции времени, которыми мы обозначим компоненты спинора:

$$\chi(t) \equiv \begin{pmatrix} u(t) \\ v(t) \end{pmatrix} \quad (7.38)$$

При этом начальное условие  $u(0) = 1, v(0) = 0$ .

Тогда левая часть уравнения (7.35) запишется через обычные производные по времени  $\dot{u}$  и  $\dot{v}$ , там не нужны частные производные, так как  $\chi$  зависит только от  $t$ . Справа будет выражение с  $+2\mu_0$ , потому что  $-2\mu_0$  было записано в уравнении Паули для частицы с зарядом  $+e$ , а здесь электрон с зарядом  $-e$ .

Оператор спина

$$\hat{s} = \frac{1}{2} \hat{\sigma}, \quad (7.39)$$

где  $\hat{\sigma}$  – матрица Паули. 2 и  $\frac{1}{2}$  сократят друг друга, от  $\vec{B}(t)\hat{s}$  останется  $B_{\perp} \cos(\omega t) \hat{\sigma}_x + B_{\perp} \sin(\omega t) \hat{\sigma}_y + B_0 \hat{\sigma}_z$ .  $\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} +1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ , поэтому, если запишем конструкцию  $B_0 \hat{\sigma}_z$  как матрицу  $2 \times 2$ , на главной диагонали будут стоять  $B_0$  и  $-B_0$ . При  $\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$  в (7.36) стоит  $B_{\perp} \cos(\omega t)$ , это выражение будет на обоих местах на побочной диагонали. А от  $\hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$  на верхнем правом месте получится  $-i \sin(\omega t) B_{\perp}$ , а на левом нижнем  $+i \sin(\omega t) B_{\perp}$ . Свернём  $\cos(\omega t) - i \sin(\omega t)$  в  $e^{-i\omega t}$ , а  $\cos(\omega t) + i \sin(\omega t)$  в  $e^{+i\omega t}$ . В итоге спиновое уравнение Паули (7.35) в матричной форме будет выглядеть как

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{u} \\ \dot{v} \end{pmatrix} = +\mu_0 \begin{pmatrix} B_0 & B_{\perp} e^{-i\omega t} \\ B_{\perp} e^{+i\omega t} & -B_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \quad (7.40)$$

Компоненты в матрице поделились, на главной диагонали стоят  $B_0$  и  $-B_0$ , а на побочной – слагаемые с нестационарной частью магнитного поля.

Перепишем систему (7.40) в покомпонентной форме. Разделим (7.40) на  $i\hbar$ . Справа будет  $\frac{1}{i} = -i$ , и от деления верхнего левого элемента матрицы на  $\hbar$  возникнет величина  $\frac{\mu_0 B_0}{\hbar}$  размерности частоты. Так как  $\omega$  – это частота изменения поля, тождественно обозначим

$$\frac{\mu_0 B_0}{\hbar} \equiv \Omega_0 \quad (7.41)$$

А

$$\frac{\mu_0 B_{\perp}}{\hbar} \equiv \Omega_{\perp} \quad (7.42)$$

Тогда из (7.40), если перемножить правую часть по правилу строка на столбец, получится система двух обыкновенных однородных линейных дифференциальных уравнений первого порядка

$$\dot{u} = -i(\Omega_0 u + \Omega_{\perp} e^{-i\omega t} v) \quad (7.43)$$

$$\dot{v} = -i(\Omega_{\perp} e^{-i\omega t} u + \Omega_{\perp} \Omega_0 v) \quad (7.44)$$

с начальными условиями

$$u(0) = 1 \quad (7.45)$$

$$v(0) = 0 \quad (7.46)$$

Единственная проблема, что коэффициенты этой системы зависят от времени, причём экспоненциальным образом. Но её можно преобразовать в систему с постоянными коэффициентами. От неизвестных функций  $u$  и  $v$  перейдём к новым функциям  $f$  и  $g$ , записав

$$u(t) \equiv f(t) e^{-i\frac{\omega}{2}t} \quad (7.47)$$

$$v(t) \equiv g(t) e^{+i\frac{\omega}{2}t} \quad (7.48)$$

Тогда в уравнении (7.43) общим множителем станет экспонента  $e^{-i\frac{\omega}{2}t}$ , а во втором  $e^{+i\frac{\omega}{2}t}$ , экспоненты сократятся, и получится система уравнений с постоянными коэффициентами. Из первого уравнения системы (7.43–7.44) получится

$$\dot{f} = -i\left(\Omega_0 - \frac{\omega}{2}\right)f - i\Omega_{\perp}g, \quad (7.49)$$

а из второго

$$\dot{g} = -i\Omega_{\perp}f + i\left(\Omega_0 - \frac{\omega}{2}\right)g \quad (7.50)$$

Поскольку экспоненты  $e^{-i\frac{\omega}{2}t}$  и  $e^{+i\frac{\omega}{2}t}$  в нуле единицы, начальные условия не меняются,

$$f(0) = 1 \quad (7.51)$$

$$g(0) = 0 \quad (7.52)$$

Систему уравнений с постоянными коэффициентами можно решать большим числом способов, в том числе выразить одну переменную через другую и подставить в одно из уравнений. Здесь удобнее сначала решать уравнение на  $g$ , потому что для него нулевое начальное условие (7.52). Поэтому выразим  $f$  из (7.50):

$$f = +\frac{i}{\Omega_{\perp}}\dot{g} + \frac{\Omega_0 - \frac{\omega}{2}}{\Omega_{\perp}}g \quad (7.53)$$

и подставим в (7.49), получая

$$+\frac{i}{\Omega_{\perp}}\ddot{g} + \frac{\Omega_0 - \frac{\omega}{2}}{\Omega_{\perp}}\dot{g} = \frac{\Omega_0 - \frac{\omega}{2}}{\Omega_{\perp}}\dot{g} - \frac{i\left(\Omega_0 - \frac{\omega}{2}\right)^2}{\Omega_{\perp}}g - i\Omega_{\perp}g \quad (7.54)$$

Слагаемые с  $\dot{g}$  сокращаются. Остальные перенесём в одну сторону и умножим на  $\frac{i}{\Omega_{\perp}}$ , получив уравнение гармонического осциллятора

$$\ddot{g} + \left[ \left( \Omega_0 - \frac{\omega}{2} \right)^2 + \Omega_{\perp}^2 \right] g = 0 \quad (7.55)$$

Его решением будут синусы и косинусы, но, если учесть начальное условие (7.52), останется только синус:

$$g(t) = A \sin(\Omega t), \quad (7.56)$$

где  $A$  – какая-то константа интегрирования и для краткости обозначено

$$\Omega \equiv \sqrt{\left( \Omega_0 - \frac{\omega}{2} \right)^2 + \Omega_{\perp}^2} \quad (7.57)$$

Подставим (7.56) в (7.53).  $\dot{g} = \Omega A \cos(\Omega t)$ , получится

$$f(t) = A \cdot \left\{ i \frac{\Omega}{\Omega_{\perp}} \cos(\Omega t) + \frac{\Omega_0 - \frac{\omega}{2}}{\Omega_{\perp}} \sin(\Omega t) \right\} \quad (7.58)$$

Константу  $A$  надо определить из второго начального условия (7.51), приравняв его к выражению (7.58) в нуле, где  $\cos(\Omega t) = 0$ , а  $\sin(\Omega t) = 1$ :

$$1 = iA \frac{\Omega}{\Omega_{\perp}}, \quad (7.59)$$

поэтому

$$A = -\frac{\Omega_{\perp}}{\Omega} \quad (7.60)$$

Теперь мы знаем всё спиновое состояние, можем записать  $f(t)$  и  $g(t)$ , подставив (7.60) в (7.58) и (7.56). Но в задаче нужно найти  $\omega_{-}$ . Амплитуда состояния против оси  $z$  – как раз нижняя компонента,  $v$ , поэтому

$$\omega_{-} \equiv |v(t)|^2 \quad (7.61)$$

А так как  $v = g \cdot e^{+i\frac{\omega}{2}t}$ , квадрат модуля экспоненты будет единицей, и (7.61) в любой момент времени совпадёт с

$$|g(t)|^2 = \frac{\Omega_{\perp}^2}{\Omega} \cdot \sin^2(\Omega t), \quad (7.62)$$

если подставить (7.60) в (7.56).

Получается, что вероятность  $\omega_{-}$  отправить спин электрона против оси  $z$  будет меняться периодически. На графике она как функция времени начнётся с нуля, потому

что в момент  $t = 0$  спин электрона был ориентирован по оси  $z$ , то есть вероятность быть ориентированным против неё равнялась нулю. И будет меняться периодически между нулём и максимальным значением, равным  $\frac{\Omega_{\perp}^2}{\Omega^2}$ , с двойной частотой  $\Omega$ , под которой подразумевается выражение (7.57), поскольку в (7.62) стоит квадрат синуса (рис. 7.4).

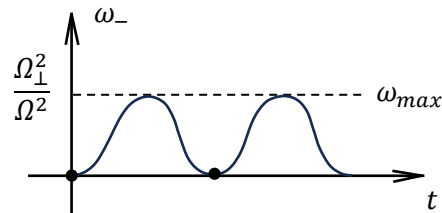


Рис. 7.4. Периодическое изменение вероятности направления спина электрона против оси

Интересно посмотреть выражение для максимальной вероятности, загнать электрон в состояние со спином, направленным против оси  $z$ . Она равна

$$\omega_{max} = \frac{\Omega_{\perp}^2}{\left(\Omega_0 - \frac{\omega}{2}\right)^2 + \Omega_{\perp}^2} \quad (7.63)$$

Это явно резонанс. Если частота изменения магнитного поля  $\omega$  будет в точности равна  $2\Omega_0$ , то есть если частота, с которой мы крутим нестационарную часть поля, привязана к величине стационарной части поля соотношением

$$\omega = \frac{2\mu_0 B_0}{\hbar}, \quad (7.64)$$

в скобках в знаменателе в (7.63) будет стоять ноль, и максимальная вероятность окажется единицей. То есть электрон будет периодически перекидываться в состояние со спином против оси  $z$ .

А средняя по времени вероятность ориентации против оси  $z$  будет равна  $\frac{1}{2}$ , так как вероятность симметрично гармонически меняется между 0 и 1.

Для любого магнитного момента энергетически выгодное состояние, когда магнитный момент смотрит по полю. Электрон – частица с отрицательным зарядом, у неё магнитный момент направлен против спина, то есть в энергетически выгодном состоянии спин смотрит против поля, здесь против оси  $z$ . Состояние, которое мы задали в начале, в момент времени  $t = 0$ , энергетически невыгодное, как бы возбуждённое. А состояние, про которое был вопрос задачи, энергетически выгодное. То есть результат говорит, что при таком периодическом воздействии полем на электрон тот будет периодически перекидываться между энергетически выгодным и невыгодным состояниями, то есть между основным и возбуждённым.

У электрона в возбуждённом состоянии всегда есть возможность снять возбуждение и другим образом. Он может перейти в основное состояние не под

действием переменного поля, а высветиться, то есть испустить фотон на частоте (7.64). Так что, если мы будем воздействовать на кусок вещества, содержащий электроны, таким переменным магнитным полем, удивим, что из этого вещества идёт излучение на частоте (7.64), создаваемое электронами, совершающими подобный переход. Данное явление называется электронным парамагнитным резонансом (ЭПР).

До сих пор в некоторых поликлиниках и технологических отделах заводов можно найти кабинет, на котором будет написано «ЭПР». И там, и там, скорее всего, будет подразумеваться ЭПР-диагностика. Интенсивность индуцированного данным воздействием излучения из каждого куска вещества будет пропорциональна концентрации электронов. Чем их больше, тем больше они будут переходить и высвечиваться. Поэтому, раскачивая электроны таким магнитным полем и ставя детекторы, которые ловят фотоны этой частоты, будем получать карту электронной плотности внутри вещества. По электронной плотности в теле человека можно отличить, например, мышцы от костей или связок. А в технологических процессах – конструкцию, где нужно вещество сплошное, или где в ней образовалась полость. Это широко используемый способ внутренней диагностики вещества.

Правда, в медицине в последние 20 лет более популярным стал ядерный магнитный резонанс (ЯМР). Он устроен по аналогичной схеме, но там раскачивается магнитный момент, связанный с ядром. Магнитно-резонансная томография (МРТ) сейчас получила широкое распространение, и МРТ-установки в больницах сейчас в основном работают на ЯМР, а не на ЭПР. В МНОЦ в кабинете, где занимались МРТ-диагностикой, висел плакат, рассказывавший о её физических принципах. Там было написано, что тёмным на МРТ-фотографии отображаются области, не содержащие протонов. Подразумевалось, что всё настроено на сигнал протона, ядра атома водорода, и тёмным отображаются области, где водорода нет. В тех же мышечных тканях его гораздо больше, чем в костных, что довольно очевидно из их строения. Получается, что по сигналу резонанса можно изучать внутреннее строение человека с большой точностью.

Таким образом, посмотрев на относительно простую задачу, посвящённую спиновой динамике, мы столкнулись с явлением магнитного резонанса, которое широко используется и в медицине, и в технологиях, и в научном эксперименте. С другой стороны, мы увидели, как работает спиновая часть уравнения Паули. Мы специально взяли задачу с гармоническим изменением внешнего воздействия, чтобы она оказалась точно решаемой. Но в других вопрос тоже будет лишь в том, сможем ли мы проинтегрировать возникшую систему уравнений. Для нерелятивистских частиц спина  $s = \frac{1}{2}$  это просто система двух обыкновенных дифференциальных уравнений, линейных однородных и первого порядка, только с непостоянными коэффициентами, поэтому вопрос в том, сможем ли мы учесть эту непостоянность.

Данный пример важен ещё и с практической точки зрения, потому что задачи про спиновую динамику на базе спиновой части уравнения Паули будут во второй

контрольной работе. Тем более, можно придумать много таких переменных магнитных полей, чтобы система интегрировалась в элементарных функциях и не очень сложно решалась. В основном там всё будет сводиться к одному из разобранных нами случаев – разобранному на лекции случаю неравномерной прецессии, когда магнитное поле меняется по времени, но постоянно по направлению, и разобранному на семинаре, когда на постоянное поле накладывается дополнительное внешнее, изменяющееся гармонически. Будут отдельно оцениваться правильность процедуры, то есть понимание того, как работать с этой задачей, её корректная постановка, и техническая реализация, доведение возникшей системы до конкретного ответа.



## Семинар 8. Сложение моментов

### Контрольный опрос

Главное в данной теме – привыкнуть ко всем специфическим понятиям и обозначениям, поэтому контрольный опрос будет очень прямолинейным. Будем считать, что коэффициенты Клебша – Гордана  $C_{jm}^{m_1 m_2}(j_1 j_2)$  определяет соотношение

$$|j_1 j_1 j_2 m_1\rangle = \sum_{m_1 m_2} C_{jm}^{m_1 m_2}(j_1 j_2) |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle \quad (8.1)$$

1) Чему равняется коэффициент Клебша – Гордана

$$C_{2+2}^{+1+1}(1\ 1) \quad (8.2)$$

2) Чему равняется коэффициент Клебша – Гордана

$$C_{2+1}^{+1+1}(1\ 1) \quad (8.3)$$

3) Чему равняется коэффициент Клебша – Гордана

$$C_{2+1}^{+1\ 0}(1\ 1) \quad (8.4)$$

Каждый из них строго определён. Эти вопросы простые, но в некоторых может быть подвох.

4) Пусть электрон  $e^-$  в атоме водорода  $H$ , имеющий спин  $s = \frac{1}{2}$ , находится в состоянии с орбитальным моментом  $l = 1$ , полным моментом  $j = \frac{3}{2}$  и его проекцией  $m_j = +\frac{1}{2}$ . Полный момент электрона определён как сумма орбитального и спинового

$$\hat{j} = \hat{l} + \hat{s} \quad (8.5)$$

Это конкретное состояние электрона, мы его в него загнали. Чему равно среднее значение проекции спина электрона на ось  $z$  в данном состоянии,  $\langle \hat{s}_z \rangle$ ?

В этом вопросе уже надо подумать и воспользоваться тем, что делали на лекции.

### Ответы на контрольный вопрос

1) Здесь всё просто, потому что, когда мы складываем моменты 1 и 1 в скобках в (8.2), то 2 в нижнем индексе – это максимально возможный момент, а +2 – его максимально возможная проекция, которая может набраться единственным образом, как +1 + 1 в верхних индексах. Других вариантов в разложении вектора (8.1) с такими квантовыми числами не будет, поэтому данный коэффициент Клебша – Гордана должен равняться единице.

2) Здесь вместо (8.3) можно было спросить значение коэффициента Клебша – Гордана

$$C_{2+1}^{+1\ 0}(1\ 0) \quad (8.6)$$

В коэффициенте (8.3) проекция суммарного момента +1 в нижнем индексе не равняется сумме проекций составляющих +1 + 1. Аналогично, в (8.6) при сложении

моментов 1 и 0 в скобках не может получиться момент, равный 2, в нижнем индексе. Поэтому данные коэффициенты Клебша – Гордана равны нулю, таких векторов в разложении быть не может.

Из того, что коэффициент Клебша – Гордана в (8.1) не равен нулю, должно следовать, что индекс

$$m = m_1 + m_2, \tag{8.7}$$

а  $j \in |j_1 - j_2|, \dots, j_1 + j_2$ . Если это не выполнено, данный коэффициент обязательно будет равен нулю, потому что такой вектор не может появиться в разложении соответствующего вектора  $|j_1 j_2 m_1\rangle$  с определённым полным моментом.

3) Этот коэффициент нужно было уже либо считать по формуле  $\sqrt{j_1(j_1 + j_2)}$ , либо вспомнить, что это такое. Мы должны сложить два момента в скобках, равных 1. Если мы строим  $|1 + 1\rangle|1 + 1\rangle$ , то, как заметили в вопросе 1), получится состояние

$$|1 + 1\rangle|1 + 1\rangle = |2 \ 1 \ 1 + 2\rangle \tag{8.8}$$

Если подействуем на него оператором  $\hat{J}_-$ , справа получится  $\sqrt{(2 + 2) \cdot 1} = 2$ , умноженный на тот же вектор, где четвёртый коэффициент теперь +1. А слева мы разбиваем  $\hat{J}_-$  на два слагаемых,  $\hat{J}_{1-}$  и  $\hat{J}_{2-}$ , и каждое из них действует, вытаскивая  $\sqrt{2}$ . Из (8.8) получится

$$\sqrt{2}|1 \ 0\rangle|1 + 1\rangle + \sqrt{2}|1 + 1\rangle|1 \ 0\rangle = 2|2 \ 1 \ 1 + 1\rangle \tag{8.9}$$

Разделим (8.9) на 2, чтобы выразить вектор справа. Тогда слева будут стоять коэффициенты Клебша – Гордана, равные  $\frac{1}{\sqrt{2}}$ . Один из них как раз (8.4).

4) На лекции мы уже строили соответствующий вектор, но для изоспина. Для момента, в данном случае полного момента количества движения, механического момента электрона в атоме водорода, всё будет также, как для изоспина, потому что алгебраические свойства этих операторов совершенно одинаковы.

То есть мы говорим, что проще было бы написать состояние с  $j = \frac{3}{2}$  и максимальной проекцией  $m_j = \frac{3}{2}$ , потому что состояние  $\left| \frac{3}{2}, 1, \frac{1}{2}, +\frac{3}{2} \right\rangle$  – как раз состояние с единичным коэффициентом Клебша – Гордана:

$$\left| \frac{3}{2}, 1, \frac{1}{2}, +\frac{3}{2} \right\rangle = |1 + 1\rangle \left| \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \right\rangle \tag{8.10}$$

Подействуем на (8.10) оператором  $\hat{J}_-$ , тогда справа получится нужное состояние:

$$\sqrt{3} \left| \frac{3}{2}, 1, \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{2}|1 \ 0\rangle \left| \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \right\rangle + |1 + 1\rangle \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle \tag{8.11}$$

Разделим (8.11) на  $\sqrt{3}$ . Справа при первом слагаемом будет коэффициент  $\sqrt{\frac{2}{3}}$ , что означает, что квадрат модуля этого коэффициента, равный  $\frac{2}{3}$ , это вероятность того, что

электрон, находящийся в состоянии  $\left| \frac{3}{2}, 1, \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle$ , будет обнаружен в состоянии  $\left| \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \right\rangle$ . То есть с вероятностью  $\frac{2}{3}$  у него проекция спина  $s_z = +\frac{1}{2}$  и с вероятностью  $\frac{1}{3}$   $s_z = -\frac{1}{2}$ .

Тогда

$$\langle s_z \rangle = \frac{2}{3} \left( +\frac{1}{2} \right) + \frac{1}{3} \left( -\frac{1}{2} \right) = \frac{1}{6} \quad (8.12)$$

### Задача 1. Коэффициенты Клебша – Гордана и проекторы на состояния с определённым полным моментом

В списке обязательных есть задача, где предлагается найти все возможные коэффициенты Клебша – Гордана для сложения моментов  $j_1 = j_2 = \frac{1}{2}$ , то есть все  $C_{jm}^{m_1 m_2} \left( \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right)$ . Это задача о сложении двух спинов  $s_1 = s_2 = \frac{1}{2}$ . Например, есть электронная оболочка атома гелия, состоящая из двух электронов, и нас интересует состояние с определённым значением полного спинового момента. Это важно даже с точки зрения физики, ведь, согласно первому правилу Хунда, отбор для порядка подуровней тонкого расщепления начинается именно по данным значениям. В частности, у атома гелия состояние с наименьшей энергией – это состояние с полным спином  $S = 1$ , состояние с  $S = 0$  чуть повыше.

Итак, во-первых, надо вычислить все коэффициенты Клебша – Гордана вида

$$C_{jm}^{m_1 m_2} \left( \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right) \quad (8.13)$$

Во-вторых, построить операторы проектирования на состояния с определённым значением полного спина.

Поскольку  $s_1 = s_2 = \frac{1}{2}$ , полный спин может принимать значения  $S = 0, 1$ . При  $S = 0$  проекция принимает единственное значение  $M_S = 0$ , поэтому будет всего одно базисное состояние, его даже называют синглетным, то есть одиночным. А при  $S = 1$  проекция пробегает три значения  $M_S = +1, 0, -1$ , и данные три состояния называют триплетными. В сумме их получается четыре. Это естественно, ведь у одной частицы со спином  $\frac{1}{2}$  базис состоит из двух базисных состояний, пространство двумерное, так что прямое произведение двух двумерных пространств, дающее пространство спиновых состояний пары частиц со спином  $\frac{1}{2}$ , должно быть четырёхмерным.

«Факторизованный базис» состоит из упорядоченных произведений двух спиноров  $\chi_{\sigma_1}$  и  $\chi_{\sigma_2}$ . В данном случае в базисе из спинорных конструкций четыре базисных элемента:  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ ,  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ ,  $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ ,  $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ , и любое спиновое состояние системы из двух частиц спина  $\frac{1}{2}$  можно записать в виде их суперпозиции. Но они не будут состояниями с определённым полным спином, по крайней мере все. И раз нас просят

найти все коэффициенты Клебша – Гордана (8.13), фактически нужно построить все состояния с определённым полным спином через эти спинорные конструкции, состояния факторизованного базиса.

Будем действовать по уже использованной хорошо работающей схеме. Станем нумеровать состояния квантовыми числами полного спина  $S$  и его проекции  $M_S$ . Максимальная проекция отвечает состоянию

$$|SM_S\rangle = |1 + 1\rangle \quad (8.14)$$

Соответствующий коэффициент Клебша – Гордана отличен от нуля, только если в качестве верхних индексов стоят числа  $+\frac{1}{2}$ ,

$$C_{1+1}^{+\frac{1}{2}+\frac{1}{2}}\left(\frac{1}{2} \frac{1}{2}\right) = 1 \quad (8.15)$$

На языке базисных векторов эта запись будет представлена через спинорную конструкцию, в которой обе частицы находятся в состоянии с проекцией спина  $s_z = +\frac{1}{2}$  на ось  $z$ , а вместе они в состоянии с определённым полным спином  $S = 1$  и его проекцией на ось  $z$   $S_z = +1$ :

$$|1 + 1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (8.16)$$

Подействуем на (8.16) оператором  $\hat{S}_-$ , будет

$$\hat{S}_- |1 + 1\rangle = \sqrt{2} |1 0\rangle \quad (8.17)$$

С другой стороны,  $\hat{S}_-$  можно записать как

$$\hat{S}_- = \hat{S}_{1-} + \hat{S}_{2-} \quad (8.18)$$

Подействуем (8.18) на спинорную конструкцию в (8.16).  $\hat{S}_{1-}$  будет действовать на первый спинор и превратит его в  $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ , а  $\hat{S}_{2-}$  аналогично поступит со вторым. Получится

$$(\hat{S}_{1-} + \hat{S}_{2-}) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (8.19)$$

Разделив (8.19) на  $\sqrt{2}$  из (8.17), на языке базисных векторов получим, что состояние с  $S = 1$  и  $S_z = 0$

$$|1 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (8.20)$$

Соответственно, коэффициенты Клебша – Гордана

$$C_{1 0}^{+\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}\left(\frac{1}{2} \frac{1}{2}\right) = C_{1 0}^{-\frac{1}{2}+\frac{1}{2}}\left(\frac{1}{2} \frac{1}{2}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (8.21)$$

(8.20) и (8.21) – одна и та же запись, но вторая на языке значений коэффициентов, а первая на языке непосредственно разложения базисного вектора одного базиса по другому.

Если ещё раз подействуем оператором  $\hat{S}_-$  и перескочим в состояние  $S_z = -1$ . Но это можно сделать и без алгебраических действий, потому что такую проекцию можно набрать единственным способом, из обеих  $s_z = -\frac{1}{2}$ . Поэтому обязательно

$$|1 - 1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (8.22)$$

На языке коэффициентов это означает, что

$$C_{1-1}^{-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 2 \end{pmatrix} = 1 \quad (8.23)$$

Итак, мы построили три базисных вектора триплетного набора состояний, триплета по полному спину  $S = 1$  с проекциями  $S_z = +1, 0, -1$ : (8.16), (8.20), (8.22). Пространство четырёхмерное, есть ещё синглетное состояние с  $S = 0$  и  $S_z = 0$ . Его вектор ортогонален всем векторам триплета и нормирован на единицу. Этого достаточно, чтобы построить его, например, как

$$|0 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} - \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (8.24)$$

Такой четвёртый базисный вектор точно ортогонален (8.20) и тем более (8.16) и (8.22), сумма квадратов модулей коэффициентов равна единице.

Теперь мы знаем, что, если пишем такую же пару коэффициентов Клебша – Гордана как (8.21), только с 0 в первом нижнем индексе, будет

$$C_{00}^{+\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 2 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (8.25)$$

$$C_{00}^{-\frac{1}{2}+\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 2 \end{pmatrix} = -\frac{1}{\sqrt{2}} \quad (8.26)$$

Мы вычислили все возможные коэффициенты Клебша – Гордана, у которых в скобках стоят  $j_1 = j_2 = \frac{1}{2}$ , и получили полное соответствие факторизованного и нефакторизованного базисов, они друг через друга выразились.

