



ФИЗИЧЕСКИЙ  
ФАКУЛЬТЕТ  
МГУ ИМЕНИ  
М.В. ЛОМОНОСОВА

*teach-in*  
ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

# КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ. ЧАСТЬ 1. СЕМИНАРЫ

СВЕШНИКОВ  
КОНСТАНТИН АЛЕКСЕЕВИЧ

ФИЗФАК МГУ

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

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



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



## Содержание

<b>1 Семинар 1. Математический аппарат квантовой теории</b>	<b>6</b>
1.1 Понятие линейного пространства . . . . .	6
1.2 Операция скалярного произведения . . . . .	7
1.3 Норма . . . . .	8
1.4 Базис . . . . .	8
1.5 Линейный оператор . . . . .	9
1.6 Гильбертово пространство . . . . .	10
1.7 Собственные значения и собственные вектора . . . . .	11
<b>2 Семинар 2. Эрмитовы и самосопряженные операторы</b>	<b>12</b>
2.1 Спектральное разложение эрмитова оператора . . . . .	12
2.2 Задача на гармонический осциллятор . . . . .	15
<b>3 Семинар 3. Осцилляторные задачи</b>	<b>20</b>
3.1 СЗ и СВ операторов координаты и импульса гармонического осциллятора	20
3.2 Доказательство отсутствия конечномерных матриц операторов $q$ и $p$ . .	22
3.3 Осциллятор под действием постоянной внешней силы . . . . .	23
3.4 Свойства когерентного состояния . . . . .	25
3.5 Эффект Мёссбауэра . . . . .	28
<b>4 Семинар 4. Задачи динамики</b>	<b>29</b>
4.1 Гармонический осциллятор с зависящей от времени внешней силой . .	29
4.2 Разделение операторной экспоненты на сомножители . . . . .	32
<b>5 Семинар 5. Доклад „Сжатые состояния“</b>	<b>36</b>
<b>6 Семинар 6. Взаимодействие атомной системы со светом в резонаторе</b>	<b>42</b>
6.1 Эффект Мёссбауэра . . . . .	42
6.2 Задача на одномодовое излучение, взаимодействующее с атомной си- стемой в резонаторе . . . . .	44
6.2.1 Задача на СЗ и СВ . . . . .	45
6.2.2 Задача эволюции . . . . .	50
<b>7 Семинар 7. Упражнения по использованию матриц плотности</b>	<b>52</b>

7.1	Температурная матрица плотности . . . . .	52
7.1.1	Формула Планка . . . . .	53
7.2	Спиновые матрицы плотности . . . . .	53
7.2.1	Эксперимент Штерна-Герлаха . . . . .	58
<b>8</b>	<b>Семинар 8. Конфайнмент атомных систем. Одномерные задачи с потенциальными ямами</b>	<b>63</b>
8.1	Конфайнмент атомных систем . . . . .	63
8.2	Задача на одномерную симметричную квадратную потенциальную яму	67
8.2.1	Четные уровни. . . . .	69
8.2.2	Нечетные уровни. . . . .	72
8.2.3	Бесконечно глубокая потенциальная яма. . . . .	73
<b>9</b>	<b>Семинар 9. Одномерные задачи на потенциальные барьеры и ямы</b>	<b>76</b>
9.1	Задача на потенциал вида $\delta$ -ямы . . . . .	76
9.2	Задача на две $\delta$ -ямы . . . . .	78
9.3	Задача на эффект надбарьерного отражения . . . . .	81
9.4	Эффект холодной эмиссии . . . . .	83
9.5	Задача на отражение от барьера . . . . .	85
9.6	Задача на потенциальную яму со стенками конечной и бесконечной высоты . . . . .	87
9.7	Задача на дельта-барьер . . . . .	90
9.8	Конечный кристалл . . . . .	91
<b>10</b>	<b>Семинар 10. Доклад „Эффект Казимира на сфере“</b>	<b>95</b>
<b>11</b>	<b>Семинар 11. Задача на яму конечной глубины с <math>\delta</math>-ямой. Гребенка Дирака</b>	<b>99</b>
11.1	Одномерная потенциальная яма конечной глубины с $\delta$ -ямой . . . . .	99
11.2	Гребенка Дирака . . . . .	103
<b>12</b>	<b>Семинар 12. Доклад „Уравнение Кортевега-де Фриза“</b>	<b>108</b>
<b>13</b>	<b>Семинар 13. Гребенка Дирака вниз. Задачи на квазиклассическое приближение</b>	<b>115</b>
13.1	Гребенка Дирака вниз . . . . .	115

13.2	Модель Кронига-Пенни . . . . .	120
13.3	Эффект Андерсона . . . . .	121
13.4	Квазиклассический метод . . . . .	123
<b>14</b>	<b>Семинар 14. Dancing Ball. Трехмерные задачи квантовой механики</b>	<b>126</b>
14.1	Dancing Ball . . . . .	126
14.2	Трехмерная сферически симметричная потенциальная яма конечной глубины . . . . .	131
14.3	Сферическая оболочка . . . . .	132
14.4	Задача на кулоновский потенциал с технической добавкой . . . . .	133
<b>15</b>	<b>Семинар 15. Доклад „Обратная задача рассеяния“</b>	<b>138</b>
<b>16</b>	<b>Семинар 16. Кулоновский потенциал с технической добавкой. Уров- ни Ландау</b>	<b>147</b>
16.1	Рождение $e^+ e^-$ пар электрическим полем . . . . .	147
16.2	Продолжение задачи на кулоновский потенциал с технической добавкой	150
16.2.1	Теорема Феймана-Хеллмана. . . . .	152
16.2.2	Формулы Крамерса . . . . .	155
16.3	Уровни Ландау . . . . .	156
16.4	Задача на одномерный кулоновский потенциал . . . . .	162
<b>17</b>	<b>Семинар 17. Сложение моментов. Задачи на использование шаро- вых спинов</b>	<b>163</b>
17.1	Сложение моментов . . . . .	163
17.2	Задача про атомный орбитальный электрон . . . . .	166
<b>18</b>	<b>Семинар 18. Доклад „Введение в квазикристаллы“</b>	<b>175</b>
<b>19</b>	<b>Семинар 19. Доклад „Одномерный атом водорода“</b>	<b>185</b>
<b>20</b>	<b>Семинар 20. Доклад „Конфайнмент атомных систем“</b>	<b>199</b>

# Семинар 1. Математический аппарат квантовой теории

## Понятие линейного пространства

**Определение 1.1.** *Линейное пространство  $(\{|a\rangle\})$  — множество, в котором заданы операции умножения на число и сложения векторов. Полученный в результате операций вектор также лежит в данном пространстве.*



Рис. 1.1. Операция умножения вектора на число (а) и сложения векторов (б)

Вектор  $a$  в линейном пространстве размерности  $n$  может быть записан в виде столбца размерности  $n$ :

$$|a\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_i \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}, \quad (1.1)$$

тогда операции умножения на число и сложения векторов будут иметь вид:

$$\alpha|a\rangle = \begin{pmatrix} \alpha a_1 \\ \vdots \\ \alpha a_i \\ \vdots \\ \alpha a_n \end{pmatrix} \quad |a\rangle + |b\rangle = \begin{pmatrix} a_1 + b_1 \\ \vdots \\ a_i + b_i \\ \vdots \\ a_n + b_n \end{pmatrix}. \quad (1.2)$$

Пусть теперь столбцы  $\infty$ -мерные, но представляют собой счетное множество, тогда:

$$|a\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_i \\ \vdots \\ a_n \\ \vdots \end{pmatrix} \quad \alpha|a\rangle = \begin{pmatrix} \alpha a_1 \\ \vdots \\ \alpha a_i \\ \vdots \\ \alpha a_n \\ \vdots \end{pmatrix} \quad |a\rangle + |b\rangle = |c\rangle = \begin{pmatrix} a_1 + b_1 \\ \vdots \\ a_i + b_i \\ \vdots \\ a_n + b_n \\ \vdots \end{pmatrix}. \quad (1.3)$$

Помимо этого для таких столбцов необходимо ввести дополнительное условие вида:

$$\sum_{i=1}^n |a_i|^2 < \infty. \quad (1.4)$$

**Утверждение 1.1.** Пусть  $|a\rangle$  и  $|b\rangle$  - это бесконечномерные столбцы, для которых выполняются (1.3). Тогда это условие верно для любого  $|c\rangle = |a\rangle + |b\rangle$ .

**Доказательство.**

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n |c_i|^2 &= \sum_{i=1}^n |a_i + b_i|^2 = \sum_{i=1}^n |a_i|^2 + \sum_{i=1}^n |b_i|^2 + \sum_{i=1}^n (a_i b_i^* + a_i^* b_i) \leq \\ &\leq [\sum_i |u_i v_i|^2 \leq \sum_i |u_i|^2 \sum_i |v_i|^2 - \text{неравенство Коши-Буняковского}] \leq \sum_{i=1}^n |a_i|^2 + \\ &+ \sum_{i=1}^n |b_i|^2 + 2\sqrt{\sum_{i=1}^n |a_i|^2 \sum_{i=1}^n |b_i|^2} < \infty \end{aligned}$$

■

Множество таких столбцов ( $\{|a\rangle\}$ ) эквивалентно пространству  $l_2$ .

При рассмотрении пространства комплекснозначных функций  $\{|\psi\rangle\}$  условие (1.4) заменится выражением вида:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot |\psi|^2 < \infty. \quad (1.5)$$

Пространство таких комплекснозначных функций эквивалентно пространству  $L_2$ . Пространства  $L_2$  и  $l_2$  являются изоморфными.

## Операция скалярного произведения

Введем теперь операцию скалярного произведения. Скалярное произведение — это бинарная операция над пространством векторов, линейная по второму аргументу. Для него выполняется равенство:

$$\langle a|b\rangle = \langle b|a\rangle^*. \quad (1.6)$$

Скалярное произведение может быть записано в следующем виде:

$$\vec{a} \vec{b} = |\vec{a}| |\vec{b}| \cdot \cos(\widehat{\vec{a}, \vec{b}}) \quad (\text{для геометрических векторов}) , \quad (1.7)$$

$$\langle a|b \rangle = \sum_i a_i^* b_i \quad (\text{общий случай для векторов}) , \quad (1.8)$$

$$\langle \psi|\varphi \rangle = \int dx \psi^* \varphi \quad (\text{в пространстве комплекснозначных функций}) . \quad (1.9)$$

## Норма

Введем теперь понятие нормы. Для  $l_2$  норма имеет вид:

$$\langle a|a \rangle = \sum_i |a_i|^2 < \infty . \quad (1.10)$$

Для  $L_2$ :

$$\langle \psi|\psi \rangle = \int dx |\psi(x)|^2 < \infty . \quad (1.11)$$

Обозначается норма, как  $\|a\|^2$ :

$$\|a\|^2 = \langle a|a \rangle . \quad (1.12)$$

Введем теперь понятие нормированного пространства.

**Определение 1.2.** *Нормированное пространство - это пространство с заданной на нем нормой.*

## Базис

**Определение 1.3.** *Базис линейного пространства  $(\{e_n\})$  – упорядоченная система векторов, для которой выполняются условия:*

1) *система векторов линейно независима*

$$\langle e_n|e_m \rangle = \delta_{nm} , \quad (1.13)$$

2) *каждый вектор линейного пространства может быть представлен в виде линейной комбинации векторов системы*

$$|a \rangle = \sum_i a_i |e_i \rangle; \quad a_i = \langle e_i|a \rangle . \quad (1.14)$$



Если вектор представляет собой конечномерный столбец:

$$|a\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_i \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = a_1 \begin{pmatrix} 1_1 \\ 0_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ 0_n \end{pmatrix} + \dots + a_i \begin{pmatrix} 0_1 \\ \vdots \\ 1_i \\ \vdots \\ 0_n \end{pmatrix} + \dots + a_n \begin{pmatrix} 0_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ 0_{n-1} \\ 1_n \end{pmatrix}. \quad (1.15)$$

Аналогичное выражение можно записать и для бесконечномерного столбца, записав его в виде бесконечной ряда.

Для функций справедлива теорема Стеклова:

**Теорема 1.1.** Любая гладкая дважды дифференцируемая функция может быть разложена в ряд Фурье по собственным функциям, которые являются базисными для пространства и получаются в результате решения краевой задачи.

$$|a\rangle = \sum_n a_n |e_n\rangle = \sum_n |e_n\rangle \langle e_n | a \rangle = \left( \sum_n |e_n\rangle \langle e_n | \right) |a\rangle \Rightarrow \underbrace{\sum_n |e_n\rangle \langle e_n |}_{\text{условие полноты базиса}} = 1 = \hat{1}, \quad (1.16)$$

где  $\hat{1}$  - единичный оператор.

С использованием условия полноты базиса может быть получено выражение для скалярного произведения (1.7):

$$\begin{aligned} \langle a | b \rangle &= \langle a | \left( \sum_n |e_n\rangle \langle e_n | \right) | b \rangle = \left[ \begin{array}{c} \text{при условии} \\ \text{конечности нормы} \end{array} \right] = \\ &= \sum_n \langle a | e_n \rangle \langle e_n | b \rangle = \sum_n a_n^* b_n. \end{aligned} \quad (1.17)$$

В случае, если все коэффициенты разложения равны нулю, то это вектор с нормой ноль (ноль-вектор):

$$0 = 0 \cdot |a\rangle. \quad (1.18)$$

## Линейный оператор

Основное свойство линейных операторов:

$$A(\alpha|a\rangle + \beta|b\rangle) = \alpha A|a\rangle + \beta A|b\rangle. \quad (1.19)$$

Пусть линейный оператор, действуя на  $|a\rangle$  переводит его в  $|b\rangle$ :

$$A|a\rangle = |b\rangle. \quad (1.20)$$

Подействуем слева  $\langle e_n |$ :

$$\langle e_n | A | a \rangle = \langle e_n | A \sum_m | e_m \rangle \langle e_m | a \rangle = \sum_m \langle e_n | A | e_m \rangle a_m = \langle e_n | b \rangle = b_n , \quad (1.21)$$

откуда следует, что:

$$\sum_m A_{nm} a_m = b_n . \quad (1.22)$$

Рассмотрим произведение двух линейных операторов. Пусть  $C = AB$ , тогда:

$$C | a \rangle = AB | a \rangle . \quad (1.23)$$

Подействуем на (1.23) слева  $\langle e_n |$ :

$$\langle e_n | C | a \rangle = \langle e_n | AB | a \rangle = \left[ \begin{array}{l} \text{вспоминаем, что} \\ \sum_m | e_m \rangle \langle e_m | = 1 \end{array} \right] = \dots = \sum_{mk} A_{nm} B_{mk} a_k , \quad (1.24)$$

где  $A_{nm} = \langle e_n | A | e_m \rangle$ ,  $B_{mk} = \langle e_m | B | e_k \rangle$ ,  $a_k = \langle e_k | a \rangle$ .

## Гильбертово пространство

Гильбертово пространство ( $H$ ) — это полное линейное нормированное пространство векторов ( $\{|\psi\rangle\}$ ).

Свойства гильбертового пространства:

- 1)  $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle^*$ ;
- 2)  $\langle \psi | \psi \rangle = \|\psi\|^2 < \infty$ ;
- 3) неравенство треугольника:  $\|a + b\| \leq \|a\| + \|b\|$ ;
- 4) существование ортонормированного базиса:  $\langle e_n | e_m \rangle = \delta_{nm}$ .

Важным свойством гильбертовых пространств является их изоморфность друг другу:

$$H_1 \longleftrightarrow l_2 \longleftrightarrow H_2 \quad \longrightarrow \quad H_1 \longleftrightarrow H_2 . \quad (1.25)$$

**Упражнение 1.1.** Решить задания из разделов матрицы и операторы из файла по математическому аппарату.

## Собственные значения и собственные вектора

При действии оператора на собственный вектор  $|a\rangle$ :

$$A|a\rangle = \alpha|a\rangle, \quad (1.26)$$

где  $\alpha$  - собственное значение оператора  $A$ .

Поскольку в реальности приборы измеряют вещественные числа, то необходимо использовать операторы, все собственные значения которых являются вещественными — эрмитовы операторы.

Операция сопряжения для таких операторов может быть записана как:

$$\langle u|T|v\rangle = \langle v|T^+|u\rangle^*, \quad (1.27)$$

$$T_{nm} = \langle e_n|T|e_m\rangle = \langle e_m|T^+|e_n\rangle^* = (T^+)_{mn}^*. \quad (1.28)$$

**Утверждение 1.2.** Если  $A$  — эрмитов оператор ( $A = A^+$ ), то все его собственные значения вещественные.

**Доказательство.**

$$\langle a|A|a\rangle = \alpha\langle a|a\rangle = \alpha\|a\|^2 = \alpha^*\|a\|^2 \Rightarrow \alpha = \alpha^* \Rightarrow A = A^+$$

■

Помимо эрмитовых операторов, в квантовой теории часто используются унитарные операторы, основное свойство которых

$$UU^+ = 1. \quad (1.29)$$

Пусть унитарный оператор действует на векторы  $|u\rangle$  и  $|v\rangle$  так, что

$$|u'\rangle = U|u\rangle; \quad |v'\rangle = U|v\rangle, \quad (1.30)$$

тогда скалярное произведение преобразованных векторов можно записать в следующем виде:

$$\langle u'|v'\rangle = \langle u'|U|v\rangle = \langle v|U^+U|u\rangle^* = \langle v|u\rangle^* = \langle u|v\rangle. \quad (1.31)$$

Таким образом, действие унитарного оператора не изменяет скалярное произведение.

## Семинар 2. Эрмитовы и самосопряженные операторы

### Спектральное разложение эрмитова оператора

Для того, чтобы правильно провести измерение величины оператора, который не коммутирует с некой выбранной величиной  $F$ , необходимо осуществить спектральное разложение.

Рассмотрим конечномерную эрмитову матрицу

$$A_{nm} = (A)_{mn}^* . \quad (2.1)$$

**Утверждение 2.1.** Любая конечномерная эрмитова матрица может быть приведена к диагональному виду с помощью унитарного преобразования.

$$A \Rightarrow A' = U^+ A U , \quad (2.2)$$

где

$$(A')_{nm} = a_n \delta_{nm} . \quad (2.3)$$

При этом матрица  $U$  устроена так, что её столбцы оказываются собственными векторами (СВ) исходной матрицы  $A$  в силу того, что поскольку  $A'$  - диагональная матрица, её СВ - столбцы нулей с одной единицей на  $n$ -ом месте. Таким образом, структура матрицы  $A'$  может быть представлена в следующем виде:

$$A' = \sum_n a_n \begin{pmatrix} 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \dots & \dots & \vdots \\ \vdots & \dots & 1_n & \dots & \vdots \\ \vdots & \dots & \dots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \end{pmatrix} . \quad (2.4)$$

Для того, чтобы по матрице  $A'$  восстанавливать матрицу  $A$ , запишем следующее равенство:

$$A|u_n\rangle = a_n|u_n\rangle , \quad (2.5)$$

где  $u_n$  - столбцы унитарной матрицы  $U$ .