Ещё в задаче надо построить операторы проектирования на состояние с определённым спином, которые обычно называют проекторами на синглетное и триплетное состояния.

Проще построить проектор на синглетное состояние, потому что оно одно. Чтобы определить проектор на заданный вектор через базисные элементы нашего базиса с определённым значением, нужно взять конструкцию

$$\hat{P}_0 = |0 0\rangle\langle 0 0| \quad (8.27)$$

Также её можно построить в виде, например, конкретной матрицы в пространстве таких спинорных конструкций, причём чисто алгебраическим способом. Здесь могут быть только два возможных значения полного спина,  $S = 0$  и 1. Поэтому сумма проекторов на состояния с этими спинами должна давать

$$\hat{P}_0 + \hat{P}_1 = 1 \quad (8.28)$$

С другой стороны, для каждого оператора можно построить спектральное разложение – разложение по проекторам на свои собственные вектора, где коэффициентами будут собственные значения. Поэтому оператор квадрата полного спина окажется равен сумме по всем возможным значениям квантового числа  $S$ , нумерующего собственные вектора и значения:

$$\hat{S}^2 = \sum_{S=0}^1 S(S+1) \hat{P}_S, \quad (8.29)$$

$S(S+1)$  – собственное значение на проектор,  $\hat{P}_S$  – проектор на состояние с соответствующим полным спином.

При  $S = 0$  соответствующего слагаемого в (8.29) не будет, поэтому спектральное разложение в действительности будет выглядеть как удвоенный проектор на триплетное состояние,  $2\hat{P}_1$ . То есть проектор на подмножество триплетных состояний, если расписывать  $\hat{S}^2$  через спиновые операторы первой и второй частицы,

$$\hat{P}_1 = \frac{1}{2} (\hat{s}_1 + \hat{s}_2)^2 = \frac{1}{2} (\hat{s}_1^2 + \hat{s}_2^2 + 2\hat{s}_1\hat{s}_2) \quad (8.30)$$

Раскроем скобки. Квадраты спиновых операторов одной частицы можно заменить на их собственные значения, потому что в пространстве состояний системы двух частиц со спином  $s = \frac{1}{2}$  спин каждой частицы определен и равен  $\frac{1}{2}$ . Значит, операторы  $\hat{s}_1^2$  и  $\hat{s}_2^2$  равны  $\frac{1}{2}(\frac{1}{2} + 1) = \frac{3}{4}$ .

Тогда можно выразить проектор на подмножество триплетных состояний непосредственно через спиновые операторы первой и второй частиц. Из (8.30) получится

$$\frac{3}{4} + \hat{s}_1\hat{s}_2 \quad (8.31)$$

И, учитывая (8.28), можно выразить через них и проектор на синглетное состояние

$$\hat{P}_0 = 1 - \hat{P}_1 = \frac{1}{4} - \hat{s}_1\hat{s}_2 \quad (8.32)$$

Если умножить (8.32) на  $-3$  и сложить с (8.31), получится

$$\hat{P}_1 - 3\hat{P}_0 = 4\hat{s}_1\hat{s}_2 \quad (8.33)$$

Из чего можно, наоборот, выразить спиновую конструкцию через проекторы

$$\hat{s}_1\hat{s}_2 = \frac{1}{4}\hat{P}_1 - \frac{3}{4}\hat{P}_0 \quad (8.34)$$

Рассмотрим, где это может пригодиться. Мы разбирали на лекции потенциал взаимодействия частиц, который записали как функцию от расстояния между ними, умноженную на конструкцию с произведением операторов их спинов:

$$u = u(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)(1 + \alpha\hat{s}_1\hat{s}_2) \quad (8.35)$$

Если написать в ней, согласно (8.28), 1 как  $\hat{P}_0 + \hat{P}_1$  и подставить выражение (8.34), можно записать весь потенциал в виде комбинации проекторов

$$u(|\vec{r}|) \left\{ \hat{P}_0 \left( 1 - \frac{3}{4} \alpha \right) + \hat{P}_1 \left( 1 + \frac{\alpha}{4} \right) \right\} \quad (8.36)$$

То есть, если пара частиц находится в состоянии с  $S = 0$ , синглетном, новый эффективный потенциал их взаимодействия будет  $u(|\vec{r}|) \left( 1 - \frac{3}{4} \alpha \right)$ . А если в состоянии с  $S = 1$ , триплетном, он окажется  $u(|\vec{r}|) \left( 1 + \frac{\alpha}{4} \right)$ .

Так что в этом случае стационарными состояниями для нашей системы будут именно состояния с определённым полным спином. При этом состояния с  $S = 0$  и 1 будут вести себя как частицы с немного разным потенциалом взаимодействия. То есть, если мы хотим исследовать базис из собственных векторов гамильтониана системы из двух частиц, содержащей потенциал (8.35), надо просто разделить весь базис на синглетные и триплетные. И для каждого из них будет уже обычная задача без зависимости потенциальной энергии от спина, потому что для каждого класса состояний остаётся просто число, умноженное на  $u(|\vec{r}|)$ .

Это число может быть интересным. Например, если  $\alpha = \frac{4}{3}$ , в состоянии с  $S = 0$  частицы не взаимодействуют друг с другом, ведут себя как свободные. А в состоянии с  $S = 1$  взаимодействовать будут, в скобке при  $\hat{P}_1$  окажется положительная константа, и новый эффективный потенциал у триплетных частиц будет потенциалом притяжения, если таковым был потенциал  $u$ , или отталкивания, если  $u$  был потенциалом отталкивания. То есть мы сразу начинаем понимать физику процесса, зависимость поведения системы двух частиц от их спинового состояния.

Формулы (8.32) и (8.30) очень важные и сильно пригодятся в следующем семестре при исследовании систем частиц со спином  $\frac{1}{2}$ . В тривиальном случае частиц со спином  $s = 0$  всегда полный спин  $S = 0$ , и нет смысла разбивать пространство состояний частиц на подпространства с определённым его значением. Чем больше спин, тем обширнее будет пространство состояний и тем сложнее технологически с ним будет работать. Поэтому спин  $s = \frac{1}{2}$  – самый простой из всех возможных нетривиальных случаев, когда мы изучаем, например, спиновую структуру состояний двух частиц одного определённого спина. Вместе с тем это очень важный пример, потому что многие реальные физические системы, которые нас интересуют, это системы частиц спина  $\frac{1}{2}$ : электронная оболочка атома, электронная оболочка молекулы, ядро как система нуклонов в нуклонной модели Гайзенберга – Иваненко, даже нуклон как система кварков и антикварков, то есть кварк-глюонная плазма. Правда, там примешиваются глюоны со спином  $s = 1$ , но, если выбирать именно кварковые степени свободы, будет как раз система частиц спина  $\frac{1}{2}$ .

И мы нашли уникальное свойство этих систем. Ни при каком другом ненулевом спине нельзя записать проекторы на состояние с определённым спином непосредственно через спиновые операторы самих частиц. Для более высоких спинов записать такой проектор вообще не так легко и в общем виде невозможно.

## Задача 2. Спин системы из трёх частиц спина

Рассмотрим систему из большего числа, например,  $N = 3$  частиц со спинами  $s_1 = s_2 = s_3 = \frac{1}{2}$ . Мы опять хотим построить оператор полного спина, который теперь будет

$$\hat{S} = \hat{s}_1 + \hat{s}_2 + \hat{s}_3 \quad (8.37)$$

Нам хочется построить состояние с определённым полным спином как с квантовым числом, чтобы было  $S(S + 1)$ . По правилу моментов  $S$  здесь может пробегать значения  $\frac{1}{2}$  и  $\frac{3}{2}$ .

$$\hat{S}^2 = \hat{s}_1^2 + \hat{s}_2^2 + \hat{s}_3^2 + 2\hat{s}_1\hat{s}_2 + 2\hat{s}_2\hat{s}_3 + 2\hat{s}_3\hat{s}_1 = \frac{3}{4} \cdot 3 + 2\hat{s}_1\hat{s}_2 + 2\hat{s}_2\hat{s}_3 + 2\hat{s}_3\hat{s}_1 \quad (8.38)$$

Если мы будем строить в этом случае проектор на состояние с определённым полным спином, нужно будет как-то разобраться с попарными спиновыми операторами. Каждый из них можно выразить через проекторы на состояние с определённым полным спином данной пары.

## Связь оператора перестановки частиц и квадрата оператора спина

Также ещё раз внимательно посмотрим на записанные базисы (8.16), (8.20), (8.22) и (8.24). Видно, что все триплетные состояния симметричны по отношению к перестановке первого и второго спинора, а синглетное антисимметрично. Введём в пространстве спиновых состояний оператор  $\hat{P}_{12}^{(S)}$ , который переставляет спиновые переменные первой и второй частицы. Подействовав на (8.16), (8.20), (8.22), он ничего не поменяет, а подействовав на (8.24), поменяет знак у состояния, потому что при перестановке первого и второго спинора это выражение переходит в минус себя.

Каждое из состояний (8.16), (8.20), (8.22) и (8.24) с определённым полным спином. Оператор  $\hat{P}_{12}^{(S)}$  действует на любое такое состояние как  $+1$  для  $S = 1$  и как  $-1$  для  $S = 0$ . Значит,  $\hat{P}_{12}^{(S)}$  и  $\hat{S}^2$  между собой связать явным образом. У оператора  $\hat{P}_{12}^{(S)}$  собственные значения для этих векторов  $1$  и  $-1$ , а у  $\hat{S}^2$  они  $2$  и  $0$ , они просто отличаются на единицу. То есть оператор перестановки спиновых переменных для частиц спина  $\frac{1}{2}$ , подставляя (8.30),

$$\hat{P}_{12}^{(S)} = \hat{S}^2 - 1 = \frac{1}{2} + 2\hat{s}_1\hat{s}_2 \quad (8.39)$$

Таким образом, оператор перестановки переменных в аргументе спиновых частей волновой функции тоже можно выразить через спиновые операторы частиц.



Полученные соотношения нам очень пригодятся в конкретных системах в следующем семестре.

### Задача 3. Статистика измерений спина для системы двух частиц под углом друг к другу

Это тоже задача из списка обязательных. Есть система из  $N = 2$  частиц спина  $s_1 = s_2 = \frac{1}{2}$ . Будем считать частицы различимыми, разбираться с требованиями неразличимости станем во втором семестре. Мы загнали эту систему в состояние, в котором обе частицы имеют определённые направления спинов:  $\vec{s}_1$  и  $\vec{s}_2$  направлены вдоль осей  $\vec{n}_1$  и  $\vec{n}_2$ , угол между которыми  $(\vec{n}_1, \vec{n}_2) = \vartheta$  известен.

Нужно посчитать вероятность  $\omega_0$  того, что полный спин данной системы равен нулю. То есть надо предсказать статистику измерений. Если мы сделаем прибор, который измеряет полный спин  $S$ , для частицы спина  $s = \frac{1}{2}$  он будет выдавать 0 или 1. Нужно узнать, с какой вероятностью он в заданном состоянии выдаст 0.

Эту задачу можно решать прямолинейно в любой удобной системе координат. Где-то в пространстве есть вектора  $\vec{n}_1$  и  $\vec{n}_2$ , ориентированные под углом  $\vartheta$  друг к другу. Введём систему координат, направив ось  $z$  вдоль вектора  $\vec{n}_1$ , а ось  $x$  так, чтобы  $\vec{n}_2$  лежал в плоскости  $zx$ . Ось  $y$  будет дополнять их до правой тройки (рис. 8.1).

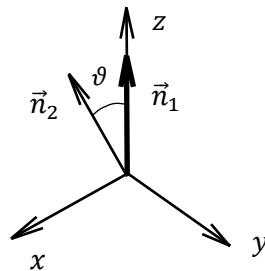


Рис. 8.1. Выбор удобного вектора  $\vec{n}$

С точки зрения этой системы координат первая частица находится в состоянии со спином, ориентированным по оси  $z$ . То есть её спиновое состояние описывается спинором

$$\chi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{8.40}$$

А спин второй частицы направлен вдоль оси  $\vec{n}_2$ , которая лежит в плоскости  $zx$  под углом  $\vartheta$  к оси  $z$ , то есть сферические углы вектора  $\vec{n}_2$  – это полярный  $\vartheta$  и азимутальный  $\varphi = 0$ . Поэтому спиновое состояние второй частицы описывает спинор, где в общем случае компоненты  $\cos \frac{\vartheta}{2}$  и  $\sin \frac{\vartheta}{2} e^{i\varphi}$ , а здесь

$$\chi_2 = \begin{pmatrix} \cos \frac{\vartheta}{2} \\ \sin \frac{\vartheta}{2} \end{pmatrix} \quad (8.41)$$

Можно построить факторизованный вектор состояния, который описывает общее спиновое состояние системы двух частиц  $X$ . Им будет упорядоченное произведение одночастичных спиноров:

$$X = \chi_1 \cdot \chi_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \frac{\vartheta}{2} \\ \sin \frac{\vartheta}{2} \end{pmatrix} \quad (8.42)$$

Чтобы выяснить статистику измерений квадрата полного спина, наблюдаемой  $\hat{S}^2$ , мы должны разложить это состояние. Можно традиционным способом, по состояниям с определённым полным спином, как

$$\cos \vartheta \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \sin \frac{\vartheta}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (8.43)$$

$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  – это вектор  $|1 + 1\rangle$  из нашего базиса состояний с определённым полным спином. А  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$  не является состоянием данного базиса, но его довольно легко построить. Состояния с проекцией 0, то есть  $|1 0\rangle$  и  $|0 0\rangle$ , как раз можно представить как комбинацию этой конструкции и такой же с переставленными спинорами. Для её получения запишем (8.43) как

$$\cos \frac{\vartheta}{2} |1 + 1\rangle + \sin \frac{\vartheta}{2} \cdot \frac{1}{2} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right\} \quad (8.44)$$

Первые два слагаемых в скобках – это  $\frac{1}{\sqrt{2}} |1 0\rangle$ , а вторые – это  $\frac{1}{\sqrt{2}} |0 0\rangle$ . То есть мы окончательно разложили наше состояние по базисным с определённым полным спином, из (8.44) получается

$$\cos \frac{\vartheta}{2} |1 + 1\rangle + \sin \frac{\vartheta}{2} \frac{1}{\sqrt{2}} |1 0\rangle + \sin \frac{\vartheta}{2} \frac{1}{\sqrt{2}} |0 0\rangle \quad (8.45)$$

Вероятность получить при измерении результат, отвечающий каждому из базисных состояний, это квадрат модуля соответствующего коэффициента разложения. Сумма квадратов модулей коэффициентов разложения  $\cos^2 \frac{\vartheta}{2} + \sin^2 \frac{\vartheta}{2} = 1$ . Искомая вероятность обнаружить при измерении спин  $S = 0$  – это квадрат модуля коэффициента при  $|0 0\rangle$ , потому что состояния  $|1 0\rangle$  и  $|1 + 1\rangle$  относятся к  $S = 1$ :

$$\omega_0 = \left( \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \frac{\vartheta}{2} \right)^2 = \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\vartheta}{2} = \frac{1}{4} (1 - \cos \vartheta) \quad (8.46)$$

Тогда  $\omega_1$  можно найти или как сумму квадратов коэффициентов при  $|1 0\rangle$  и  $|1 + 1\rangle$ , то есть из (8.45) как

$$\omega_1 = \cos^2 \frac{\vartheta}{2} + \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\vartheta}{2} \quad (8.47)$$

Или, поскольку спинов кроме  $S = 0$  и  $1$  быть не может, учитывая (8.46), как

$$\omega_1 = 1 - \omega_0 = \frac{3}{4} + \frac{1}{4} \cos \vartheta \quad (8.48)$$

То есть мы можем определять вероятность реализации значения  $\hat{S}^2$  для практически произвольного спинового состояния системы из двух частиц спина  $\frac{1}{2}$ , потому что в действительности эти вероятности будут зависеть только от угла между направлениями спинов.

Рассмотрим другой способ, который позволит получить тот же ответ, чтобы не заикливаться на прямолинейных путях. Поскольку других значений спина  $S$  кроме  $0$  и  $1$  нет, сумма вероятностей выпадения этих спинов, то есть  $\hat{S}^2 = 0$  и  $2$ ,

$$\omega_0 + \omega_1 = 1 \quad (8.49)$$

С другой стороны, если мы умножим данные вероятности на соответствующие значения  $S(S + 1)$ , по определению должны получить среднее значение оператора  $\hat{S}^2$  в нашем состоянии:

$$\omega_0 \cdot 0 + \omega_1 \cdot 2 = \langle \hat{S}^2 \rangle \quad (8.50)$$

Из (8.50) следует, что, расписывая через операторы спина частиц,

$$\omega_1 = \frac{1}{2} \langle \hat{S}^2 \rangle = \langle \hat{S}_1^2 + \hat{S}_2^2 + \vec{s}_1 \vec{s}_2 \rangle = \frac{3}{4} + \langle \vec{s}_1 \vec{s}_2 \rangle \quad (8.51)$$

Мы установили для  $s = \frac{1}{2}$ , что проецировать спины можно по геометрическим правилам. Поэтому среднее от скалярного произведения операторов спина можно посчитать как  $\frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \cos \vartheta$ , где  $\vartheta$  – угол между направлениями спинов, если усредняем по состояниям с определёнными направлениями спинов. То есть (8.51) переписется как

$$\frac{3}{4} + \frac{1}{4} \cos \vartheta \quad (8.52)$$

Получился тот же ответ, что и в предыдущем способе. Там он был получен как  $1 - \omega_0$ , а здесь гораздо быстрее было построить  $\omega_1$  и уже  $\omega_0$  найти как  $1 - \omega_1$ , получилось бы то же самое значение.

Когда мы работаем с операторами момента, их замечательные алгебраические свойства довольно часто позволяют действовать простыми методами в очень широком классе задач. Нужно научиться это видеть, чтобы быстро решать задачи, имеющие достаточно простой метод решения.

Пока мы всё время использовали полезные свойства спина  $s = \frac{1}{2}$ , но можно работать и с другими. Рассмотрим пример на это, но теперь будем не стремиться

рассказывать разные способы решения, а с самого начала действовать так, как кажется наиболее рациональным.

#### Задача 4. Среднее значение орбитального момента для частиц определённого спина

Возьмём частицу со спином  $s = \frac{3}{2}$ , хотя в реальном мире мы редко имеем дело с такими стабильными частицами, и посадим в центрально-симметричное поле в состояние с определённым орбитальным моментом  $l = 1$ .

Применим правило сложения моментов. Возьмём прямое произведение пространств состояний с моментом  $\frac{3}{2}$  и моментом 1 и разложим его в прямую сумму от разности до суммы с шагом через единицу:

$$\left(\frac{3}{2}\right) \otimes (1) = \left(\frac{1}{2}\right) \oplus \left(\frac{3}{2}\right) \oplus \left(\frac{5}{2}\right) \quad (8.53)$$

То есть полный момент количества движения  $j$  такой частицы в этом классе состояний может принимать значения  $\frac{1}{2}$ ,  $\frac{3}{2}$  и  $\frac{5}{2}$ . Удобнее всего работать с проекцией спина  $m_s = +\frac{5}{2}$ , потому что она максимальная. Но мы усложним себе задачу, рассмотрев состояние с полным моментом  $j = \frac{3}{2}$  и его проекцией  $m_j = +\frac{3}{2}$ . Этим мы чётко задаём состояние частицы со спином  $s = \frac{3}{2}$ , находящейся в центрально-симметричном поле в  $p$ -состоянии, как говорили в атомной физике.

Надо найти среднее значение оператора орбитального момента как вектора  $\langle \vec{l} \rangle$  в данном состоянии.

Правда, мы довольно быстро от вектора избавимся. В состоянии зафиксирована проекция полного момента на ось  $z$ , то есть в задаче аксиальная симметрия. Из соображений симметрии понятно, что направления, например, вдоль оси  $x$  и против неё по отношению к данному состоянию равноправны. Поэтому среднее значение  $x$ -проекции любого векторного оператора в нём должно равняться нулю. Так что  $\langle \hat{l}_x \rangle = 0$  и  $\langle \hat{l}_y \rangle = 0$ .

Тогда первым делом выделим направление вдоль оси  $z$ , и задача сведётся к вычислению среднего значения  $z$ -проекции орбитального момента:

$$\langle \vec{l} \rangle = \vec{e}_z \langle \hat{l}_z \rangle \quad (8.54)$$

Дальше надо максимально коротким путём разложить выбранное состояние по состояниям с определённым  $\hat{l}_z$ . Тогда мы будем знать вероятности выпадения возможных в нём значений  $\hat{l}_z$ . Какие  $\hat{l}_z$  могут получиться, мы пока не знаем. Все необходимые коэффициенты Клебша – Гордана будем вычислять вручную, а не брать из таблицы.

Согласно нашей схеме, проще всего начинать с состояния с максимальным моментом. Состояние с  $j = \frac{5}{2}$  и  $j_z = +\frac{5}{2}$  можно построить из состояний с определёнными  $l_z$  и  $s_z$  единственным образом, где  $l = 1$ ,  $m_l = +1$ ,  $s = \frac{3}{2}$  и  $m_s = +\frac{3}{2}$ , коэффициент Клебша – Гордана равен единице:

$$\left| \frac{5}{2} + \frac{5}{2} \right\rangle = |1 + 1\rangle \left| \frac{3}{2} + \frac{3}{2} \right\rangle \quad (8.55)$$

Дальше подействуем на правую часть (8.55) оператором  $\hat{j}_-$ . В общем случае, когда он действует на вектор  $|j + j\rangle$ , всегда вытаскивает  $\sqrt{2j}$ , здесь это  $\sqrt{5}$ . Для действия на левую часть (8.55) разобьём  $\hat{j}_-$  как

$$\hat{j}_- = \hat{l}_- + \hat{s}_- \quad (8.56)$$

$\hat{l}_-$  подействует на  $|1 + 1\rangle$  и выдаст  $\sqrt{2}$ , а  $\hat{s}_-$  подействует на  $\left| \frac{3}{2} + \frac{3}{2} \right\rangle$  и выдаст  $\sqrt{3}$ . Из (8.55) получится

$$\sqrt{5} \left| \frac{5}{2} + \frac{3}{2} \right\rangle = \sqrt{2} |1 0\rangle \left| \frac{3}{2} + \frac{3}{2} \right\rangle + |1 + 1\rangle \sqrt{3} \left| \frac{3}{2} + \frac{1}{2} \right\rangle \quad (8.57)$$

Разделив (8.57) на  $\sqrt{5}$ , получим выражение с коэффициентами Клебша – Гордана:

$$\left| \frac{5}{2} + \frac{3}{2} \right\rangle = \sqrt{\frac{2}{5}} |1 0\rangle \left| \frac{3}{2} + \frac{3}{2} \right\rangle + \sqrt{\frac{3}{5}} |1 + 1\rangle \left| \frac{3}{2} + \frac{1}{2} \right\rangle \quad (8.58)$$

Если бы мы указали в вопросе задачи этот вектор, уже могли бы посчитать среднее, потому что квадраты модулей коэффициентов  $\sqrt{\frac{2}{5}}$  и  $\sqrt{\frac{3}{5}}$  показывают, с какой вероятностью реализуется каждая из проекций каждого из составляющих моментов. Но нас интересует вектор  $\left| \frac{3}{2} + \frac{3}{2} \right\rangle$ .

Шаг по  $j$  мы делаем с помощью соотношения ортонормировки. В состоянии  $\left| \frac{3}{2} + \frac{3}{2} \right\rangle$  из-за того, что нужно будет брать ту же проекцию  $j_z = +\frac{3}{2}$ , что и для  $\left| \frac{5}{2} + \frac{3}{2} \right\rangle$ , будет либо  $m_l = 0, m_s = +\frac{3}{2}$ , либо  $m_l = +1, m_s = +\frac{1}{2}$ . То есть интересующее состояние всё равно будет линейной комбинацией тех же двух пар произведений векторов из (8.58):

$$\alpha |1 0\rangle \left| \frac{3}{2} + \frac{3}{2} \right\rangle + \beta |1 + 1\rangle \left| \frac{3}{2} + \frac{1}{2} \right\rangle \quad (8.59)$$

Ортогональность говорит, что

$$\alpha \sqrt{\frac{2}{5}} + \beta \sqrt{\frac{3}{5}} = 0, \quad (8.60)$$

а, умножая на общий  $\sqrt{5}$ ,

$$\alpha \sqrt{2} + \beta \sqrt{3} = 0 \quad (8.61)$$

и тогда

$$\beta = -\sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \alpha \quad (8.62)$$

Кроме того, нам известно, что

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \quad (8.63)$$

Мы всегда можем выбрать фазу одного коэффициента. Если выберем  $\alpha$  так, что он будет положительным вещественным числом,  $\beta$ , согласно уравнению связи (8.62), получится отрицательным вещественным числом, модули в (8.63) снимутся. Тогда, если подставить (8.62) в (8.63), будет

$$\alpha^2 + \frac{2}{3}\alpha^2 = 1 \quad (8.64)$$

То есть

$$\alpha = \sqrt{\frac{3}{5}} \quad (8.65)$$

$$\beta = -\sqrt{\frac{2}{5}} \quad (8.66)$$

Тогда интересующее состояние

$$\left| \frac{3}{2} + \frac{3}{2} \right\rangle = \sqrt{\frac{3}{5}} |1\ 0\rangle \left| \frac{3}{2} + \frac{3}{2} \right\rangle - \sqrt{\frac{2}{5}} |1\ 1\rangle \left| \frac{3}{2} + \frac{1}{2} \right\rangle \quad (8.67)$$

Из чего следует, что с вероятностью  $\frac{3}{5}$   $l_z = 0$ , это даст нулевой вклад в среднее. А с вероятностью  $\frac{2}{5}$   $l_z = +1$ . Поэтому

$$\langle l_z \rangle = +\frac{2}{5} \quad (8.68)$$

Тогда среднее по состоянию  $\left| \frac{3}{2} + \frac{3}{2} \right\rangle$  в векторной форме, среднее от векторного оператора в виде числового вектора по заданному состоянию

$$\left\langle \frac{3}{2} + \frac{3}{2} \left| \hat{l} \right| \frac{3}{2} + \frac{3}{2} \right\rangle = +\frac{2}{5} \vec{e}_z \quad (8.69)$$

Итак, мы достаточно подробно изучили применение правила сложения моментов в квантовой теории, принципов построения базисов в состоянии с определённым значением суммарного момента через состояния с определёнными значениями составляющих моментов.

На лекции мы начали разбор применения этого для связанной системы из двух частиц со спином спином, где гамильтониан зависит от спина. Когда мы рассмотрели на

семинаре, как в общем случае можно работать со спинорными операторами для системы из двух частиц спина  $s = \frac{1}{2}$ , не обращаясь к тому примеру, мы всё равно довольно сильно в нём продвинулись. Поэтому на следующей лекции, когда к нему вернёмся, фактически сразу начнём с наработанных сегодня идей и довольно быстро разберёмся с ним до конца.

## Семинар 9. Сложение моментов - 2

### Контрольный опрос

Данный контрольный опрос на обсуждение предыдущих тем.

1) Определите коэффициент Клебша – Гордана

$$C_{4+3}^{+2+1}(2,2) \quad (9.1)$$

2) Есть связанное состояние из двух частиц со спинами  $s_1 = \frac{1}{2}$  и  $s_2 = \frac{3}{2}$  с орбитальным моментом относительного движения  $l = 2$ . Какие значения может принимать квантовое число  $J$ , задающее суммарный момент количества движения этой системы, в системе центра масс? Это задача на сложение моментов.

3) Запишите проектор  $\hat{P}_{tr}$  на подпространство состояний с полным спином  $S = 1$  для системы двух частиц со спинами  $s_1 = s_2 = \frac{1}{2}$ . Состояния с  $S = 1$  в таком случае называют триплетными по спину данной системы, поэтому  $\hat{P}_{tr}$  – проектор на триплетное состояние. Имеется в виду проектор в пространстве спиновых состояний, про координатное движение мы ничего не говорим. Оператор можно писать в любой удобной форме, например, через проекторы на базисные вектора в этом подпространстве или непосредственно через спиновые операторы.

4) Данный вопрос уже требует вычислений и в некотором смысле является продолжением вопроса 3). Для системы двух частиц спина  $s_1 = s_2 = \frac{1}{2}$  определили спиновую наблюдаемую непосредственно через спины первой и второй частиц:

$$\hat{F} \equiv 1 + \alpha \hat{s}_1 \hat{s}_2, \quad (9.2)$$

$\alpha$  – некая константа. Данную систему поместили в состояние со спиновой частью волновой функции, где спин одной частицы по оси  $z$ , а другой против:

$$X(s_1 s_2) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (9.3)$$

Чему равно среднее значение наблюдаемой  $F$  в этом состоянии,  $\langle F \rangle_X$ ?

### Ответы на контрольный опрос

1) С одной стороны, при сложении двух моментов мы всегда знаем единичный коэффициент Клебша – Гордана для максимальной проекции максимального момента. Поэтому, если возьмём состояние с полным моментом  $J = j_1 + j_2$  и проекцией  $M_J = +j_1 + j_2$ , будет

$$|j_1 + j_2, +j_1 + j_2\rangle = |j_1 + j_1\rangle |j_2 + j_2\rangle \quad (9.4)$$

Подействует на (9.4) оператором  $\hat{J}_-$ . Слева получится произведение  $\sqrt{2j}$  на состояние с тем же полным моментом, но проекцией на единицу меньше, как в (9.1). А справа, когда мы разобьём  $\hat{J}_-$  на  $\hat{J}_{1-}$  и  $\hat{J}_{2-}$ , получатся две подобные конструкции:

$$\sqrt{2(j_1 + j_2)} |j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle =$$



$$= \sqrt{2(j_1)}|j_1 + j_2 - 1\rangle|j_2 + j_2\rangle + \sqrt{2(j_2)}|j_1 + j_1\rangle|j_2 + j_2 - 1\rangle \quad (9.5)$$

Из (9.5) следует, что, например, коэффициент, где в верхних индексах стоят вторые части векторов второго слагаемого, будет отношением коэффициента перед ним к коэффициенту слева:

$$C_{j_1+j_2, j_1+j_2-1}^{j_1, j_2-1} = \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} \quad (9.6)$$

Если подставим в него  $j_1 = j_2 = 2$ , получится  $\frac{1}{\sqrt{2}}$ . Можно было проводить эту процедуру сразу для частного случая (9.1).

С другой стороны, мы сильно упростили вопрос, задав одинаковые складываемые  $j_1$  и  $j_2$ . Поэтому всё симметрично, и соответствующее (9.1) состояние с проекцией  $M_J = +3$  должно раскладываться на состояния с проекциями  $+2$  у одного момента и  $+1$  у другого, причём с равными вкладами. То есть оно записывается как суперпозиция двух ортогональных состояний с равными вкладами. Поскольку сумма квадратов модулей коэффициентов всегда должна быть единицей, квадраты соответствующих коэффициентов равны  $\frac{1}{2}$ , а они сами  $\frac{1}{\sqrt{2}}$ . Это можно понять из структуры выражения (9.1) даже без явной формулы (9.6), которую мы уже выводили.

2) Есть удобная форма, алгебраическое выполнение прямого перемножения пространств

$$\left(\frac{1}{2}\right) \otimes \left(\frac{3}{2}\right) \otimes (2) \quad (9.7)$$

Мы знаем, как для перемножения двух пространств произвести разложение в прямую сумму соответствующих пространств, а потом применяем это по индукции. Для первых двух будет сумма от разности до суммы с шагом через единицу:

$$\left(\frac{1}{2}\right) \otimes \left(\frac{3}{2}\right) = (1) \oplus (2) \quad (9.8)$$

Аналогично,  $(2) \otimes (2)$  даёт полные моменты  $J = 0, 1, 2, 3, 4$ , и все возможные значения  $(1) \otimes (2)$ , от 1 до 3, уже будут лежать внутри этого диапазона, так что итоговый ответ будет тот же.

Когда мы разбирали похожий пример на лекции, дополнительно посмотрели, сколько в прямой сумме будет пространств с каждым значением  $J$ , и таким образом поняли, сколько базисных элементов в полном базисе будет принадлежать каждому  $J$ .

3) Проектор на триплетное состояние можно было писать в любой удобной форме, поэтому был довольно большой набор возможностей. Первая была прямолинейной. Поскольку триплетные состояния – это состояния с полным спином  $S = 1$ , который способен иметь проекции  $+1, 0, -1$ , можно просто написать сумму проекторов на соответствующие три состояния:

$$\hat{P}_{tr} = |1 + 1\rangle\langle 1 + 1| + |1 0\rangle\langle 1 0| + |1 - 1\rangle\langle 1 - 1|, \quad (9.9)$$

это будет правильным ответом.

С другой стороны, вспомним, как мы делали на лекции. Оператор  $\hat{S}^2$  имеет собственное значение 2 для состояния со спином  $S = 1$  и собственное значение 0 для состояния с  $S = 0$ , а проектор на триплетные состояния должен иметь собственное значение 1 для состояния с  $S = 1$  и 0 для  $S = 0$ . Так что можно записать

$$\hat{P}_{tr} = \frac{1}{2}\hat{S}^2 = \frac{1}{2}(\hat{s}_1 + \hat{s}_2)^2 \quad (9.10)$$

Это тоже правильные формы записи ответа на заданный вопрос.

Также можно раскрыть квадрат в (9.10). Под ним стоят коммутирующие между собой операторы, так как относятся к разным частицам, поэтому можно использовать бинომ Ньютона. В пространстве состояний с определённым спином  $s = \frac{1}{2}$  квадрат спинового оператора – это всегда произведение  $\frac{3}{4}$  на единичный оператор. Поэтому из (9.10) получится

$$\frac{3}{4} + \hat{s}_1\hat{s}_2 \quad (9.11)$$

Проекторы на триплетное и синглетное состояния в сумме должны давать единицу, так как других полных спинов кроме 0 и 1 у системы двух частиц спина  $\frac{1}{2}$  быть не может. Поэтому проектор на состояние с  $S = 0$  можно написать через спиновые операторы либо прямо, как проектор на единственное синглетное состояние, либо как разность единицы и (9.11):

$$\hat{P}_s = 1 - \hat{P}_1 = |0 0\rangle\langle 0 0| = \frac{1}{4} - \hat{s}_1\hat{s}_2 \quad (9.12)$$

4) Приём из прошлого вопроса открывает прямой путь к ответу на этот. Мы уже увидели, что

$$\hat{S}^2 = (\hat{s}_1 + \hat{s}_2)^2 = \frac{3}{2} + 2\hat{s}_1\hat{s}_2 \quad (9.13)$$

Поэтому если в операторе (9.2) перепишем  $\alpha$  как  $\frac{\alpha}{2} \cdot 2$ , будет

$$\hat{F} \equiv 1 + \frac{\alpha}{2} \cdot 2\hat{s}_1\hat{s}_2 = 1 + \frac{\alpha}{2} \left[ \hat{S}^2 - \frac{3}{2} \right] \quad (9.14)$$

А комбинация столбцов в (9.3) – это комбинация состояний с нулевой проекцией полного спина с полным спином  $S = 0$  или 1. Так что (9.3) можно написать как

$$\frac{1}{\sqrt{2}}|0 0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right] + \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right] \quad (9.15)$$

То есть данное состояние с вероятностью 50% синглетное и с вероятностью 50% триплетное. Поэтому среднее значение наблюдаемой  $F$  в нём будет суммой произведения

$\frac{1}{2}$  на значение величины (9.14), когда  $S = 1$ , то есть когда  $\hat{S}^2$  имеет собственное значение 2, и произведения  $\frac{1}{2}$  на значение (9.14), когда  $S = 0$ :

$$\langle F \rangle = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\alpha}{4} \right) + \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{3\alpha}{4} \right) = 1 - \frac{\alpha}{4} \quad (9.16)$$

В основе получения ответа на данный вопрос лежит два фактора: понимание, что задано состояние (9.3), в котором с вероятностью 50% полный спин 1 или 0, и что наблюдаемую (9.2) можно записать так, что её собственное значение определим по значению полного спина. Она имеет определённые значения именно в состояниях с определённым полным спином из-за простой линейной связи (9.14) операторов  $\hat{F}$  и  $\hat{S}^2$ , остальное просто какие-то константы. Но пока мы эти две вещи не поняли, ответ не ищется, поэтому данный вопрос имеет статус сложного. Каждый контрольный опрос выстроен примерно так, что два вопроса в нём простые, один средний и один сложный.

Сделаем небольшой комментарий по поводу последнего вопроса, о котором мы уже говорили на лекции. Мы решали задачу про нерелятивистский позитроний в приближении, где взаимодействие чисто кулоновское, которое не зависит от спинов. Поэтому ситуация была достаточно простой. Но если мы заглянем в справочные данные по позитронию, поймём, что это предположение неверное хотя бы потому, что его время жизни по отношению к аннигиляции в состояниях с полным спином 0 и 1 различается примерно в 1000 раз. То есть в полной электромагнитной теории зависимость от ориентации спинов явно присутствует. Но это существенно в том случае, когда мы изучаем что-то на временах, много больших времени жизни, которое у пары позитрония с полным спином 0 примерно 0,12 нсек, а у ортопозитрония с полным спином 1 в основном состоянии, где  $n = 1$ ,  $l = 0$ , для которого мы строили соответствующие волновые функции, больше 100 нсек. Если же мы изучаем позитроний на временах, много меньших 0,1 нсек, можно пренебрегать этими эффектами и считать данные состояния почти стационарными.

Чтобы понять, как действовать, когда есть явная зависимость от спинов, рассмотрим следующую задачу.

### Задача 1. Спектр для гамильтониана с взаимодействием, зависящим от спинов

Возьмём гамильтониан такого же вида, какой писали для позитрония, и умножим его на конструкцию  $(1 + \alpha \hat{S}_1 \hat{S}_2)$ , сказав, что подобран параметр  $\alpha$ , который учитывает зависимость от спинов:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} - \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} (1 + \alpha \hat{S}_1 \hat{S}_2) \quad (9.17)$$

Если есть две частицы спина  $s = \frac{1}{2}$ , и мы хотим учесть зависимость взаимодействия от спинов, нужно добавить в гамильтониан (9.17) какие-то слагаемые,

зависящие от спинов. Но при этом гамильтониан должен остаться скаляром, если это замкнутая система, и нет внешних полей, которые могли бы задать внешнее выделенное направление.

Из операторов  $\hat{s}_1$  и  $\hat{s}_2$  можно образовать скаляры  $\hat{s}_1^2$  и  $\hat{s}_2^2$ , но это не интересно, так как они кратны единичному оператору и их можно загнать в 1 в скобке в (9.17), а также скалярное произведение  $\hat{s}_1\hat{s}_2$ . Так что реально (9.17) – практически общий вариант для нерелятивистского приближения. Если вспомним атомную физику, могут добавиться ещё спин-орбитальные взаимодействия, то есть возникнуть скаляры, перепутывающие вращения в орбитальном и спиновом пространствах, вроде скалярного произведения  $\vec{l}\vec{s}$ . А (9.17) – почти общий гамильтониан в случае, если перепутывания взаимовлияния координатного и спинового движений не происходит.

Для электрона с позитроном это наверняка не так. Орбитальное движение любого заряда создаёт магнитное поле, а поскольку у электрона и позитрона есть не только заряды, но и собственные магнитные моменты, они будут с этим полем взаимодействовать. Так феноменологически объясняли появление спин-орбитального взаимодействия в атомной физике. Здесь оно тоже будет работать, если это позитроний.

Но вернёмся к гамильтониану (9.17) и рассмотрим, как зависит спектр от константы  $\alpha$ .  $(1 + \alpha\hat{s}_1\hat{s}_2)$  можно переписать, согласно (9.14), как  $1 + \frac{\alpha}{2}[\hat{S}^2 - \frac{3}{2}]$ . Тогда при полном спине  $S = 1$   $\hat{S}^2 = 2$ , и это выражение даст  $1 + \frac{\alpha}{4}$ , а при  $S = 0$  даст  $1 - \frac{3\alpha}{4}$ . Получается, что зависимость от  $\alpha$  вполне критическая. Например, если  $\alpha > \frac{4}{3}$ ,  $1 - \frac{3\alpha}{4} < 0$ , то есть при таком  $\alpha$  в синглетном состоянии притяжение в (9.17) заменяется на отталкивание, и связанных синглетных состояний у данной системы вообще не будет, только непрерывный спектр.

Видно, что даже знак взаимодействия при наличии чувствительности к взаимной ориентации спинов может меняться в зависимости от спинового состояния. Поэтому для таких гамильтонианов нужно независимо изучать спектр для синглетных и триплетных состояний, а потом при необходимости сравнивать между собой, если что-то спросили про весь спектр. Это очень характерный пример, который часто возникает в нерелятивистских задачах, где мы как-то учитываем дополнительное, например, магнитное взаимодействие, или любые корреляции между спинами в состояниях.

Данный пример и вопросы контрольного вопроса в очередной раз продемонстрировали полезность умения работать алгебраически со спиновыми операторами. Задач, где оно часто требуется, в практических приложениях, а также в обязательных задачах или на контрольных работах, возникает много.

Рассмотрим ещё пару примеров на демонстрацию того, как мы должны работать. Среди обязательных задач на ту же алгебру есть довольно стандартная, которая много где появляется.

## Задача 2. Вероятности реализации значений проекции спина в системе двух частиц

Есть система двух частиц спина  $s_1 = s_2 = \frac{1}{2}$ . Рассматривается её состояние  $|x\rangle$ , которое определено как

$$|x\rangle \equiv e^{i\varphi\hat{S}_x} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (9.18)$$

где, как обычно, оператор полного спина системы определён как сумма спиновых операторов частиц

$$\hat{S} \equiv \hat{S}_1 + \hat{S}_2 \quad (9.19)$$

Оператор  $\hat{S}_x$  эрмитов, поэтому  $e^{i\varphi\hat{S}_x}$  унитарен. Более того, в спиновом пространстве данной системы это оператор поворота на угол  $\varphi$  вокруг оси  $x$ , так как  $\hat{S}_x$  является генератором именно такого поворота. И он действует на спиновую конструкцию.

Нужно указать вероятности реализации возможных значений наблюдаемой  $S_z$  в данном состоянии, распределение вероятностей  $\omega(S_z)$ .

Видно, что полный спин в состоянии (9.18)  $S = 1$ . Полный спин – это  $S(S + 1)$ , собственное значение скалярного оператора  $\hat{S}^2$ , так что он при вращениях меняться не будет. Поэтому, как всегда при  $S = 1$ , проекция принимает значения  $S_z = +1, 0, -1$ . Им будут отвечать три вероятности, которые обозначим  $\omega_+, \omega_0, \omega_-$ . Их сумма должна быть

$$\omega_+ + \omega_0 + \omega_- = 1 \quad (9.20)$$

Мы свернули на стандартный путь – составление системы уравнений относительно трёх интересующих нас вероятностей. Первое уже выписано, а два других получатся, если посчитаем среднее значение от первой и второй степеней  $S_z$ . Мы знаем, что

$$\omega_+(+1) + \omega_0 \cdot 0 + \omega_-(-1) = \omega_+ - \omega_- = \langle x | S_z | x \rangle \quad (9.21)$$

Подставим в (9.21) определение  $|x\rangle$  (9.18). Состояние  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ , которое, хоть и записано через спиноры, является состоянием с определённым полным спином  $S = 1$  и его проекцией на ось  $z$ ,  $S_z = 1, |1 + 1\rangle$ . Это очень удобно, потому что мы можем переписать правую часть (9.21) как среднее по состоянию  $|1 + 1\rangle$  от преобразованного оператора  $\hat{S}_z$ . Но, поскольку у него не совсем правильно, как обычно при преобразовании поворота, при действии направо получится  $i\varphi\hat{S}_x$ , а при действии налево  $-i\varphi\hat{S}_x$ , в действительности нужно будет смотреть преобразование наблюдаемой  $\hat{S}_z$  при повороте на угол  $\varphi$  в отрицательном направлении, по часовой стрелке, вокруг оси  $x$ . Проекция на ось  $x$  будет 0, на ось  $z$  будет  $\hat{S}_z \cos \varphi$ , а на ось  $y$  будет  $S_z \sin \varphi$  (рис. 9.1).

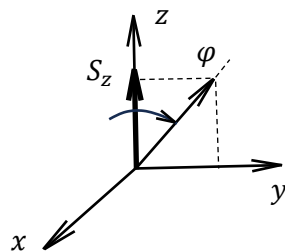


Рис. 9.1. Поворот вектора спина на угол  $\varphi$  вокруг оси  $x$  в отрицательном направлении

Можно и честно написать выражение  $e^{-i\varphi\hat{S}_x}\hat{S}_ze^{i\varphi\hat{S}_x}$  и воспользоваться формулой

$$e^A\hat{B}e^{-A} = \hat{B} + \frac{1}{1!}[\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2}[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \dots, \quad (9.22)$$

где в роли  $A$  выступит  $-i\varphi\hat{S}_x$ , а в роли  $\hat{B}$  будет  $\hat{S}_z$ . Получится

$$e^{-i\varphi\hat{S}_x}\hat{S}_ze^{i\varphi\hat{S}_x} = \hat{S}_z + [-i\varphi\hat{S}_x, \hat{S}_z] \quad (9.23)$$

Из второго слагаемого можно вынести  $-i\varphi$ , коммутатор  $[\hat{S}_x, \hat{S}_z] = -\hat{S}_y$ , т. к.  $\hat{S}_x, \hat{S}_z, \hat{S}_y$  левая тройка, поэтому (9.23) равно

$$\hat{S}_z - \varphi\hat{S}_y + \dots \quad (9.24)$$

Можно убедиться, что следующее слагаемое, получающееся из двойного коммутатора с двумя  $\hat{S}_z$ ,  $-\frac{\varphi^2}{2}\hat{S}_z$ . Но мы и так догадываемся, что, так как это преобразование поворота, там должна быть комбинация  $\cos \varphi$  и  $\sin \varphi$ . Мы видим, что  $\cos \varphi$  в (9.23) – это первое слагаемое разложения  $\cos \varphi$ , а  $-\varphi\hat{S}_y$  – первое слагаемое разложения  $-\sin \varphi$ .

Поэтому понимаем, что из (9.21) получится

$$\langle 1 + 1 | \hat{S}_z \cos \varphi - \hat{S}_y \sin \varphi | 1 + 1 \rangle \quad (9.25)$$

Среднее от  $\hat{S}_z$  в состоянии (9.18) с  $\hat{S}_z = +1$  равно  $+1$ , среднее от  $\hat{S}_y$  это  $0$  просто из симметрии нашего состояния с определённым направлением спина по оси  $z$ . То есть (9.22) равно  $\cos \varphi$ .

Аналогично,

$$\omega_+(+1)^2 + \omega_0 \cdot 0^2 + \omega_-(-1)^2 = \omega_+ + \omega_- = \langle x | \hat{S}_z^2 | x \rangle \quad (9.26)$$

Можно для каждого  $\hat{S}_z$  записать конструкцию  $\hat{S}_z \cos \varphi - \hat{S}_y \sin \varphi$  и возвести в квадрат. В результате будет среднее от  $\hat{S}_z^2 \cos^2 \varphi$ , которое выдаст  $\cos^2 \varphi$ , и среднее от  $\hat{S}_y^2 \sin^2 \varphi$ , которое выдаст  $\sin^2 \varphi$  на  $\frac{1}{2}$ . Ведь среднее от  $\hat{S}_y^2$  в состоянии со спином, ориентированным вдоль оси  $z$ , аксиально симметричном относительно вращений вокруг неё в спиновом пространстве, всегда  $\frac{1}{2}$  от среднего от  $\hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2$  то есть  $\frac{1}{2}$  от  $\hat{S}^2 - \hat{S}_z^2$ :

$$\langle \hat{S}_y^2 \rangle = \frac{1}{2} \langle \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 \rangle = \frac{1}{2} \langle \hat{S}^2 - \hat{S}_z^2 \rangle \quad (9.27)$$

Собственное значение оператора  $\hat{S}^2$  для  $S = 1$  равно 2, среднее значение от  $\hat{S}_z^2$  равно  $1, \frac{1}{2}(2 - 1) = \frac{1}{2}$ . А где будут  $-\sin \varphi \cos \varphi$  на  $\hat{S}_z \hat{S}_y$  и  $\hat{S}_y \hat{S}_z$ , средние будут давать нули из-за того, что  $\hat{S}_z$  – это оператор, для которого в обкладках (9.22) стоят его собственные вектора, и он сразу превращается в число. А среднее от  $\hat{S}_y$ , как мы поняли, 0.

Поэтому из (9.26) получится

$$\cos^2 \varphi + \sin^2 \varphi \cdot \frac{1}{2} = \frac{1}{2}(1 + \cos^2 \varphi) \quad (9.28)$$

Итак, мы получили систему из трёх уравнений: (9.20),

$$\omega_+ - \omega_- = \cos \varphi \quad (9.29)$$

$$\omega_+ - \omega_- = \frac{1}{2}(1 + \cos^2 \varphi) \quad (9.30)$$

Они дают довольно простой ответ. Например, для получения  $\omega_+$  нужно сложить (9.29) и (9.30) и поделить пополам. Будет

$$\omega_+ = \frac{1}{4}(1 + \cos^2 \varphi + 2 \cos \varphi) = \frac{1}{4}(1 + \cos \varphi)^2 = \cos^4 \left(\frac{\varphi}{2}\right) \quad (9.31)$$

А чтобы получить  $\omega_-$ , нужно из (9.30) вычесть (9.29). Будет

$$\omega_- = \frac{1}{4}(1 + \cos^2 \varphi - 2 \cos \varphi) = \frac{1}{4}(1 - \cos \varphi)^2 = \sin^4 \left(\frac{\varphi}{2}\right) \quad (9.32)$$

Тогда  $\omega_0$ , учитывая (9.20) и подставляя первые формы записи  $\omega_+$  и  $\omega_-$  из (9.31), будет

$$\omega_0 = 1 - \frac{1}{2}(1 + \cos^2 \varphi) = \frac{1}{2}(1 - \cos^2 \varphi) = \frac{1}{2} \sin^2 \varphi \quad (9.33)$$

Итак, мы посчитали все три искомые вероятности и компактно выразили их через  $\varphi$ . Если написать (9.33) через  $\frac{\varphi}{2}$ , мы сразу увидим, что их сумма равна единице, так как в (9.33) тоже образуется полный квадрат, и будет  $\left(\sin^2 \frac{\varphi}{2} + \cos^2 \frac{\varphi}{2}\right)^2 = 1$ .

### Задача 3. Матрицы плотности частиц в смешанном состоянии

Мы в основном работаем с чистыми состояниями, но данная задача из списка обязательных напомнит, как описываются и откуда берутся смешанные. У нас всё та же система двух частиц со спинами  $s_1 = s_2 = \frac{1}{2}$  – простейший нетривиальный случай сложения спинов. Нетривиальный – потому что спины ненулевые, с  $s = 0$  всё совсем просто, простейший – потому что это самые маленькие ненулевые значения.

Запишем некое явно выданное чистое состояние этой системы как

$$|\phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}[|\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\downarrow\rangle] \quad (9.34)$$

Надо построить матрицы плотности, описывающие состояния первой и второй частиц по отдельности,  $\hat{\rho}_{1,2}$ .

Это сразу напоминает нам о процедуре частичного взятия следа, рассказанной на лекции. Там мы смотрим, что будет, когда проводим измерения какой-то наблюдаемой, связанной со спином  $s_1$ , у системы, находящейся в состоянии (9.34). Поскольку наблюдаемая, которую мы измеряем, ничего не знает про  $s_2$ , то для описания корректной статистики её измерений нужно усреднить по возможным значениям второго спина. Как мы обсуждали в общей теории, эта операция и производится с помощью процедуры частичного взятия следа.

Например, чтобы построить  $\hat{\rho}_1$ , надо взять проектор на наше чистое состояние и произвести процедуру частичного взятия следа, то есть вычислить след по матрице в форме проектора, описывающей состояние второй частицы:

$$\hat{\rho}_1 = Tr\{|\phi\rangle\langle\phi|\} \quad (9.35)$$

Ещё раз проведём и осмыслим эту процедуру.