Далее с помощью приведения матрицы  $A'$  к  $A$  обратным преобразованием получим следующую структуру для матрицы  $A$ :

$$A = \sum_n a_n |u_n\rangle\langle u_n| . \quad (2.6)$$

В силу того, что СВ нормированы на символ Кронекера  $\langle u_n|u_m\rangle = \delta_{nm}$  и унитарное преобразование не изменяет их скалярное произведение, действие матрицы  $A$  на вектор  $|u_l\rangle$  приводит к

$$A|u_l\rangle = \sum_n a_n |u_n\rangle \underbrace{\langle u_n|u_l\rangle}_{\delta_{nl}} = a_l |u_l\rangle , \quad (2.7)$$

$$|u_n\rangle\langle u_n| = \Pi_n , \quad (2.8)$$

где  $\Pi_n$  - проекционный оператор. Он обладает следующими свойствами:

$$\Pi_n^2 = \Pi_n; \quad \Pi_n \Pi_m = \Pi_n \delta_{nm} . \quad (2.9)$$

**Утверждение 2.2.** *Собственные вектора эрмитова оператора всегда можно ортонормировать в силу следующего свойства:*

$$\langle u_n|A|u_m\rangle = a_m \langle u_n|u_m\rangle = \langle u_m|A|u_n\rangle^* = a_n \langle u_n|u_m\rangle . \quad (2.10)$$

Перепишем (2.10) в виде

$$(a_n - a_m) \langle u_n|u_m\rangle = 0 . \quad (2.11)$$

Если собственные значения (СЗ) различны, то для того, чтобы выполнялось равенство (2.11), необходимо, чтобы  $\langle u_n|u_m\rangle = 0$ . Выражение  $\langle u_n|u_m\rangle$  отлично от нуля только в случае совпадения индексов СЗ  $a_n$  и  $a_m$  (то есть при  $m=n$ ).

Если же в системе присутствует вырождение, то выражение (2.11) переписется в виде

$$(a_{n_\alpha} - a_{m_\beta}) \langle u_{n_\alpha}|u_{m_\beta}\rangle = 0 , \quad (2.12)$$

где индексы  $\alpha$  и  $\beta$  означают индекс уровня в подпространстве вырождения, которое всегда является конечномерным. В данном случае необходимо проводить дополнительную диагонализацию. Оператор  $\Pi_n$  будет работать по той же самой схеме, что и в случае невырожденного спектра, что означает, что в любом случае можно пользоваться разложением

$$A = \sum_n a_n \Pi_n . \quad (2.13)$$

**Теорема 2.1.** *Любой самосопряженный оператор в гильбертовом пространстве может быть получен из эрмитовой матрицы размерности  $n \times n$  предельным переходом от  $n$  к бесконечности.*

Рассмотрим теперь разложение оператора  $A^2$ :

$$A^2 = \sum_n a_n^2 \Pi_n . \quad (2.14)$$

В выражении (2.14) было использовано свойство проекционных операторов (2.9). Далее из свойства математической индукции получим, что для любой функции  $f(A)$ , заданной в виде степенного ряда, будет верно:

$$f(A) = \sum_n f(a_n) \Pi_n . \quad (2.15)$$

**Пример 2.1.** *В случае, когда функция  $f(A) = \sqrt{A}$ , выражение (2.15) не выполняется в силу того, что возникает необходимость извлечения корня из оператора. Рассмотрим матрицы следующего вида:*

$$b_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = b^+ \Rightarrow b_1^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} , \quad (2.16)$$

$$b_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = b \Rightarrow b_2^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} . \quad (2.17)$$

Из выражений (2.16) и (2.17) видно, что корень из  $b_1^2$  и корень из  $b_2^2$  отличны от нуля. Стоит отметить, что матрицы операторов  $b$  и  $b^+$  используются как способ описания фермионов, поскольку условие  $b^2 = 0$  фактически представляет собой принцип запрета Паули. Тогда  $b$  - это оператор уничтожения, а  $b^+$  - оператор рождения фермионов, для которых выполняется антикоммутиационное соотношение:

$$b b^+ + b^+ b = 1 . \quad (2.18)$$

**Замечание 2.1.** *Функция вида  $f(A) = \sqrt{A}$  может быть использована в случае, когда оператор  $A$  является неотрицательным, поскольку из неотрицательного СЗ можно легко извлечь корень.*

## Задача на гармонический осциллятор

Запишем гамильтониан простого гармонического осциллятора:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} q^2, \quad (2.19)$$

где  $H$ ,  $p$  и  $q$  - это самосопряженные операторы, при этом  $q$  и  $p$  удовлетворяют следующему коммутационному соотношению

$$[q, p] = i\hbar. \quad (2.20)$$

Необходимо найти СВ, или  $\psi$ , оператора  $H$ :

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle. \quad (2.21)$$

Сделаем сначала размерное преобразование вида:

$$p = \sqrt{m\hbar\omega} P; \quad q = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} Q, \quad (2.22)$$

где  $Q$  и  $P$  - безразмерные операторы координаты и импульса. Коммутационное соотношение для этих операторов запишется в виде:

$$[Q, P] = i. \quad (2.23)$$

Перепишем гамильтониан в терминах  $Q$  и  $P$ :

$$H = \frac{\hbar\omega}{2} (P^2 + Q^2), \quad (2.24)$$

после чего введем вспомогательные операторы

$$a = \frac{Q + iP}{\sqrt{2}}; \quad a^+ = \frac{Q - iP}{\sqrt{2}}, \quad (2.25)$$

где  $a^+$  и  $a$  - неэрмитовы операторы. Для них выполняется равенство коммутатора

$$[a, a^+] = \left[ \frac{Q + iP}{\sqrt{2}}, \frac{Q - iP}{\sqrt{2}} \right] = \frac{1}{2} ([iP, Q] - [Q, iP]) = \frac{1}{2} (1 + 1) = 1. \quad (2.26)$$

Выразим  $Q$  и  $P$  через  $a$  и  $a^+$ . Тогда

$$Q = \frac{a + a^+}{\sqrt{2}}; \quad P = \frac{a - a^+}{i\sqrt{2}}, \quad (2.27)$$

откуда  $Q^2$  и  $P^2$  оказываются равными

$$Q^2 = \frac{1}{2} (a + a^+) (a + a^+) = \frac{1}{2} (a^2 + a^{+2} + a a^+ + a^+ a), \quad (2.28)$$

$$P^2 = \frac{1}{2} (a a^+ + a^+ a - a^2 - a^{+2}) . \quad (2.29)$$

Следовательно, гамильтониан можно переписать в виде

$$H = \frac{\hbar\omega}{2} (a a^+ + a^+ a) . \quad (2.30)$$

Используем коммутационное соотношение (2.26) для получения окончательного выражения гамильтониана:

$$[a, a^+] = 1 \Rightarrow a a^+ = a^+ a + 1 , \quad (2.31)$$

следовательно

$$H = \hbar\omega \left( a^+ a + \frac{1}{2} \right) . \quad (2.32)$$

В лекциях было сформулировано утверждение о том, что любой оператор  $T$ , который имеет следующую:  $T = W^+W$ , - является неотрицательным. Выражение (2.32) по виду похоже на выражение для оператора  $T$ , следовательно, среднее значение гамильтониана по любому вектору гильбертова пространства

$$\langle u|H|u \rangle \geq \frac{\hbar\omega}{2} \Rightarrow E_n \geq \frac{\hbar\omega}{2} . \quad (2.33)$$

Это значит, что выражение (2.33) верно и для любого СВ.

Теперь для того чтобы найти спектр оператора  $H$  предположим, что существует такой СВ оператора  $H$  -  $\psi_E$ , что

$$H \psi_E = E \psi_E , \quad (2.34)$$

тогда построим вектор  $\widetilde{\psi}_E$  следующим образом:

$$\widetilde{\psi}_E = a^+ \psi_E . \quad (2.35)$$

Подействуем на вектор  $\widetilde{\psi}_E$  оператором  $H$ :

$$H \widetilde{\psi}_E = H a^+ \psi_E . \quad (2.36)$$

Для того, чтобы переставить местами операторы  $H$  и  $a^+$  в (2.36), вычислим коммутатор этих операторов:

$$[H, a^+] = \left[ \hbar\omega \left( a^+ a + \frac{1}{2}, a^+ \right) \right] = \hbar\omega [a^+ a, a^+] = \hbar\omega a^+ . \quad (2.37)$$



Аналогичными действиями можно вычислить и этот коммутатор:

$$[H, a] = \left[ \hbar\omega \left( a^+ a + \frac{1}{2}, a \right) \right] = \dots = -\hbar\omega a . \quad (2.38)$$

Используем (2.37) для того, чтобы переставить местами  $H$  и  $a^+$ :

$$H a^+ = a^+ H + \hbar\omega a^+ = a^+ (H + \hbar\omega) , \quad (2.39)$$

тогда действие  $H$  на вектор  $\widetilde{\psi}_E$  преобразуется к виду

$$H \widetilde{\psi}_E = H a^+ \psi_E = a^+ (E + \hbar\omega) \psi_E = (E + \hbar\omega) a^+ \psi_E = (E + \hbar\omega) \widetilde{\psi}_E . \quad (2.40)$$

Из (2.40) следует, что  $\widetilde{\psi}_E$  тоже является СВ оператора  $H$  с СЗ -  $E + \hbar\omega$ . Тогда оператор  $a^+$  представляет собой оператор рождения, поскольку он увеличивает энергию на один осцилляторный квант  $\hbar\omega$ .

Введем теперь вектор  $\widetilde{\widetilde{\psi}}_E$ , который может быть представлен в виде

$$\widetilde{\widetilde{\psi}}_E = a \psi_E . \quad (2.41)$$

Если подействовать на  $\widetilde{\widetilde{\psi}}_E$  оператором  $H$  и учесть (2.38), то можно получить, что:

$$H \widetilde{\widetilde{\psi}}_E = (E - \hbar\omega) \widetilde{\widetilde{\psi}}_E , \quad (2.42)$$

тогда  $\widetilde{\widetilde{\psi}}_E$  является СВ оператора  $H$  с СЗ -  $E - \hbar\omega$ . Из этого следует, что оператор  $a$  представляет собой оператор уничтожения, так как он уменьшает энергию на один осцилляторный квант.

Следовательно, операторы вида

$$\widetilde{\widetilde{\psi}}^{(n)} = a^{+n} \psi_E; \quad \widetilde{\widetilde{\psi}}^{(n)} = a^n \psi_E , \quad (2.43)$$

с очевидностью так же будут являться СВ оператора  $H$  с СЗ -  $E + n\hbar\omega$  и  $E - n\hbar\omega$ .

Как уже было показано, энергия гармонического осциллятора ограничена снизу величиной  $\hbar\omega/2$ , следовательно, операция уничтожения кванта на определенном значении  $n$  должна прерваться. Для этого необходимо, чтобы действие оператора  $a$  на СВ основного состояния ( $\psi_0$ ) осциллятора давало нулевое значение:

$$a \psi_0 = 0 . \quad (2.44)$$

Постулируем нормировку СВ  $\psi_0$

$$\langle \psi_0 | \psi_0 \rangle = 1 . \quad (2.45)$$

Далее подействуем оператором  $H$  на  $\psi_0$  с учетом того, что первый член гамильтониана (2.32)  $a^+a$  при действии на  $\psi_0$  дает ноль, в результате чего останется только постоянный член  $\hbar\omega/2$ :

$$H \psi_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \psi_0 = E_0 \psi_0 , \quad (2.46)$$

где  $E_0$  является нижним уровнем энергии осциллятора.

Все остальные СВ могут быть получены путем действия оператора  $a^+$  на  $\psi_0$ :

$$\psi_n = C_n a^{+n} \psi_0 , \quad (2.47)$$

где  $C_n$  - нормировочная константа, обеспечивающая выполнение нормировки СВ

$$\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \delta_{nm} . \quad (2.48)$$

Далее нормируем  $\psi_n$  на единицу:

$$\begin{aligned} \langle \psi_n | \psi_n \rangle &= |C_n|^2 \langle a^{+n} | a^{+n} \rangle = [\langle u | A | v \rangle = \langle v | A^+ | u \rangle^*] = |C_n|^2 \langle \psi_0 | a^n a^{+n} | \psi_0 \rangle^* = \\ &= |C_n|^2 \langle \psi_0 | a^{n-1} a a^{+n} | \psi_0 \rangle^* . \end{aligned} \quad (2.49)$$

Вычислим коммутатор операторов  $a$  и  $a^{+n}$

$$[a, a^{+n}] = [a, a^{+(n-1)}] = [a, a^+] a^{+(n-1)} + a^+ [a, a^{+(n-1)}] = \dots = n a^{+(n-1)} . \quad (2.50)$$

Из (2.50) следует, что

$$a a^{+n} = a^{+n} a + n a^{+(n-1)} . \quad (2.51)$$

Следовательно, окончательное выражение для  $\langle \psi_n | \psi_n \rangle$  будет иметь вид:

$$\langle \psi_n | \psi_n \rangle = \langle \psi_0 | a^{n-1} a a^{+n} | \psi_0 \rangle^* = n \langle \psi_0 | a^{n-1} a^{+(n-1)} | \psi_0 \rangle^* = n! \langle \psi_0 | \psi_0 \rangle , \quad (2.52)$$

откуда немедленно получаем, что

$$|C_n|^2 = \frac{1}{n!} . \quad (2.53)$$

$|C_n|^2$  фиксирует только модуль, но фаза остается произвольной. Фазу можно задать любой, поскольку в ортодоксальном подходе, основанном на формуле для среднего, с левой и правой части формулы для среднего вида  $\bar{T} = \langle u_l | T | u_l \rangle$  стоит один и тот же вектор и, следовательно, фаза в выражении сократится.

Самым простым вариантом является выбор нулевой фазы. Таким образом, получим окончательное выражение для  $C_n$  :

$$C_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} . \quad (2.54)$$

Подставим  $C_n$  в выражение для СВ  $\psi_n$ :

$$\psi_n = \frac{a^{+n}}{\sqrt{n!}} \psi_0 . \quad (2.55)$$

В терминах нормированных векторов подействуем на  $\psi_n$  операторами  $a^+$  и  $a$ :

$$a^+ \psi_n = \sqrt{n+1} \psi_{n+1} , \quad (2.56)$$

$$a \psi_n = \sqrt{n} \psi_{n-1} . \quad (2.57)$$

Операторы  $a$  и  $a^+$  при квантовании электромагнитного поля представляют собой операторы уничтожения и рождения фотонов, поскольку каждая фотонная мода представляет собой осциллятор. Для состояния с  $n$  фотонами оператор  $a^+$ , который рождает дополнительный фотон, приводит к появлению коэффициента  $\sqrt{n+1}$  в терминах векторов состояния, а оператор  $a$  обеспечивает поглощения фотона, соответственно, приводит к  $-\sqrt{n}$ . Тогда в силу того, что интенсивности процессов пропорциональны квадратам модулей, запишем их отношение:

$$\frac{I_n^{(+)}}{I_n^{(-)}} = \frac{n+1}{n} , \quad (2.58)$$

где  $I_n^{(+)}$  - интенсивность вынужденного испускания фотона,  $I_n^{(-)}$  - вынужденного поглощения.

Выражение (2.58) полностью соответствует соотношению, выведенному Эйнштейном в рамках классической электродинамики и статистической физики. Исходя из полученной формулы, можно сделать вывод, что чем больше количество фотонов данного типа, тем с большей вероятностью будет рождаться следующий фотон данного типа. Следовательно, если в резонаторе фотоны определенного типа будут в условиях инверсной населенности, то чем больше фотонов накопится, тем с большей вероятностью будет излучен следующий. Данное утверждение лежит в основе всей лазерной физики.

## Семинар 3. Осцилляторные задачи

### СЗ и СВ операторов координаты и импульса гармонического осциллятора

Вспомним, что гамильтониан осциллятора может быть записан в терминах операторов  $a$  и  $a^+$ , коммутатор которых определяется выражением  $[a, a^+] = 1$ :

$$H = \hbar\omega \left( a^+ a + \frac{1}{2} \right) . \quad (3.1)$$

Для осциллятора приняты обозначения СВ гамильтониана в виде  $|n\rangle$ , где  $n$  - номер уровня энергии осциллятора, тогда:

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle . \quad (3.2)$$

Как уже было показано на предыдущем семинаре, энергия осциллятора равна

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) . \quad (3.3)$$

Для осциллятора выполняется условие существования нижнего уровня с номером  $n$ , равным нулю. Действие оператора  $a$  на СВ этого уровня запишется как

$$a|0\rangle = 0 . \quad (3.4)$$

Остальные СВ строятся путем многократного действия оператора  $a^+$  с нормировочной константой:

$$|n\rangle = \frac{a^{+n}}{\sqrt{n!}} |0\rangle . \quad (3.5)$$

Набор СВ  $|n\rangle$  формируют осцилляторный базис ( $\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$ ), полнота которого гарантирована. Гамильтониан в данном случае является величиной с чисто дискретным невырожденным спектром и может быть разложен по проекторам ( $\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$ ):

$$H = \sum_n E_n |n\rangle\langle n| . \quad (3.6)$$

Теперь распишем действие операторов  $a^+$  и  $a$  на СВ  $|n\rangle$ :

$$a^+ |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle , \quad (3.7)$$

$$a |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle . \quad (3.8)$$

Далее восстановим по  $a^+$  и  $a$  исходную координату и импульс:

$$q = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a + a^+) , \quad (3.9)$$

$$p = \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} \frac{(a - a^+)}{2} . \quad (3.10)$$

Вычисляем матрицы  $q$  и  $p$  в осцилляторном базисе. Для этого на примере матричного элемента  $q_{nm}$  подействуем на оператор  $q$  СВ  $m$  справа и  $n$  слева. Тогда получим, что

$$\begin{aligned} q_{nm} &= \langle n|q|m\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle n|a + a^+|m\rangle = \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{m} \delta_{n,m-1} + \sqrt{m+1} \delta_{n,m+1}) . \end{aligned} \quad (3.11)$$

Таким образом, можно легко восстановить матрицу  $q$ :

$$q = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & \dots & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & \dots & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \ddots & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 & \ddots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 & \ddots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & 0 \end{pmatrix} . \quad (3.12)$$

Матрица  $q$  представляет собой трехдиагональную матрицу с нулевыми матричными элементами на главной диагонали. Эта матрица, очевидно, является эрмитовой.

Для  $p$  аналогично можно получить, что

$$p_{nm} = \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & \dots & 0 & \dots \\ -\sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & \dots & 0 & \dots \\ 0 & -\sqrt{2} & 0 & \ddots & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 & \ddots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 & \ddots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & 0 \end{pmatrix} . \quad (3.13)$$

**Упражнение 3.1.** В *Wolfram Mathematica* найти СВ и СВ операторов координаты и импульса гармонического осциллятора. Для этого необходимо записать матрицы  $q$  и  $p$  в *Wolfram Mathematica* с выбранной размерностью и решить задачу на СВ полученных матриц.