Здесь есть два важных момента. Во-первых, мы впервые воспользовались формой записи вектора состояния системы из двух частиц спина  $\frac{1}{2}$  со стрелками. Как и в других разделах физики микромира, мы всегда считаем выделенным направлением направление оси  $z$ , так что когда рисуем стрелку вверх, соответствующая частица имеет спин, ориентированный по данной оси, а когда стрелку вниз – против оси. Поэтому, если записать (9.34), как раньше, на языке спинорных конструкций,  $\uparrow\uparrow$  будет обозначать, что два спинора, описывающие состояния первой и второй частиц, это  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  и  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ . Для  $\uparrow\downarrow$  для первой частицы, на первом месте спинор  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ , а для второй, на втором  $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ . А для  $\downarrow\downarrow$  спинорная конструкция  $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ . Поэтому из (9.34) получится

$$|\phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \left[ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right] \quad (9.36)$$

Запишем проектор (9.35) в форме (9.36). Два множителя  $\frac{1}{\sqrt{3}}$ , перемножившись, выдадут  $\frac{1}{3}$ . В фигурных скобках (9.35) нужно перемножить конструкцию из скобок (9.36) на сопряжённую к ней. При сопряжении каждый из спиноров превращается в эрмитово сопряжённый, то есть после транспонирования становится строкой. Формально нужно произвести ещё комплексное сопряжение, но тут оно ничего не изменит, потому что все компоненты вещественны. Так что будет

$$|\phi\rangle\langle\phi| = \frac{1}{3} \left[ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right] \cdot \left[ (1 \ 0)(1 \ 0) + (1 \ 0)(0 \ 1) - (0 \ 1)(0 \ 1) \right] \quad (9.37)$$

Раскроем скобки. Каждую спинорную конструкцию, относящуюся к первой частице, то есть столбик, умножаем на строчку, относящуюся ко второй. По правилу матричного произведения, умножая столбец на строку, мы получим матрицу  $2 \times 2$ . Так и



должно быть, это матрицы в пространстве спинорных состояний. Из (9.37) получится 9 разных произведений, где во всех одна компонента равняется единице, а остальные нулю. Например, для перемножения  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  на  $(1 \ 0)(1 \ 0)$  мы сначала смотрим только на то, что стоит на первом месте,  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} (1 \ 0)$ . Перемножая их, получаем матрицу  $2 \times 2$ . Для получения верхнего левого элемента умножаем первую строку столбца на первый столбец строки, выходит 1, на остальных местах аналогично получаются нули. В итоге будет:

$$\begin{aligned} \frac{1}{3} [ & \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \\ & + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \\ & + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} ] \end{aligned} \quad (9.38)$$

Матричное перемножение очень просто запрограммировать, поэтому такие конструкции лучше считать на компьютере. Но мы продолжим вручную и будем заботиться об оптимальности действий. Все матрицы складываются поэлементно, но они перемножаются с разными конструкциями. Поэтому удобно выбирать суммы, где одна из матриц одинакова. Например, у первого, второго, четвертого и пятого слагаемых в (9.38) одинакова первая матрица. Вынеся её, сложим поэлементно четыре, на которые она умножается и у которых все единицы на разных местах. Аналогично сделаем для третьей и шестой матриц, седьмой и восьмой, и допишем оставшуюся девятую. Из (9.38) получится

$$|\phi\rangle\langle\phi| = \frac{1}{3} \left\{ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right\} \quad (9.39)$$

Можно преобразовывать и дальше, но (9.39) уже достаточно компактно. Тем более там стоят четыре конструкции, у которых в первой матрице на разных четырёх местах единицы. Если нас интересует, как описывать измерение наблюдаемых, связанных только со спином первой частицы, статистику, мы должны считать её состояние смешанным и описывать матрицей плотности, которая получается операцией частичного взятия следа чистого состояния (9.36). То есть заменить каждую вторую матрицу на её след. Каждая получившаяся после этого матрица даёт информацию о своём матричном элементе, и это легко собрать в одну матрицу:

$$\hat{\rho}_1 = Tr_2(|\phi\rangle\langle\phi|) = \frac{1}{3} \cdot \left\{ \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right\} = \begin{pmatrix} \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} & \frac{1}{3} \end{pmatrix} \quad (9.40)$$

Данная матрица эрмитова, положительно определена, так как диагональные элементы положительны, как и детерминант, то есть все угловые миноры. Кроме того,

мы говорили, что спиновые матрицы плотности для частиц спина  $\frac{1}{2}$  могут быть записаны через вектор поляризации. То есть можно написать

$$\hat{\rho}_1 = \frac{1}{2}(\hat{I}_2 + \vec{\xi} \hat{\sigma}), \quad (9.41)$$

где  $\hat{\sigma}$  – матрицы Паули.

При  $\hat{I}_2$ , как обычно, будет  $\frac{1}{2}$ . Чтобы увеличить  $\frac{1}{2}$  до  $\frac{2}{3}$  на главной диагонали в (9.40), надо добавить  $\frac{1}{6}$ , а чтобы понизить до  $\frac{1}{3}$ ,  $-\frac{1}{6}$ . То есть взять матрицу  $\hat{\sigma}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ . А чтобы получить числа на побочной диагонали, надо взять матрицу  $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \hat{\sigma}_1$ . Поэтому, с учётом коэффициента  $\frac{1}{2}$  перед скобкой, из (9.40) будет

$$\frac{1}{2} \left[ \hat{I}_2 + \frac{1}{3} \hat{\sigma}_3 - \frac{2}{3} \hat{\sigma}_1 \right], \quad (9.42)$$

Сравнивая (9.42) с (9.41), получим, что вектор поляризации для этого смешанного состояния

$$\vec{\xi} = -\frac{2}{3} \vec{e}_1 + \frac{1}{3} \vec{e}_3, \quad (9.43)$$

$\vec{e}_1$  и  $\vec{e}_3$  – базисные орты.

Модуль этого вектора меньше единицы, значит, это по-настоящему смешанное состояние. Как мы помним, при записи в форме (9.41) можно узнать чистые состояния по тому, что у них  $|\xi| = 1$ . Данный факт можно было проверить и возведя матрицу (9.40) в квадрат. Перемножив её саму на себя по правилу матричного умножения, мы увидим, что её квадрат не равен ей самой, то есть это не чистое состояние.

Полезно самостоятельно посчитать  $\hat{\rho}_2$ . Самая длинная операция, построение проектора  $|\phi\rangle\langle\phi|$ , уже выполнена, нужно только вычислить его частичный след по первым состояниям от того же проектора,

$$\hat{\rho}_2 = Tr_1(|\phi\rangle\langle\phi|) \quad (9.44)$$

На следующих занятиях мы разберём приближённые методы, оставшуюся тему по программе семестра. А на последних лекциях и семинарах, уже на базе аппарата, с которым познакомились, ещё раз вернёмся к первоосновам. И немного поговорим о таких вещах как неравенство Белла или о вещах, связанных с тем, как мы экспериментально пытаемся доказать справедливость парадигмы квантовой теории. То есть о том, что переход на вероятностный язык описания не наша прихоть, а следствие реальности, которую мы видим в этом мире. И тогда подобные технические приёмы очень пригодятся.

## Семинар 10. Метод ВКБ

Данный семинар будет посвящён теме квазиклассики, то есть в основном методу ВКБ.

### Контрольный опрос

1) Для любого приближённого метода один из главных вопросов – когда им можно пользоваться. Запишите в любой удобной форме условие применимости метода ВКБ в стационарных задачах. Нестационарные, теорию переходов пока не трогаем.

2) С помощью принципа квантования Бора – Зоммерфельда найдите высоколежащие ( $n \gg 1$ ) уровни энергии для одномерного ящика длины  $L$ , в котором свободно бегает точечная частица массой  $m$  (рис. 10.1). Мы неоднократно вспоминали точный спектр значений энергии данной системы и знаем, что должно получиться. Финитную область движения частицы ограничивают две непроницаемые стенки бесконечной высоты.

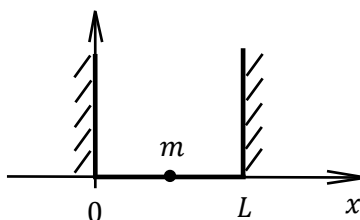


Рис. 10.1. Частица в одномерном ящике длины  $L$

3) Оцените число дискретных уровней энергии частицы массы  $m$  в потенциальном поле, где потенциальная энергия

$$u(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq L \\ 200 \frac{\pi^2 \hbar^2}{mL^2}, & x < 0, x > L \end{cases} \quad (10.1)$$

Здесь тоже прямоугольная яма, но стенки конечной высоты  $200 \frac{\pi^2 \hbar^2}{mL^2}$ , иначе будет бесконечное число дискретных уровней (рис. 10.2).

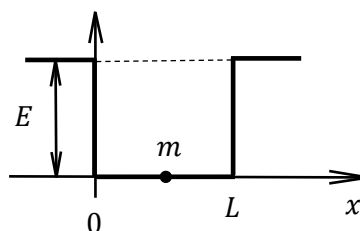


Рис. 10.2. Частица в прямоугольной яме длины  $L$

4) Оцените для частицы с массой  $m$  и энергией

$$E = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \quad (10.2)$$

значение коэффициента прохождения  $T(E)$  потенциального барьера

$$u(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, x > a \\ 800 \frac{\hbar^2}{ma^2} \left(1 - \frac{x}{a}\right), & 0 \leq x \leq L \end{cases} \quad (10.3)$$

Для наглядности он нарисован на рис. 10.3. При  $x = 0$  происходит скачок от 0 до  $800 \frac{\hbar^2}{ma^2}$ , в интервале от 0 до  $a$  будет парабола, в точке  $a$  график обращается в ноль. За пределами этого интервала везде ноль. Энергия частицы, если сравнить формулы (10.2) и (10.3), в 1600 раз меньше высоты барьера, то есть здесь глубоко подбарьерное прохождение.

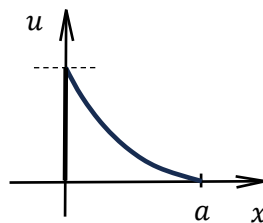


Рис. 10.3. Потенциальный барьер

Ответы на вопросы можно дать формулой или с экспонентой в степени. Для тех, кто захочет записать его числом, добавим, что с устраивающей нас точностью  $e^{-20} \approx 2 \cdot 10^{-9}$ .

### Ответы на контрольный вопрос

1) Данный вопрос общий теоретический. Здесь можно было написать и

$$\hbar \left| \frac{dp}{dx} \right| \ll p^2, \quad (10.4)$$

и, что то же самое,

$$\left| \frac{d\lambda}{dx} \right| \ll 1, \quad (10.5)$$

если иметь в виду соответствующую дебройлевскую длину волны. И даже, учитывая обсуждение, что она много меньше характерного размера движения,

$$\lambda \ll L \quad (10.6)$$

Всё это допустимые способы указать на квазиклассический характер нашего метода и написать, в каком случае им можно пользоваться. Разве что формы записи (10.4) и (10.5) более общие, потому что в более простой (10.6) мы подчёркиваем главное свойство потенциала, в котором движется частица. А ведь ещё есть зависимость применимости и точности нашего метода от граничных условий, которая здесь немного скрывается.

2) В соответствии с правилом Бора – Зоммерфельда, так как с обеих сторон финитную область движения ограничивают стенки, а для каждой стенки, как мы видели,

вклад в  $\gamma$  равен  $\frac{1}{2}$ , в качестве  $\gamma$  будет  $\frac{\pi+\pi}{2\pi} = 1$ . Справа будет интеграл по всей финитной области движения, под которым должно стоять  $\sqrt{2m(E - u(x))}$ . Но внутри ящика  $u \equiv 0$ , так что под интегралом останется константа  $\sqrt{2mE}$ , и вычисление будет простое:

$$n + 1 = \frac{1}{\pi\hbar} \int_a^b \sqrt{2mE} dx = \frac{\sqrt{2mE}}{\pi\hbar} L \quad (10.7)$$

Выразим из этой записи энергию  $E$ . Будет

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (n + 1)^2 \quad (10.8)$$

Такое выражение выдаёт правило Бора – Зоммерфельда, а значит, и метод ВКБ. В данном правиле и в выражении (10.8)  $n = 0, 1, 2, \dots$ . Можно заменить  $n + 1$  на  $\tilde{n}$ , и получится более привычная формула

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \tilde{n}^2 \quad (10.9)$$

Правило Бора – Зоммерфельда обещает, что этот результат должен быть правильным, по крайней мере в основном и следующем за ним порядке по  $n$ . (10.9) справедливо при  $n \gg 1$ , так что различие между  $n$  и  $\tilde{n}$  становится незначительным.

Этот результат точно описывает весь спектр, начиная с самого нижнего уровня, основного состояния, где  $n = 0$  или  $\tilde{n} = 1$ , до самого верха. Так что ящик – тоже пример одномерной системы, где правило Бора – Зоммерфельда случайно попадает в точный ответ несмотря на то, что обещает дать ответ только в главной асимптотике по  $n$  и в следующей за ней заглавной асимптотике.

3) Данный вопрос опирается на то же вычисление, но требует небольшого дополнительного понимания. Для ямы, заданной выражением (10.1), область дискретного спектра – это энергия от 0 до высоты барьера, ограничивающего яму, равной  $200 \frac{\pi^2 \hbar^2}{mL^2}$ . Значит, надо подсчитать число уровней в области  $E < 200 \frac{\pi^2 \hbar^2}{mL^2}$ .

Нужно взять правило Бора – Зоммерфельда. Для оценки не важно, что здесь стоит на месте  $\gamma$ :  $1, \frac{1}{2}$  или что-то ещё. Под корнем возьмём значение для случая максимально возможной здесь энергии дискретного уровня, то есть  $u = 0$  и  $E = u_0$ , и подставим его значение (10.1). Получится

$$N \approx \frac{1}{\pi\hbar} \int_a^b \sqrt{2m \cdot 200 \frac{\pi^2 \hbar^2}{mL^2}} dx \approx 20 \quad (10.10)$$

То есть  $N_{\max} = 20$ . Более того, мы понимаем уровень ошибки. Строго говоря, нужно было написать слева в (10.10)  $N + 1$ , так что было бы  $N = 19$  и поправочные

слагаемые порядка  $\frac{1}{N}$ , которое в данном случае примерно 5%. То есть здесь, наверное, 19 состояний, с ошибкой, скорее всего, не больше 1:

$$N = 19 \pm 1 \quad (10.11)$$

Так что ответ 20 вполне нормальная оценка, как и любой другой, соответствующий (10.11).

Обратим внимание, что сама логика может быть масштабирована на более хитрые задачи. В этой просто был очень простой потенциал, чтобы был интеграл от константы.

4) Здесь потенциал уже не постоянный. Энергия барьера в (10.3) намного превышает значение энергии (10.2), а по порядку величины характерное значение дебройлевской длины волны для энергии (10.2). Поэтому прохождение через такой барьер – очень слабая поправка к классическому поведению, в котором частица через него не пройдет. Это позволяет предполагать, что здесь тоже можно пользоваться формулой ВКБ, ведь условие её применимости и заключается в том, что коэффициент должен быть очень маленьким.

По формуле по порядку величины должно быть

$$T(E) \approx e^{-\frac{2}{\hbar}S_0} \quad (10.12)$$

Формально при вычислении  $S_0$  мы должны написать интеграл по подбарьерной области, то есть взять маленькое значение энергии (10.2), посчитать границы подбарьерной области от 0 до некоего  $x_{\max}$  (рис. 10.3), от  $u(x) - E$ . Но  $E$  меньше  $u$  в 1600 раз, так что сдвиг  $E$  от 0 изменит значение интеграла в лучшем случае на десятые доли процента. Поэтому для оценки можно заменить  $E$  на 0 и написать под интегралом просто  $u$ . Будем считать, что внешняя граница подбарьерной области от  $a$  почти не отличается и возьмём интеграл от 0 до  $a$ . Получится

$$S_0 = \sqrt{2m \cdot 800} \int_0^a \frac{\hbar^2}{ma^2} \left(1 - \frac{x}{a}\right)^2 dx = 40 \frac{\pi}{a} \int_0^a \left(1 - \frac{x}{a}\right) dx \quad (10.13)$$

Если для выражения  $\frac{1}{a} \int_0^a \left(1 - \frac{x}{a}\right) dx$  сделать замену  $t = \frac{x}{a}$ , из (10.13) с высокой точностью будет

$$40\hbar \int_0^1 (1-t) dt = 40\hbar \cdot \frac{1}{2} = 20\hbar \quad (10.14)$$

Когда подставим результат (10.14) в (10.12), реальный коэффициент прохождения получится  $e^{-40}$ , с данной в вопросе подсказкой это примерно  $4 \cdot 10^{-18}$ . Предположение, что  $T(E) \ll 1$ , здесь замечательно оправдывается.

Заметим, что в конце лекции была небольшая ошибка. Мы написали в домашнюю заготовку формулу для коэффициента прохождения через прямоугольный барьер для сравнения с простым результатом, который получается по формуле ВКБ. И назвали её

точной, что было неправдой. В той формуле стояло отношение полиномов по  $\beta$ , которое было определено через энергию частицы и высоту барьера, но дальше была одна экспонента. Однако для точного решения мы должны были бы решить в трёх областях. В подбарьерной области соответствующую фундаментальную систему решений обнаруживали бы две экспоненты, растущая и убывающая, и решение бы строилось как их линейная комбинация. Поэтому в действительности в ответе в числителе и/или знаменателе должны были фигурировать и  $e^{-\beta ka}$ , и  $e^{+\beta ka}$ .

Так что на самом деле мы написали точный ответ при выборе нужного, основного экспоненциального слагаемого. Мы пренебрегли поправками порядка  $e^{-\beta ka}$  и оставили низшую степень этой экспоненты. Перед ней был точный предэкспоненциальный множитель, который в ВКБ-формуле мы просто принимает равным единице. Поэтому мы рисовали его график и указывали, что он отличается от единицы не более чем в два раза в каком-то диапазоне значений  $\beta$ .

Вообще есть много разных формул, которые там возникают. Рассмотрим очень популярную, которую можно видеть во многих книгах.

### Формула Кембла

Она, по сути, тоже получена методом ВКБ, но там по-другому работают с соответствующими экспоненциальными множителями. Кембл пытался построить ответ, в котором вклады разных экспонент будут просуммированы, не только  $e^{-\frac{2}{\hbar}S_0}$ , но и квадраты, кубы и более высокие её степени. Однако он при этом, к сожалению, всё равно пренебрегал отличием предэкспоненциального множителя от единицы. Так что формула Кембла выглядит как

$$T(E) = \frac{e^{-\frac{2}{\hbar}S_0}}{1 + e^{-\frac{2}{\hbar}S_0}} \quad (10.15)$$

Её главное достоинство в том, что она не обладает одним дефектом исходной приближённой формулы

$$T(E) = e^{-\frac{2}{\hbar}S_0} \quad (10.16)$$

Там мы приходили к идее, что, если величина  $S_0$  становится маленькой по сравнению с  $\hbar$ , экспонента, а значит и  $T(E)$ , стремится к единице.

Например, для прямоугольного барьера, если энергия в точности соответствует его высоте (рис. 10.4), формально получится, что  $S_0 = 0$ , поскольку при  $E = u$  будет интеграл от  $|p(x)| = 0$ . И тогда по старой формуле (10.16) окажется, что коэффициент проницаемости этого барьера равен  $e^0 = 1$ , что на самом деле не так. Для случая  $E = 0$  точное решение строится очень легко из-за простого выражения для поведения функции внутри барьера. Правильное значение будет равно  $\frac{1}{2}$ . И формула Кембла (10.15) при  $S_0 \rightarrow 0$ , когда экспонента обращается в единицу, как раз даёт точный ответ для подобного

потенциала. То есть в действительности она лучше, чем первый результат (10.16), ведёт себя в пределе  $S_0 \rightarrow 0$ , и для маленьких  $S_0$  даёт более разумные значения.

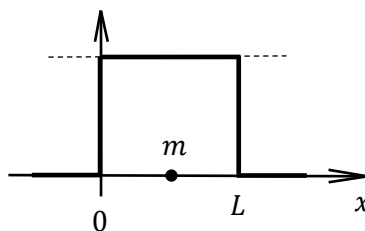


Рис. 10.4. Прямоугольный барьер и энергия, соответствующая его высоте

Но, как мы замечали, главная проблема подобных формул, не только формулы Кембла, но и некоторых других, использующихся в таких ситуациях, что при  $S_0 \rightarrow 0$  они в принципе должны быть неприменимы, так как неприменимо само приближение, в рамках которого они выведены. Есть несколько задач, для которых эта формула даёт более точное описание ситуации. Если  $S_0 \gg \hbar$ , когда работает метод ВКБ, отличие формулы (10.15) от (10.16) будет практически ничтожным, потому что будет  $e^{-\frac{2}{\hbar}S_0} \ll 1$ , и появление этого слагаемого в знаменателе почти ничего не изменит. Оно даже слегка понизит нашу оценку, что справедливо, потому что во многих подобных случаях предэкспоненциальный множитель может оказаться меньше единицы.

Но, с другой стороны, формула (10.16) не является с точки зрения высокой теории обоснованной для применения в области, когда  $S_0$  меньше или порядка  $\hbar$ . Это скорее практический опыт, что в некоторых задачах она оказывается удобней и лучше описывает ситуацию и когда барьер квазиклассический, и когда он теряет квазиклассичность. Когда нужно описать что-то на стыке двух областей, довольно часто используют формулу Кембла (10.15) скорее не как правильную теоретическую, а как удачную интерполяцию. Но у Кембла она была честно выведена в рамках определённого метода работы с ВКБ-выражением.

В целом, главное в задачах, посвящённых методу ВКБ, это удивительная простота метода. В нашем курсе мы редко уходим от одномерных систем, и, как правило, все задачи на данный метод одномерные и стационарные. И в них можно использовать формулу Бора – Зоммерфельда для подсчёта уровней дискретного спектра и формулу (10.16) для оценки коэффициента проницаемости барьера, который должен быть очень маленьким. Это фактически две готовые формулы для получения ответов на большинство задач. Иногда спрашивают чуть хитрее, например, не сами уровни  $E_n$ , а число дискретных уровней в заданной потенциальной яме. Но, как мы только что видели, это та же самая задача на правило Бора – Зоммерфельда.

Поэтому интересные задачи на квазиклассику возникают, когда, по сути, просят выполнить некую полномасштабную симуляцию реальной теоретической работы. Когда дают некое физическое явление и разрешают пользоваться методом ВКБ. То есть когда параметры системы, изучаемой в явлении, таковы, что движение микрочастиц там



квазиклассично, и нужно установить законы этого явления. Тогда приходится комбинировать разные результаты метода ВКБ, чтобы построить теоретическое описание целого явления. Это интереснее и сложнее, но, например, на контрольных работах такие задачи не даются, потому что предполагают более вдумчивую работу с физическим материалом.

А технические задачи всегда на использование трёх базовых формул, которые мы на лекции получили как простые результаты метода ВКБ. А именно правила Бора – Зоммерфельда, формулы для коэффициента проницаемости квазиклассического потенциального барьера и формулы для числа квантовых состояний некоторой системы.

В качестве первого примера возьмём технический, который при точном решении мы бы вряд ли осилили, чтобы продемонстрировать силу метода.

### Задача 1. Уровни энергии частицы в потенциальной яме

Нужно найти уровни  $E_n$  частицы массы  $m$  в потенциальной яме

$$u(x) = u_0 \left| \frac{x}{a} \right|^\nu, \quad (10.17)$$

где  $\nu$  – произвольное положительно число. Модуль поставили, чтобы не возникало вопроса со знаком.

При  $\nu = 2$  получается гармонический осциллятор, в этом случае ответ будет точный и нам известный. Но со всеми остальными  $\nu$  будут проблемы, потому что даже, казалось бы, в простом случае с  $\nu = 1$ , из-за модуля придётся решать задачи в области  $x < 0$  и  $x > 0$  и сшивать на границе. А линейный потенциал в обеих областях в координатном представлении выдаст функцию Эйри, которая записывается как фурье-образ функции с кубическим полиномом в экспоненте, то есть явно не элементарную функцию. Для произвольного  $\nu$  всё будет ещё сложнее.

То есть становится ясно, что аналитически точно задачу не решить. Пусть нам разрешили использовать метод ВКБ. Тогда нужно записать уравнение правила Бора – Зоммерфельда. Пренебрежём поправками порядка  $\frac{1}{n}$ .

Потенциал  $u(x)$  (10.17) по-разному ведёт себя при  $\nu < 1$ ,  $\nu = 1$  и  $\nu > 1$ , там разное касание в нуле. На рис. 10.5 график для  $\nu > 1$ . Свойство симметрии у него есть при любом  $\nu$ . Для заданного значения энергии  $E$  область классически допустимого движения будет симметрична. Обозначим её границы как  $-b$  и  $b$ , потому что обозначение  $a$  уже используется в определении потенциала (10.17).

Значение  $b$  легко найти, потому что точки поворота находятся из условия

$$E = u(b) \quad (10.18)$$

Тогда, если приравнять  $\frac{E}{u_0}$  к  $\left(\frac{b}{a}\right)^\nu$ , получится

$$b = a \left( \frac{E}{u_0} \right)^{\frac{1}{\nu}} \quad (10.19)$$

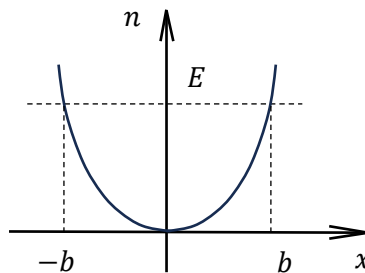


Рис. 10.5. График потенциала для  $\nu > 1$

Не будем рассматривать предельные переходы. При конечном  $\nu$  это всегда точки поворота, поэтому граничные условия такие, что  $\gamma$  от двух точек поворота даёт  $\frac{1}{2}$  слева в уравнении правила Бора – Зоммерфельда. Интеграл от  $-b$  до  $+b$  ввиду симметрии можно записать как два интеграла от 0 до  $b$ . Так что получается

$$n + \frac{1}{2} \approx \frac{1}{\pi \hbar} \cdot 2 \int_0^b \sqrt{2m \left[ E - u_0 \left( \frac{x}{a} \right)^\nu \right]} dx \quad (10.20)$$

Теперь вопрос фактически в вычислении интеграла в (10.20). Вынесем из-под корня  $2mE$ , останется  $1 - \frac{u_0}{E} \left( \frac{x}{a} \right)^\nu$ . Посмотрев на определение  $b$  (10.19), перепишем (10.20) как

$$\frac{2\sqrt{2mE}}{\pi \hbar} \int_0^b \sqrt{1 - \left( \frac{x}{b} \right)^\nu} dx \quad (10.21)$$

Здесь естественна замена

$$t = \left( \frac{x}{b} \right)^\nu \quad (10.22)$$

Тогда получится

$$dt = \nu \left( \frac{x}{b} \right)^{\nu-1} = \nu t \cdot \frac{dx}{x}, \quad (10.23)$$

из чего

$$dx = \frac{dt}{\nu t} \cdot x, \quad (10.24)$$

а  $x$  заново выразим из (10.22) как

$$x = bt^{\frac{1}{\nu}} \quad (10.25)$$

и подставим в (10.23). Когда будем переделывать  $\frac{dx}{x}$ , выскочит множитель  $\frac{1}{v}$  и ещё возникнет множитель  $b$  из (10.25).  $t$  под интегралом будет из выражений (10.25) и (10.23). Тогда из (10.21) получится

$$\frac{2\sqrt{2mE}}{\pi\hbar v} b \int_0^1 t^{\frac{1}{v}-1} \sqrt{1-t} dt \quad (10.26)$$

Можно избавиться от интеграла, если вспомнить определение бета-функции.  $B(x, y)$ ,  $t^{\frac{1}{v}-1} = t^{x-1}$ , а  $\sqrt{1-t} = (1-t)^{y-1}$ , так что  $x = \frac{1}{v}$  и  $y = \frac{3}{2}$ . Тогда, подставив в (10.26) выражение (10.19), мы придём к результату

$$n + \frac{1}{2} \approx \frac{2\sqrt{2mE}a}{\pi\hbar v} \left(\frac{E}{u_0}\right)^{\frac{1}{v}} \cdot B\left(\frac{1}{v}, \frac{3}{2}\right) \quad (10.27)$$

$B(x, y) = \frac{\Gamma(x)\Gamma(y)}{\Gamma(x+y)}$ .  $\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}$ ,  $\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \sqrt{\frac{\pi}{2}}$ . Без  $v$  мы всё равно не сможем явно их посчитать, хотя для многих  $v$  (10.27) просто вычисляется как число. Чтобы получить ответ, надо возвести (10.27) в степень вроде  $2v$ , чтобы из корня вышло  $E^v$ , из скобки  $E^2$ , и таким образом выразить  $E^{2+v}$  через всё остальное. Получится

$$E_n = \left[ \frac{\pi\hbar v \left(n + \frac{1}{2}\right)}{2\sqrt{2ma}B\left(\frac{1}{v}, \frac{3}{2}\right)} \right]^{\frac{2v}{v+2}} u_0^{\frac{2}{v+2}} \quad (10.28)$$

Для произвольного  $v$  это выражение громоздкое, но мы можем проверить его правильность, посмотрев знакомый нам случай  $v = 2$ . В нём будет

$$B\left(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}\right) = \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2} + \frac{3}{2}\right)} = \frac{\sqrt{\pi} \cdot \frac{\sqrt{\pi}}{2}}{1} = \frac{\pi}{2} \quad (10.29)$$

Чтобы получить осциллятор, нужно взять

$$u_0 = \frac{m\omega^2 a^2}{2} \quad (10.30)$$

Тогда, при подстановке в формулу (10.17), умножая (10.30) на  $\left(\frac{x}{a}\right)^2$ , мы получим потенциальную энергию гармонического осциллятора.

А формула (10.27) при  $v = 2$ , (10.17) и (10.29) выдаст

$$n + \frac{1}{2} \approx E \cdot \frac{2\sqrt{2ma}}{2\pi\hbar} \sqrt{\frac{2}{m\omega^2 a^2}} \cdot \frac{\pi}{2} = \frac{E}{\hbar} \cdot \frac{1}{\omega} \quad (10.31)$$

Из чего получается точный ответ

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (10.32)$$

То есть осциллятор – ещё одна задача, в которой правило Бора – Зоммерфельда выдаёт точный результат для произвольного  $n$ , начиная с  $n = 0$ . Это тоже такой особо симметричный случай, что происходит точное попадание.

Данный пример демонстрирует, что даже, казалось бы, со сложным потенциалом можно разобраться. Здесь пришлось вспомнить бета-функцию, но в целом ничего экстраординарного не встретилось. Мы для произвольного  $\nu$  получили довольно громоздкую, но честную формулу, которая должна корректно описывать высоколежащие уровни энергии для  $n \gg 1$ .

Следующий пример более интересный. Произведём полномасштабную симуляцию работы теоретика по изучению конкретного физического явления – холодной эмиссии электронов из металла.

## Задача 2. Холодная эмиссия электронов из металла

Можно заставить электроны  $e^-$  лететь из металла с помощью явления термоэмиссии, то есть нагреть его так, чтобы в энергетическом распределении электронов появлялись электроны с энергиями, достаточными для того, чтобы преодолеть барьер, совершить работу выхода, и выскочить из металла. Явление холодной эмиссии – это эмиссия электронов из металла в ситуации, когда температура слишком мала, чтобы давать в неё хоть какой-то вклад. Мы будем считать, что  $kT$  намного меньше характерных энергий в металле.

Понятно, что в этом случае электроны сами из него не полетят. Возьмём кусок металла и поместим его во внешнее электрическое поле, некое  $\vec{E}_{ext}$ . В статическом случае за счёт электростатической индукции на поверхности металла выступит немного электронов проводимости. Они перераспределятся по ней таким образом, что где-то выступят отрицательные заряды, которые поймают линии напряжённости электрического поля, а где-то положительные, откуда будут выходить новые (рис. 10.6). В целом, картина поля вблизи металлического образца как-то исказится так, что в каждый кусочек его поверхности поле будет входить под прямым углом. Ведь если угол не прямой и есть ненулевая касательная составляющая  $\vec{E}$ , значит, электроны ещё бегут по металлу. Когда наступит равновесие, в статическом случае линии напряжённости всегда будут входить в него перпендикулярно.

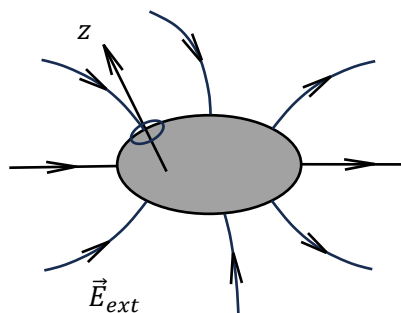


Рис. 10.6. Силовые линии, входящие и выходящие в металл и его маленький кусок

Возьмём небольшой кусочек поверхности металла (рис. 10.6). С точки зрения электрона любой макроскопический металлический образец – это очень большой объём. Будем рассматривать электрон проводимости. В самой простой модели это такой объект, который может свободно бегать внутри металла, а выскочить из него не может, потому что на границе металл-вакуум стоит потенциальный барьер.

Для начала для простоты будем считать барьер прямоугольным. Введём ось  $z$  перпендикулярно поверхности металла в данной точке (рис. 10.6) и скажем, что картина вблизи этого маленького кусочка поверхности металла выглядит следующим образом.  $z = 0$  как раз граница металла, металлическая поверхность (рис. 10.7). Слева от неё в области  $z < 0$ , внутри металла, электроны будут двигаться как свободные, поэтому можно считать, что там потенциальная энергия тождественно равняется нулю. А чтобы они не могли выскочить, поставим на границе потенциальный барьер высотой  $u_0$  для области справа  $z > 0$ , вне металла. То есть будем считать, что решётка металла создаёт для электрона проводимости потенциал

$$u(z) = \begin{cases} \equiv 0, & z < 0 \\ +u_0, & z > 0 \end{cases} \quad (10.33)$$

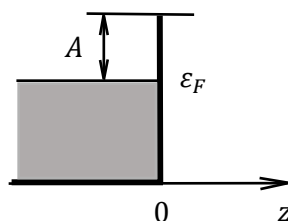


Рис. 10.7. Барьер, энергия Ферми и работа выхода

Найдём на рис. 10.7 работу выхода. Когда внутри металла существуют электроны, они, являясь фермионами, будут сначала занимать состояния с наименьшими энергиями, которые там есть, потом с чуть большими и т. д. В каждом квантовом состоянии будет сидеть ровно один электрон. Электронов в металле очень много, кусок металла с точки зрения электрона очень большой, так что можно считать эту систему квазиклассической. Число  $N_e$  равняется числу занятых квантовых состояний  $N_{\text{КВ}}$ .

С точки зрения метода ВКБ его надо посчитать как фазовый объём, а это произведение объёма  $V$  куска металла в координатном пространстве на объём, занятый электронами в импульсном пространстве. Они в состоянии с близкой к нулю температурой стараются занять состояния с минимальной энергией. Энергия свободно движущихся электронов кинетическая, поэтому они стараются её минимизировать. Значит, займут все состояния с импульсами от 0 до некоторого максимально возможного, такого, чтобы хватило разместить их все. Этот импульс для систем фермионов называют импульсом Ферми  $p_F$ . Поэтому объём, который электроны занимают в импульсном пространстве, это объём шара с радиусом  $p_F$ , равный  $\frac{4\pi}{3} p_F^3$ . Как раз радиус  $p_F$  на самом деле определяется числом электронов проводимости. По одной из формул

квазиклассического метода это надо поделить на  $(2\pi\hbar)^3$ . И так как электроны имеют спин  $s = \frac{1}{2}$ , умножить на число спиновых состояний при каждом состоянии движения электрона,  $(2s + 1) = \left(2 \cdot \frac{1}{2} + 1\right) = 2$ . Получится

$$N_e = N_{\text{кв}} = \frac{V \cdot \frac{4\pi}{3} p_F^3}{(2\pi\hbar)^3} \cdot 2 \quad (10.34)$$

Данная квазиклассическая формула позволяет связать импульс Ферми, максимальный импульс, который будут иметь электроны проводимости внутри металла, с их концентрацией:

$$\frac{N_e}{V} \equiv n_e \quad (10.35)$$

Это одна из базовых характеристик металла как вещества. Договоримся, что мы в качестве первой характеристики конкретного металла будем брать именно её. Даже если мы её не знаем для данного металла, её можно довольно правдоподобно оценить из простой идеи, что при соединении в решётку все атомы, образующие металлическую решётку чистого металла, в среднем отдают в общее пользование по одному электрону. Тогда концентрация электронов проводимости должна соответствовать концентрации атомов, которая считается делением плотности металла на массу одного атома. А если вещество известно, то и эти данные для него тоже. Так что будем считать, что (10.35) – это табличная характеристика металла, но даже если у нас отсутствуют табличные данные, она легко оценивается по его простым общеизвестным характеристикам.

Из формулы (10.34) получается

$$p_F = \hbar(3\pi^2 n_e)^{\frac{1}{3}} \quad (10.36)$$

Соответственно, по энергетической шкале все электроны займут состояния от 0 до величины, которую обычно называют энергией Ферми  $\varepsilon_F$ . В нашем случае это кинетическая энергия электрона, имеющего импульс Ферми. То есть из (10.36) понятно, что это не новый параметр, он по-прежнему вычисляется через концентрацию электронов проводимости  $n_e$  и равен

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2(3\pi^2 n_e)^{\frac{2}{3}}}{2m_\varphi} \quad (10.37)$$

Тогда можно на графике 10.6 нарисовать работу выхода  $A$  для нашего металла. По определению это минимальная работа, которую надо совершить, чтобы заставить электрон из него выскочить, то есть разница между высотой барьера (10.33) и энергией Ферми (10.37). Это тоже табличная характеристика металла.

Так что теперь будем характеризовать металл в нашей задаче величинами  $n_e$  и  $A$ . Это два эмпирических параметра, которые нам нужны от него, чтобы пользоваться выбранной для него моделью. Мы взяли очень простую его модель из базовых данных о

том, что такое металл и электрон проводимости, добавив к ним метод ВКБ (10.34) и немного математики. Так выглядит металл, если нет электрического поля.

Когда его включают, очень маленькая часть электронов проводимости как-то переместится, частично выступив на поверхности, где-то немного уйдя с неё, где-то придя на неё. В действительности концентрация электронов проводимости внутри металла при нормальных лабораторных полях, не превышающих 1 МВ/м, почти не поменяется. Тогда вблизи границы металла возникнет электрическое поле, которое для такого маленького объёма можно считать почти постоянным. А в однородном поле потенциальная энергия электрона в области  $z > 0$  станет примерно линейной функцией. Мы специально выбрали место, где  $\vec{E}$  входит в металл, то есть на электрон действует сила, которая пытается его оттуда вытащить. Внутри металла, в область  $z < 0$  поле не проникнет, там  $u$  останется прежним, как в (10.33). А в области  $z > 0$  с учётом внешнего поля поле будет  $u_0 - eEz$  (наклонная на рис. 10.8).

Мы обнаруживаем, что возникает потенциальный барьер, отгораживающий электроны проводимости от внешнего мира. Тогда в нашей модели холодная эмиссия электронов из металла будет связана с туннелированием через него электронов проводимости. Где  $E$  выходит, линия на рис 10.6 в области  $z > 0$  пойдёт вверх под углом, и никакого туннелирования не будет. Электроны могут туннелировать только в таких местах, где линии установившегося статического поля входят в металл. В них навстречу данным линиям будут вылетать эмиссионные электроны, возникнет ток холодной эмиссии.

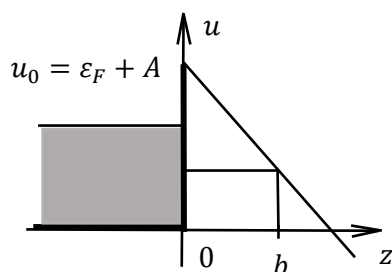


Рис. 10.8. Потенциальный барьер, отгораживающий электроны от внешнего мира

Чтобы описать этот эффект, теоретик скажет, что нужно описать зависимость плотности тока холодной эмиссии от  $E$ . Если мы это узнаем, то из электростатики для нашего куска металла легко решим задачу про статическое поле, определим  $E$  в каждой точке металла и узнаем, с какой плотностью течёт эмиссионный ток. Дальше посмотрим, как будет меняться заряд нашего куска металла. Наверняка это будет происходить очень медленно, так, что процесс будет квазистационарен. Если электроны будут улетать, кусочек постепенно начнёт заряжаться положительно. От этого будет расширяться зона с положительным зарядом на поверхности металла и сужаться зона с отрицательным. Эмиссионный ток прекратится, когда на ней не будет места с отрицательным поверхностным зарядом в соответствующем статическом поле.

Итак, мы сформулировали модель металла, модель явления, объяснили его физический механизм и поставили задачу. Если мы получим формулу зависимости плотности эмиссионного тока от поля  $E$  вблизи данного кусочка поверхности металла,  $j_\varphi(E)$ , в этой картине, опишем всю динамику эффекта и всё про него поймём.

Вообще плотность тока – это произведение заряда на концентрацию зарядов и на их скорость. Ось  $z$  на рис. 10.6 мы направили перпендикулярно поверхности, ток в целом вдоль неё и течёт. Если даже эмиссионные электроны будут вылетать с какими-то компонентами скорости, перпендикулярными этой оси, в целом из симметрии такой постановки задачи на маленьком кусочке ясно, что средний ток будет течь именно против неё.

Понятно, что летят электроны, и с точки зрения электротехника ток втекает в металл, но мы сейчас не будем писать его знак, нас будет интересовать его величина. Поэтому запишем плотность эмиссионного тока просто как произведение заряда на концентрацию летящих носителей и на их скорость по оси  $z$ . Будет

$$j_e \equiv j_z = env_z \quad (10.38)$$

Мы знаем, что происходит внутри металла. Там энергии всех электронов меняются от 0 до  $\varepsilon_F$ . А модуль импульса электронов  $|\vec{p}| \leq p_F$ . То есть в импульсном пространстве есть некий шарик радиусом  $p_F$ , и допустимые импульсы для электронов, которые там бегают, все начинаются в начале координат и заканчиваются в его пределах (рис. 10.9). В этом случае

$$v_z = \frac{p_z}{m} \quad (10.39)$$

Поэтому, если у всех электронов разные  $p_z$ , мы не можем воспользоваться формулой (10.37) напрямую, а должны выделить группу электронов с одинаковым значением  $v_z$ , посчитать её вклад, а потом сложить все вклады, то есть проинтегрировать. Для этого возьмём конкретное значение  $p_z$ . Сечение данного шара плоскостью  $p_z$ , равняющегося конкретному значению, это некий круг.

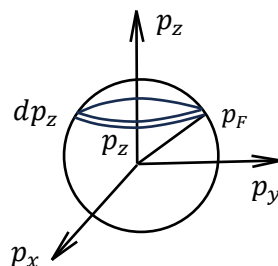


Рис. 10.9. Выделение группы электронов, попадающих в цилиндр радиусом  $p_z$  и толщиной  $dp_z$

Нужно посчитать количество электронов  $dn_e$ , которые имеют  $p_z$  в диапазоне от  $p_z$  до  $p_z + dp_z$ . По сути, надо нарисовать на рис. 10.9 цилиндр толщиной  $dp_z$ . Количество электронов, попавших в данный фазовый объём, это произведение площади данного



круга,  $\pi R^2$ , где  $R^2 = p_F^2 - p_z^2$ , на  $dp_z$ , то есть импульсного объёма этой области, на координатный объём  $V$ , где они могут быть сосредоточены, разделённое на  $(2\pi\hbar)^3$  и умноженное на 2.

$$N = \frac{\pi(p_F^2 - p_z^2)dp_z \cdot V}{(2\pi\hbar)^3} \cdot 2 \quad (10.40)$$

Чтобы получить вклад этих электронов в концентрацию, их количество надо разделить на  $V$ . Тогда концентрация электронов проводимости, имеющая импульсы в пределах выделенного цилиндра,

$$dn_e = \frac{\pi(p_F^2 - p_z^2)dp_z \cdot V}{(2\pi\hbar)^3} \cdot 2 \quad (10.41)$$

И для каждого из них верна формула (10.39).

Тогда вклад этих электронов в эмиссионный ток  $dj_e$  будет вычисляться как  $\int e \cdot dn_e \cdot \frac{p_z}{m}$ . Но так мы посчитаем ток, который падает на наш треугольный барьер изнутри, а нас интересует тот, который будет снаружи от наклонной стороны. Для каждого значения  $p_z$  получается конкретное значение кинетической энергии движения электронов вдоль оси  $z$ , равное  $\frac{p_z^2}{2m}$ , а именно от этой величины зависит коэффициент проницаемости барьера. Его надо умножить на вероятность того, что электрон выскочит через барьер и действительно даст вклад в эмиссионный ток, а не просто в поток электронов, падающий изнутри на границу металла. Поэтому в формулу нужно добавить коэффициент проницаемости барьера. Получится

$$dj_e = \int e \cdot dn_e \cdot \frac{p_z}{m} T\left(\frac{p_z^2}{2m}\right) \quad (10.42)$$

Подставим в (10.42) выражение (10.41). Вынесем константы за знак интеграла. Нас не интересуют отрицательные  $p_z$ , такой электрон не будет пытаться выскочить из металла, он наоборот удаляется от границы вглубь. Поэтому вклад в эмиссионный ток могут дать только электроны с  $p_z > 0$ , а такое  $p_z$  означает, что оно меняется от 0 до максимального положительного значения  $p_F$ . Тогда из (10.42) получится, что эмиссионный ток нужно вычислять по формуле

$$\frac{e}{m} \frac{1}{4\pi^2\hbar^3} \int_0^{p_F} dp_z (p_F^2 - p_z^2) p_z T\left(\frac{p_z^2}{2m}\right) \quad (10.43)$$

То есть в рамках нашей модели получилось конкретное выражение, которое надо просто посчитать. Как любой теоретик, минимизируем усилия. Если  $2m$  из знаменателя перед интегралом в (10.43) отправить в  $(p_F^2 - p_z^2)$ , получится  $\varepsilon_F - \frac{p_z^2}{2m}$ , это энергия движения по оси  $z$ . Кроме того, если возьмём ещё один множитель  $\frac{1}{m}$ , потом для сокращения добавим  $m$  в числитель, то под интегралом будет  $\frac{p_z dp_z}{m} = d\left(\frac{p_z^2}{2m}\right)$ .

Введём переменную

$$\varepsilon \equiv \frac{p_z^2}{2m} \quad (10.44)$$

Тогда (10.43) превратится в интеграл от 0 до  $\varepsilon_F$ , потому что когда  $p_z = p_F$ ,  $\varepsilon = \varepsilon_F$ :

$$\frac{em}{2\pi^2\hbar^3} \int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon (\varepsilon_F - \varepsilon) T(\varepsilon) \quad (10.45)$$

Теперь надо понять, что такое  $T(\varepsilon)$ . Раз задача квазиклассическая, коэффициент проницаемости барьера для электронов с энергией  $\varepsilon$  тоже можно взять из квазиклассической формулы.

Мы уже выяснили, что высота барьера на рис. 10.8

$$u_0 = \varepsilon_F + A, \quad (10.46)$$

где  $A$  – работа выхода. Поэтому потенциальная энергия в области  $z > 0$

$$u(z) = \varepsilon_F + A - eEz, \quad (10.47)$$

$E$  – напряжённость электрического поля.

Коэффициент прохождения для данной энергии по квазиклассической формуле

$$T(\varepsilon) = \exp\left\{-\frac{2}{\hbar} S_0\right\} \quad (10.48)$$

$S_0$  нужно посчитать как интеграл по подбарьерной области. Её внутренняя граница  $z = 0$ , там электроны из области  $z < 0$  ныряют под барьер. А внешняя граница определяется из условия

$$\varepsilon_F + A - eEb = \varepsilon, \quad (10.49)$$

где  $b$  отмечен на рис. 10.8. Тогда

$$b = \frac{\varepsilon_F + A - \varepsilon}{eE} \quad (10.50)$$

(10.48), если расписать  $S_0$ , подставляя в его выражение (10.47), переписется как

$$\exp\left\{-\frac{2}{\hbar} \int_0^b \sqrt{2m(\varepsilon_F + A - \varepsilon - eEz)} dz\right\} = \exp\left\{-\frac{2\sqrt{2meE}}{\hbar} \int_0^b \sqrt{b-z} dz\right\} \quad (10.51)$$

Данный интеграл считается в элементарных функциях. Его первообразная  $-\frac{2}{3}(b-z)^{\frac{3}{2}}$ . В точке  $b$  подстановка даст 0, поэтому  $\int_0^b \sqrt{b-z} dz = \frac{2}{3} b^{\frac{3}{2}}$ . Так что из (10.51), если подставить (10.50), получится

$$\exp\left\{-\frac{2\sqrt{2meE}}{\hbar} \frac{2}{3} \left(\frac{\varepsilon_F + A - \varepsilon}{eE}\right)^{\frac{3}{2}}\right\} \quad (10.52)$$

Тогда плотность эмиссионного тока  $j_e$  (10.45), если подставить (10.52), будет

$$\frac{em}{2\pi^2\hbar^3} \int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon e^{-\frac{4\sqrt{2m}}{3\hbar eE}(\varepsilon_F + A - \varepsilon)^{\frac{3}{2}}} \quad (10.53)$$

Это уже выражение в виде интеграла от конкретной функции. В реальных теоретических работах, симуляцию которых мы хотели сделать, интегралы, берущиеся в элементарных функциях, обычно не получаются. Этот, немного попреобразовывая, можно, свести к неполной гамма-функции, но оно не сильно поможет. Теоретик на этом месте скажет, что мы получили точный ответ в квадратурах, который можно при необходимости записать через стандартную спецфункцию. Но ему хотелось бы проанализировать полученный ответ, представить себе график. А анализировать его в таком виде, с неполными гамма-функциями, особенно при каких-то специфических значениях параметров, может быть не очень удобно.

Поэтому теоретик рассмотрел бы какой-то случай, в котором это выражение упростится, чтобы понять, как всё выглядит на уровне явления. Поймём, как ведёт себя точная квадратурная формула в приближении «плохого проводника». Проводник плохой, когда у него низкая концентрация электронов проводимости, а значит маленькая  $\varepsilon_F$ . Для данной модели металла разумно сравнивать её с  $A$ , потому что они вместе образуют барьер (рис. 10.8), то есть вместе входят в один из базовых параметров модели явления, ведь от высоты барьера сильно зависит вероятность туннелирования.

Итак, перейдём к приближению «плохого проводника»  $\varepsilon_F \ll A$ .  $\varepsilon_F - \varepsilon$  в (10.53) – это тоже величина, меняющаяся от 0 до  $\varepsilon_F$ , ей в этом приближении можно пренебречь по сравнению с  $A$ , и вся экспонента вынесется из-под знака интеграла. Интеграл от оставшегося даст  $\frac{\varepsilon_F^2}{2}$ . И ответ получится как конструкция из параметров задачи, умноженная на экспоненту с показателем в виде конструкции из параметров задачи, поделённой на  $E$ .

Тогда плотность эмиссионного тока в этом приближении зависит от напряжённости поля примерно как

$$j_e(E) \approx j_0 e^{-\frac{E_0}{E}}, \quad (10.54)$$

$j_0$  логично называть током насыщения, потому что это максимальный ток, который будет, если сделать приложенное электрическое поле  $E \gg E_0$ . В таком случае показатель экспоненты будет стремиться к нулю, экспонента к единице, а ток к  $j_0$ . Для него есть явное выражение из (10.53):

$$j_0 = \frac{em}{2\pi^2 \hbar^3} \cdot \frac{\varepsilon_F^2}{2} \quad (10.55)$$

Дальше его можно выразить через параметры модели, подставив в него формулу для  $\varepsilon_F$  (10.37). То есть для конкретного металла ток насыщения холодной эмиссии можно посчитать.

А  $E_0$  из (10.54) – это то, что стоит в показателе экспоненты в (10.53) выше  $E$ , если на место скобки  $(\varepsilon_F + A - \varepsilon)$  поставить  $A$ . Когда  $E \ll E_0$ , в (10.54) экспонента будет в большой отрицательной степени, и ток будет намного меньше тока насыщения.  $E_0$  – характерная напряжённость внешнего поля, некий её масштаб, при котором для данного

металла ток холодной эмиссии становится заметен. Из (10.53), если написать  $A^{\frac{3}{2}} = \sqrt{A} \cdot A$ ,

$$E_0 = \frac{4\sqrt{2mA} \cdot A}{3\hbar e} \quad (10.56)$$

Обе константы, (10.55) и (10.56) мы выражаем через параметры взятого металла.

График тока холодной эмиссии теперь можно хорошо представить.  $j_e$  как функция  $E$  при  $E \ll E_0$  очень подавлен, а при  $E \gg E_0$  стремится к  $j_0$ . То есть на графике будет сначала резкий провал, а потом ступенька (рис. 10.9).

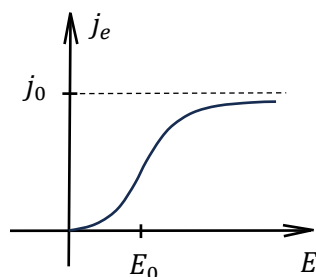


Рис. 10.9. График тока холодной эмиссии

Итак, мы взяли реальное явление и, пользуясь только общими знаниями и методом ВКБ, за полчаса полностью его изучили. Это убедительная демонстрация возможностей ВКБ-подхода. Но, конечно, всё получилось, потому что мы приняли, что кусок металла очень большой и всё ведёт себя квазиклассично.

Мы ещё немного поговорим о методе ВКБ на следующем занятии.

## Семинар 11. Теория возмущений

### Выбор невозмущённого гамильтониана

При разборе задач, посвящённых теории возмущений, самый творческий шаг – разбиение исходного гамильтониана на невозмущённый и возмущение. В нашем распоряжении не так много задач, где бы мы знали точное решение и его собственные вектора были удобным базисом. Например, чтобы при записи их как координатные волновые функции они не были чересчур сложными, с которыми даже вычисление матричных элементов будет представлять проблему.

С данной точки зрения идеальный невозмущённый гамильтониан – это гамильтониан линейного гармонического осциллятора, сразу по нескольким причинам. С ним задача точно решаемая, при этом его собственные вектора – очень удобный базис, в котором существует удобный алгебраический инструмент вычисления матричных элементов любых операторов через повышающий и понижающий операторы для гармонического осциллятора. Там вообще есть очень удобные состояния, например, когерентные. То есть у осциллятора хорошо исследованный и удобно представленный всевозможный набор базисов невозмущённой задачи, начиная с самого основного, из векторов с определёнными значениями энергии, который мы чаще всего и используем.

Данная задача удобна и с точки зрения физики, так как любое маленькое колебание любого объекта вблизи положения равновесия всегда чем-то напоминает гармонический осциллятор. Это естественное первое приближение для любой системы, совершающей такие колебания.

Математики скажут, что у линейного гармонического осциллятора есть ещё одно замечательное свойство. Его гамильтониан квадратичен, соответственно, уравнения движения линейны, а значит, его легко масштабировать на произвольную размерность. То есть можно рассмотреть задачу о  $n$ -мерном осцилляторе, разбив его на  $n$  независимых линейных осцилляторов, если поле действующих на него сил позволит это сделать, что часто случается.