Если проделать упражнение 3.1, то в зависимости от размерности матриц в результате решения будут получены дискретные ряды вещественных СЗ, диапазон которых с ростом размерности матрицы будет расти, однако помимо этого так же будет увеличиваться и плотность СЗ (рис. 3.1). Если, например, искать СЗ для матриц размерности 1000, то будет виден почти сплошной спектр СЗ; для 100000 - расстояние между СЗ будет порядка  $10^{-10}$ .

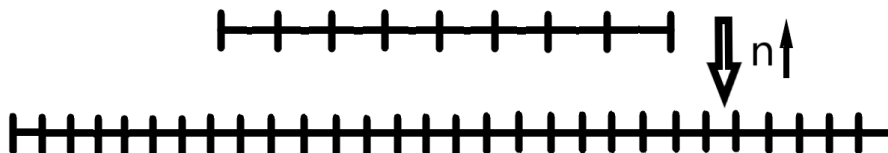


Рис. 3.1. Рост диапазона и уплотнение СЗ с ростом размерности матрицы

Таким образом, непрерывный спектр является предельным переходом  $n \rightarrow \infty$  из случая дискретного спектра. Этот сплошной спектр не может представлять собой чистое состояние, поскольку нельзя «выкалывать» одну точку вещественной оси, а также всегда необходимо работать с некоторым интервалом. В случае дискретного спектра между отдельными уровнями всегда есть некоторое расстояние, в результате чего можно с точностью отделять уровни друг от друга.

## Доказательство отсутствия конечномерных матриц операторов $q$ и $p$

Покажем, что операторы  $q$  и  $p$  не существуют в виде конечномерных матриц.

Во-первых, если бы конечномерные матрицы операторов  $q$  и  $p$  существовали, то, как известно, им бы соответствовали конечномерные матрицы векторов. Помимо этого также наблюдались бы пустоты между значениями  $q$  и  $p$ , которые могли бы быть зарегистрированы. На сегодняшний день с точностью до  $10^{-18}$  этого не наблюдается.

Во-вторых, если вспомнить, что коммутатор между операторами  $q$  и  $p$  равен  $[q, p] = i\hbar$ , то при вычислении следа коммутатора матриц  $q$  и  $p$  можно получить противоречие:

$$\text{Tr} [q, p] = \text{Tr} (qp - pq) = 0 = i\hbar \text{Tr} 1 = i\hbar N . \quad (3.14)$$

Данное противоречие возникает потому, что в случае, когда матрицы являются конечномерными, выражение  $\text{Tr} (qp - pq)$  всегда будет равно нулю. Так, можно

проверить, что при переходе к пределу будет выполняться равенство  $\text{Tr}[q, p] = i\hbar N$ .

## Осциллятор под действием постоянной внешней силы

Рассмотрим теперь осциллятор под действием постоянной внешней силы, которая не зависит от времени. Запишем гамильтониан для данной задачи:

$$H = \hbar\omega \left( a^+ a + \frac{1}{2} \right) + f a + f^* a^+ . \quad (3.15)$$

Если провести аналогию с задачей колебаний груза на пружине, то при воздействии на систему постоянной не зависящей от времени силы произойдет смещение положения равновесия осциллятора, однако частота колебаний при этом останется неизменной. Запишем внешнюю силу в терминах  $a$  и  $a^+$ :

$$a = A + \xi; \quad a^+ = A^+ + \xi^* . \quad (3.16)$$

Коммутатор новых операторов  $A$  и  $A^+$  будет равен  $[A, A^+] = 1$ , а гамильтониан при таком преобразовании можно переписать в следующем виде:

$$H = \hbar\omega \left( A^+ A + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega (A^+ \xi + A \xi^*) + f A + f^* A^+ + \hbar\omega |\xi|^2 + f \xi + \xi^* f^* . \quad (3.17)$$

В результате данного преобразования в гамильтониане появились линейные члены. Для того чтобы сократить их, выберем  $\xi$  таким, что

$$\xi = -\frac{f^*}{\hbar\omega} , \quad (3.18)$$

где  $f$  может быть вещественным числом.

Тогда гамильтониан можно переписать следующим образом:

$$H = \hbar\omega \left( A^+ A + \frac{1}{2} \right) - \frac{|f|^2}{\hbar\omega} . \quad (3.19)$$

Поиск решения задачи осуществляется аналогично случаю осциллятора без воздействия внешней силы. Отличие будет заключаться лишь в необходимости внесения поправки в энергию уровней. Тогда для рассматриваемого случая нулевым СВ будет являться вектор  $|\Omega\rangle$ , а действие на него оператора  $A$  запишется в виде

$$A|\Omega\rangle = 0 . \quad (3.20)$$

Все остальные СВ могут быть получены путем действия оператора  $A^+$  на СВ  $|\Omega\rangle$ :

$$|N\rangle = \frac{A^{+N}}{\sqrt{N!}} |\Omega\rangle . \quad (3.21)$$

В таком случае энергия осциллятора будет равна

$$E_N = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) - \frac{|f|^2}{\hbar\omega} . \quad (3.22)$$

В выражении (3.22) поправка к энергии  $|f|^2/\hbar\omega$  записывается со знаком минус, поскольку для того, чтобы вернуть осциллятор в состояние, когда на него не действует внешняя сила, необходимо совершить положительную работу.

Если в выражении (3.20) вместо  $A$  записать его разложение через операторы  $a$  и  $\xi$ , то возникнет уравнение, которое по истине играет существенную роль в квантовой механике и задает когерентные состояния:

$$a|\Omega\rangle = \xi|\Omega\rangle . \quad (3.23)$$

Далее перейдем к несколько иному обозначению СВ. Когерентные состояния всегда обозначаются с помощью СВ, которое фигурирует в данном выражении. Запишем формулу для СВ  $\xi$ :

$$|\xi\rangle = C e^{\xi a^+} |0\rangle , \quad (3.24)$$

где  $|0\rangle$  - СВ основного состояния невозмущенного осциллятора.

Докажем теперь равенство

$$e^{-\xi a^+} a e^{\xi a^+} = a + \xi = a(\xi) . \quad (3.25)$$

В выражении (3.25)  $e^{-\xi a^+} a e^{\xi a^+}$  переобозначено как  $a(\xi)$ . Далее возьмем производную от функции  $a(\xi)$ :

$$\frac{da}{d\xi} = e^{-\xi a^+} [a, a^+] e^{\xi a^+} = 1 . \quad (3.26)$$

Из выражения (3.26) следует, что  $a(\xi) = \xi + C$  с начальным условием  $a(0) = a$ , тогда

$$a(\xi) = a + \xi . \quad (3.27)$$

Домножим (3.25) слева на  $e^{\xi a^+}$  и получим:

$$a e^{\xi a^+} = e^{\xi a^+} (a + \xi) . \quad (3.28)$$

Используем выражение (3.28) для того, чтобы доказать равенство (3.23):

$$a|\xi\rangle = C a e^{\xi a^+} |0\rangle = \xi C e^{\xi a^+} |0\rangle = \xi|\xi\rangle . \quad (3.29)$$



Распишем СВ  $|\Omega\rangle$ :

$$|\Omega\rangle = C e^{\xi a^+} |0\rangle = C \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\xi a^+)^n}{n!} |0\rangle = C \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\xi^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle, \quad (3.30)$$

где было использовано разложение  $e^{\xi a^+}$  в ряд.

Таким образом, выражение (3.30) для СВ  $|\Omega\rangle$  представляет собой суперпозицию состояний невозмущенного осциллятора.

Коэффициент  $C$  в выражении (3.30) является нормировочной константой и может быть определен из условия  $\langle\Omega|\Omega\rangle = 1$ :

$$\langle\Omega|\Omega\rangle = |C|^2 \sum_n \frac{|\xi|^{2n}}{n!} = |C|^2 e^{|\xi|^2}. \quad (3.31)$$

Поскольку фаза для  $C$  может быть выбрана произвольно, положим её равной нулю (так как это удобно). Тогда  $C = e^{-\frac{|\xi|^2}{2}}$ . Таким образом, можем записать окончательное выражение для вектора  $|\xi\rangle$  в следующем виде:

$$|\xi\rangle = e^{-\frac{|\xi|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\xi^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle = e^{-\frac{|\xi|^2}{2}} e^{\xi a^+} |0\rangle. \quad (3.32)$$

Далее ответим на следующий вопрос: пусть в результате действия на осциллятор внешней силы осциллятор оказался в нижнем энергетическом состоянии. Спектр является невырожденным, поэтому вектор  $|\xi\rangle$  представляет собой чистое состояние. Тогда с какой вероятностью в этом новом энергетическом состоянии может быть обнаружено состояние с  $n$  невозмущенными квантами?

Вспомним, что для невозмущенного осциллятора с  $H = \hbar\omega (a^+ a + \frac{1}{2})$  вектор  $n$  является СВ ( $H |n\rangle = E_n |n\rangle$ ) с СЗ -  $E_n = \hbar\omega (n + \frac{1}{2})$ . Вероятность обнаружить другое чистое состояние

$$P_n = |\langle n|\Omega\rangle|^2 = e^{-|\xi|^2} \frac{|\xi|^{2n}}{n!}, \quad (3.33)$$

где  $P_n$  - вероятность обнаружить состояние с  $n$  квантами свободного невозмущенного осциллятора, когда на осциллятор действует внешняя сила.

## Свойства когерентного состояния

Введем оператор числа фотонов -  $\hat{n}$ , равный

$$\hat{n} = a^+ a. \quad (3.34)$$

При действии  $\hat{n}$  на СВ  $|n\rangle$  невозмущенного осциллятора можно получить его СЗ, которое будет равно числу фотонов  $n$ :

$$\hat{n}|n\rangle = n|n\rangle . \quad (3.35)$$

Далее сделаем то же самое для вектора  $|\Omega\rangle$ . Затем перейдем к вычислению матричного элемента для того, чтобы рассчитать среднее число фотонов  $\bar{n}$ :

$$\langle\Omega|\hat{n}|\Omega\rangle = \langle\Omega|a^+ a|\Omega\rangle = |\xi|^2 = \bar{n} . \quad (3.36)$$

В выражении (3.36) было получено среднее число фотонов  $\bar{n} = |\xi|^2$ . Далее вычисляем  $\hat{n}^2$  для того, чтобы получить дисперсию числа фотонов:

$$\begin{aligned} \langle\Omega|\hat{n}^2|\Omega\rangle &= \langle\Omega|a^+ a a^+ a|\Omega\rangle = [a a^+ = a^+ a + 1] = \langle\Omega|a^{+2} a^2|\Omega\rangle + \\ &+ \langle\Omega|a^+ a|\Omega\rangle = |\xi|^4 + |\xi|^2 , \end{aligned} \quad (3.37)$$

тогда окончательно получим, что дисперсия числа фотонов

$$D_\Omega(n) = |\xi|^2 = \bar{n} . \quad (3.38)$$

Для того чтобы сформулировать второе свойство, найдем средние и дисперсии координаты и импульса. Для их поиска необходимо рассчитать матричные элементы  $q$ ,  $q^2$ ,  $p$  и  $p^2$  по вектору когерентного состояния  $\xi$ :

$$\langle\xi|q|\xi\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle\xi|a^+ + a|\xi\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\xi + \xi^*) , \quad (3.39)$$

$$\langle\xi|q^2|\xi\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle\xi|(a + a^+)^2|\xi\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} (2|\xi|^2 + 1 + \xi^2 + \xi^{*2}) . \quad (3.40)$$

Следовательно, дисперсия координаты может быть записана в виде

$$D_\xi(q) = \frac{\hbar}{2m\omega} . \quad (3.41)$$

Аналогично и для импульса:

$$\langle\xi|p|\xi\rangle = \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} \frac{1}{i} \langle\xi|a - a^+|\xi\rangle = \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} \frac{\xi - \xi^*}{i} , \quad (3.42)$$

$$\begin{aligned} \langle\xi|p^2|\xi\rangle &= -\frac{\hbar m\omega}{2} \langle\xi|(a - a^+)^2|\xi\rangle = \frac{\hbar m\omega}{2} (1 - (\xi - \xi^*)^2) = \\ &= \frac{\hbar m\omega}{2} (1 - \xi^2 - \xi^{*2} + 2|\xi|^2) . \end{aligned} \quad (3.43)$$

Тогда представим дисперсию импульса следующим образом:

$$D_\xi(p) = \frac{\hbar m\omega}{2} . \quad (3.44)$$

Так, произведение дисперсий координаты и импульса будет равно

$$D_\xi(q) D_\xi(p) = \frac{\hbar^2}{4} . \quad (3.45)$$

Как видно из выражения (3.45), когерентное состояние минимизирует соотношение неопределенности между координатой и импульсом. Таким образом, удается получить траекторию, максимально приближенную к классической механике.

Для того чтобы в соотношении неопределенности минимизировать дисперсию одной из величин, увеличивая при этом дисперсию по другой, необходимо использовать так называемые сжатые состояния.

Ранее были получены два базиса: базис невозмущенного осциллятора ( $\{|n\rangle\}$ ) и базис осциллятора, на который воздействует внешняя сила ( $\{|N\rangle\}$ ). Известно, что два базиса Гильбертова пространства должны быть связаны унитарным преобразованием

$$|N\rangle = U|n\rangle . \quad (3.46)$$

Для векторов основного состояния  $|\Omega\rangle$  и  $|0\rangle$  должно быть выполнено соотношение

$$|\Omega\rangle = U|0\rangle . \quad (3.47)$$

Вспомним построение  $|\Omega\rangle$  записанное через  $|0\rangle$ :

$$|\Omega\rangle = e^{-\frac{|\xi|^2}{2}} e^{\xi a^+} |0\rangle . \quad (3.48)$$

В выражении (3.48) присутствуют две экспоненты: одна из них отвечает за нормировку, другая - содержит операторную часть. Для того чтобы построить унитарный оператор, сделаем замену экспоненты вида

$$e^{\xi a^+} \longrightarrow e^{\xi a^+ - \xi^* a} . \quad (3.49)$$

Преобразованный оператор является унитарным, поскольку для него выполняется равенство  $A^+ = A$ :

$$\left( e^{\xi a^+ - \xi^* a} \right)^+ = e^{\xi^* a - \xi a^+} . \quad (3.50)$$

Если вспомнить выражение  $e^{-\xi a^+} a e^{\xi a^+} = a + \xi$ , то замена экспоненты (3.49) не изменит ответа, потому что  $a$  коммутирует с  $a$ . Тогда с помощью преобразований, аналогичных (3.27) - (3.29), получим, что:

$$|\Omega\rangle = e^{\xi a^+ - \xi^* a} |0\rangle . \quad (3.51)$$

Нормировочный коэффициент в (3.51) уже не требуется, так как унитарное преобразование сохраняет норму. Для того чтобы окончательно убедиться в правильности выражения (3.51), необходимо воспользоваться решением задачи B11 из задач по математическому аппарату квантовой теории и разложить экспоненту вида  $e^{A+B}$  на произведение двух экспонент, если коммутатор  $[A, B] = \lambda \hat{1}$ . Если воспользоваться алгоритмом решения этого упражнения, то разложение  $e^{\xi a^+ - \xi^* a}$  может быть переписано в виде  $e^{\xi a^+} e^{-\frac{|\xi|^2}{2}} e^{-\xi^* a}$ . Подействовав  $e^{-\xi^* a}$  на  $|0\rangle$ , получим  $1|0\rangle$ . Тогда полученное выражение совпадает с (3.31).

## Эффект Мёссбауэра

Эффект Мёссбауэра заключается в бесфононном переходе ядра в возбужденное состояние при поглощении фотона. При этом энергия фотона идет не только на переход в возбужденное состояние, но и на импульс отдачи. Этот импульс возмущает колебания всего кристалла, благодаря чему кинетическая энергия приобретаемая атомом оказывается микроскопической. Данный эффект Наблюдается для кобальта с энергией перехода - 119 КэВ, что является очень низкой энергией перехода в возбужденное состояние, поскольку обычные ядерные возбуждения по масштабу энергии представляют собой МэВы.

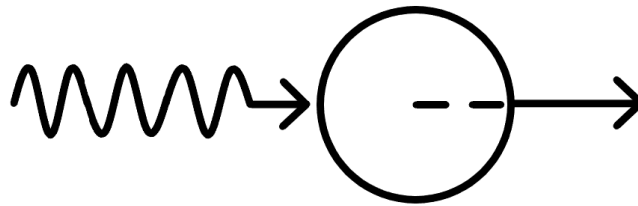


Рис. 3.2. Поглощение фотона ядром

## Семинар 4. Задачи динамики

### Гармонический осциллятор с зависящей от времени внешней силой

Рассмотрим первую эволюционную задачу с гамильтонианом вида

$$H(t) = \hbar\omega \left( a^+ a + \frac{1}{2} \right) + f(t) a^+ + f^*(t) a, \quad (4.1)$$

где  $f$  - внешняя сила, зависящая от времени.

В силу наличия зависящей от времени внешней силы данный гамильтониан является функцией, зависящей от времени, в результате чего задача больше не является задачей на стационарные состояния, а является задачей динамики.

Пусть в начальный момент времени система находится в основном состоянии осциллятора:

$$\psi(0) = |0\rangle. \quad (4.2)$$

С некоторой вероятностью в момент времени  $t$  система возбудится до состояния с  $n$  квантами (или фотонами). Так как гамильтониан является функцией от  $t$ , имеет место эволюция системы во времени.

**Замечание 4.1.** *Случай, когда внешняя сила  $f$  представляет собой дельта - функцию, является более сложным и требует иного подхода к решению по сравнению с тем, что будет представлен далее.*

Пусть в момент времени  $t$ , равный нулю, начинает действовать внешняя сила, которая возбуждает систему. В такого рода задачах вместо поиска СВ необходимо искать унитарный оператор эволюции системы, в результате чего задача сводится к решению уравнения Гейзенберга.

Решаем уравнение для оператора  $a$ , так как оператор  $p$  связан с ним линейным преобразованием.

$$\dot{a} = \frac{i}{\hbar} [H, a]. \quad (4.3)$$

Стоит отметить, что уравнение (4.3) записано для произвольного момента времени и коммутатор  $a$  с  $a^+$  существует в каждый момент времени, поэтому для любого  $t$  выполняется:

$$[a(t), a^+(t)] = 1. \quad (4.4)$$

Далее определим, чему равна правая часть выражения (4.3):

$$\frac{i}{\hbar} [H, a] = -i\omega a - \frac{i}{\hbar} f(t) . \quad (4.5)$$

Для того чтобы полностью решить задачу необходимо также записать уравнения Гейзенберга и найти его решение для оператора  $a^+$ . Тем не менее, для того чтобы получить решение для данного оператора, необходимо найти сопряженное выражение от полученного выражения для оператора  $a$ .

Решим уравнение (4.3) методом вариации постоянных:

$$a(t) = C(t) e^{-i\omega t} , \quad (4.6)$$

тогда

$$\dot{C}(t) = -\frac{i}{\hbar} f(t) e^{i\omega t} \longrightarrow C(t) = C(0) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau e^{i\omega\tau} f(\tau) . \quad (4.7)$$

В начальный момент времени  $t$ , равный нулю должно выполняться условие равенства  $a(t=0) = a(0)$ , следовательно, выражение для оператора  $a$  должно иметь вид

$$a(t) = \left[ a(0) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau e^{i\omega\tau} f(\tau) \right] e^{-i\omega t} = U^+(t) a(0) U(t) . \quad (4.8)$$

Поскольку необходимо, чтобы оператор  $a$  был представим в виде  $U^+(t) a(0) U(t)$ , необходимо преобразовать выражение  $a(0) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau e^{i\omega\tau} f(\tau) e^{-i\omega t}$ .

Оператор эволюции в данной задаче должен выполнять две функции: создавать множитель  $e^{-i\omega t}$  и сдвигать  $a(0)$  на числовой коэффициент  $\int_0^t d\tau e^{i\omega\tau} f(\tau)$ .

Операция умножения  $a(0)$  на экспоненту соответствует свободной динамике, поскольку в случае прекращения действия силы  $f$  данный множитель остается. Оператор эволюции же может быть записан в следующем виде:

$$U_1 = e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \longrightarrow e^{-i\omega a^+ t} , \quad (4.9)$$

где  $H_0$  - оператор Гамильтона без внешней силы. В данному выражении в экспоненте опущено слагаемое  $1/2$ , поскольку оно не относится к операторной части.

Далее рассмотрим закон эволюции оператора  $a(0)$  с использованием оператора эволюции  $U_1$ :

$$a(\omega) = e^{i\omega a^+ t} a e^{-i\omega a^+ t} . \quad (4.10)$$

**Замечание 4.2.** Важным свойством оператора  $a^+$  является его эрмитовость. Легко убедиться в том, что для него выполняется соотношение  $(a^+ a)^+ = a^+ a$ .

Далее продифференцируем  $a(\omega)$  по  $\omega$ :

$$\frac{da}{d\omega} = it e^{i\omega a^+ t} \underbrace{[a^+ a, a]}_{-a} e^{-i\omega a^+ t} = -it a(\omega) . \quad (4.11)$$

Решением дифференциального уравнения (4.11) является оператор вида

$$a(\omega) = \underbrace{a(0)}_{=a} e^{-i\omega t} . \quad (4.12)$$

Далее необходимо реализовать операцию сдвига  $a(0)$  на числовой коэффициент. Для этого будем использовать оператор

$$U_2 = e^{\xi(t)a^+ - \xi^*(t)a} , \quad (4.13)$$

где  $\xi(t)$  имеет вид:

$$\xi(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau e^{i\omega\tau} f(\tau) . \quad (4.14)$$

Оператор  $U_2$  так же, как и  $U_1$ , является унитарным оператором ( $U_2^+ U_2 = 1$ ).

Будем действовать по схеме, ранее использованной для оператора  $U_1$ . Рассмотрим закон эволюции оператора  $a$  с использованием оператора  $U_2$ :

$$U_2^+ a U_2 = a + \xi . \quad (4.15)$$

При подстановке выражения (4.13) в (4.15) легко убедиться, что оператор  $U_2$  выполняет нужный сдвиг на числовой коэффициент. Так, необходимо составить из операторов  $U_1$  и  $U_2$  полный унитарный оператор  $U$ .

Для того чтобы в результате его действия получить выражение (4.8) требуется, чтобы он имел следующий вид:

$$U = U_1 U_2 . \quad (4.16)$$

В таком случае при подстановке  $U$  в закон эволюции оператора  $a$  получим следующее равенство:

$$U^+ a U = U_2^+ U_1^+ a U_1 U_2 = e^{-i\omega t} U_2^+ a U_2 = e^{-i\omega t} (a + \xi) . \quad (4.17)$$

**Замечание 4.3.** Оператор  $U$ , определенный выражением (4.16), можно выбрать как  $U = U_2 U_1$ , однако при этом необходимо, чтобы оператор  $U_2$  осуществлял сдвиг на числовой коэффициент, домноженный на экспоненту  $e^{-i\omega t}$ .

После того, как нам удалось определить явный вид оператора  $U$ , можно осуществить поиск эволюции системы из некоторого состояния. Волновая функция этого состояния в момент времени  $t$  может быть записана как

$$|\psi(t)\rangle = U(t) |\psi(0)\rangle . \quad (4.18)$$

Следовательно, в этот момент времени вероятность обнаружить  $n$  квантов (или фотонов) осциллятора равняется следующему:

$$P_n(t) = |\langle n|\psi(t)\rangle|^2 = |\langle n|U(t)|0\rangle|^2 . \quad (4.19)$$

## Разделение операторной экспоненты на сомножители

Для того, чтобы вычислить матричный элемент, в выражение (4.18) необходимо разделить экспоненту, которая содержится в операторе  $U_2$ , на сомножители. Рассмотрим операцию разделения на сомножители операторной экспоненты  $e^{A+B}$  в общем случае .

Если операторы  $A$  и  $B$  коммутируют между собой, то

$$e^{A+B} = e^A \cdot e^B . \quad (4.20)$$

В случае, когда коммутатор  $[A, B] = \lambda \hat{1}$ , экспонента тоже может быть разложена. Для того чтобы провести такое разложение необходимо использовать общую формулу дифференцирования операторных экспонент.

Пусть есть некий оператор  $V$ , зависящий от параметра  $\lambda$ , и этот оператор может быть продифференцирован по  $\lambda$ . Пусть при этом

$$\left[ V(\lambda), \frac{\partial V}{\partial \lambda} \right] \neq 0 . \quad (4.21)$$

Сразу же возникает вопрос, связанный с тем, как именно можно дифференцировать экспоненту  $e^{V(\lambda)}$  по  $\lambda$ . Чтобы ответить на данный вопрос, вспомним формулу разложения по повторному коммутатору (формула Бейкера-Хаусдорфа).

Разложим единицу на сумму отрезков  $\Delta t$ :

$$\sum_{i=1}^N \Delta t_i = 1 , \quad (4.22)$$

тогда производная от  $e^{V(\lambda)}$  по  $\lambda$  может быть преобразована следующим образом:

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} e^{V(\lambda)} = \frac{\partial}{\partial \lambda} e^{V(\lambda) \sum_i \Delta t_i} = \frac{\partial}{\partial \lambda} \left( \prod_i e^{\Delta t_i V(\lambda)} \right) . \quad (4.23)$$



Используя формулу дифференцирования произведения, получим

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} e^{V(\lambda)} = \sum_{k=1}^N \left( \prod_{i=1}^{k-1} e^{\Delta t_i V(\lambda)} \times \left( \frac{\partial}{\partial \lambda} e^{\Delta t_k V(\lambda)} \right) \times \prod_{i=k+1}^N e^{\Delta t_i V(\lambda)} \right). \quad (4.24)$$

Далее устремим число отрезков разбиения  $N$  к бесконечности, в результате чего экспоненту  $e^{\Delta t_k V(\lambda)}$  можно разложить следующим образом:

$$e^{\Delta t_k V(\lambda)} = 1 + \Delta t_k V(\lambda) + O(\Delta t^2). \quad (4.25)$$

Подставим выражение (4.25) в (4.24) и получим, что

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \lambda} e^{V(\lambda)} &= \sum_{k=1}^N \prod_{i=1}^{k-1} e^{\Delta t_i V(\lambda)} \Delta t_k \frac{\partial V}{\partial \lambda} \prod_{i=k+1}^N e^{\Delta t_i V(\lambda)} = \\ &= \sum_{k=1}^N \Delta t_k \exp \left[ \sum_{i=1}^{k-1} \Delta t_i V(\lambda) \right] \frac{\partial V}{\partial \lambda} \exp \left[ \sum_{i=k+1}^N \Delta t_i V(\lambda) \right]. \end{aligned} \quad (4.26)$$

В силу того, что ранее число отрезков разбиения было устремлено к бесконечности, в выражении (4.26) можно перейти от суммирования к интегрированию, получив при этом окончательное выражение для производной  $\frac{\partial}{\partial \lambda} e^{V(\lambda)}$ :

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} e^{V(\lambda)} = \int_0^1 e^{\alpha V(\lambda)} \frac{\partial V}{\partial \lambda} e^{(1-\alpha)V(\lambda)} d\alpha = \int_1^0 e^{(1-\alpha)V} \frac{\partial V}{\partial \lambda} e^{\alpha V} d\alpha. \quad (4.27)$$

Введем теперь вспомогательный оператор  $C(x)$  такой, что

$$C(x) = A + Bx, \quad (4.28)$$

тогда:

$$\frac{dC}{dx} = B. \quad (4.29)$$

Далее введем оператор  $F(x)$ :

$$F(x) = e^{C(x)}. \quad (4.30)$$

Возьмем производную от этого оператора по  $x$ :

$$\frac{d}{dx} F(x) = \left( \int_0^1 e^{\alpha C(x)} B e^{-\alpha C(x)} d\alpha \right) F(x). \quad (4.31)$$

Обозначим, что

$$B(\alpha) = e^{\alpha C(x)} B e^{-\alpha C(x)}. \quad (4.32)$$

Для того, чтобы вычислить интеграл в выражении (4.31), решим уравнение Гейзенберга для оператора  $B(\alpha)$ :

$$\frac{dB}{d\alpha} = e^{\alpha C} [C, B] e^{-\alpha C} = \lambda, \quad (4.33)$$

где

$$[C, B] = [A + Bx, B] = [A, B] = \lambda . \quad (4.34)$$

Тогда оператор  $B(\alpha)$  будет равен:

$$B(\alpha) = B + \alpha \lambda . \quad (4.35)$$

Подставим найденный оператор в выражение (4.31). Тогда

$$\frac{dF}{dx} = \left( \int_0^1 (B + \alpha \lambda) d\alpha \right) F(x) = \left( B + \frac{\lambda}{2} \right) F(x) . \quad (4.36)$$

Решим дифференциальное уравнение (4.36) на оператор  $F(x)$  и получим, что

$$F(x) = e^{(B + \frac{\lambda}{2})x} F(0) = e^{(B + \frac{\lambda}{2})x} e^A = e^{\frac{\lambda x}{2}} e^{Bx} e^A . \quad (4.37)$$

Для того чтобы функция  $F(x)$  совпадала с  $e^{A+Bx}$ , необходимо взять за  $x$  единицу, тогда

$$F(1) = e^{A+B} = e^{\frac{\lambda}{2}} e^B e^A = e^{-\frac{\lambda}{2}} e^A e^B , \quad (4.38)$$

где второй вид записи разбирования экспонент на сомножители может быть получен из таких соображений, что при замене  $A$  на  $B$  и  $B$  на  $A$  выражение не изменится, а коммутатор этих операторов при перестановке будет равен  $-\lambda$ .

Далее вернемся к выражению для  $P_n(t)$ . Оно может быть преобразовано к следующему виду:

$$P_n(t) = |\langle n|U(t)|0\rangle|^2 = |\langle n|U_1 U_2|0\rangle|^2 = |\langle n|U_2(t)|0\rangle|^2 . \quad (4.39)$$

Применим полученный метод разбирования операторных экспонент на сомножители к оператору  $U_2$ . Тогда

$$e^{\xi a^+ - \xi^* a} = e^{-\frac{|\xi|^2}{2}} e^{\xi a^+} e^{-\xi^* a} . \quad (4.40)$$

Подставим полученное выражение в (4.39) и получим, что

$$P_n(t) = |\langle n|e^{-\frac{|\xi|^2}{2}} \sum_m \frac{\xi^m}{\sqrt{m!}} |m\rangle|^2 = e^{-|\xi|^2} \frac{|\xi|^{2n}}{n!} . \quad (4.41)$$

Полученное в (4.41) выражение представляет собой распределение Пуассона. Вместо функции  $\xi$  можно выбрать любую функцию, возбуждающую осциллятор. Примеры таких функций представлены на рис. 4.1.

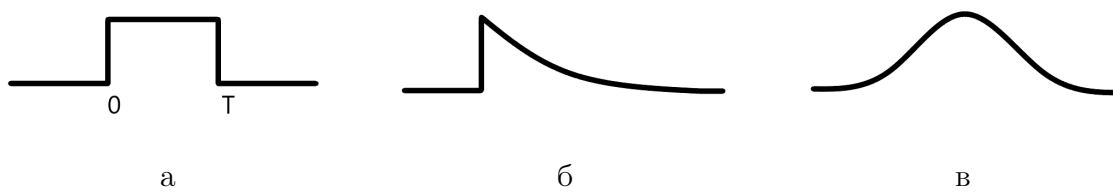


Рис. 4.1. Примеры осцилляторных функций  $\xi$

## Семинар 5. Доклад „Сжатые состояния“

### Доклад подготовила Терещенко Ирина Александровна

Большой интерес для задач квантовой оптики представляют собой сжатые состояния электромагнитного поля, т.е. состояния, сжатые по одной из квадратур. Важно, что квадратуру электромагнитного поля, флуктуации которой меньше стандартного квантового предела, перспективно использовать с точки зрения уменьшения квантового шума в таких областях, как оптическая связь, фотодетектирование, а также детектирование гравитационных волн и их усиление с понижением уровня шума. Известно также, что дробовой шум - это предельный уровень, ниже которого в классике нельзя опуститься, однако в случае сжатых состояний это не предел. Как же подготовить такие состояния? Покажем это на примере квантового рассмотрения простого гармонического осциллятора. Будем прилагать постоянное электрическое воздействие такого вида, что гамильтониан системы можно записать следующим образом:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} kx^2 - eE_0 (ax - bx^2) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} (k + 2ebE_0) x^2 - eaE_0 x, \quad (5.1)$$

где

$$k' = k + 2ebE_0. \quad (5.2)$$

Так,  $ax$  приводит к смещению, а  $bx^2$  вводится в качестве барьера «сжимающего волновой пакет».

Для квантового описания данной системы введем операторы безразмерных координаты и импульса:

$$\hat{x} = \frac{\hat{a} + \hat{a}^+}{2} \quad \left( \hat{x} = \frac{\sqrt{2\hbar/m\omega}}{2} (a + a^+) \right), \quad (5.3)$$

где  $\hat{a}^+$  и  $\hat{a}$  - операторы рождения и уничтожения соответственно.

Рассчитаем коммутатор  $[\hat{x}, \hat{p}]$ :

$$\begin{aligned} [\hat{x}, \hat{p}] &= \left[ \frac{\hat{a} + \hat{a}^+}{2}, \frac{\hat{a} - \hat{a}^+}{2} \right] = -\frac{i}{4} \{ [a + a^+, a] - [a + a^+, a^+] \} = \\ &= -\frac{i}{4} \{ [a^+, a] - [a, a^+] \} = \frac{i}{2} [a, a^+] = \frac{i}{2}, \end{aligned} \quad (5.4)$$

так как  $[a, a^+] = i$ .

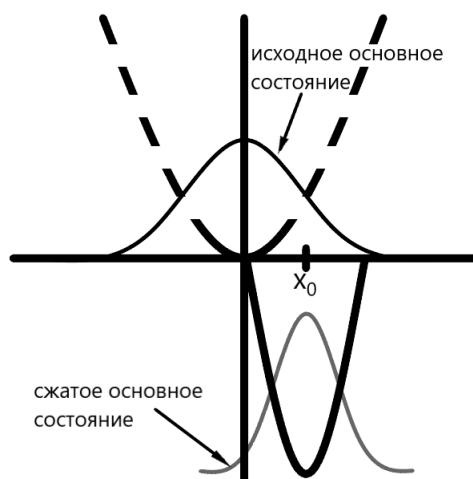


Рис. 5.1. Сжатие волнового пакета смещенным «суженным» квадратичным потенциалом ПГО

По принципу неопределенности Гейзенберга, если:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}, \quad (5.5)$$

то:

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{|\langle C \rangle|}{2}. \quad (5.6)$$

Следовательно, соотношение неопределенности:

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{1}{4}. \quad (5.7)$$

Условием сжатого состояния является  $(\Delta x) < \frac{1}{2}$ , либо  $(\Delta p) < \frac{1}{2}$ . Если вдобавок к этому условию выполняется:  $\Delta x \Delta p = \frac{1}{4}$ , то мы имеем дело с идеальным сжатым состоянием. Проиллюстрируем это с помощью фазовой плоскости.

Генерация сжатых состояний осуществляется, например, в процессе параметрического рассеяния света, при котором фотон накачки проходит через кристалл с нелинейной восприимчивостью  $\chi^{(2)}$  и рождает сигнальный и холостой фотоны. При этом выполняется ЗСЭ:

$$\omega_p = \omega_i + \omega_s \quad (5.8)$$

При этом рожденные фотоны сильно скоррелированы друг с другом, а результирующее поле (генерируемое) называется двухмодовым сжатым светом. Генерация яркого сжатого вакуума, содержащего до  $10^{15}$  фотонов в одной моде была описана в работе: *Chekhova M.V., et. al. // Optics Communications. - 2015. - Vol. 337. -*

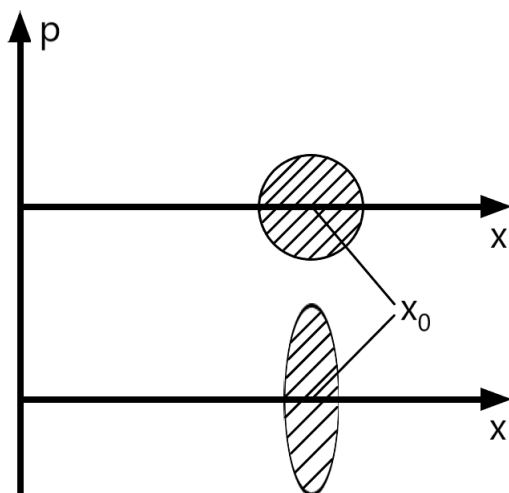


Рис. 5.2. Рисунок фазовой плоскости

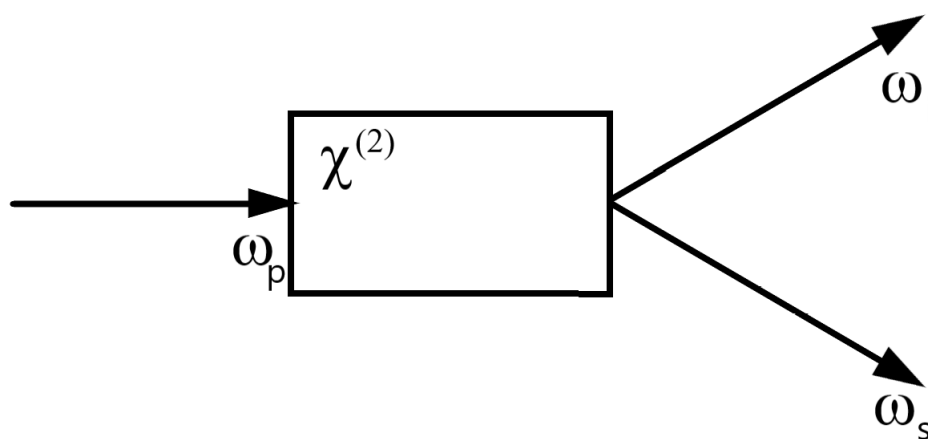


Рис. 5.3. Прохождение света через кристалл с нелинейной восприимчивостью

Р. 27. Генерация также может осуществляться при генерации высших гармоник, в многофотонных процессах, а также возникать в эффектах самовоздействия.