Тогда интересно, какой класс задач подходит под решение методами стационарной теории возмущений, как обычно говорят, в осцилляторном приближении. В качестве примера рассмотрим задачу, которая продемонстрирует преимущества осцилляторного подхода при использовании данной теории. Она будет очень ценной и с прагматической точки зрения. Ведь, если на контрольной, зачёте или экзамене преподаватель хочет дать задачу на стационарную теорию возмущений, самой удобной, которая покажет, насколько студент всё хорошо понимает, и в то же время не потребует сложных вычислений, будет задача, у которой в качестве  $\hat{H}_0$  гамильтониан линейного гармонического осциллятора.

## Задача 1. Низколежащие уровни энергии частицы в потенциале с точкой минимума

Частица массы  $m$  совершает одномерное движение по оси  $x$ , гамильтониан имеет вид

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + u(x), \quad (11.1)$$

где  $u(x)$  – какая-то функция, имеющая чётко выраженную точку минимума (рис. 11.1). То есть у ямы есть некоторое значение координаты  $x$ , равно  $x_0$ , в котором потенциальная энергия равна  $u_0$ , и это абсолютный минимум потенциала, в обе стороны от  $x_0$  тот монотонно растёт.

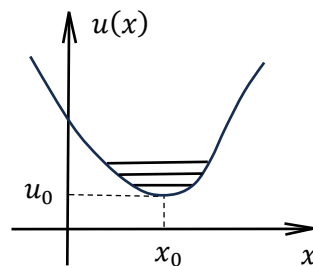


Рис. 11.1. Низшие дискретные уровни в яме с минимумом потенциала

В яме есть какой-то набор дискретных уровней. Тогда для основного и низших возбуждённых состояний, энергии которых близки к энергии основного, область колебаний, наверное, может быть относительно небольшой. И в пределах неё любая кривая в окрестности точки минимума немного похожа на параболу.

Поэтому перепишем гамильтониан (11.1), разложив  $u(x)$  в окрестности  $x_0$ , то есть напомним  $u_0$ . Поскольку  $x_0$  – точка минимума, слагаемого с первой степенью  $(x - x_0)$  в разложении не будет. В дальнейшем будем обозначать производную  $n$ -й степени, вычисленную в точке минимума  $x_0$ , как

$$u_0^{(n)} \equiv \frac{d^n u}{dx^n}(x_0) \quad (11.2)$$

Поэтому второе слагаемое будет содержать значение второй производной функции  $u(x)$  в  $x_0$ ,  $\frac{u_0''}{2}$ , умноженное на  $(x - x_0)^2$ . В итоге из (11.1) получится

$$\frac{\hat{p}_x^2}{2m} + u_0 + \frac{u_0''}{2}(x - x_0) + \frac{u_0'''}{6}(x - x_0)^2 + \frac{u_0^{IV}}{24}(x - x_0)^3 + \dots \quad (11.3)$$

Мы не просто так написали в этом ряду много слагаемых. Если бы мы ограничились только квадратичным, получили бы как раз задачу о гармоническом осцилляторе. Поэтому, казалось бы, низшей поправкой является третья степень. Но третья и четвёртая степени имеют разную симметрию, а у задачи про осциллятор гамильтониан, как видно из (11.3), будет симметричен относительно замены  $x - x_0$  на обратное отклонение  $x_0 - x$ . Поэтому при вычислении матричных элементов от куба и

от четвёртой степени по этим волновым функциям они могут себя по-разному повести. И для некоторых состояний может оказаться, что, например, диагональные матричные элементы по соответствующей функции от третьей степени отклонения обратятся в ноль. А нам всегда нужна низшая не исчезающая поправка. Поэтому мы с самого начала сохраняем в (11.3) четвёртую степень, понимая, что та может ею стать, если вклад от третьей степени занулится.

В этом и состоит некое понимание происходящего, мы сразу прогнозируем, что должны взять в качестве базовых слагаемых, если не можем аналитически решить задачу с полным  $u(x)$  и собираемся использовать теорию возмущений.

Переходя к этой задаче, логично сместить начало отсчёта координаты на  $x_0$ , тогда  $x - x_0$  превратится в  $x$ . И сместить начало отсчёта по энергии на  $u_0$ . То есть дальше будем считать  $E - u_0$  просто  $E$  и вычислять энергию отклонения от минимума потенциала. В конце концов, калибровка потенциала – это не влияющая на физику процесса действие, смещение начала отсчёта энергии не вызовет изменений физического содержания задачи.

Чтобы не путаться, не будем переобозначать гамильтониан как  $\hat{H}'$  или  $\hat{\tilde{H}}$ , просто дальше напишем (11.3) в новых переменных. Тогда множители из (11.3), например, величина  $u_0''$ , так как  $x_0$  – точка минимума, должна быть положительной. Тождественно обозначим её

$$u_0'' \equiv m\omega^2, \quad (11.4)$$

приведя третье слагаемое в (11.3) к стандартному виду потенциальной энергии линейного гармонического осциллятора  $\frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2}$ . На самом деле это определение для частицы массой  $m$  частоты  $\omega$  – эффективной частоты малых колебаний вблизи точки минимума  $x_0$ . Также тождественно обозначим для краткости

$$\frac{u_0''}{6} \equiv \alpha \quad (11.5)$$

$$\frac{u_0^{IV}}{24} \equiv \beta \quad (11.6)$$

Тогда из (11.3) мы придём к задаче с гамильтонианом

$$\hat{H} \approx \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2} + \alpha \hat{x}^3 + \beta \hat{x}^4 \quad (11.7)$$

Здесь стоит знак приближения, потому что поправками более высокого порядка,  $\hat{x}^5$ ,  $\hat{x}^6$  и т. д. мы пренебрегаем.

Логика этого следующая. Если вся затея имеет смысл, осцилляторное приближение хорошее,  $\hat{H}_0$  – удачный невозмущённый гамильтониан для этой задачи, где в (11.7)

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2}, \quad (11.8)$$

а возмущение

$$\hat{V} = \alpha \hat{x}^3 + \beta \hat{x}^4, \quad (11.9)$$

тогда влияние слагаемых с более высокими степенями должно убывать при повышении степени. И хотя мы сразу не можем разобрать, как будет соотноситься друг с другом влияние третьей и четвёртой степеней, поскольку они разной чётности, пятая степень должна меньше влиять на динамику системы, чем третья, а шестая меньше четвёртой. Поэтому мы оставляем слагаемые (11.5) и (11.6) как главные. Константы  $\alpha$  и  $\beta$  чётко связаны с потенциалом  $u(x)$ , точнее, с его поведением в окрестности точки минимума  $x_0$ .

Такой подход называется анализом динамики в низшем ангармоническом приближении, и оператор возмущения (11.9) мы будем называть оператором низшего ангармонического приближения для задачи (11.1).

Понятно, что самое грубое исследование свойств такой задачи происходит, когда мы просто ограничиваемся гамильтонианом гармонического осциллятора (11.8). Но в этом случае задача будет точно решаемой. Можно ввести соответствующие собственные вектора, по традиции просто обозначаемые номером,  $|n\rangle$ , которые являются обозначением для  $|\psi_n^{(0)}\rangle$ , где  $n = 0, 1, \dots$ , целые неотрицательные числа. Будет

$$\hat{H}_0 |n\rangle = E_n^{(0)} |n\rangle, \quad (11.10)$$

где невозмущённые уровни энергии

$$E_n^{(0)} = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad (11.11)$$

Так что, если можно пренебречь ангармоничностью, мы получаем для гамильтониана (11.8) в окрестности минимума эквидистантный спектр уровней энергии, определяемый формулой (11.1).

Задача теории возмущений – уточнить этот результат, то есть подсказать, как на спектр повлияет наличие небольшой ангармоничности потенциала, представленной двумя слагаемыми (11.9). Это и есть решение исходной задачи (11.1) с произвольной потенциальной энергией  $u(x)$  вида как на рис 11.1, в низшем ангармоническом приближении.

В списке обязательных как раз есть задача, где для такого потенциала предлагается найти низколежащие уровни энергии в низшем ангармоническом приближении. Почему именно их, тоже нужно будет разобраться в процессе решения. То есть мы сводим произвольную задачу (11.1) к конкретной (11.7), где есть конкретный удобный для нас невозмущённый гамильтониан (11.8) и конкретное возмущение (11.9).

На этом творческая часть решения, где мы размышляли, что делать с данной задачей, заканчивается. Дальше возникает техническая реализация намеченного пути. Скажем, что спектр осциллятора невырожден: в (11.11)  $s_n \equiv 1$  для всех  $n$ , так что все



уровни энергии невырождены, и для них есть готовые формулы для вычисления поправок к энергии при исследовании спектра.

Что происходит в  $V^0$ , (11.1), мы уже знаем ввиду удобного выбора  $\hat{H}_0$ . Дальше разберёмся с  $V^1$ . Поправки к энергии первого порядка – это диагональные матричные элементы оператора возмущения  $\hat{V}$ . Нужно усреднить по векторам  $|n\rangle$  из (11.10) выражение (11.9). Получится

$$E_n^{(1)} = V_{nn} = \alpha \langle n | \hat{x}^3 | n \rangle + \beta \langle n | \hat{x}^4 | n \rangle \quad (11.12)$$

У нашего осциллятора есть симметрия гамильтониана (11.7) относительно замены  $x$  на  $-x$ , поэтому его собственные функции в координатном представлении либо чётные, либо нечётные. Когда мы будем считать среднее от  $\hat{x}^n$ , там будет фигурировать квадрат модуля волновой функции, который всегда чётная функция. Поэтому после умножения на  $\hat{x}^3$  подынтегральное выражение в первом слагаемом в (11.12) станет нечётной функцией. И соответствующий интеграл, хоть он и не собственный, от  $-\infty$  до  $+\infty$ , будет сходящимся за счёт экспоненциального убывания собственных функций осциллятора: у них всегда есть экспоненциальный фактор и они на бесконечности довольно быстро стремятся к нулю. Сходящийся интеграл от нечётной функции в симметричных пределах, от  $-\infty$  до  $+\infty$ , обязательно равен нулю. То есть в поправке первого порядка (11.12) первое слагаемое уходит, и остаётся вклад только от низшей чётной ангармонической степени, от четвёртой.

А для вычисления матричного элемента  $\beta \langle n | \hat{x}^4 | n \rangle$  для осциллятора есть хороший метод, связанный с повышающими и понижающими операторами. Оператор координаты удобно записать как

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^+) \quad (11.13)$$

В (11.12) возникнет четвёртая степень этого корня и матричный элемент между векторами с заданным номером  $n$  от  $(\hat{a} + \hat{a}^+)^4$ :

$$\frac{\hbar^2 \beta}{4m^2 \omega^2} \langle n | (\hat{a} + \hat{a}^+)^4 | n \rangle \quad (11.14)$$

$\hat{a}$  и  $\hat{a}^+$  между собой не коммутируют, поэтому бином Ньютона применять нельзя. Нужно расписать все возможные произведения четырёх элементов  $\hat{a}$  или  $\hat{a}^+$ . При вычислении матричных элементов по осцилляторным состояниям разумно подумать, какие из конструкций между обкладками дадут ненулевые вклады в этот элемент. Ненулевой вклад между  $n$ -м и  $n$ -м состояниями дадут только конструкции, содержащие одинаковое количество  $\hat{a}$  и  $\hat{a}^+$ . Иначе это произведение переведёт  $|n\rangle$  не в  $\langle n|$ , и скалярное произведение двух ортогональных собственных векторов гамильтониана  $\hat{H}_0$  даст ноль. Число слагаемых, где по два раза содержатся  $\hat{a}$  и  $\hat{a}^+$ , если вспомнить комбинаторику, определяется числом способов расставить два, например, оператора  $\hat{a}$  и  $\hat{a}$ , по четырём вакантным местам. На двух других при этом встанут операторы  $\hat{a}^+$ .

$C_4^2 = 6$ , так что будет шесть разных слагаемых. Чтобы не запутаться, сначала возьмём конструкцию  $\hat{a}^+ \hat{a}^+ \hat{a} \hat{a}$ , потом переставим один множитель  $\hat{a}$ , потом ещё раз его переставим. У трёх других конструкций на последнем месте будет стоять  $\hat{a}^+$ , их можно получить из данных, поменяв в них местами  $\hat{a}$  и  $\hat{a}^+$ . Так что из (11.14) получится

$$\frac{\hbar^2 \beta}{4m^2 \omega^2} \langle n | (\hat{a}^+ \hat{a}^+ \hat{a} \hat{a} + \hat{a}^+ \hat{a} \hat{a}^+ \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^+ \hat{a}^+ \hat{a} + \hat{a} \hat{a} \hat{a}^+ \hat{a}^+ + \hat{a} \hat{a}^+ \hat{a} \hat{a}^+ + \hat{a}^+ \hat{a} \hat{a} \hat{a}^+)^2 | n \rangle \quad (11.15)$$

Каждая конструкция в (11.15) переводит  $n$ -й вектор в  $n$ -й, скалярное произведение  $\langle n | n \rangle = 1$ , так что нужно следить, какие нормировочные множители вытаскивают конструкции в них.  $\hat{a}$ , действуя на  $|n\rangle$ , вытаскивает  $\sqrt{n}$  и понижает номер на единицу:

$$\hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle, \quad (11.16)$$

а  $\hat{a}^+$  вытаскивает  $\sqrt{n+1}$  и повышает номер на единицу:

$$\hat{a}^+ |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle, \quad (11.17)$$

за что они и называются повышающим и понижающим операторами.

Так что в (11.15) в первом слагаемом последний множитель,  $\hat{a}$ , подействует на  $|n\rangle$  и вытаскивает  $\sqrt{n}$  и выдаст  $|n-1\rangle$ . Следующий  $\hat{a}$  подействует уже на  $|n-1\rangle$ , поэтому вытаскивает  $\sqrt{n-1}$  и выдаст  $|n-2\rangle$ .  $\hat{a}^+$  вытаскивает  $\sqrt{n-1}$  и выдаст  $|n-1\rangle$ , и  $\hat{a}^+$  вытаскивает  $\sqrt{n}$  и выдаст  $|n\rangle$ . То есть, первое слагаемое в (11.5) выдаст  $n(n-1)$ . Второе выдаст  $\sqrt{n} \cdot \sqrt{n} \cdot \sqrt{n} \cdot \sqrt{n}$ , третье  $\sqrt{n} \cdot \sqrt{n} \cdot \sqrt{n+1} \cdot \sqrt{n+1}$ , четвёртое  $\sqrt{n+1} \cdot \sqrt{n+2} \cdot \sqrt{n+2} \cdot \sqrt{n+1}$ , пятое  $\sqrt{n+1} \cdot \sqrt{n+1} \cdot \sqrt{n+1} \cdot \sqrt{n+1}$ , и шестое  $\sqrt{n+1} \cdot \sqrt{n+1} \cdot \sqrt{n} \cdot \sqrt{n}$ .

Тогда формула для первой поправки к энергии  $E_n^{(1)}$

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2 \beta}{4m^2 \omega^2} [n(n-1) + n^2 + n(n+1) + (n+1)(n+2) + (n+1)^2 + n(n+1)] = \\ = \frac{\hbar^2 \beta}{4m^2 \omega^2} (6n^2 + 6n + 3) = \frac{3\hbar^2 \beta}{2m^2 \omega^2} \left( n^2 + n + \frac{1}{2} \right) \end{aligned} \quad (11.18)$$

Она квадратична по  $n$  и связана с коэффициентом  $\beta$ , четвёртой производной потенциала в нуле, поделённой на 24 (11.6). В формулу (11.18) входит  $\omega$ , которая выражается через вторую производную как (11.4), так что мы эту поправку по каждой функции  $u(x)$  посчитаем.

При конкретных вычислениях, например, на контрольной работе, будут встречаться разные функции. Так что стоит дать технический совет не спешить дифференцировать её четыре раза и подставлять значение координаты минимума. На самом деле нам нужно только разложить  $u(x)$  по отклонениям от точки минимума до четвёртой степени, понимая, что первой при этом не будет, так как это точка минимума. Зачастую это сделать проще, особенно если функция сложная.

Поправка первого порядка даёт влияние ангармоничности, но мы потеряли влияние коэффициента кубической степени, она просто занулилось в первом порядке теории возмущений. Однако для произвольного потенциала мы не знаем реальное

соотношение  $\alpha$  и  $\beta$ . Они разной размерности, но при приведении к одной, возможно, коэффициент  $\alpha$  будет очень велик, а  $\beta$  мал. И тогда вторая поправка от занулившегося в (11.12) вклада от  $\alpha$  может оказаться больше, чем от  $\beta^1$ . Также у конкретного потенциала может оказаться, что четвёртая производная в этой точке ноль, тогда будет  $\beta = 0$ , и это всё равно не даст правильного ответа.

Итак, для того, чтобы наш ответ можно было использовать для произвольного потенциала  $u(x)$  в низшем исчезающем приближении, нужно проанализировать поправку второго порядка. В ней будут слагаемые порядка  $\alpha^2$ ,  $\beta^2$  и  $\alpha^1\beta^1$ . Мы предполагаем, что ряд теории возмущений, который у нас получается как ряд по  $\alpha$  и  $\beta$ , должен быть достаточно быстро сходящимся. То есть слагаемые, содержащие более высокую степень  $\beta$ , должны влиять на ответ много меньше, чем содержащие более низкую. И слагаемое порядка  $\beta^2$  должно быть много меньше, чем уже найденное порядка  $\beta^1$  (11.8). Поэтому для анализа низшей исчезающей поправки  $\beta^2$  не нужен, если  $\beta \neq 0$ , мы её для него уже знаем.

Аналогично, если ряд по  $\alpha$  быстро сходящийся, слагаемое порядка  $\alpha^1\beta^1$  тоже можно считать не низшей исчезающей поправкой. Слагаемое с  $\beta^1$  (11.18) уже есть, оно  $\beta^1\alpha^0$ , и по сравнению с ним  $\beta^1\alpha^1$  тоже должно быть маленькой поправкой.

Таким образом, если мы поставили задачу посчитать низшую исчезающую поправку низшего ангармонического приближения, из второго порядка нужно только слагаемое, содержащее  $\alpha^2$ . То есть, переходя к  $V^2$ , выделим слагаемые, пропорциональные  $\alpha^2$ , чем сократим объём вычислений. При этом качественно получим возможность анализировать влияние и поправок от нечётных членов разложения потенциала по  $x_0$ , низшим из которых является третий, и поправок слагаемых с чётной степенью разложения, где низшей является четвёртая, которую мы уже учли. А если мы захотим посчитать  $\alpha^1\beta^1$  и  $\beta^2$ , это можно будет сделать отдельно, готовые формулы для этого уже есть.

Но пока ограничимся главным эффектом. Вторая поправка, где в знаменателе стоит квадрат модуля матричного элемента между  $k$ -м и  $n$ -м вектором от оператора ангармонического возмущения (11.9), это

$$E_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} \frac{|\langle k | \alpha \hat{x}^3 + \beta \hat{x}^4 | n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \quad (11.19)$$

В рамках заданной нами точности не нужно слагаемое  $\beta \hat{x}^4$ , потому что оно как раз и будет давать вклады в  $\alpha^1\beta^1$  и  $\beta^2$ . На место оператора  $\hat{x}$  можно опять подставить (11.13), в качестве множителя получится  $\alpha^2 \frac{\hbar^3}{8m^3\omega^3}$ . А в знаменатель формулу для невозмущённого спектра (11.11), будет  $\frac{1}{\hbar\omega(n-k)}$ ,  $\frac{1}{\hbar\omega}$  вынесем за знак суммы. Получился размерный множитель. Под знаком суммы по  $k \neq n$  в числителе будет матричный элемент от  $(\hat{a} + \hat{a}^+)^3$ , который сразу распишем. Так как в обкладках произвольные  $k$  и  $n$ ,

надо честно расписать перемножение трёх скобок  $(\hat{a} + \hat{a}^+)$ . Сгруппируем получившиеся восемь слагаемых по количеству операторов  $\hat{a}$ , начиная с максимально возможного: сначала возьмём  $\hat{a}^3$ , потом три конструкции, где два оператора  $\hat{a}$  и один  $\hat{a}^+$ , стоящий на одном из трёх возможных мест, дальше где два  $\hat{a}^+$  и один  $\hat{a}$ , и  $\hat{a}^{+3}$ . А в знаменателе под суммой будет  $n - k$ . Собирая всё, из (11.19) получим

$$\alpha^2 \frac{\hbar^3}{8m^3\omega^3} \frac{1}{\hbar\omega} \cdot \sum_{k \neq n} \frac{|(k|\hat{a}^3 + (\hat{a}\hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}\hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}^+\hat{a}\hat{a}) + (\hat{a}^+\hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}^+\hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}\hat{a}^+\hat{a}^+) + \hat{a}^{+3}|n\rangle|^2}{n - k} \quad (11.20)$$

$\hat{a}^3$ , действуя на  $|n\rangle$ , превращает его в  $|n - 3\rangle$ , так что значение  $k$ , при котором из этого слагаемого получается ненулевой матричный элемент, это  $k = n - 3$ . Действие операторов в первой скобке будет превращать  $|n\rangle$  в  $|n - 1\rangle$ , во второй в  $|n + 1\rangle$ , а  $\hat{a}^{+3}$  в  $|n + 3\rangle$ . Таким образом, ненулевые слагаемые получатся только для четырёх значений  $k$ :  $n - 3, n - 1, n + 1, n + 3$ .

Для каждого из этих случаев стоящий в знаменателе  $n - k$  имеет определённое значение: 3, 1, -1, -3. А в числителе  $\hat{a}^3$  при действии на  $|n\rangle$  вытаскивает  $\sqrt{n}\sqrt{n-1}\sqrt{n-2}$ , и потом это выражение возводится в квадрат. Дальше нужно считать среднее от первой скобки в (11.20).  $\hat{a}\hat{a}\hat{a}^+$  вытаскивает  $\sqrt{n+1}\sqrt{n+1}\sqrt{n}$ ,  $\hat{a}^+\hat{a}\hat{a}$  вытаскивает  $\sqrt{n}\sqrt{n-1}\sqrt{n-1}$ , а  $\hat{a}\hat{a}^+\hat{a}$  вытаскивает  $\sqrt{n}\sqrt{n}\sqrt{n}$ . Везде получается  $n^{\frac{3}{2}}$ , но у третьего слагаемого ещё вычитается  $\sqrt{n}$ , а у первого добавляется, они сократятся. Так что общий множитель будет  $3n^{\frac{3}{2}}$ , который возведётся в квадрат. Мы строим матрицу эрмитова оператора, к тому же ещё и вещественную, она симметрична. Так что для второй скобки будет то же самое, но с заменой  $n$  на  $n + 1$ . И для  $\hat{a}^{+3}$  результат тоже можно понять из симметрии или действия этого оператора.

В итоге из (11.20) получится

$$\frac{\hbar^3 \alpha^2}{8m^3 \omega^3} \cdot \left\{ \frac{n(n-1)(n-2)}{3} + \frac{9n^3}{1} + \frac{9(n+1)^3}{-1} + \frac{(n+1)(n+2)(n+3)}{-3} \right\} \quad (11.21)$$

Может показаться, что здесь полином третьей степени. Но на самом деле, как и в случае первой конструкции, он второй степени, так как  $+\frac{n^3}{3}$  и  $-\frac{n^3}{3}$  сократят друг друга, и останутся только слагаемые, содержащие  $n^2, n^1$  и  $n^0$ . Несмотря на то, что в (11.21) есть дроби со знаменателем 3, получится конструкция с целочисленными коэффициентами. Отрицательные вклады больше, чем положительные, так что в целом выражение будет отрицательно. Приведя подобные слагаемые, получим

$$\frac{\hbar^3 \alpha^2}{8m^3 \omega^3} (-30n^2 - 30n - 11) \quad (11.22)$$

Теперь можно выписать нужное нам слагаемое, второй порядок с сохранением только слагаемого, содержащего  $\alpha^2$ . Поскольку мы пренебрегаем слагаемыми порядка  $\beta^2$  и  $\alpha^1\beta^1$ , если вынести из (11.22) множитель  $-30$ ,

$$E_n^{(2)} \approx -\frac{15\hbar\alpha^2}{4m^3\omega^4}\left(n^2 + n + \frac{11}{30}\right) \quad (11.23)$$

Объединяя результаты (11.18) и (11.23) для поправок первого и второго порядка, придём к окончательной формуле для уровней энергии нашего потенциала, вычисленной в рамках теории возмущений в системе приближений, которую мы назвали поиском низших ангармонических поправок. Возвращая  $u_0$  из (11.3), который мы сразу убрали из подсчёта энергии, и гармонический вклад (11.11), получим, что с учётом низших ангармонических поправок уровни энергии

$$E_n \approx u_0 + \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{3\hbar^2\alpha^2}{2m^2\omega^2}\left(n^2 + n + \frac{1}{2}\right) - \frac{15\hbar\alpha^2}{4m^3\omega^4}\left(n^2 + n + \frac{11}{30}\right) \quad (11.24)$$

Мы здесь оборвали ряды, выбросив как минимум слагаемые, содержащие  $\beta^2$  и  $\alpha^1\beta^1$ , а также более высокие, третьи, четвёртые и т. д. степени. Получилось некое приближённое выражение. Но мы для произвольного потенциала  $u(x)$ , про который знали только то, что у него единственная чётко выраженная точка минимума, получили конкретную формулу для уровней энергии.

Нужно разобраться, когда ей можно пользоваться. Данное приближение работает, если ряд (11.24) быстро сходящийся. По сути, нужно, чтобы, независимо от потенциала и того, какое из третьего и четвёртого слагаемых, одно или оба вместе, даёт низшую ангармоническую поправку, она всё равно была много меньше, чем выражение для уровней энергии, отличие  $E_n$  от  $u_0$ , в гармоническом приближении, второе слагаемое. Если же третье и четвёртое слагаемое по модулю порядка второго, то и отбрасывание последующих слагаемых – операция некорректная.

Поэтому можно взять общее условие применимости, которое выдаст такой же результат. Или, посмотрев на полученное разложение, заметить, что условием его применимости будет

$$\max\left(\frac{3\hbar^2|\beta|}{2m^2\omega^2}\left(n^2 + n + \frac{1}{2}\right), \frac{15\hbar\alpha^2}{4m^3\omega^4}\left(n^2 + n + \frac{11}{30}\right)\right) \ll \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (11.25)$$

На первый взгляд, условие (11.25) довольно сложное, потому что обе сравниваемые величины зависят от  $n$  разным образом. Но в действительности, если возьмём

$$\left(n + \frac{1}{2}\right)^2 = n^2 + n + \frac{1}{4}, \quad (11.26)$$

оба выражения в скобках в (11.25),  $n^2 + n + \frac{1}{2}$  и  $n^2 + n + \frac{11}{30}$ , будут отличаться от неё на достаточно маленькое значение: первая на  $\frac{1}{4}$ , вторая ещё меньше. То есть даже при  $n = 0$

отличие выражения в первой скобке от (11.26) всего в два раза. А чем выше  $n$ , тем оно будет меньше.