Когерентные состояния и вакуум могут быть описаны на основе операторов  $a$  и  $a^+$ . Преобразование же этих состояний в сжатое (операторы  $b$  и  $b^+$ ) описывается операторным уравнением в представлении Гейзенберга:

$$\hat{b} = \mu \hat{a} + \nu \hat{a}^+; \quad \hat{b}^+ = \mu^* \hat{a}^+ + \nu^* \hat{a}, \quad (5.9)$$

где  $\mu, \nu = \text{Const}$ . Они также удовлетворяют уравнению:

$$|\mu|^2 - |\nu|^2 = 1. \quad (5.10)$$

Тогда дисперсии флуктуаций квадратурных компонент определяются следующим

образом:

$$D_x = \langle \alpha, \xi | x^2 | \alpha, \xi \rangle - (\langle \alpha, \xi | x | \alpha, \xi \rangle)^2 = \frac{|\mu - \nu|^2}{4}, \quad (5.11)$$

$$D_p = \langle \alpha, \xi | p^2 | \alpha, \xi \rangle - (\langle \alpha, \xi | p | \alpha, \xi \rangle)^2 = \frac{|\mu + \nu|^2}{4}. \quad (5.12)$$

Рассмотрим преобразование вакуумного состояния в сжатое:

$$\underbrace{|\alpha, \xi\rangle}_{\text{сжатое-когерентное состояние}} = \underbrace{D(\alpha)}_{\text{оператор смещения}} * \underbrace{S(\xi)}_{\text{оператор сжатия}} * \underbrace{|0\rangle}_{\text{вакуумное состояние}}, \quad (5.13)$$

где

$$D(\alpha) = \exp(\alpha \hat{a}^+ - \alpha^* \hat{a}), \quad (5.14)$$

$$S(\xi) = \exp\left(\frac{1}{2}\xi \hat{a}^{+2} - \frac{1}{2}\xi^* \hat{a}^2\right), \quad (5.15)$$

причем  $\alpha, \xi \in \mathbf{C}$ ;  $\alpha = |\alpha| \exp(i\varphi)$ ;  $\xi = r \exp(i\theta)$ , где  $r$  - показатель сжатия, а  $|\alpha|^2 = \langle N \rangle$ .

Если целью является получение вакуумного сжатого состояния, то

$$|0_s\rangle = S(\xi) |0\rangle. \quad (5.16)$$

Важно отметить, что к определению оператора сжатия можно прийти и через рассмотрение конкретного гамильтониана системы, которая позволяет рассмотреть генерацию сжатого состояния на примере вырожденного (по частоте) параметрического процесса.

$$H = i\hbar(g\hat{a}^{+2} - g^*\hat{a}^2), \quad (5.17)$$

где  $g$  - константа взаимодействия.

В результате создается состояние поля вида:

$$|\psi(t)\rangle = \exp((g\hat{a}^{+2} - g^*\hat{a}^2)t) |0\rangle, \quad (5.18)$$

что и приводит к виду  $S(\xi)$ .

Рассмотрим систему более детально:

$$H = \hbar\omega\left(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2}\right) + i\hbar\Gamma\left(e^{2i\omega t}\hat{a}^2 - e^{-2i\omega t}\hat{a}^{+2}\right), \quad (5.19)$$

где первое слагаемое в скобках (5.19) означает уничтожение двух квантов с испусканием двух фотонов с частотой  $\omega$ , а второе - рождение двух квантов с поглощением двух фотонов.

$$\frac{d\hat{a}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{a}] . \quad (5.20)$$

Выражение (5.20) представляет собой уравнение Гейзенберга.

Запишем уравнения Гейзенберга для операторов  $\hat{a}$  и  $\hat{a}^+$ :

$$\begin{cases} \frac{d\hat{a}}{dt} = -i\omega\hat{a} - 2\Gamma e^{-2i\omega t} \hat{a}^+ \\ \frac{d\hat{a}^+}{dt} = i\omega\hat{a}^+ - 2\Gamma e^{2i\omega t} \hat{a} . \end{cases} \quad (5.21)$$

Далее выполним замену:

$$\begin{cases} \hat{a} = \tilde{a} \exp(-i\omega t) \\ \hat{a}^+ = \tilde{a}^+ \exp(i\omega t) , \end{cases} \quad (5.22)$$

которая приведет к системе уравнений:

$$\begin{cases} \frac{d\tilde{a}}{dt} = -2\Gamma \tilde{a}^+ \\ \frac{d\tilde{a}^+}{dt} = -2\Gamma \tilde{a} . \end{cases} \quad (5.23)$$

Пусть  $\hat{q} = (\hat{a} + \hat{a}^+)/2$ ,  $\hat{p} = (\hat{a} - \hat{a}^+)/2i$ , тогда

$$\begin{cases} \frac{d\hat{q}}{dt} = -2\Gamma \hat{q} \\ \frac{d\hat{p}}{dt} = 2\Gamma \hat{p} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \frac{dq}{q} = -2\Gamma dt \\ \frac{dp}{p} = 2\Gamma dt \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \hat{q} = \hat{q}_0 e^{-2\Gamma t} \\ \hat{p} = \hat{p}_0 e^{2\Gamma t} \end{cases} \quad (5.24)$$

Если  $\psi_{\text{in}} = |0\rangle$  (вакуум), то:

$$\langle \hat{q}(t) \rangle = e^{-2\Gamma t} \langle 0 | \hat{q}_0 | 0 \rangle = 0, \quad D_q(t) = \langle \hat{q}^2(t) \rangle , \quad (5.25)$$

откуда

$$D_q(t) = \langle 0 | \hat{a}^+ \hat{a}^+ + \hat{a}^+ \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^+ + \hat{a} \hat{a} | 0 \rangle = \langle q_0^2 \rangle e^{-4\Gamma t} = \frac{1}{2} e^{-4\Gamma t} . \quad (5.26)$$

Ранее уже было сказано о том, что такие процессы могут происходить в кристалле.

Пусть  $t$  - время прохождения в кристалле, тогда  $\Gamma t = \sigma(l)$ , где  $l$  - длина кристалла.

Таким образом

$$D_q = \frac{1}{2} e^{-4\sigma}; \quad D_p = \frac{1}{2} e^{4\sigma} . \quad (5.27)$$

Дисперсия координатной квадратуры резко уменьшается при попадании фотона в кристалл. Чем больше длина образца, тем меньше будет дисперсия. Проиллюстрируем данный эффект с помощью фазовой плоскости (рис. 5.4).



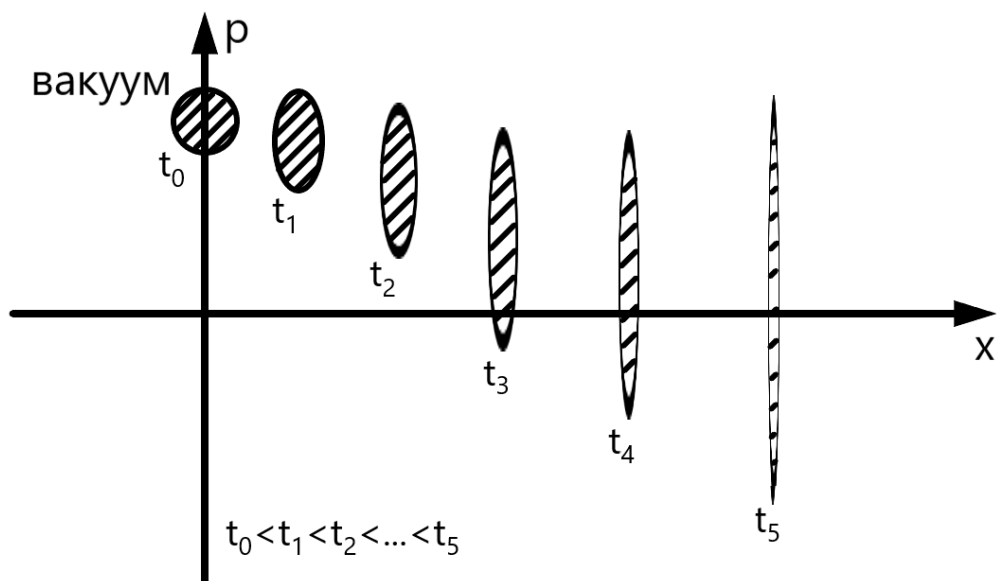


Рис. 5.4. Эффект уменьшения дисперсии с увеличением длины образца

## Семинар 6. Взаимодействие атомной системы со светом в резонаторе

### Эффект Мёссбауэра

Вернемся к изучению эффекта Мёссбауэра (бесфононному ядерному переходу) и вспомним, что данный эффект наблюдается при поглощении или испускании гамма-кванта атомным ядром с его переходом в возбужденное состояние (рис. 6.1).

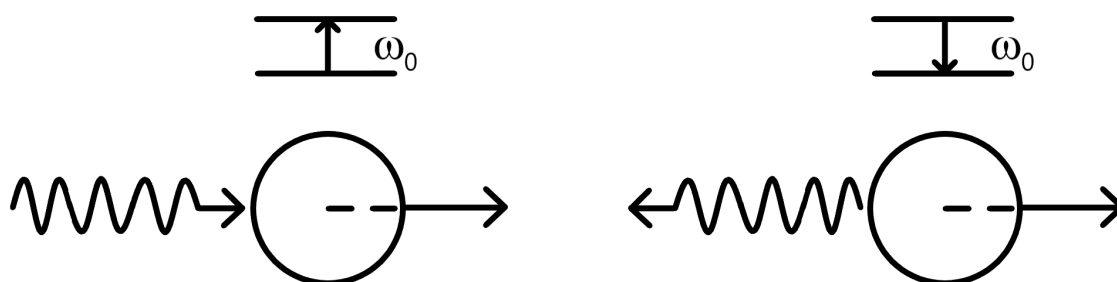


Рис. 6.1. Поглощение и испускание гамма-кванта атомным ядром

Частоты  $\omega$  перехода ядра в возбужденное состояние могут быть экспериментально измерены. При этом весь спектр поглощения и весь спектр излучения смещены относительно несмещенной частоты перехода  $\omega_0$  (рис. 6.2).

Так как при поглощении гамма-кванта энергия расходуется не только на переход ядра в возбужденное состояние, но и на импульс отдачи, энергия гамма-кванта должна быть больше энергии перехода, следовательно, для частоты  $\omega$  соотношение будет аналогичным. В случае излучения, наоборот, частота излучаемого гамма-кванта будет меньше частоты перехода  $\omega_0$  (рис. 6.2).



Рис. 6.2. Смещение спектра частот при поглощении и испускании гамма-кванта атомным ядром

Стоит отметить, что спектр оказывается уширенным за счет того, что процессы возбуждения фононов крайне разнообразны. Эксперимент показывает, что при

энергии гамма-квантов меньше 150 КэВ (примерно) импульса отдачи не хватает на возбуждение фононов. В таком случае импульс отдачи передается не одному ядру, а всему образцу в целом. Таким образом, образец будет совершать небольшое поступательное движение. В силу того, что масса образца большая, кинетическая энергия образца может быть записана в виде

$$E_{\text{кин}} = \frac{p^2}{2M_{\text{обр}}} \ll \dots \quad (6.1)$$

Как следует из выражения (6.1), кинетическая энергия образца оказывается много меньше всех величин, рассматриваемых в задаче.

Переход ядра в возбужденное состояние может быть описан матричным элементом следующего вида

$$\langle 0_{\text{фононы}} | e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{r}_N} | 0_{\text{фононы}} \rangle, \quad (6.2)$$

где  $\vec{p}$  - импульс фонона,  $\vec{r}_N$  - радиус-вектор ядра.

Матричный элемент (6.2) может быть легко вычислен, так как:

$$\vec{r}_N = \sum_{\alpha} \vec{\lambda}_{\alpha} q_{\alpha}, \quad (6.3)$$

где  $q_{\alpha}$  - нормальная координата, являющаяся степенью свободы каждой фононной моды. Тогда

$$\langle 0_{\text{фононы}} | e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{r}_N} | 0_{\text{фононы}} \rangle = \langle 0 | e^{i/h\vec{p} \sum_{\alpha} \vec{\lambda}_{\alpha} q_{\alpha}} | 0 \rangle. \quad (6.4)$$

Каждый  $q_{\alpha}$  в свою очередь может быть записан в виде

$$q_{\alpha} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m_{\alpha}\omega_{\alpha}}} (a_{\alpha} + a_{\alpha}^+) . \quad (6.5)$$

Далее вычисляем матричные элементы от нулевого состояния по каждой моде, которые могут быть записаны следующим образом:

$$\langle 0 | e^{i\kappa_{\alpha}(a_{\alpha} + a_{\alpha}^+)} | 0 \rangle, \quad (6.6)$$

где  $\kappa_{\alpha}$  - некоторая константа, равная

$$\kappa_{\alpha} = \frac{\vec{p} \vec{\lambda}_{\alpha}}{\sqrt{2\hbar m_{\alpha} \omega_{\alpha}}}. \quad (6.7)$$

Экспоненты в матричных элементах могут быть разложены следующим образом:

$$e^{i\kappa_{\alpha}(a_{\alpha} + a_{\alpha}^+)} = e^{-|\kappa_{\alpha}|^2} e^{i\kappa_{\alpha} a_{\alpha}^+} e^{i\kappa_{\alpha} a_{\alpha}} . \quad (6.8)$$

Тогда экспонента  $e^{i\chi_\alpha a_\alpha}$ , действуя направо на  $|0\rangle$ , оставляет единицу;  $e^{i\chi_\alpha a_\alpha^\dagger}$  также оставит единицу при действии на  $\langle 0|$ , и итоговым ответом для каждого матричного элемента будет  $e^{-|\chi_\alpha|^2}$ . Матричный элемент (6.2) составляет главную часть интенсивности электромагнитного перехода. В связи с этим интенсивность перехода будет пропорциональна квадрату модуля матричного элемента (6.2):

$$I \sim e^{-2\sum_\alpha |\chi_\alpha|^2}. \quad (6.9)$$

Из выражения (6.9) следует, что чем больше энергия налетающего гамма-кванта, тем меньше интенсивность перехода, поэтому для эффекта Мёссбауэра критично, чтобы энергия налетающего гамма-кванта была меньше 150 КэВ, и чем меньше будет эта энергия, тем более интенсивным будет переход. Рекордсменами по энергии перехода являются  $^{57}\text{Fe}$  с энергией перехода 14.4 КэВ и следующий после него  $^{119}\text{Sn}$  с энергией перехода 23.6 КэВ.

### Задача на одномодовое излучение, взаимодействующее с атомной системой в резонаторе

Рассмотрим более сложную систему в резонаторе, в которой происходит одномодовое поглощение и излучение фотонов (рис. 6.3). Резонатор позволяет возбуждаться определенной частоте фотона. При этом в системе присутствует взаимодействие с атомной подсистемой, за счет которой и происходят процессы поглощения и излучения.

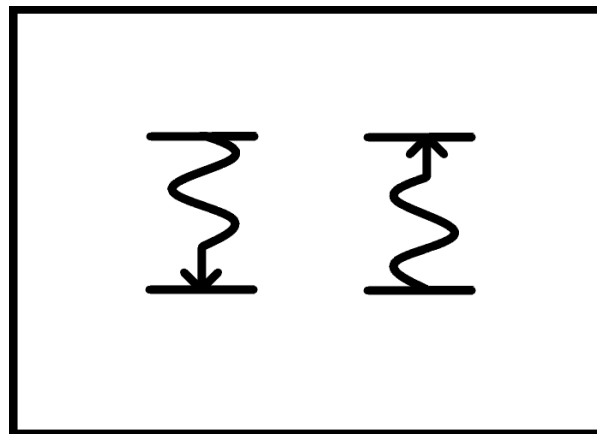


Рис. 6.3. Система в резонаторе

## Задача на СЗ и СВ

Ограничимся простейшим случаем, когда возможен всего один переход между атомными уровнями. Гамильтониан такой задачи может быть записан в следующем виде:

$$H = \underbrace{\hbar\omega \left( a^+ a + \frac{1}{2} \right)}_{\text{фотонная подсистема}} + \underbrace{\hbar\omega \frac{\sigma_3}{2}}_{\text{атомная подсистема}} + \underbrace{g a^+ \sigma_- + g^* a \sigma_+}_{\text{взаимодействие между подсистемами}}, \quad (6.10)$$

где

$$\sigma_{\pm} = \frac{1}{2} (\sigma_1 \pm i \sigma_2). \quad (6.11)$$

Если расписать матрицы  $\sigma_+$  и  $\sigma_-$ , то они могут быть представлены как

$$\sigma_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (6.12)$$

и

$$\sigma_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (6.13)$$

Матрицы (6.12) и (6.13) являются неэрмитовыми и при эрмитовом сопряжении они переходят друг в друга, при этом для них выполняется следующее условие:

$$\sigma_+^2 = \sigma_-^2 = 0. \quad (6.14)$$

С точки зрения собственной энергии атомов

$$H_{\text{ат}} = \frac{\hbar\omega}{2} \sigma_3. \quad (6.15)$$

СВ  $H_{\text{ат}}$  являются СВ  $\sigma_3$  и равны

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (6.16)$$

Поддействовав на эти СВ  $H_{\text{ат}}$ , получим следующие выражения

$$H_{\text{ат}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = +\frac{\hbar\omega}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (6.17)$$

$$H_{\text{ат}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar\omega}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (6.18)$$

Столбец  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  соответствует верхнему атомному уровню, а  $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$  - нижнему. Уровни разнесены на величину  $\hbar\omega$ . Далее будем считать, что частота фотона является резонансной, т. е. равна частоте перехода.

Запишем действие операторов  $\sigma_+$  и  $\sigma_-$  на СВ  $H_{\text{ат}}$ :

$$\sigma_+ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_- \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (6.19)$$

Таким образом, слагаемое гамильтониана  $g a^+ \sigma_-$  соответствует переходу с верхнего атомного уровня на нижний с излучением фотона, а  $g^* a \sigma_+$  - переходу на нижний уровень с поглощением фотона.

Найдем теперь СВ гамильтониана  $H$  при условии, что константа связи между подсистемами не зависит от времени. Введем вектор  $\psi$  Гильбертова пространства, построенный на базисе осцилляторных состояний и одновременно состояний двухуровневой системы, благодаря чему базисные векторы будут иметь следующий вид:

$$|\nu\rangle = \begin{pmatrix} |n_1\rangle \\ |n_2\rangle \end{pmatrix} = |n_1\rangle \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + |n_2\rangle \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (6.20)$$

В результате для  $\psi$  будет получаться очевидная реализация в виде столбца (спинора)

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}. \quad (6.21)$$

Отметим, что в задаче присутствует симметрия, поскольку в нее равноправно входят процессы рождения фотона с переходом атомной системы вниз и обратные процессы возбуждения атомной системы с поглощением фотонов. Таким образом, в этом случае должен существовать дополнительный динамический интеграл движения

$$N = a^+ a + \xi \sigma_3. \quad (6.22)$$

Далее необходимо подобрать величину  $\xi$  так, чтобы операторы  $H$  и  $N$  коммутировали:

$$[H, N] = 0 = [H, a^+ a] + [H, \xi \sigma_3] = [H, a^+ a] + \xi [H, \sigma_3]. \quad (6.23)$$

Для начала вычислим коммутатор  $[H, a a^+]$ . Для этого вспомним следующее свойство коммутаторов:

$$[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]. \quad (6.24)$$

Далее запишем коммутатор  $[H, a a^+]$ :

$$[H, a a^+] = [g a^+ \sigma_- + g^* a \sigma_+, a^+ a] = -g a^+ \sigma_- + g^* \sigma_+ a . \quad (6.25)$$

Затем вычислим и второй коммутатор:

$$[H, \sigma_3] = [g a^+ \sigma_- + g^* a \sigma_+, \sigma_3] . \quad (6.26)$$

Для того чтобы вычислить коммутатор в выражении (6.26), необходимо дополнительно вычислить следующий коммутатор:

$$[\sigma_{\pm}, \sigma_3] = \frac{1}{2} [\sigma_1 \pm i \sigma_2, \sigma_3] = \{[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k\} = -i\sigma_2 \mp \sigma_1 = \mp 2\sigma_{\pm} . \quad (6.27)$$

С учетом (6.27) коммутатор из выражения (6.26) окончательно может быть записан таким образом

$$[H, \sigma_3] = 2g a^+ \sigma_- - 2g^* a \sigma_+ . \quad (6.28)$$

Вернемся к выражению (6.23) и подставим в него найденные коммутаторы. Тогда

$$[H, N] = g a^+ \sigma_- (2\xi - 1) - g^* a \sigma^+ (2\xi - 1) = 0 . \quad (6.29)$$

Из выражения (6.29) становится очевидным, что для равенства коммутатора  $[H, N]$  нулю необходимо выбрать  $\xi$ , равным  $\frac{1}{2}$ . При таком выборе величина  $N$ , как уже упоминалось ранее, является динамическим интегралом движения, и тогда  $H$  и  $N$  в силу того, что данные величины коммутируют, должны иметь один и тот же СВ. Тогда потребуем выполнение следующего условия:

$$N|\psi\rangle = \nu|\psi\rangle . \quad (6.30)$$

Так как ранее предполагалось, что величина  $N$  по построению определяется выражением (6.22), будут выполняться следующие соотношения:

$$a^+ a \psi_1 + \frac{1}{2} \psi_1 = \nu \psi_1 , \quad (6.31)$$

$$a^+ a \psi_2 - \frac{1}{2} \psi_2 = \nu \psi_2 . \quad (6.32)$$

Из выражений (6.31) и (6.32) следует, что  $\psi_1$  и  $\psi_2$  должны быть состояниями с определенными числами заполнения фотонов, отличающимися на единицу. Предположим, что

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle &= \alpha |n\rangle , \\ |\psi_2\rangle &= \beta |n+1\rangle . \end{aligned} \quad (6.33)$$

Тогда при подстановке выражений из (6.33) в (6.31) и (6.32) получим, что

$$\nu = n + \frac{1}{2}. \quad (6.34)$$

Структура  $\psi$  в таком случае с точностью до коэффициентов может быть представлена в виде

$$\psi = \begin{pmatrix} \alpha |n\rangle \\ \beta |n+1\rangle \end{pmatrix}. \quad (6.35)$$

Полученный ответ вполне очевиден, поскольку нижнее состояние получается тогда, когда излучается ещё один фотон. Когда система находится в нижнем состоянии, в фотонной подсистеме обязательно должен находиться дополнительный фотон.

Далее будем решать уравнение

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle. \quad (6.36)$$

Распишем гамильтониан системы в матричном виде:

$$H = \begin{pmatrix} \hbar\omega (a^+ a + \frac{1}{2}) + \frac{\hbar\omega}{2} & g^* a \\ g a^+ & \hbar\omega (a^+ a + \frac{1}{2}) - \frac{\hbar\omega}{2} \end{pmatrix}. \quad (6.37)$$

Умножим матрицу (6.37) на вектор  $|\psi\rangle$  и получим:

$$H|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \alpha (\hbar\omega (n + \frac{1}{2}) + \frac{\hbar\omega}{2}) |n\rangle + g^* \sqrt{n+1} \beta |n\rangle \\ g \sqrt{n+1} |n+1\rangle + \beta (\hbar\omega (n + \frac{1}{2} + 1) - \frac{\hbar\omega}{2}) |n+1\rangle \end{pmatrix}. \quad (6.38)$$

Приравняем выражение из (6.38) к правой части (6.36) и запишем её в виде системы уравнений вида

$$\begin{cases} \hbar\omega (n+1) \alpha + g^* \sqrt{n+1} \beta = E\alpha \\ g \sqrt{n+1} \alpha + \beta \hbar\omega (n+1) = E\beta \end{cases}. \quad (6.39)$$

Решение системы (6.39) найдем из условия равенства нулю детерминанта

$$\begin{vmatrix} \hbar\omega (n+1) - E & g^* \sqrt{n+1} \\ g \sqrt{n+1} & \hbar\omega (n+1) - E \end{vmatrix} = 0. \quad (6.40)$$

Решение системы приводит к двум ответам для энергии  $E_n^{(\pm)}$ , которые могут быть записаны в следующем виде:

$$E_n^{(\pm)} = \hbar\omega (n+1) \pm |g| \sqrt{n+1}. \quad (6.41)$$



С целью упрощения теоретических выкладок будем считать величину  $g$  вещественным числом. Зафиксируем постоянные  $\alpha$  и  $\beta$ . Поскольку  $g$  - вещественное, при подстановке ответов (6.41) в систему (6.39) легко может быть получено, что

$$E_n^{(+)} \longrightarrow \alpha = \beta = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad (6.42)$$

$$E_n^{(-)} \longrightarrow \alpha = -\beta = \frac{1}{\sqrt{2}}. \quad (6.43)$$

Следовательно, СВ будут окончательно записаны в следующем виде:

$$\psi_n^{(\pm)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} |n\rangle \\ \pm |n+1\rangle \end{pmatrix}. \quad (6.44)$$

При этом интеграл движения  $N$  равен  $n + \frac{1}{2}$  в случае обоих состояний. Эти состояния становятся дифференцируемыми за счет на СВ оператора энергии.

Далее обратимся к вполне логичному вопросу, который может возникнуть при рассмотрении данной задачи, а именно: вопросу среднего количества фотонов в наших стационарных состояниях и средней энергии атомной системы.

$$\bar{n} = \langle \psi_n^{(\pm)} | a^+ a | \psi_n^{(\pm)} \rangle = n + \frac{1}{2}. \quad (6.45)$$

Как следует из выражения (6.45), среднее число фотонов получается нецелым. Очевидно, что любое измерение обязательно даст целое число фотонов. У среднего значения величины  $n$  обязательно будет дисперсия, которая может быть записана в следующем виде:

$$D_\psi(a^+ a) = \langle \psi_n^{(\pm)} | (a^+ a)^2 | \psi_n^{(\pm)} \rangle = \frac{1}{2} [n^2 + (n+1)^2] - \left(n + \frac{1}{2}\right)^2 = \frac{1}{4}. \quad (6.46)$$

Таким образом, величина фотонов в системе будет равна

$$n = n + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \longrightarrow \left\{ \begin{array}{l} |n\rangle \\ |n+1\rangle \end{array} \right\}. \quad (6.47)$$

При измерениях числа фотонов в системе всегда получается величина  $n$ , равная либо  $n$ , либо  $n+1$ , а среднее число будет равняться  $n + \frac{1}{2}$ .

**Упражнение 6.1.** Лектором предлагается самостоятельно вычислить среднюю энергию атомной системы.

## Задача эволюции

Пусть при  $t = 0$  система находилась в состоянии

$$|\psi(0)\rangle = \begin{pmatrix} |0\rangle \\ |n+1\rangle \end{pmatrix}. \quad (6.48)$$

Обратимся к вопросу определения вероятности обнаружить систему в состоянии  $|\psi(T)\rangle$  в момент времени  $t = T$  ( $T > 0$ ):

$$|\psi(T)\rangle = \begin{pmatrix} |m\rangle \\ |0\rangle \end{pmatrix}. \quad (6.49)$$

**Замечание 6.1.** *Важно отметить, что термин "состояние" используется в качестве некоего сленга, потому что на самом деле говорится не о состоянии, а о наборе измеренных величин, которые могут быть определены по данному состоянию. Именно набор СЗ определяет данное состояние.*

В рассматриваемом случае состояние определяется тем, что система находится в нижнем атомном уровне и имеет накопленный  $n + 1$  фотон. Измерим число фотонов и состояние атомной системы с помощью либо оператора  $H_{ат}$ , либо -  $a^+a$ .

Состояние (6.49) по отношению к (6.48) представляет собой полностью инвертированную систему, а само же оно характеризует полную инверсную населенность. Поскольку решается динамическая задача, будем использовать оператор эволюции следующего вида:

$$U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}, \quad (6.50)$$

тогда для  $\psi(T)$  сразу же можно записать общий ответ

$$\psi(T) = e^{-\frac{i}{\hbar}HT}|\psi(0)\rangle. \quad (6.51)$$

В силу того, что в задаче известен спектр, разложим вектор  $\psi(0)$  по СВ гамильтониана:

$$\psi(T) = e^{-\frac{i}{\hbar}HT} \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_n^{(+)} - \psi_n^{(-)}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ e^{-\frac{i}{\hbar}E_n^{(+)}T} \psi_n^{(+)} - e^{-\frac{i}{\hbar}E_n^{(-)}T} \psi_n^{(-)} \right]. \quad (6.52)$$

Далее представим (6.52) в виде столбца, тогда

$$|\psi(T)\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \left( e^{-\frac{i}{\hbar}E_n^{(+)}T} - e^{-\frac{i}{\hbar}E_n^{(-)}T} \right) |n\rangle \\ \left( e^{-\frac{i}{\hbar}E_n^{(+)}T} + e^{-\frac{i}{\hbar}E_n^{(-)}T} \right) |n+1\rangle \end{pmatrix}. \quad (6.53)$$

Для того чтобы найти вероятность обнаружить состояние  $|\psi(T)\rangle$  в качестве конечного, необходимо вычислить квадрат модуля матричного элемента между столбцом (6.53) и вектором (6.49). Тогда вероятность будет равна следующему выражению:

$$P_m(T) = \delta_{n,m} \frac{1}{4} \left| e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^{(+)} T} - e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^{(-)} T} \right|^2. \quad (6.54)$$

Покажем, что выражение под модулем может быть преобразовано к  $\sin$ . И в  $E_n^{(+)}$  и в  $E_n^{(-)}$  есть общая компонента  $\hbar\omega(n+1)$ , которая может быть вынесена из-под знака модуля в виде общего фазового множителя, в результате чего ее можно будет приравнять к единице. Таким образом, под знаком модуля останется выражение следующего вида:

$$e^{-\frac{i}{\hbar} g \sqrt{n+1} T} - e^{-\frac{i}{\hbar} g \sqrt{n+1} T} = -2i \sin\left(\frac{g \sqrt{n+1}}{\hbar} T\right), \quad (6.55)$$

тогда окончательное выражение для вероятности может быть записано так:

$$P_m(T) = \delta_{n,m} \sin^2\left(\frac{g \sqrt{n+1}}{\hbar} T\right). \quad (6.56)$$

Как и должно быть в системе, имеющей только дискретный спектр, ответ осциллирует. Это является обязательным условием эволюции системы дискретных уровней.

**Упражнение 6.2.** Лектором предлагается самостоятельно найти период осциллирующий.

Инверсная населенность в системе может быть достигнута при условии, что число фотонов в верхнем состоянии будет равно  $n$  - числу фотонов в начальном состоянии системы.

Перейдем к нахождению средней энергии системы. Поскольку система является консервативной, энергия будет сохраняться, то есть оператор  $\hat{H} = \widehat{\text{const}}$ . Гамильтониан  $H$  является интегралом движения, поэтому он не зависит от времени. Тогда средняя энергия системы может быть найдена следующим образом:

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = \frac{1}{2} (E_n^{(+)} + E_n^{(-)}) = \hbar\omega(n+1). \quad (6.57)$$

## Семинар 7. Упражнения по использованию матриц плотности

### Температурная матрица плотности

Для температурной матрицы плотности  $\rho$  может быть записано в следующем образом:

$$\rho = \frac{e^{-\beta H}}{\text{Tr}(e^{-\beta H})}, \quad (7.1)$$

где величина  $\beta$  имеет вид

$$\beta = \frac{1}{kT}. \quad (7.2)$$

Рассмотрим случай осциллятора в термостате:

$$H = \hbar\omega \left( a^+ a + \frac{1}{2} \right), \quad (7.3)$$

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right). \quad (7.4)$$

Так,  $\rho$  и все следы, представленные в выражении для матрицы плотности, вычисляются следующим образом. Введем величину  $Z$ , которая называется статистической суммой и может быть записана в виде

$$Z = \text{Tr}(e^{-\beta H}). \quad (7.5)$$

**Утверждение 7.1.** Если известна статистическая сумма исследуемой системы, то про систему известно все, потому что с её помощью можно найти среднее любой другой величины.

Для рассматриваемого нами случая статистическая сумма  $Z$  может быть вычислена, так как  $Z$  может быть преобразована следующим образом:

$$Z = \sum_n e^{-\beta E_n} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega(n+\frac{1}{2})} = e^{-\frac{\beta\hbar\omega}{2}} \frac{1}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}}. \quad (7.6)$$

Среднее всех других величин могут быть вычислены в качестве производных от логарифма  $Z$ . В частности, если нас интересует энергия осциллятора, то она равна

$$\bar{E} = \text{Tr}(H\rho) = \sum_n E_n \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} = -\frac{\partial}{\partial\beta} \ln Z. \quad (7.7)$$

В результате подставки выражения (7.6) в (7.7) тогда получим следующее:

$$\begin{aligned}\bar{E} &= -\frac{\partial}{\partial\beta} \ln \left( \frac{e^{-\frac{\beta\hbar\omega}{2}}}{1-e^{-\beta\hbar\omega}} \right) = -\frac{\partial}{\partial\beta} \left( -\frac{\beta\hbar\omega}{2} \right) - \frac{\partial}{\partial\beta} \ln \left( \frac{1}{1-e^{-\beta\hbar\omega}} \right) = \\ &= -\frac{\partial}{\partial\beta} \left( -\frac{\beta\hbar\omega}{2} \right) - \frac{\partial}{\partial\beta} \ln \left( \frac{1}{1-e^{-\beta\hbar\omega}} \right) = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\partial}{\partial\beta} \ln (1 - e^{-\beta\hbar\omega}) = \\ &= \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega e^{-\beta\hbar\omega}}{1-e^{-\beta\hbar\omega}} = \boxed{\frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} = \bar{E}}.\end{aligned}\quad (7.8)$$

### Формула Планка

Для средней энергии с помощью полученного ответа в выражении (7.8) можно вывести формулу Планка. Для этого необходимо просуммировать  $\bar{E}$  по всем частотам осциллятора, которые имеются в системе, и возможным поляризациям. В качестве начала отсчета возьмем энергию  $\frac{\hbar\omega}{2}$ , поскольку данная энергия будет и в начале акта излучения, а также после него. Таким образом, интенсивность излучения может быть получена следующим образом:

$$I = \sum_{\omega,\lambda} \frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} dN_{\omega}, \quad (7.9)$$

где  $dN_{\omega}$  - число состояний, приходящихся на соответствующий дифференциал частоты:

$$dN_{\omega} = V \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} = V \frac{k^2 dk d\Omega_k}{(2\pi)^3} = V \frac{\omega^2 d\omega d\Omega_k}{(2\pi c)^3}. \quad (7.10)$$

Подставим формулу для  $dN_{\omega}$  из (7.10) в выражение для  $I$  и поделим на объем. Тогда

$$\frac{I}{V} = 2 \frac{4\pi\omega^2 d\omega}{(2\pi c)^3} \frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} = \frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} d\omega. \quad (7.11)$$

Выражение (7.11) представляет собой формулу Планка.

### Спиновые матрицы плотности

Далее перейдем к спиновым матрицам плотности. Рассмотрим частицы со спином  $s = \frac{1}{2}$ . Для таких частиц оператор спина будет равен

$$\vec{s} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}. \quad (7.12)$$

В дальнейшем будем опускать  $\hbar$  в выражениях для спина, считая, что он измеряется в единицах  $\hbar$ , т. е. является безразмерным параметром.

Самое известное и, пожалуй, наиболее нужное свойство спина заключается в том, что оператор проекции спина на любое направление  $\vec{n}$ , представляющий собой единичный вектор ( $\vec{n}^2 = 1$ ), будет действовать на спин следующим образом:

$$s_n = \vec{n} \vec{s}; \quad s_n^2 = \frac{1}{4}. \quad (7.13)$$

Для того чтобы вывести это свойство, распишем  $s_n^2$ :

$$s_n^2 = n_i n_j s_i s_j. \quad (7.14)$$

Поменяв индексы в выражении (7.14), получим

$$s_n^2 = \frac{1}{2} n_i n_j (s_i s_j + s_j s_i). \quad (7.15)$$

Спины  $s_i, s_j$  могут быть выражены через сигма-матрицы, для которых выполняется следующее свойство:

$$\sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i = 2 \delta_{ij}. \quad (7.16)$$

Выражение (7.16) в свою очередь может быть проверено через основное соотношение для  $\sigma$  матриц:

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} + i \epsilon_{ijk} \sigma_k. \quad (7.17)$$

Тогда, по свойствам перестановки индексов для символа Леви-Чивиты, из выражения (7.17) легко может быть получено равенство (7.16). Так, очевидно выполнение свойства

$$s_n^2 = \frac{1}{4}. \quad (7.18)$$

Похожее свойство может быть получено и для спина  $s = 1$ :

$$s_n^3 = s_n. \quad (7.19)$$

Решение по собственным значениям для спина  $s = 1$  равно 0 и  $\pm 1$ . Выражение (7.19) представляет собой основную теорему матричной алгебры, или теорему Кэли-Гамильтона, которая гласит, что:

**Теорема 7.1.** *Любая квадратная матрица удовлетворяет своему характеристическому уравнению.*

**Доказательство.**

Пусть  $A$  - матрица размерности  $n \times n$ . Характеристическое уравнение выглядит следующим образом:

$$\det(A - \lambda \cdot 1) = 0. \quad (7.20)$$

Выражение (7.20) представляет собой уравнение  $n$ -ой степени относительно  $\lambda$ . Так, запишем уравнение для  $\lambda$ :

$$a_n \lambda^n + \dots + a_0 = 0, \quad (7.21)$$

где  $a_0, \dots, a_n$  - коэффициенты уравнения, определяемые матрицей  $A$ .