Поэтому можно заменить выражения в скобках в (11.25) на  $(n + \frac{1}{2})^2$  без изменения порядков величин, сократить на  $n + \frac{1}{2}$  и, поделив на  $\hbar\omega$ , переписать (11.25) в виде

$$n + \frac{1}{2} \ll \min \left\{ \frac{2m^2\omega^3}{3\pi|\beta|}, \frac{4m^3\omega^5}{15\hbar\alpha^2} \right\} \quad (11.27)$$

Это уже совершенно конкретное требование, ограничивающее возможные значения номеров  $n$ . И теперь понятно почему при формулировке задачи просили найти именно низколежащие уровни энергии.

В самом деле, если мы построили гамильтониан, переписали выражение для уровней энергии к виду осциллятора с низшей ангармонической поправкой, то есть уже знаем  $\omega, \beta, \alpha$ , можно просто посчитать выражение в скобках в (11.27). Если оно оказалось, например, единицей, даже для  $n = 0$  требование (11.27) не выполнено. Значит, ни для каких  $n$  выражение (11.24) нельзя применять с приличной точностью. А если минимум из двух конструкций в (11.27), например, 100, то для низших десяти уровней на уровне точности не хуже 10% (11.24) будет работать. То есть мы сразу получаем приближённую, но вполне осознанную оценку точности.

Мы сохранили в (11.27) слагаемое  $\frac{1}{2}$  слева только для того, чтобы данное условие включало случай для энергии основного состояния системы с  $n = 0$  и даже при нём значения параметров задачи были ограничены разумным требованием.

Теперь можно заявить, что мы полностью решили задачу. Мы разработали, как от начальной функции потенциальной энергии  $u(x)$  перейти к задаче о линейном гармоническом осцилляторе с низшей ангармонической поправкой, как эту задачу решить и как установить условия, при которых полученный ответ может быть использован в отношении данного конкретного потенциала, есть ли вообще такой диапазон номеров  $n$  и насколько далеко он простирается. Мы всегда получаем ограничение сверху, поэтому разумно сказать, что формула (11.24) для низколежащих уровней энергии, где  $n$  ограничено условием (11.27).

Для другого варианта приближённых вычислений, метода ВКБ в рамках квазиклассического приближения, мы видели, что для одномерных потенциальных ям есть формула, которая хорошо работает при  $n \gg 1$ , чем больше  $n$ , тем лучше. То есть рассмотренные два метода являются взаимодополняющими. Для произвольного потенциала  $u(x)$  есть способ, который, возможно, даст корректную формулу в области маленьких значений  $n$ , и есть способ, который даст корректную формулу в области больших. Сочетая эти два результата, можно неплохо представить весь спектр гамильтониана в целом.

Ещё рассмотрим вопрос, не могут ли среди отброшенных слагаемых с  $\alpha^1\beta^1$  и  $\beta^2$  найтись такие, которые дадут поправки того же порядка, что и сохранённые. Обобщим его и дадим на него два ответа. Обобщим в том смысле, что вспомним, что мы выбросили не только слагаемые с  $\alpha^1\beta^1$  и  $\beta^2$ , но и те, которые в разложении реального потенциала соответствовали  $(x - x_0)^5$ ,  $(x - x_0)^6$  и т. д. То есть уже когда мы выводили ответ, предполагали, что эта операция корректна, что мы имеем право выделять низшее ангармоническое приближение. Это накладывает некоторые ограничения на вид потенциала и, по-хорошему, для конкретного это надо проверять.

Первый ответ на вопрос про  $\alpha^1\beta^1$  и  $\beta^2$  более длинный. Нужно понимать, что если полученный ответ разумен, то возникающие здесь ряды по степеням  $\alpha$  и  $\beta$  должны быть быстро сходящимися. И тогда все следующие поправки должны давать более маленькие вклады. Если это не так, мы должны не решать по теории возмущений задачу про ангармонические поправки, а пытаться учесть эту поправку в произвольной степени  $\alpha$  и  $\beta$ , то есть честно решить задачу с ней. Мы этого делать не стали, сочтя, что это слишком сложно для произвольного потенциала  $u(x)$ . То есть выбрали такой класс потенциалов, при которых данный подход хороший.

Конечно, можно придумать и класс потенциалов, где отброшенные поправки будут порядка оставленных. Например, для потенциала, у которого большое  $\beta$  и маленькое  $\alpha$ , отброшенные слагаемые порядка  $\alpha^1\beta^1$  могут оказаться того же порядка или даже больше, чем оставленное нами слагаемое порядка  $\alpha^2$ . Но они всё равно будут меньше, чем учтённое слагаемое  $\beta^1$ . То есть правильный ответ №1 выглядит так: либо здесь вообще нельзя пользоваться теорией возмущений, либо отброшенное слагаемое заведомо даёт маленькие поправки на фоне основного из учтённых. Не обязательно оба учтённых слагаемых будут намного больше, чем любое из отброшенных, но наибольшее из них точно много больше всех тех, если процедура корректна. А у нас есть отличный способ проверить её корректность, посмотрев условие применимости и увидев, соответствует ли нужное нам  $n$  диапазону значений, который отвечает выполнению этого условия.

Ответ №2 более короткий и жестокий. Если возникло подозрение, что для конкретного потенциала процедура отбрасывания слагаемых порядка  $\alpha^1\beta^1$  и  $\beta^2$  некорректна, можно честно посчитать эти вклады. Никаких принципиальных сложностей в процедуру вычисления это не добавит, у нас уже есть готовая конечная формула, просто увеличится объём арифметических действий. Но в большинстве случаев, прежде чем это делать, стоит посмотреть ответ №1 и подумать, нужно ли оно.

Перейдём ко второму примеру. Если в первом мы рассматривали случай невырожденного невозмущённого уровня, во втором разберём случай вырождения, чтобы понять, чем он отличается. Ограничим себя невозмущённым гамильтонианом снова осцилляторного типа, так как считать матричные элементы по осцилляторным состояниям легко алгебраически, без интегралов.

## Задача 2. Спектр низколежащих уровней энергии двумерной системы

Есть двумерная система, где материальная квантовая точечная частица массы  $m$  движется в плоскости  $(x, y)$ , и гамильтониан состоит из кинетической энергии, потенциальной энергии изотропного двумерного осциллятора с одинаковыми частотами по осям  $x$  и  $y$ , и ещё одного слагаемого:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2}{2m} + \frac{m\omega^2(\hat{x}^2 + \hat{y}^2)}{2} + \lambda\hat{x}\hat{y}, \quad (11.28)$$

где  $\lambda$  – некая величина размерности, совпадающей с  $m\omega^2$ . Мы полагаем, что

$$|\lambda| \ll m\omega^2, \quad (11.29)$$

то есть последнее слагаемое в (11.28) – это некая маленькая поправка.

Считая его возмущением, исследуем спектр низколежащих уровней энергии. Опять ограничимся ими, потому что уже понимаем, что распространение на высоколежащие всегда требует отдельного исследования. Даже сделаем более конкретно, исследуем район низших трёх невозмущённых уровней.

Если мы считаем в (11.28) невозмущённым гамильтонианом

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2}{2m} + \frac{m\omega^2(\hat{x}^2 + \hat{y}^2)}{2}, \quad (11.30)$$

а возмущением

$$\hat{V} = \lambda\hat{x}\hat{y}, \quad (11.31)$$

то для такого разбиения знаем собственные вектора и собственные значения  $\hat{H}_0$ .

Двумерный осциллятор можно рассмотреть как наложение двух линейно независимых осцилляторов по осям  $x$  и  $y$ . Поэтому уровни энергии можно записать как

$$E_n^{(0)} = \hbar\omega\left(n_x + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega\left(n_y + \frac{1}{2}\right) = \hbar\omega(n_x + n_y + 1) \quad (11.32)$$

где  $n_x$  и  $n_y$  – квантовые числа, задающие номер возбуждения составляющего осциллятора по  $x$  и по  $y$ . То есть соответствующий собственный вектор можно ими пронумеровать как  $|n_x n_y\rangle$ , однозначно задавая это состояние, которое является произведением состояния первого осциллятора с числом возбуждений  $n_x$  и второго с  $n_y$ :

$$|n_x n_y\rangle = |n_x\rangle |n_y\rangle \quad (11.33)$$

Заметим, уровни энергии (11.32) в действительности зависят только от суммы квантовых чисел  $n_x$  и  $n_y$ . Так что, если введём главное квантовое число

$$n = n_x + n_y, \quad (11.34)$$

можно будет занумеровать уровни энергии по стандартной схеме только им.  $n$  пробегает значения, которые могут получить в результате суммирования  $n_x$  и  $n_y$ , то есть  $0, 1, 2, 3 \dots$

Тогда (11.32) переписывается как

$$\hbar\omega(n + 1) \quad (11.35)$$



Чтобы воспользоваться стандартными формулами, надо ввести ещё одно квантовое число  $\alpha$ , чтобы оно нумеровало состояния  $|n_x n_y\rangle$ , отвечающие одному и тому же уровню энергии  $n$ . Например, чтобы оно пробегало значения, начиная с 1, как

$$\alpha \equiv n_x + 1 \quad (11.36)$$

Тогда  $n_x$  и  $n_y$  будут выражаться через него однозначно:

$$n_x = \alpha - 1 \quad (11.37)$$

$$n_y = n + 1 - \alpha \quad (11.38)$$

Собственный вектор невозмущённого гамильтониана, отвечающего уровню энергии  $E_n^{(0)}$ ,  $|\psi_{n\alpha}^{(0)}\rangle$ , который дальше будем писать как  $|n\alpha\rangle$ , через вектора возбуждения  $|n_x\rangle$  и  $|n_y\rangle$  эффективных осцилляторов, совершающих колебания по осям  $x$  и  $y$ , запишется как

$$|\psi_{n\alpha}^{(0)}\rangle \equiv |n\alpha\rangle = |\alpha - 1\rangle |n + 1 - \alpha\rangle \quad (11.39)$$

Видно, что  $\alpha$  пробегает значения от 1 до  $n + 1$ , потому что тогда, согласно (11.37)  $n_x$  пробегает от 0 до  $n$ , а  $n_y$ , согласно (11.38), от  $n$  до 0, как и нужно. То есть кратность вырождения уровня энергии (11.32) оказывается  $s_n = n + 1$ , поскольку есть ровно  $n + 1$  способ разбить число  $n$  в сумму двух чисел  $n_x$  и  $n_y$ , пробегающих значения от 0 до  $n$ :  $0 + n$ ,  $1 + (n - 1)$  и т. д. до  $n + 0$ .

Итак, мы естественным образом исследовали, что в нулевом порядке по возмущению имеем изотропный двумерный осциллятор со спектром энергетических уровней (11.32) и собственными векторами (11.39), занумерованными стандартным образом двумя квантовыми числами  $n$  и  $\alpha$ , где  $\alpha$  пробегает значения от 1 до кратности вырождения уровня  $E_n^{(0)}$ , равной  $n + 1$ .

Дальше рассмотрим, что будет в первом порядке по  $n$ . У самого низшего уровня основного состояния, где  $n = 0$ , кратность вырождения  $s_0 = 1$ , он невырожденный. Тогда

$$E_n^{(0)} = \hbar\omega \quad (11.40)$$

А  $E_0^1$  считаем от оператора возмущения (11.31) по исходному состоянию, при  $n = 0$   $\alpha$  отсутствует. Основное состояние через произведение векторов состояний составляющих операторов  $|n_x\rangle$  и  $|n_y\rangle$  записывается единственным образом, с  $n_x = 0$  и  $n_y = 0$ . Так что получается

$$E_0^1 = \langle 00 | \lambda \hat{x} \hat{y} | 00 \rangle = \lambda \cdot \langle 0 | \hat{x} | 0 \rangle \langle 0 | \hat{y} | 0 \rangle = 0 \quad (11.41)$$

Оба средних значения координаты для осцилляторов, колеблющихся по оси  $x$  и  $y$ , равны нулю. Среднее значение координаты осциллятора в любом стационарном состоянии всегда ноль. Так что в первом порядке теории возмущений исходный уровень остаётся на месте.

Теперь рассмотрим, что происходит с уровнем с  $n = 1$ . Он уже двукратно вырожден,  $s_1 = 2$ .  $\alpha = 1, 2$ , при этом вектор  $|n\alpha\rangle$  (11.39) через номера возбуждения по осям  $x$  и  $y$

$$|11\rangle = |0\rangle \cdot |1\rangle \quad (11.42)$$

$$|12\rangle = |1\rangle \cdot |0\rangle \quad (11.43)$$

Соответственно, матрица оператора возмущения  $V_{\alpha\beta}$ , матрица  $2 \times 2$ ,

$$V_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} V_{11} & V_{12} \\ V_{21} & V_{22} \end{pmatrix}, \quad (11.44)$$

её составляющие находим как матричные элементы от оператора (11.31) между соответствующими состояниями. С  $V_{11}$  произойдёт то же самое, что и в (11.41). Только  $\hat{x}$ , согласно (11.42), будет усредняться по состоянию  $|0\rangle$ , а  $\hat{y}$  по  $|1\rangle$ , но средние значения координаты всё равно будут нулями. Аналогично произойдёт и с  $V_{22}$ , где  $\hat{x}$ , в соответствии с (11.43), будет усредняться по состоянию  $|1\rangle$ , а  $\hat{y}$  по  $|0\rangle$ :

$$V_{11} = V_{22} = 0 \quad (11.44)$$

Матричные элементы  $V_{12}$  и  $V_{21}$  будут вещественны, так что ещё и равны друг другу. В матричном элементе от оператора  $\hat{x}$ ,  $|21\rangle$  аналогично (11.42) и (11.43), где слева  $x$  – возбуждение с номером 1, а с другой стороны с номером 0, получается, что вычисляется  $\langle 1|\hat{x}|0\rangle$ . Тогда матричный элемент от оператора  $\hat{y}$ , как видно из структуры векторов, будет вычисляться между состояниями, у которых номера расставлены в обратном порядке.

$$V_{21} = V_{12} = \lambda \langle 1|\hat{x}|0\rangle \langle 0|\hat{y}|1\rangle \quad (11.45)$$

Заметим, что в записи матрицы (11.44) стоят именно индексы  $\alpha$ . Номер  $n = 1$  мы, как и договаривались, перестали замечать, поскольку в рамках данного пункта исследуем уровень

$$E_n^{(0)} = 2\hbar\omega, \quad (11.46)$$

для которого везде  $n = 1$ .

Сами матричные элементы вычислить очень легко. Оператор  $\hat{x}$  можно записать как (11.13), матричный элемент от него из (11.45) будет

$$\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle 1|\hat{a}_x + \hat{a}_x^+|0\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}, \quad (11.47)$$

так как отличен он нуля будет только матричный элемент от  $\hat{a}_x^+$ , который переводит 0 в 1, и скалярное произведение  $\langle 1|1\rangle = 1$ .

Поскольку оператор  $\hat{y}$  такой же, как и  $\hat{x}$ , ведь исходный осциллятор изотропен, матричный элемент для него будет аналогичен (11.47), только между 0 и 1. Поэтому сработает оператор  $\hat{a}_y$ , но точно также, и результат будет такой же. Так что из (11.45) получится

$$\frac{\hbar\lambda}{2m\omega} \tag{11.48}$$

Тогда, в силу условия на  $\lambda$  (11.29),

$$|V_{12}| \ll \hbar\omega \tag{11.49}$$

и много меньше значения энергии невозмущённого уровня (11.46).

Построим секулярное уравнение для данной задачи для невозмущённого двукратно вырожденного уровня (11.46). Напишем  $V_{\alpha\beta} - E\delta_{\alpha\beta}$ , то есть в матрицу оператора возмущения (11.44) с уже вычисленными коэффициентами (11.44) и (11.48) на главную диагональ добавим  $-E$  и приравняем её детерминант к нулю:

$$\det \begin{pmatrix} 0 - E & \frac{\hbar\lambda}{2m\omega} \\ \frac{\hbar\lambda}{2m\omega} & 0 - E \end{pmatrix} = 0 \tag{11.50}$$

Будет квадратное уравнение

$$E^2 - \left(\frac{\hbar\lambda}{2m\omega}\right)^2 = 0 \tag{11.51}$$

У него два разных корня, два возможных значения поправки первого порядка

$$E_{1,2}^{(1)} = \pm \frac{\hbar\lambda}{2m\omega} \tag{11.52}$$

То есть двукратно вырожденный уровень после включения возмущения (11.31) разбивается на два невырожденных подуровня, расположенных симметрично по отношению к исходному (рис. 11.2), с разностью энергии

$$\Delta E = \frac{\hbar|\lambda|}{m\omega} \ll \hbar\omega \tag{11.53}$$

$|\lambda|$  ставим, потому что  $\lambda$  разного знака, и  $\Delta E$  всегда разность более высоколежащей и более низколежащей энергии, а какая какой в (11.52) окажется, зависит от знака  $\lambda$ . Но данное расстояние всегда много меньше, чем само значение энергии на шкале энергии от нуля, то есть в ней это действительно небольшое расщепление.

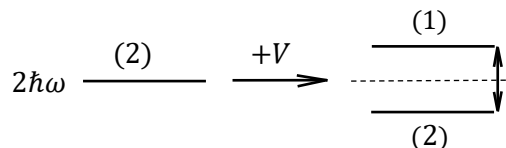


Рис. 11.2. Расщепление уровня энергии на два подуровня

Посмотрим, что будет для следующего уровня  $n = 2$ . Для него

$$E_2^{(0)} = 3\hbar\omega, \tag{11.54}$$

а кратность вырождения  $s_2 = 3$ , так что здесь возникнет матрица  $3 \times 3$ . Но теперь правильно занумерованные через  $n$  и  $\alpha$  собственные вектора будут следующие. В [21]

$\alpha = 1$ , поэтому, согласно (11.37),  $n_x = 0$ . А поскольку должно быть  $n_x + n_y = 2$ , номер возбуждения по  $y$  будет 2. Аналогично для  $|22\rangle$  и  $|23\rangle$ , поэтому получится

$$|21\rangle = |0\rangle_x |2\rangle_y \quad (11.55)$$

$$|22\rangle = |1\rangle_x |1\rangle_y \quad (11.56)$$

$$|23\rangle = |2\rangle_x |0\rangle_y \quad (11.57)$$

Так что, когда мы будем вычислять матричные элементы, где  $\hat{x}^1$  и  $\hat{y}^1$ , и  $\hat{a}$  и  $\hat{a}^+$  тоже будут возникать в первой степени, отличные от нуля будут только между состояниями, где номер возбуждения соответствующего линейного осциллятора по оси  $x$  или  $y$  отличается на единицу. Где они совпадают, в матрице это главные диагональные элементы, будут нули. Где они различаются на два, в верхнем правом и нижнем левом углу, тоже. Четыре остальных элемента получатся ненулевыми, причём ещё и одинаковыми. Например, для верхнего центрального, когда мы считаем между матричными элементами (11.55) и (11.56), для  $x$  возникает матричный элемент между 0 и 1 (11.47). А для  $y$  между 2 и 1. Когда  $\hat{a}^+$  действует на  $|1\rangle$ , он дополнительно вытаскивает  $\sqrt{2}$ . Так что там будет  $\sqrt{\frac{\hbar\lambda}{2m\omega}} \cdot \sqrt{2} \sqrt{\frac{\hbar\lambda}{2m\omega}}$ , как и на левом центральном месте по симметрии. А поскольку на оставшихся двух местах просто происходит перестановка между  $x$  и  $y$ , оператор возмущения (11.31) тоже симметричен относительно замены  $x$  на  $y$ , там будут те же самые выражения. И вся матрица будет

$$\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} \frac{\hbar\lambda}{2m\omega} & 0 \\ \sqrt{2} \frac{\hbar\lambda}{2m\omega} & 0 & \sqrt{2} \frac{\hbar\lambda}{2m\omega} \\ 0 & \sqrt{2} \frac{\hbar\lambda}{2m\omega} & 0 \end{pmatrix} \quad (11.58)$$

Тогда секулярное уравнение

$$\det(V_{\alpha\beta} - E\delta_{\alpha\beta}) = 0 \quad (11.59)$$

На главной диагонали в (11.58) везде стоят просто  $-E$ , так что можно разложить детерминант по любой строке или столбцу с соответствующими слагаемыми. Будет

$$(-E) \left( E^2 - \frac{\hbar^2 \lambda^2}{2m^2 \omega^2} \right) + (-1) \sqrt{2} \frac{\hbar\lambda}{2m\omega} \left( (-E) \frac{\hbar\lambda}{2m\omega} \sqrt{2} \right) = 0 \quad (11.60)$$

Это кубическое уравнение, но из-за того, что  $E$  здесь возникает общим множителем в первой степени, оно сводится к уравнению вида

$$E \left( E^2 - \frac{\hbar^2 \lambda^2}{m^2 \omega^2} \right) = 0 \quad (11.61)$$

Его три корня

$$E = 0, \pm \frac{\hbar\lambda}{m\omega} \tag{11.62}$$

То есть трёхкратно вырожденный уровень (11.54) разбивается на три подуровня (рис. 11.3), расположенных симметрично относительно друг друга на расстоянии  $\Delta E$ , тоже выражаемом формулой (11.52).

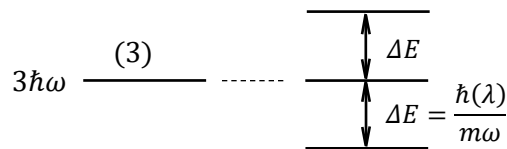


Рис. 11.3. Расщепление уровня энергии на три подуровня

Тогда, по аналогии,  $k$ -й уровень  $k\hbar\omega$  с кратностью вырождения  $k$  разобьётся на  $k$  подуровней, расположенных симметрично относительно друг друга на том же самом расстоянии.

Здесь мы, во-первых, понимаем, что это ограничено, ведь данная система за счёт подуровней начинает расплзаться всё дальше и дальше. Тогда подуровни, на которые расщепился уровень  $k\hbar\omega$ , и на которые расщепился  $(k + 1)\hbar\omega$ , при увеличении  $k$  начнут приближаться друг к другу и в какой-то момент перепутываться. Это будет означать, что у возмущённого гамильтониана уровни энергии уже не удобно нумеровать прежним способом. И вообще, в данном подходе мы явно подразумеваем, что величина расщепления между уровнями, которая как раз регулируется модулем недиагонального матричного элемента, а те все порядка  $\frac{\hbar\lambda}{m\omega}$ , должна быть мала по сравнению с разностью между соседними уровнями, равной  $\hbar\omega$ . Если это выполняется, как мы и требовали в (11.53), они не сблизятся.

То есть формальный признак нарушения требований корректности теории возмущений в задачах с расщеплением вырожденных уровней – когда системы подуровней, на которые расщепились соседние уровни, начинают слишком сильно приближаться друг к другу и возникает опасность, что они перемешаются. Тогда очевидно, что возмущение слишком сильное.

Во-вторых, эта задача имеет удивительное свойство – позволяет произвести внутреннюю проверку метода. Мы получили результат в рамках теории возмущений и можем сравнить его с точным, потому что эта задача, если вспомнить вид гамильтониана (11.28), допускает точное решение. Ведь форма потенциальной энергии квадратичная, мы добавили слагаемое  $\lambda\hat{x}\hat{y}$ , которое тоже квадратичное по  $x$  и  $y$ . Так что существует преобразование поворота в плоскости  $x$  и  $y$ , можно перейти к новым координатам  $x'$  и  $y'$ , в которых квадратичная форма потенциальной энергии будет диагонализирована. То есть там будет  $\frac{m\omega\hat{x}'^2}{2} + \frac{m\omega\hat{y}'^2}{2}$ . Тогда возникнут два независимых осциллятора, совершающих колебания по осям  $\hat{x}'$  и  $\hat{y}'$ . И тогда существует точное решение

$$E_{\text{точн}} = \hbar\omega_x \left( n_x + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega_y \left( n_y + \frac{1}{2} \right) = \hbar \left( n_x\omega_x + n_y\omega_y + \frac{\omega_x + \omega_y}{2} \right) \quad (11.63)$$

Дальше, разлагая  $\omega_x$  и  $\omega_y$  по степеням  $\lambda$ , – ведь у нас есть точная формула, выражающая их через  $\lambda$  и  $\omega$ , которую мы получаем при диагонализации квадратичной формы, – мы находим, как точное решение (11.63) разлагается по степеням параметра  $\lambda$ . И можем сравнить, что получается, когда мы ограничимся здесь разложением с точностью до  $\omega^1$ , с ответом, полученным из теории возмущений. Это полезно сделать самостоятельно, чтобы вспомнить диагонализацию квадратичных форм и применить её в задаче квантовой механики. Выполнив это, мы обнаружим, что в первом порядке разложения по  $\lambda$  точного решения здесь получается тот же результат, который выдаёт в первом порядке по  $\lambda$  теория возмущений. Так что можно сделать вывод, что в этом случае теория возмущений выдерживает проверку на корректность подхода.

Итак, мы рассмотрели два важных примера, где изучали логику работы как в случае невырожденного невозмущённого уровня, так и при наличии вырождения. Обе эти схемы чётко известны, и фактически, как только мы разбили исходный гамильтониан на невозмущённый и возмущение, дальше все наши действия в рамках стационарной теории возмущений жёстко регламентированы. Главное, получив ответ, вспомнить, что этот метод приближённый, и для данной конкретной задачи установить условие корректности полученного ответа. То есть понять, при каких значениях параметра в ней можно пользоваться ответом, полученным в рамках теории возмущений, как говорят теоретики, пертурбативным, без серьёзных ошибок.

## Семинар 12. Неравенство Белла

Мы будем разбирать конкретные примеры по теме, которую изучили на лекции. Но сначала сделаем замечание. В концовке рассуждений на лекции мы, чтобы сэкономить время, написали неравенство для модуля функции. А когда умножили его на  $\omega(\vec{\lambda})$  и проинтегрировали, написали аналогичное неравенство на отношение результатов интегрирования этих функций. Вообще говоря, это неправильный шаг.

Но, с другой стороны, продемонстрированные рассуждения были чисто формально математическим трюком, мы просто хотели получить какое-нибудь неравенство, которое потом можно будет проверять. На самом деле надо было писать его не для  $|F|$ , как мы сразу сделали, а для самой  $F$ . Тогда, после проведения таких рассуждений, мы бы получили неравенство  $-2 \leq F \leq 2$ . А после этого уже без всяких проблем для самой функции произвели умножение на  $\omega(\vec{\lambda})$  и проинтегрировали. И получили бы для написанной комбинации корреляторов требование, что она  $\in [-2, 2]$ . Итоговое ограничение на её модуль было бы ровно тем, которое мы написали в результате ускоренного вычисления. Данный ответ, предсказание концепции локального реализма, выглядел как

$$|C(AB) + C(A'B) + C(AB') + C(A'B')| \leq 2 \tag{12.1}$$

Можно самостоятельно выполнить небольшое полезное упражнение – превратить ускоренную процедуру в чуть более длинную нормальную и получить тот же ответ.

### Задача 1. Проверка неравенства Белла для распада частицы на два фермиона

Рассмотрим конкретную задачу о нахождении этих корреляторов в эксперименте по парадоксу ЭПР в версии Боба. Скалярная частица распалась на два фермиона со спинами  $s_1 = s_2 = \frac{1}{2}$ , они полетели в разные стороны. Наблюдатели Alice и Bob производят измерения над частицами: Alice над частицей 1, а Bob над частицей 2 (рис. 12.1).