Из теоремы Кэли-Гамильтона следует, что если вместо  $\lambda$  подставить в (7.21) матрицу  $A$ , то уравнение (7.21) будет тождественно выполняться. Сила данного утверждения заключается в том, что уравнение (7.21) является уравнением  $n$ -ой степени с  $n$  коэффициентами, включая  $a_0$ . Матрица же имеет  $n^2$  матричных элементов, и, если матрица равна нулю, все матричные элементы будут равняться нулю. Следовательно,  $n^2$  матричных элементов матрицы  $A$  связаны одним уравнением с  $n$  коэффициентами.

Введем взаимную к  $A$  матрицу, которая определяется следующим образом:

$$\bar{A} = \det A \cdot A^{-1}. \quad (7.22)$$

Основное свойство взаимной матрицы заключается в том, что при её умножении в любом порядке на исходную матрицу всегда будет получаться следующее:

$$\bar{A}A = A\bar{A} = \det A. \quad (7.23)$$

Также введем матрицу  $(\lambda \cdot 1 - A)$  и взаимную ей матрицу  $\overline{(\lambda \cdot 1 - A)}$ . В силу равенства (7.22) будет выполнено

$$\overline{(\lambda \cdot 1 - A)}(\lambda \cdot 1 - A) = \det(\lambda \cdot 1 - A). \quad (7.24)$$

Взаимная матрица  $\overline{(\lambda \cdot 1 - A)}$  может быть представлена в виде полинома по степеням  $\lambda$ . Так как взаимная матрица составляется из миноров, а миноры, в свою очередь, представляют собой определители матриц размерности  $(n - 1) \times (n - 1)$ , то разложение для матрицы может быть записано как

$$\overline{(\lambda \cdot 1 - A)} = B_{n-1} \lambda^{n-1} + \dots + B_0 \lambda^0. \quad (7.25)$$

Стоит отметить, что параметр  $\lambda$  может быть комплексным числом, если вычисления производятся над полем комплексных чисел или любым другим, если матрица  $A$

строится более сложным образом. В рассматриваемом случае будем ограничиваться комплекснозначным  $\lambda$ .

Подставим разложение (7.25) в (7.24) и учтем запись для определителя в форме (7.21):

$$(B_{n-1}\lambda^{n-1} + \dots + B_0\lambda^0) (\lambda - A) = (-1)^n (a_n\lambda^n + \dots + a_0) . \quad (7.26)$$

Из (7.26) следует, что если собирать произведение в виде полинома по  $\lambda$ , то, приравнявая коэффициенты при  $n$ -ой степени полинома, получим следующее равенство:

$$B_{n-1} = (-1)^n a_n . \quad (7.27)$$

Для  $n - 1$  степени:

$$B_{n-2} - B_{n-1} \cdot A = (-1)^n a_{n-1} . \quad (7.28)$$

Далее проделаем аналогичные действия для всех остальных степеней  $\lambda$ . Таким образом, все матрицы оказываются связанными с коэффициентами характеристического уравнения. Можно заметить, что выражение (7.26) представляет собой матричное произведение  $B_i$  на матрицу  $A$ . При этом коэффициенты  $\lambda$  различных степеней легко могут быть переставлены с матрицами, так как являются числами. В силу того, что коэффициенты  $\lambda$  являются произвольными, их можно заменить на  $A$ . Таким образом, левая часть выражения (7.26) обратится в ноль, а правая будет являться характеристическим уравнением с коэффициентами  $a_i$ , однако со степенями матрицы  $A$ . ■

Из доказанной теоремы следует, что если  $s_n^2 = \frac{1}{4}$ , то СЗ проекции спина  $s_n = \pm \frac{1}{2}$ , и, наоборот, если СЗ проекции спина  $s_n = \pm \frac{1}{2}$ , то они удовлетворяют соответствующему уравнению с правой частью  $\frac{1}{4}$ . В этом случае оператор должен соответствовать данному уравнению. Для моментов любой другой степени теорема также будет выполняться.

Далее в явном виде найдем соответствующие оператору спина СВ:

$$S_n \left| \pm \frac{1}{2} \right\rangle = \pm \frac{1}{2} \left| \pm \frac{1}{2} \right\rangle . \quad (7.29)$$

Пусть  $\vec{n}$  - единичный вектор, задающийся углами  $\theta$  и  $\varphi$  (рис. 7.1). Тогда вектор  $\vec{n}$  может быть записан таким образом:

$$\vec{n} = \{ \sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta \} . \quad (7.30)$$



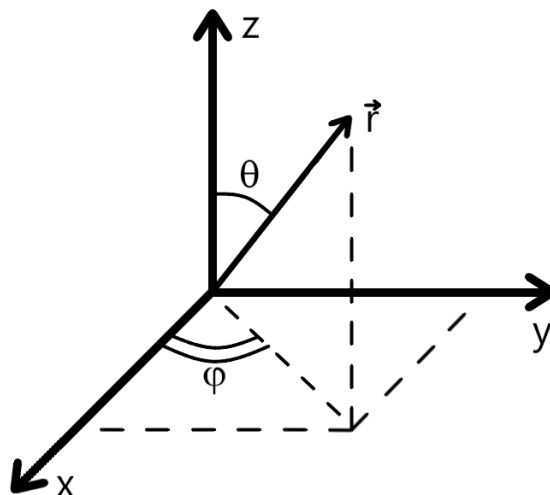


Рис. 7.1. Вектор в сферической системе координат

Запишем СВ оператора спина в следующей форме (форме спинора):

$$\left| +\frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}. \quad (7.31)$$

От матриц  $s_n$  перейдем к матрицам  $\sigma_n$  и выразим компоненту  $\sigma_n$  через матрицу Паули. Тогда

$$\sigma_n = \vec{\sigma} \vec{n} = \begin{pmatrix} \cos \theta & e^{-i\varphi} \sin \theta \\ e^{i\varphi} \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix}. \quad (7.32)$$

Подставим в (7.29) выражение для  $s_n$  через  $\sigma_n$  и получим

$$\sigma_n \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}. \quad (7.33)$$

Далее найдем связь между  $a$  и  $b$ , перемножив первую строку матрицы  $\sigma_n$  на столбец СВ:

$$\cos \theta \cdot a + e^{-i\varphi} \sin \theta \cdot b = a. \quad (7.34)$$

Выразим из уравнения (7.34) переменную  $b$ :

$$b = a \frac{1 - \cos \theta}{\sin \theta} e^{i\varphi} = e^{i\varphi} \operatorname{tg} \left( \frac{\theta}{2} \right) \cdot a. \quad (7.35)$$

Нормируем СВ  $\left| +\frac{1}{2} \right\rangle$ :

$$\left\langle +\frac{1}{2} \left| +\frac{1}{2} \right\rangle = 1 = |a|^2 + |b|^2 = |a|^2 \left( 1 + \operatorname{tg}^2 \frac{\theta}{2} \right) = \frac{|a|^2}{\cos^2 \frac{\theta}{2}}. \quad (7.36)$$

Отсюда следует, что с точностью до фазы  $a$  будет равняться следующему:

$$a = \cos \frac{\theta}{2}. \quad (7.37)$$

Следовательно, нормированный на единицу спинор будет равен

$$\left| +\frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}. \quad (7.38)$$

Для спина  $-\frac{1}{2}$  можно проделать аналогичные действия. В результате, получим СВ следующего вида:

$$\left| -\frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} \sin \frac{\theta}{2} \\ -e^{i\varphi} \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}. \quad (7.39)$$

### Эксперимент Штерна-Герлаха

Рассмотрим эксперимент Штерна-Герлаха, который является надежным доказательством того, что любая физическая величина при измерении выдает только одно число из чисел своего спектра.

Для начала будем описывать случай чистого пучка, в котором все спины частиц изначально направлены в одну сторону (компонента спина по оси  $z$  -  $+\frac{1}{2}$ ), что может быть достигнуто в результате воздействия магнитного поля на пучок (рис. 7.2).

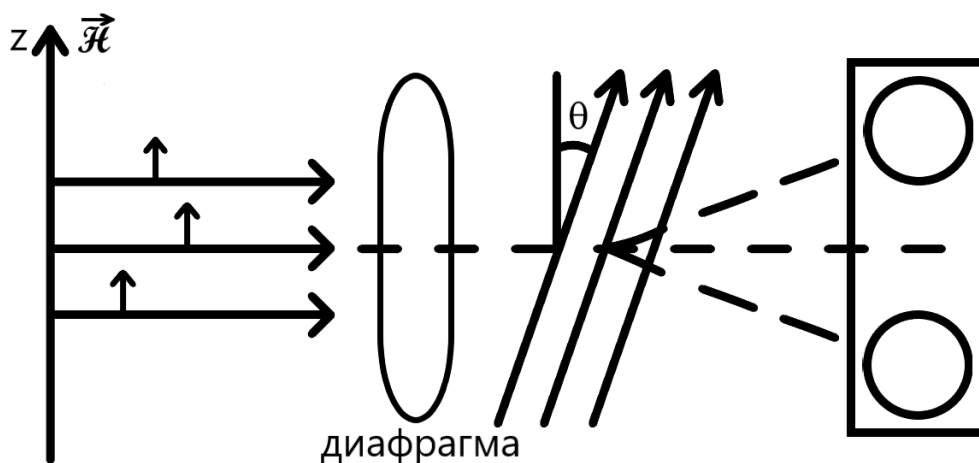


Рис. 7.2. Схема эксперимента Штерна-Герлаха

Далее пучок движется в область с диафрагмой, а после нее попадает в другое магнитное поле, направленное под углом  $\theta$  к оси  $z$ . Угол  $\varphi$  не будет влиять на конечный ответ в силу того, что систему координат всегда можно повернуть так, чтобы

угол  $\varphi$  был равен нулю. Условием на отклоняющее поле будет наличие градиента напряженности магнитного поля. Так, по законам механики и электродинамики, за счет градиента на магнитные моменты, привязанные к спинам, будет действовать отклоняющая сила. Эта сила, исходя из классических соображений, оказывается пропорциональной проекции магнитного момента на отклоняющее поле. Таким образом, пучок после прохождения поля будет отклоняться лишь в одно направление от исходного прямолинейного движения.

Эксперимент с квантовыми частицами показал, что после прохождения через второе магнитное поле пучок разделится на две части, которые в конечном итоге дадут на экране две симметричные относительно начального направления пучка области. Это происходит в силу того, что, если в классическом случае проекция и сила для всех спинов и магнитных моментов одна и та же, то для случая квантовых частиц работают законы квантовой механики. Поскольку для силы важна именно проекция момента (момент связан со спином через гиромагнитное соотношение):

$$\vec{\mu} = \mu_0 \vec{S}, \quad (7.40)$$

то в конечном итоге работает именно проекция спина на направление отклоняющего поля. В случае спина  $\frac{1}{2}$ , СЗ проекции спина  $\pm \frac{1}{2}$ , поэтому возникает сила, которая отклоняет частицу либо вверх, либо вниз. При этом области, в которые отклоняется пучок различаются только по интенсивности. Интенсивность при этом определяется вероятностью обнаружить проекцию на направляющее поле либо  $+\frac{1}{2}$ , либо  $-\frac{1}{2}$ .

Далее найдем относительные интенсивности пятен, которые пропорциональны исходной интенсивности пучка, а также вероятности обнаружить ту или иную проекцию спина:

$$P_{\pm\frac{1}{2}} = \left| \left\langle \pm \frac{1}{2} \middle| \uparrow \right\rangle \right|^2 \begin{cases} \cos^2 \frac{\theta}{2}, & \text{для } |+\frac{1}{2}\rangle \\ \sin^2 \frac{\theta}{2}, & \text{для } |-\frac{1}{2}\rangle \end{cases}, \quad (7.41)$$

где

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (7.42)$$

Полученное выражение для вероятности необходимо умножить на интенсивность начального пучка для того, чтобы получить интенсивность отклоненных пучков.

Полученные ранее выражения были найдены для идеального пучка, поэтому далее будем рассматривать реальный пучок, который всегда содержит примеси в виде

состояний с другой проекцией. Состояние такого пучка описывается спиновой матрицей плотности

$$\rho = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} + \alpha & \beta - i\gamma \\ \beta + i\gamma & \frac{1}{2} - \alpha \end{pmatrix}, \quad (7.43)$$

где  $\alpha$ ,  $\beta$  и  $\gamma$  - три вещественных параметра, обеспечивающие эрмитовость матрицы  $\rho$ .

Для человека, имеющего дело с таким экспериментом, первой задачей является проверить, что экспериментатор, который готовил пучок, правильно задал матрицу плотности. Для этого необходимо проверить, эрмитова ли матрица, равен ли её след единице и все ли СВ матрицы лежат в диапазоне от нуля до единицы. Для проверки последнего условия решим задачу на определитель

$$\det(\rho - \lambda \cdot 1) = 0. \quad (7.44)$$

Подставим выражение (7.43) для матрицы  $\rho$  в (7.44):

$$\det \begin{pmatrix} \frac{1}{2} + \alpha - \lambda & \beta - i\gamma \\ \beta + i\gamma & \frac{1}{2} - \alpha - \lambda \end{pmatrix} = \left(\frac{1}{2} - \lambda\right)^2 - \alpha^2 - \beta^2 - \gamma^2. \quad (7.45)$$

Выразим из (7.45)  $\lambda$ :

$$\omega = \lambda = \frac{1}{2} \pm \sqrt{\alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2}. \quad (7.46)$$

Следовательно, для того чтобы СВ матрицы лежали в диапазоне от нуля до единицы, необходимо, чтобы выполнялось условие

$$\alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2 \leq \frac{1}{4}. \quad (7.47)$$

Далее ответим на вопрос интенсивностей пятен, если на входе пучок является «смешанным». Для этого решим задачу следующим способом: любая матрица плотности всегда может быть представлена в виде разложения вида

$$\rho = \sum_n \omega_n |n\rangle\langle n|. \quad (7.48)$$

Каждому  $\omega$  из выражения (7.48) соответствует свой СВ, поэтому необходимо решить задачу на СВ матрицы  $\rho$ , в результате чего мы немедленно узнаем из скольких чистых состояний собирается «смешанное».

Второй способ решения является более простым и быстрым и сводится к следующей процедуре. Найдем вероятность обнаружить чистое состояние, соответствующее

проекциям  $\pm\frac{1}{2}$  на направление направляющего поля. Стоит отметить, что значения проекции не зависят от того какой пучок: чистый или смешанный.

Вычислим с какой вероятностью мы найдем два состояния проекции  $\pm\frac{1}{2}$  на ось  $n$  (на ось отклоняющего поля) в исходном смешанном состоянии пучка:

$$P_{\pm\frac{1}{2}} = \left\langle \pm\frac{1}{2} \left| \rho \right| \pm\frac{1}{2} \right\rangle . \quad (7.49)$$

**Упражнение 7.1.** Лектором предлагается доделать приведенную выше задачу самостоятельно.

Далее рассмотрим систему, в которую запускается пучок частиц со спином  $s = 1$ . Пусть начальный пучок является поляризованным и идеальным вдоль оси  $z$ . В таком случае, поскольку проекций спина на направление отклоняющего поля три, будет формироваться три области на экране: две симметричных относительно центра экрана области и одна область в центре.

Для спина  $s = 1$  необходимо использовать матрицы  $3 \times 3$  для того, чтобы обеспечить три СЗ:

$$s_x = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix} , \quad (7.50)$$

$$s_y = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{i}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{i}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{i}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{i}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix} , \quad (7.51)$$

$$s_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} . \quad (7.52)$$

Уравнение на  $s_n$  для спина 1 является кубическим:

$$s_n^3 = s_n . \quad (7.53)$$

Для такого уравнения решениями являются 3 значения:  $0, \pm 1$ . Далее будем искать СВ для рассматриваемого случая. Так как нам уже известны СЗ, то не нужно решать полную задачу, а можно по одной известной компоненте, заданной в виде

коэффициентов, найти две других.

$$\begin{aligned}
 s_n = \sin \theta \cos \varphi \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix} + \sin \theta \sin \varphi \begin{pmatrix} 0 & -\frac{i}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{i}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{i}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{i}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix} + \\
 + \cos \theta \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta & \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta e^{-i\varphi} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta e^{i\varphi} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta e^{-i\varphi} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta e^{i\varphi} & -\cos \theta \end{pmatrix}. \quad (7.54)
 \end{aligned}$$

**Упражнение 7.2.** Лектором предлагается самостоятельно дорешать задачу на СВ матрицы  $s_n$ . Для этого необходимо использовать столбец вида

$$\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} \quad (7.55)$$

и задать  $a$  как в предыдущем случае и исходя из СВ, фиксировать  $b$  и  $c$ . Далее, используя нормировку на единицу СВ, нужно искать коэффициент  $a$ .

Таким образом удастся найти три столбца, соответствующие различным СВ оператора проекции спина. Для нахождения относительной интенсивности аналогично сделанным ранее действиям необходимо искать квадрат модуля скалярного произведения СВ с исходным состоянием пучка. В рассматриваемом случае исходное состояние пучка задается столбцом:

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (7.56)$$

## Семинар 8. Конфайнмент атомных систем.

### Одномерные задачи с потенциальными ямами

#### Конфайнмент атомных систем

Конфайнмент атомных систем уже давно воспринимается как реальность, потому что уже давно известно о существовании различных металлических, биологических, полимерных и т.д. структур с порами. Например, поры бывают в решетке Pd, где междоузлия кристаллической решетки являются идеальными местами, куда может «помещаться» водород. Классическим примером может служить растворение водорода в палладии (результат 1850 года). В результате данного эксперимента удалось показать, что один объем палладия растворяет 1800 объемов атомарного водорода. Иными словами, аффинность водорода по отношению к палладию настолько высока, что атомы водорода занимают каждое междоузлие палладия, в результате чего решетка Pd сильно увеличивается и растягивается, становясь очень хрупкой. Как результат, решетка не может обеспечить достаточную прочность. Следовательно, в борьбе за минимум энергии побеждает именно водород, так как ему выгодно находиться в решетке палладия, оказывающейся сильно непригодной для использования в качестве «контейнера», в связи с чем возникает проблема транспортировки водорода. На самом деле, таких примеров достаточно много.

К сожалению, напрямую описать атомную систему или частицу, заключенную в некотором конечном объеме, не получится, так как пока для этого нам не достаточно технической составляющей, однако наиболее удобным способом описание является вариационный принцип.