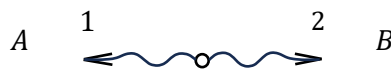


Рис. 12.1. Распад частицы на два фермиона

Начальное состояние с определённым полным спином  $S$  и его проекцией на ось  $z$   $S_z$ , имеющими нулевые значения, частицы в нём родились:

$$|SS_z\rangle = |00\rangle \tag{12.2}$$

Введём в пространстве координатные оси  $x, y, z$  и базис из состояний с определённой проекцией спина на ось  $z$  у первой и второй частиц. Базисные состояния для записи спиновой части волновой функции частицы, как обычно, будут  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  или  $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ .

Будем писать пространство спиновых состояний частиц в виде упорядоченного произведения двух данных спиноров: частицы у нас различимы, первый спинор будет описывать состояние первой, а второй второй. Тогда состояние (12.2) в пространстве таких упорядоченных произведений, как мы уже делали для такой системы, будет

$$|\psi\rangle = |SS_z\rangle = |00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right] \quad (12.3)$$

Наблюдаемые, которые предлагал измерять Бом, например,  $\hat{S}_x$  и  $\hat{S}_z$ , между собой не коммутируют. Средние значения у них равны нулю, но они меняются, их спектр содержит  $-\frac{1}{2}$  и  $+\frac{1}{2}$ . А мы хотели, чтобы он был в интервале от  $-1$  до  $+1$ . Для этого нужно просто умножить спины на два.

Итак, нас интересует плоскость  $xz$  (рис. 12.2). Наблюдаемая  $\hat{A}$  будет удвоенной проекцией спина первой частицы, над которой производит измерение Alice, на ось  $z$ . Она будет принимать значения  $-1$  и  $+1$ :

$$\hat{A} = 2\hat{S}_{1z} \quad (12.4)$$

Парная к ней наблюдаемая  $\hat{A}'$ , которую тоже измеряет Alice, будет

$$\hat{A}' = 2\hat{S}_{1x} \quad (12.5)$$

Это тоже оператор наблюдаемой, принимающий значения  $-1$  и  $+1$ , со средним значением, равным нулю, но не коммутирующий с (12.4).

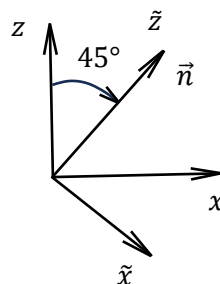


Рис. 12.2. Выбор координатных осей

А для  $\hat{B}$  введём пару координатных осей  $\tilde{x}\tilde{z}$ , которые есть оси  $x$  и  $z$ , повернутые на угол  $45^\circ$  (рис. 12.2). Этот выбор нужен, чтобы взять конкретное состояние и конкретную наблюдаемую. Соответственно,

$$\hat{B} = 2\hat{S}_{2\tilde{z}} \quad (12.6)$$

$$\hat{B}' = 2\hat{S}_{2\tilde{x}} \quad (12.7)$$

То есть у второй частицы измеряется проекция спина либо на ось  $\tilde{z}$ , либо на  $\tilde{x}$ . У нас допустимы все возможные начальные состояния, все пары наблюдаемых, измерения которых можно реализовать на практике. Мы выбрали конкретное начальное состояние (12.3), и всё, что делаем сейчас, реализуемо.



Получились две пары наблюдаемых:  $\hat{A}$  и  $\hat{A}'$ ,  $\hat{B}$  и  $\hat{B}'$  с нулевыми средними и диапазоном значений от  $-1$  и  $+1$ . Если мы производим соответствующее измерение, корреляторы с точки зрения концепции локального реализма должны удовлетворять неравенству (12.1).

Честно вычислим коррелятор  $C(AB)$  по состоянию (12.3) от наблюдаемой  $\hat{A}\hat{B}$ . Нулевое среднее упрощает и укорачивает вычисления. Подставляя выражения (12.4) и (12.6), получим

$$C(AB) = \langle 00 | 4\hat{s}_{1z}\hat{s}_{2\tilde{z}} | 00 \rangle \quad (12.8)$$

В нашей системе координат  $\hat{s}_{1z}$ , оператор спина для частицы спина  $\frac{1}{2}$ , будет записан, как обычно, через матрицу, как

$$\hat{s}_{1z} = \frac{1}{2}\hat{\sigma}_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (12.9)$$

Тогда оператор (12.4) будет записан как

$$\hat{A} = \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (12.10)$$

А чтобы получить матрицу  $\hat{s}_{2\tilde{z}}$  для (12.6), нужно спроецировать спин на направление  $\tilde{z}$ , которое задаёт вектор

$$\vec{n} = \frac{1}{\sqrt{2}}\vec{e}_z + \frac{1}{\sqrt{2}}\vec{e}_x \quad (12.11)$$

Тогда для (12.6) получится комбинация сигма-матриц  $\sigma_z$  и  $\sigma_x$  с коэффициентами  $\frac{1}{\sqrt{2}}$ , фактически в выражении появляются косинус и синус угла, равные  $\frac{1}{\sqrt{2}}$ .  $\sigma_z$  даёт элементы главной диагонали, а  $\sigma_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$  побочной. В верхнем левом углу стоит  $n_z$ , в нижнем правом  $-n_z$ , в верхнем правом  $n_x + in_y$ , в нижнем левом  $n_x - in_y$ , но  $n_y = 0$ . Так что

$$\hat{B} = 2\hat{s}_{2\tilde{z}} = 2 \cdot \frac{1}{2} \vec{n} \cdot \hat{\sigma} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \hat{B} \quad (12.12)$$

Теперь надо посчитать выражение (12.8). Множители  $\frac{1}{\sqrt{2}}$  из (12.3) в состояниях  $|00\rangle$  должны выдать общий коэффициент  $\frac{1}{2}$ . Дальше будут сопряжённые конструкции из (12.3), потом произведение матриц (12.10) и (12.12),  $\frac{1}{\sqrt{2}}$  вынесем в начало. И в конце конструкции из (12.3). Получится

$$C(AB) = \frac{1}{2\sqrt{2}} [(1 \ 0)(0 \ 1) - (0 \ 1)(1 \ 0)] \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \left( \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right) \quad (12.13)$$

Это уже конкретная матричная конструкция. Нужно помнить, что спинор, стоящий на первом месте, сопряжённый  $(1 \ 0)$  или несопряжённый  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ , перемножается с первой матрицей  $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ . Произведение строки на матрицу  $2 \times 2$  на столбец выдаёт число. Аналогично происходит со вторым спинором и второй матрицей. Когда мы будем считать, например, между первыми конструкциями, первая матрица окажется между спинорами  $(1 \ 0)$  и  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ , в результате чего получится её коэффициент 11 (верхний левый), то есть 1. Поэтому среднее для этой матрицы выдаст 1. Для второй матрицы между  $(0 \ 1)$  и  $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$  получим её коэффициент 22 (нижний правый), равный  $-1$ .

Когда возьмём между выражениями  $(0 \ 1)(1 \ 0)$  и  $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ , первая матрица выдаст коэффициент 22, а вторая 11, то есть  $(-1) \cdot 1$ . Дальше берём перекрёстные значения. При  $(1 \ 0)(0 \ 1)$  и  $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  матричные элементы от первой матрицы между несопряжённым и сопряжённым спинором будут разными, соответственно, будут получаться недиагональные элементы данной матрицы, равные 0. У второй матрицы есть недиагональные элементы (стоящие на побочной диагонали), и недиагональные множители появляются. Но первый множитель всегда ноль, поэтому ещё два слагаемых будут нулевыми.

Тогда в нашей конкретной постановке для конкретного начального состояния и конкретного набора измеряемых величин

$$C(AB) = \frac{1}{2\sqrt{2}} [1 \cdot (-1) + (-1) \cdot 1 + 0 + 0] = -\frac{1}{\sqrt{2}} \quad (12.14)$$

Нужно проделать такие вычисления ещё трижды. Мы каждый раз будем брать соответствующее произведение матриц, (12.5) и (12.7) построим аналогично (12.10) и (12.12):

$$\hat{A}' = 2\hat{s}_{1x} = 2 \cdot \frac{1}{2} \cdot \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (12.15)$$

Для матрицы  $\hat{B}'$  будет направление  $\tilde{x}$ ,

$$\vec{n} = -\frac{1}{\sqrt{2}} \vec{e}_z + \frac{1}{\sqrt{2}} \vec{e}_x, \quad (12.16)$$

у  $n_z$  на главной диагонали в (12.12) поменяются знаки, и получится

$$B' = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & +\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \quad (12.17)$$

После вычисления всех корреляторов в (12.1) получается

$$\left| -\frac{1}{\sqrt{2}} + \left(-\frac{1}{\sqrt{2}}\right) + \left(-\frac{1}{\sqrt{2}}\right) - \frac{1}{\sqrt{2}} \right| \leq 2, \quad (12.18)$$

и неравенство Белла принимает вид

$$2\sqrt{2} \leq 2 \quad (12.19)$$

То есть оно не выполняется.

Итак, квантовая теория предсказывает, что Alice и Bob, набрав статистику измерений в однотипных ситуациях рождения таких пар частиц в данном состоянии, должны получить для этой комбинации корреляторов модуль, равный  $2\sqrt{2}$ . А концепция локального реализма утверждает, что данный модуль не должен превосходить 2. Это различаемые предсказания.

Эксперименты для данного неравенства Белла, в том числе этот, и для других были выполнены много раз. Причём не только со спиновыми измерениями, но и с измерением статистики других зарядовых характеристик адронов, например над К-мезонами при их распаде. Все эксперименты фактически выполняли ту же самую функцию, проверяли реальное значение соответствующей комбинации корреляторов, для которой написано неравенство Белла. И довольно часто обнаруживалось, что для конкретного состояния квантовое вычисление даёт значение, не удовлетворяющее неравенству Белла, полученному из предположения, что всё должно описываться в рамках концепции локального реализма. Реальный эксперимент при хорошем наборе статистики подтверждал правоту квантовой теории, позволял увидеть, что среднее значение комбинации корреляторов (12.1) стремится к  $2\sqrt{2}$ , то есть превышает ограничение Белла.

Таким образом, можно повторить вслед за Беллом утверждение, что концепция локального реализма противоречит результатам реальных измерений в микромире. Это один из очень сильных аргументов в пользу парадигмы квантовой теории, и он действительно сработал, многие исследователи стали её придерживаться. И вообще копенгагенская трактовка квантовой теории на долгое время стала лидирующей трактовкой положений квантовой теории. В частности, описание процедуры измерений на базе эрмитовых операторов в гильбертовом пространстве чистых состояний, которое мы включили в нашу аксиоматику, выросло из рассуждений, связанных с подобными проверками.

Мы выбрали в данной задаче угол в  $45^\circ$ , заранее зная, что это приведёт к нарушению неравенства Белла. Можно дополнить эту демонстрацию общим исследованием. Посчитать среднее значение этой комбинации корреляторов с теми же  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$ , с тем же самым начальным состоянием, но для произвольного угла  $\alpha$  от осей  $x$  и  $z$  к осям  $\tilde{x}$  и  $\tilde{z}$ . Переделаются только матрицы (12.12) и (12.17), они теперь будут содержать в нужных местах синусы и косинусы угла  $\alpha$ , и косинус не будет равен синусу. После этого мы вычислим, как модуль комбинации корреляторов (12.1) зависит от угла от  $\alpha$ . Он окажется некой функцией от  $\alpha$ , меняющейся от 0 до  $2\sqrt{2}$ . И будет существовать такой

выбор наблюдаемых  $\hat{B}$  и  $\hat{B}'$  при фиксированных  $\hat{A}$  и  $\hat{A}'$ , при котором нарушается неравенство Белла в той форме, в которой мы его привели, оно будет нарушаться в некоем диапазоне. Мы выбрали вариант, при котором можно увидеть это в наиболее ярком виде.

Посмотреть, как всё это работает в общем виде, полезное и не очень сложное самостоятельное упражнение. Объявим его дополнительной задачей. Ещё более интересная вещь – придумать или посмотреть в литературе другие формы неравенства Белла и попробовать подобрать критический эксперимент, где мы увидим для конкретного состояния нарушение выбранного неравенства с точки зрения аккуратного вычисления в квантовой теории. Но главное, мы можем, опираясь на результаты работы экспериментаторов, сказать, что все экспериментальные данные в рамках такого подхода однозначно свидетельствуют в пользу парадигмы квантовой теории.

Во втором примере семинара мы вернёмся к теме, с которой лекция начиналась, и посмотрим конкретный пример использования вариационного метода.

## Задача 2. Энергия низших уровней частицы в параболическом потенциале

Частица массы  $m$  совершает одномерное движение в потенциале

$$u(x) = gx^4, \quad (12.20)$$

$g$  – константа.

График этой функции – парабола четвёртой степени (рис. 12.3). Даже визуально понятно, что она похожа на обычную параболу, потенциал линейного гармонического осциллятора, пропорциональный  $x^2$ . В реальности эти функции несколько отличаются, у них разное поведение в нуле и другая степень роста на бесконечности, но симметрии одинаковые. Функция (12.20) симметрична, например, относительно замены  $x$  на  $-x$ .

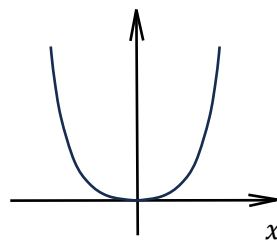


Рис. 12.3. График потенциала четвертой степени

Тогда в качестве пробного потенциала можно с разумной точностью использовать потенциал линейного гармонического осциллятора

$$\bar{u}(x) = \frac{m\omega^2}{2}x^2, \quad (12.21)$$

в котором частота  $\omega$  будет вариационным параметром. Мы выбрали его, потому что для него нам всё известно. Более того, для осциллятора мы умеем вычислять всякие средние, которые нам предстоит считать, без интегралов.

Координатная волновая функция основного состояния линейного гармонического осциллятора содержит вариационный параметр  $\omega$  и, как мы помним, выглядит как

$$\phi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} \quad (12.22)$$

Но она по большому счёту не нужна, так как мы привыкли обозначать его основное состояние вектором с номером уровня  $n = 0$ , как  $|0\rangle$ . Чтобы подчеркнуть, что мы работаем с пробной функцией, зависящей от вариационного параметра  $\omega$ , будем обозначать основное состояние, отвечающее осциллятору с частотой  $\omega$ , как  $|0, \omega\rangle$ .

Тогда, чтобы получить вариационную энергию, нужно посчитать среднее значение от гамильтониана по данному пробному состоянию. Возникнет среднее значение от кинетической энергии, равной  $\frac{\hat{p}_x^2}{2m}$ , и от потенциальной  $gx^4$  (12.20), константу  $g$  можно вынести:

$$\varepsilon(\omega) = \langle 0, \omega | \hat{H} | 0, \omega \rangle = \left\langle 0, \omega \left| \frac{\hat{p}_x^2}{2m} \right| 0, \omega \right\rangle + g \langle 0, \omega | \hat{x}^4 | 0, \omega \rangle \quad (12.23)$$

Для первого слагаемого нужно вспомнить теорему Вириала. Для стационарного состояния среднее значение кинетической энергии осциллятора всегда равно половине полной. Полная энергия осциллятора с частотой  $\omega$  в основном состоянии равна  $\frac{\hbar\omega}{2}$ , так что первое слагаемое (12.23) выдаст  $\frac{\hbar\omega}{4}$ . А во втором слагаемом мы, как обычно, перейдём к представлению повышающих и понижающих операторов, то есть произведём замену

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^+) \quad (12.24)$$

И из (12.23) получится

$$\frac{\hbar\omega}{4} + g \frac{\hbar^2}{4m^2\omega^2} \langle 0, \omega | (\hat{a} + \hat{a}^+)^4 | 0, \omega \rangle \quad (12.25)$$

Мы уже вычисляли такое среднее в примере при изучении стационарной теории возмущений, причём для произвольного  $n$ , а тут  $n = 0$ . Там получалось  $6\left(n^2 + n + \frac{1}{2}\right)$ . Но это легко и вспомнить, потому что понятно, что надо взять из  $(\hat{a} + \hat{a}^+)^4$  в (12.25) только слагаемые с одинаковым количеством  $\hat{a}$  и  $\hat{a}^+$ . В обкладках стоит состояние 0, так что все комбинации, где крайним справа в комбинации из четырёх  $\hat{a}$  и  $\hat{a}^+$  стоит  $\hat{a}$ , или, например, где  $\hat{a}^+$ , а дальше два  $\hat{a}$ , заведомо дадут ноль. То есть значительная часть операторов даст ноль, и для  $n = 0$  мы получим  $\frac{6}{2} = 3$ . Так что конечное выражение для вариационной энергии будет выглядеть как

$$\frac{\hbar\omega}{4} + \frac{3\hbar^2 g}{4m^2\omega^2} \quad (12.26)$$

Это комбинация линейной функции, пропорциональной  $\omega$ , и функции вида  $\frac{1}{\omega^2}$ , так что она выдаст кривую примерно как на рис. 12.4, стремящуюся к бесконечности при  $\omega \rightarrow 0$  и  $\omega \rightarrow \infty$  и с одной точкой минимума. Так что мы здесь по косвенному признаку видим хорошее поведение функции вариационной энергии.

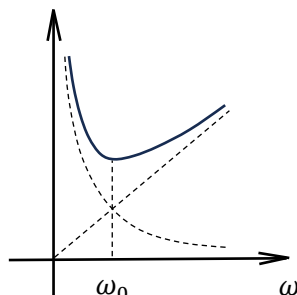


Рис. 12.4. Функция вариационной энергии

Произведём её минимизацию, приравняв её производную к нулю:

$$\frac{d\varepsilon}{d\omega} = 0 = \frac{\hbar}{4} - \frac{3}{2} \frac{\hbar^2 g}{m^2 \omega^2} \quad (12.27)$$

Тогда значение, отвечающее минимуму вариационной энергии основного состояния,

$$\omega_0^3 = \left( \frac{6\hbar g}{m^2} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (12.28)$$

Теперь для нахождения приближённого значения энергии основного состояния достаточно взять значение вариационной энергии в точке минимума. Иногда, используя свойства конкретной задачи, этот результат можно слегка уточнить. Мы найдём самое грубое приближённое значение, просто подставляя (12.28) в (12.26). Получается

$$E_{\text{осн}} \approx \varepsilon(\omega_0) = \frac{\hbar}{4} \left( \frac{6\hbar g}{m^2} \right)^{\frac{1}{3}} + \frac{3}{4} \frac{\hbar^2 g}{m^2} \left( \frac{m^2}{6\hbar g} \right)^{\frac{2}{3}} = \frac{6^{\frac{1}{3}}}{4} \frac{\hbar^{\frac{4}{3}} g^{\frac{1}{3}}}{m^{\frac{2}{3}}} \left[ 1 + \frac{1}{2} \right] = \left( \frac{3}{4} \right)^{\frac{4}{3}} \left( \frac{\hbar^4 g}{m^2} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (12.29)$$

Мы знаем волновую функцию основного состояния, но для вычисления достаточно сказать, что его вектор

$$|\text{осн}\rangle \approx |0, \omega_0\rangle, \quad (12.30)$$

где частота  $\omega_0$  выражается формулой (12.28).

Это явный пример вычислений, сложных здесь не возникло. И особо хорошо получилось из-за того, что в качестве пробного потенциала был выбран потенциал линейного гармонического осциллятора. По собственным функциям задачи о нём, как мы помним, усреднять любые функции от  $x$  довольно легко.

Теоретически можно продолжить вычисления и дальше. Если нас интересует низшее возбуждённое состояние частицы массы  $m$  в более точном потенциале, его нужно записать как

$$|1\rangle = c_1|0, \omega\rangle + c_2|1, \omega\rangle \quad (12.31)$$

и потребовать, чтобы было

$$c_1^2 + c_2^2 = 1 \quad (12.32)$$

При этом можно считать, например,  $c_1$ , вещественным положительным числом.

В выражении (12.31) стоит новое  $\omega$ , не совпадающее с  $\omega_0$ , и для подбора  $c_1$  и  $c_2$  нужно записать дополнительное требование, что скалярное произведение основного состояния на низшее возбуждённое равняется нулю. Тогда получится приближённое выражение

$$0 = \langle \text{осн} | 1 \rangle \approx c_1 \langle 0, \omega_0 | 0, \omega \rangle + c_2 \langle 0, \omega_0 | 1, \omega \rangle, \quad (12.33)$$

и опять просто придётся посчитать эти слагаемые.

Тут разумнее напрямую взять соответствующие волновые функции, ведь они не очень сложные, и посмотреть, что получится. Например, первое слагаемое в (12.33) будет равно интегралу от  $-\infty$  до  $+\infty$  по  $dx$ . Волновые функции здесь вещественны, поэтому комплексное сопряжение нас не особенно волнует. Под интегралом будут стоять выражения (12.22) для первой и второй функций, так что получится

$$\langle 0, \omega_0 | 0, \omega \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left( \frac{m\omega_0}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega_0 x^2}{2\hbar}} \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} \quad (12.34)$$

Произведение экспонент можно записать как экспоненту в степени суммы показателей. То есть по отношению к нормальной нормируемой функции в (12.34) стоит частота  $\omega + \omega_0$ . Если бы мы её правильно отнормировали, и в (12.34) стоял бы такой же нормировочный множитель, как сейчас, но с  $\omega + \omega_0$ , этот интеграл дал бы единицу. Тогда можно догадаться, что в действительности из (12.34) получится

$$\frac{(\omega_0\omega)^{\frac{1}{4}}\sqrt{2}}{\sqrt{\omega_0 + \omega}}, \quad (12.35)$$

при  $\omega = \omega_0$  оно должно превращаться в единицу.

В данной задаче из-за симметрии потенциала возникнет интересное отличие от общей конструкции. Волновые функции определённой чётности, функция  $|1, \omega\rangle$  нечётная, поэтому скалярное произведение  $\langle 0, \omega_0 | 1, \omega \rangle$  из (12.33) всегда ноль. Тогда уравнение (12.33) превратится в  $c_1 = 0$ , и тогда второе уравнение системы (12.32) даст  $c_2 = 1$ . И оказывается, что улучшенная пробная волновая функция низшего возбуждённого состояния – по-прежнему волновая функция осциллятора, но теперь его низшего возбуждённого состояния. Теперь просто надо усреднять потенциал не по  $|0, \omega\rangle$ , а по  $|1, \omega\rangle$ .

То есть в этом случае функция вариационной энергии будет

$$\tilde{\varepsilon}(\omega) = \langle 1, \omega | \hat{H} | 1, \omega \rangle, \quad (12.36)$$

$\hat{H}$  – точный гамильтониан. Здесь усреднение кинетической энергии по-прежнему даст половину полной. Энергия низшего возбуждённого состояния равна  $\frac{3}{2}\hbar\omega$ , так что из (12.36) получится

$$\frac{3}{4}\hbar\omega + g\langle 1, \omega | \hat{x}^4 | 1, \omega \rangle = \frac{3}{4}\hbar\omega + g \frac{\hbar^2}{4m^2\omega^2} \cdot \frac{5}{2}, \quad (12.37)$$

так как  $6\left(n^2 + n + \frac{1}{2}\right)$  при  $n = 1$  равняется  $\frac{5}{2}$ .

Это функция примерно такого же вида, как на рис. 12.4, просто с другими коэффициентами в линейной части и в части вида  $\frac{1}{\omega^2}$ . Из условия минимизации для (12.37) мы посчитаем  $\omega_1$  и узнаем энергию низшего возбуждённого состояния. В этой задаче из-за симметрии получилось, что низшее возбуждённое состояние считается не сложнее, чем основное, так что трюки с комбинациями начнутся только со второго возбуждённого уровня, который будет одинаковой чётности с нулевым. Там будет бесполезно брать комбинацию состояний  $|1, \omega\rangle$  и  $|2, \omega\rangle$ , мы станем писать комбинацию  $|0, \omega\rangle$  и  $|2, \omega\rangle$ , которые одинаковой чётности. И для этого уровня будет всего два коэффициента в комбинации.

Мы достаточно посмотрели, как это работает в данном конкретном примере. Получать окончательный ответ сейчас уже не будем, тем более, данная задача есть в списке обязательных. Но там она ограничивается определением энергии основного состояния, а мы это уже сделали. И заодно увидели, что при определении энергии низшего возбуждённого состояния просто происходит минимизация немного другой функции.

Итак, мы рассмотрели, как работает вариационный метод на примере конкретной одномерной стационарной задачи, для демонстрации взяв простую. Мы ещё будем практиковаться в его применении для более сложных задач в следующем семестре. А в рамках этого, по сути, осталась одна завершающая лекция.

Мы продолжим в ней обсуждение дискуссий, связанных со статусом квантовой теории, между представителями парадигмы квантовой теории, копенгагенской парадигмы, и парадигмы локального реализма. Несмотря на трюк с неравенствами Белла, которые с использованием экспериментальных данных вроде бы доказывают, что концепция локального реализма в такой прямой версии, в которой мы её сформулировали и в какой её изначально формулировали противники квантовой теории, не способна обеспечить чёткое описание некоторых статистических свойств результатов измерений, концепция всё равно продолжилась. Основная часть новых возражений против квантовой теории строилась уже на игре с правилами статистики. И возможность сохранить какие-то возражения, придумать более продвинутую версию с точки зрения статистики, которая тем не менее оставляла открытым выбор между этими двумя парадигмами, фактически заставила сторонников квантовой теории искать другой подход.



На этот поиск было потрачено довольно много времени, хотя в итоге оказалось, что мы можем играть почти в те же игры с измерением непосредственно спиновых наблюдаемых для разных частиц в некотором заданном начальном состоянии. Была придумана схема их измерения, выстроенная таким образом, что концепция локального реализма предсказывает не ограничения на какую-то корреляционную функцию в результатах измерений, а наличие некоего результата, который не возможен в принципе, вероятность которого с точки зрения данной концепции должна быть равна нулю. Тогда, если мы придумаем квантовую систему, в которой реализуется данная схема измерений, и обнаружим, что с точки зрения квантовой теории есть ненулевая вероятность реализации этого состояния, получится, что мы доказали преимущество квантовой теории над концепцией скрытых параметров уже не при анализе корреляционных функций статистики измерений, а непосредственно результатом измерения.

Это очень интересная возможность, и именно её мы обсудим на следующей лекции. Тем более, этому результату в определённый момент придали очень большое значение. Официально его часто называют парадоксом *GHZ* (Гринбергера – Хорна – Цайленгера). Один из авторов этой работы, Цайленгер, стал лауреатом Нобелевской премии, связанной с доказательствами квантовых закономерностей в состояниях фотонов для фотоники. Она была выдана в значительной степени из-за появления таких прямых доказательств преимущества парадигмы квантовой теории над парадигмой локального реализма.



ФИЗИЧЕСКИЙ  
ФАКУЛЬТЕТ  
МГУ ИМЕНИ  
М.В. ЛОМОНОСОВА

*teach-in*  
ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