Рассмотрим простейший случай, а именно: просто частицу. Вместо частицы можно провести рассмотрение и атома водорода, где в роли частицы будет выступать электрон, ядро же в силу того, что оно очень тяжелое, будет адиабатически медленно двигаться по объему полости. Так, зададим энергетический функционал

$$E[\psi] = \int_{\Omega} \left[ \frac{\hbar^2}{2m} |\vec{\nabla}\psi|^2 + V(\vec{r}) |\psi|^2 \right] d\vec{r} + \int_{\Sigma} \lambda(\vec{r}) |\psi|^2 d\vec{r}, \quad (8.1)$$

где  $\Omega$  - конечный объем, а  $\Sigma$  - поверхность.

Частица находится внутри данного объема и тем или иным способом удерживается внутри данного объема. Заметим, что рассматривается трехмерный случай.

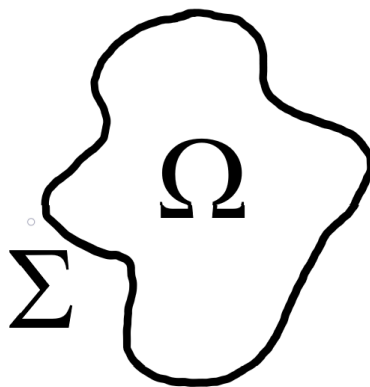


Рис. 8.1. Объем интегрирования

Важно отметить, что обязательно учитывается потенциал. Так, если рассматривается атом, то удерживается электрон, заполняющий весь объем, а тяжелое ядро либо находится в минимуме энергии, либо адиабатически медленно движется, и потенциалом  $V$  будет являться потенциал, который создает ядро. Кроме того, мы учитываем взаимодействие между частицей и окружающей средой. На самом деле, данная задача является тяжелой и сложной, так как если ведется рассмотрение электрона, то окружающая поверхность атомных размеров подразумевает собой много электронов, причем в реальности полости могут быть и больше (наноразмеры). Таким образом, необходимо учитывать не только их прямое взаимодействие, но еще и обменное. Конечно, мы будем исследовать задачу в самом простом случае. Для этого введем так называемый контактный член, соответствующий взаимодействию электрона и нашей частицы прямо на поверхности полости с окружением.

Для того чтобы правильно вывести уравнение Шредингера для такой системы в конфайнменте, необходимо воспользоваться вариационным принципом. Так, будет варьировать по бра вектору. В силу того, что интегрирование ведется по конечному объему, необходимо честно учитывать поверхностный член. Для этого можно воспользоваться либо формулой Грина, либо интегрировать по частям:

$$\int \vec{\nabla}\psi^* \vec{\nabla}\psi = \psi^* \vec{n} \vec{\nabla}\psi \Big|_{\Sigma} - \int_{\Omega} \psi^* \Delta\psi . \quad (8.2)$$

В силу того, что объем конечный, мы не можем опустить внеинтегральный член, потому что у нас нет никаких оснований, чтобы считать, что волновая функция



зачисляется. Таким образом, вариация будет выглядеть следующим образом:

$$\frac{\delta E}{\delta \psi^*} = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right) \psi \Big|_{\vec{r} \in \Omega} + \left( \vec{n} \vec{\nabla} + \lambda(\vec{r}) \right) \psi \Big|_{\vec{r} \in \Sigma}. \quad (8.3)$$

Фактически, вариация дает нам два разных по статусу члена: внутри объема и на границе. Данные вариации являются независимыми, они имеют разные степени свободы. Сама же вариация функционала может быть записана как

$$\delta E = \underbrace{\int_{\Omega} \delta \psi^* \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right) \psi \, d\vec{r}}_{\text{внутри объема}} + \underbrace{\int_{\Sigma} \delta \psi^* \left( \vec{n} \vec{\nabla} + \lambda \right) \psi}_{\text{на границе}}. \quad (8.4)$$

Таким образом, вариация для объема обеспечит уравнение Шредингера для нашей частицы внутри объема, то есть когда  $\vec{r} \in \Omega$ , равна

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right) \psi(\vec{r}) = E \psi. \quad (8.5)$$

Вариация на поверхности даст следующее:

$$\left( \vec{n} \vec{\nabla} + \lambda \right) \psi \Big|_{\vec{r} \in \Sigma} = 0. \quad (8.6)$$

Так, мы фактически осуществили постановку краевой задачи: имеем уравнение внутри объема, а также граничное условие на поверхности. Такое граничное условие является условием третьего рода, или условием Робена. Если устремить  $\lambda \rightarrow \infty$ , то есть обеспечить бесконечно большое контактное взаимодействие, фактически поставив непроницаемые стенки, то останется лишь условие Дирихле:

$$\psi \Big|_{\vec{r} \in \Sigma} = 0. \quad (8.7)$$

Если же, наоборот, выключить контактное взаимодействие, останется условие второго рода, то есть условие Нэймана.

Запишем выражение для потока плотности вероятности:

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} \left( \psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^* \right). \quad (8.8)$$

Известно, что поток определяет перенос частиц. Так, в случае нашей задачи необходимо убедиться, что граничное условие (8.6) обеспечивает запрет на перенос частицы сквозь границы объема. Рассмотрим  $\vec{n} \vec{j} \Big|_{\Sigma}$ , где  $\vec{n}$  - внешняя нормаль к поверхности (см. рис. 8.2).

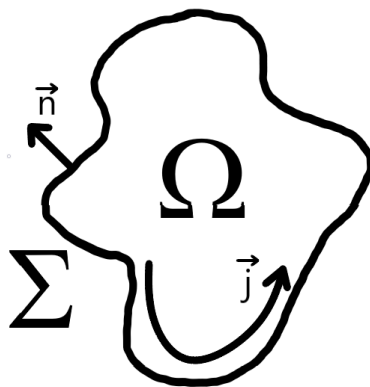


Рис. 8.2. Иллюстрация направления векторов  $\vec{n}$  и  $\vec{j}$

$$\vec{n} \vec{j} \Big|_{\Sigma} = j_n \Big|_{\Sigma} = -\lambda \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \psi - \psi \psi^*) = 0. \quad (8.9)$$

Отметим, что  $j_n$  представляет собой нормальную компоненту тока, которая и показывает наличие тока через поверхность, в то время как тангенциальная составляющая отвечает за движение частицы вдоль поверхности, однако переноса тока при этом не будет осуществляться.

**Замечание 8.1.** Важно, чтобы постоянная величина  $\lambda$  являлась вещественной, так как она характеризует контактное взаимодействие. Так, вещественность  $\lambda$  обеспечивает эрмитовость гамильтониана.

Полученный результат показывает, что частица удерживается и не проходит сквозь границу. При этом  $\psi$  совершенно не обязательно должно зануляться на границе. Так, это именно тот случай, когда частица заключена в объеме, в котором она может двигаться вдоль поверхности (имеется в виду токоперенос) с ненулевым потоком и при этом не выходит наружу. Интересно, что также описывается и конфайнмент кварков.

**Замечание 8.2.** Важным замечанием является уточнение того, что именно описывает величина  $\lambda$ . Пусть имеется пора, или междоузлие палладия, или оболочка фуллерена. Вокруг заполненной ядрами и электронам поры находится окружающая среда. Поэтому наша частица, например атомный электрон, должна взаимодействовать с окружением. Именно величина  $\lambda$  характеризует данное взаимодействие.

## Задача на одномерную симметричную квадратную потенциальную яму

Начнем повторение с решения одномерных задач квантовой механики, отнюдь не являющимися чем-то модельным, наоборот, такие задачи реальны, например, в электронном варианте. Однако на данный момент мы ограничимся решением самых простых задач.

Рассмотрим следующий потенциал:

$$V(x) = -\theta(a - |x|) V_0 . \quad (8.10)$$

Так, в данной задаче мы имеем дело с одномерной симметричной квадратной потенциальной ямой.

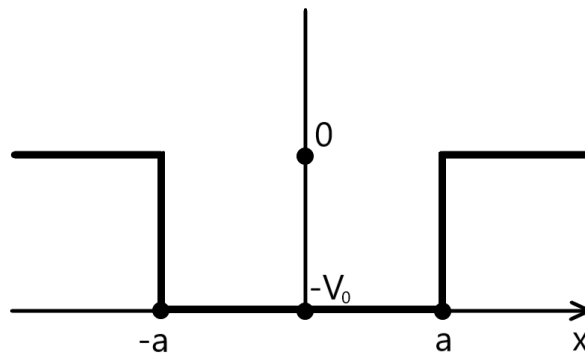


Рис. 8.3. Одномерная симметричная потенциальная яма

Именно знак «-» в выражении (8.10) показывает, что в задаче говорится о яме. Будет решать одномерное уравнение Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' + V(x) \psi = E \psi . \quad (8.11)$$

С точки зрения математической физики такая задача является довольно банальной, так как потенциал представляет собой кусочно-постоянную функцию. Таким образом, решение уравнения (8.11) сводится к решению задачи в областях непрерывности, или постоянства, потенциала с последующей сшивкой решений в точках разрыва потенциала по непрерывности функции и непрерывности производной (так как имеем дело с просто конечным скачком). В силу того, что в нашей задаче два

скачка, то решения должно быть три, а условий шивки- два (слева и справа). Однако заметим, что наша задача обладает тривиальной симметрией отражения в силу того, что потенциал (8.10) является четным:

$$V(x) = V(-x) . \quad (8.12)$$

В квантовой физике существует пока еще не доказанный закон: если есть симметрия задачи, то ей необходимо сразу воспользоваться, так как это существенно упростит задачу.

**Пример 8.1.** Если мы имеем дело с симметрией более высокого порядка, например фуллерен (ось 5-ого порядка), то отработка симметрии оси 5-ого порядка, являющейся симметрией поворота на 72 градуса, приводит к резкому редуцированию числа уравнений в системе. Например, с 60-ти уравнений для фуллерена редуцируются до примерно 5-ти.

Любая симметрия отрабатывается одним и тем же общим приемом. Пусть  $\psi_E$  - это решение уравнения (8.11) с энергией  $E$ . Тогда в силу того, что гамильтониан является симметричным относительно отражения,  $\widetilde{\psi}_E$  тоже будет являться решением данного уравнения с такой же энергией:

$$\psi_E(x) \longrightarrow \widetilde{\psi}_E(x) = \psi_E(-x) . \quad (8.13)$$

Любая другая симметрия будет отрабатываться так же. Так, например, при симметрии поворота на 72 градуса в результате отработки симметрии будет получена та же задача, и повернутая волновая функция будет являться решением уравнения Шредингера с той же энергией.

Далее в силу линейности уравнения Шредингера очевидно, что при построении двух решений в виде

$$\psi_E^{(\pm)}(x) = \psi_E(x) \pm \widetilde{\psi}_E(x) = \psi_E(x) \pm \psi_E(-x) , \quad (8.14)$$

$\psi_E^{(\pm)}(x)$  также будет являться решением уравнения (8.11), так как представляет линейную комбинацию двух исходных решений.

Такая линейная комбинация обладает определенной четностью. Так,  $\psi_E^{(\pm)}(x)$  - четная, а  $\psi_E^{(\pm)}(x)$ - нечетная относительно отражения функции. Таким образом, энергетические уровни будут классифицироваться по четности. Так, если ввести оператор отражения  $P$ , то он будет коммутировать с гамильтонианом  $H$  в силу четности

потенциала, в результате чего, два оператора будут иметь общие СВ и СЗ:

$$[P, H] = 0 . \quad (8.15)$$

Таким образом, все уровни, а также и угловые функции, можно сразу поделить на четные и нечетные. Как результат, у нас исчезнет необходимость осуществлять сшивку в точке  $x = -a$ , так как для поиска четных и нечетных решений можно рассматривать лишь положительную полуось. Впоследствии через точку  $x = 0$  можно продолжить решение на отрицательную полуось либо по условию четности, либо по - нечетности. Начнем с четных уровней:

### Четные уровни.

Будет рассматривать энергетические уровни внутри ямы (при отрицательных энергиях). Введем параметризацию, задав величину  $\varkappa$  в качестве параметра энергии:

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m} \varkappa^2 . \quad (8.16)$$

Для потенциала также введем параметризацию, которая на самом деле необязательна, но удобна для того, чтобы исключить из уравнения  $\frac{\hbar^2}{2m}$ :

$$V_0 = \frac{\hbar^2}{2m} k_0^2 . \quad (8.17)$$

Тогда внутри ямы при  $0 \leq x \leq a$  уравнение Шредингера (8.11) будет выглядеть следующим образом:

$$-\psi'' - k_0^2 \psi = -\varkappa^2 \psi . \quad (8.18)$$

В результате переноса всех членов уравнения (8.18) вправо получим:

$$\psi'' + \underbrace{(k_0^2 - \varkappa^2)}_{\lambda^2} \psi = 0 . \quad (8.19)$$

Ниже дна ямы мы не можем опуститься по уровням, поэтому  $k_0^2$ , являющийся параметром, характеризующим глубину ямы, всегда будет больше энергии, которую характеризует параметр  $\varkappa^2$ , в результате чего  $\lambda^2$  будет всегда положительна.

В результате решения уравнения (8.19) получим выражение для  $\psi_I$ , представленное через тригонометрические функции, а именно через косинус, потому что рассматривается четный случай:

$$\psi_I = A \cos \lambda x , \quad (8.20)$$

при этом очевидно, что нечетный тип решения будет записан через синус.

Снаружи ямы  $k_0^2 = 0$ , поэтому в этой области решение уравнения должно быть убывающим, так как рассматривается положительная ось (на отрицательной же оси решение будет возрастающим):

$$\psi_{II} = C e^{-\varkappa x} . \quad (8.21)$$

Далее осуществим сшивку на границе в точке  $x = a$ :

$$\begin{cases} A \cos \lambda a = C e^{-\varkappa a} \\ -A \lambda \sin \lambda a = -C \varkappa e^{-\varkappa a} . \end{cases} \quad (8.22)$$

Таким образом, удалось в общем случае получить линейную однородную систему уравнений на коэффициенты  $A$  и  $C$ . Условием разрешимости данной системы будет являться равенство нулю ее определителя. Из этого равенства в дальнейшем будет получено уравнение на уровень энергии. Таким образом

$$\lambda \operatorname{tg} \lambda a = \varkappa . \quad (8.23)$$

Данный метод необходимо использовать и при решении более сложных задач. Так, например, в методе стрельбы, когда уравнение Шредингера решается численно, необходимо работать с определителем из коэффициентов, занулив который найти уровень можно методом подбора.

В нашей же задаче можно поступить проще. Так, в одномерных задачах такого типа или же в радиальных трехмерных задачах, где фактически ставится одномерная задача по радиальной переменной, можно сразу отойти от коэффициентов  $A$  и  $C$ , поделив между собой уравнения системы (8.22). В результате данной операции мы снова получим уравнения (8.23).

Далее будем решать задачу через тангенс (однако можно и через окружность), в качестве текущего аргумента задав величину  $x = \lambda a$ . Тогда

$$\varkappa a = \sqrt{(k_0 a)^2 - x^2} = \sqrt{x_0^2 - x^2} . \quad (8.24)$$

Таким образом, при условии, что  $x_0 = k_0 a$ , получим

$$\operatorname{tg} x = \frac{\sqrt{x_0^2 - x^2}}{x} . \quad (8.25)$$

Уравнение (8.25) очень удобно проанализировать графически. Так, левую часть уравнения нарисуем в виде тангенсов, а правую - в виде полученной сложной функции от переменной  $x$ .

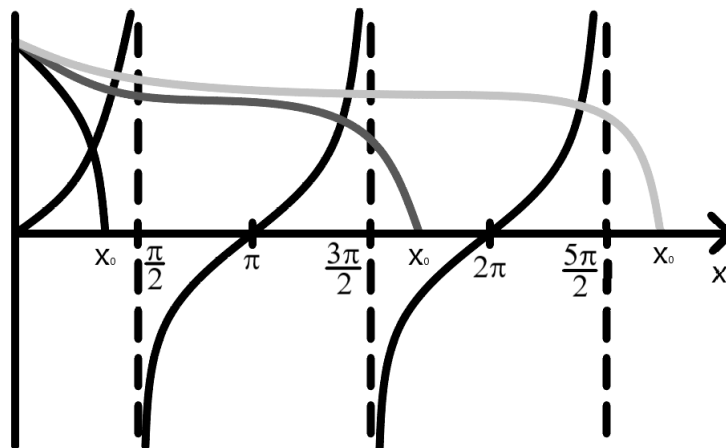


Рис. 8.4. Графическое решение трансцендентного уравнения

Обязательным условием для построения правой части уравнения является то, что  $x$  не может превосходить  $x_0$ . В точке  $x = 0$  такая функция обращается в бесконечность, а когда  $x \rightarrow x_0$  она зануляется. Более того, если взять производную такой функции в точке  $x = 0$ , то в результате дифференцирования корня, который перейдет знаменатель и, соответственно, обратится в ноль, получим вертикальную производную.

Заметим, что  $x_0 = k_0 a$  представляет собой произведение ширины ямы на ее глубину, поэтому сразу видно (см. рис. 8.4), что какое бы ни было  $x_0$ , всегда будет хотя бы одно пересечение правой части с левой, то есть всегда будет хотя бы одно решение, что является характерным свойством одномерных потенциальных ямы с равновысокими стенками. Так, для любой ямы, которая может быть сколь угодно маленькой, либо узкой, но не обязательно симметричной, всегда существует по крайней мере один уровень энергии при условии того, что стенки ямы выходят на одну и ту же асимптотику. Помимо аналитического решения, это также можно легко показать с помощью вариационного принципа. В нашем случае в интервале  $x$  от 0 до  $\pi$  будет одна точка пересечения. Впоследствии каждое следующее  $\pi$  будет добавлять один уровень.

Таким образом, мы показали, что хотя бы один четный уровень существует всегда, при этом волновая функция в случае очень неглубокого уровня является предельно сильно делокализованной по отношению к яме, так как уровень лежит на самом верхнем краю ямы, а  $\kappa$  - мало, и экспонента убывает очень медленно. Так, если уро-

вень маленький, частица реально может большую часть времени находится вне ямы (это определяется сравнением вероятностей ее обнаружения вне ямы и внутри, рассчитанных по соответствующему интегралу от квадрата модуля волновой функции), однако тем не менее это все равно будет являться связанным состоянием, и яма будет опускать частицу в связанное состояние.

### Нечетные уровни.

Вторым случаем является случай нечетного решения, когда волновая функция представляется через синус:

$$\psi_{III} = B \cos \lambda x . \quad (8.26)$$

Снаружи ямы решение будет возрастающим, следовательно

$$\psi_{IV} = D e^{\lambda x} . \quad (8.27)$$

Тогда можно получить уравнение, аналогичное (8.25):

$$\operatorname{tg} x = -\frac{x}{\sqrt{x_0^2 - x^2}} . \quad (8.28)$$

Уравнение (8.28) также будем анализировать графически. Так, правая часть при  $x \rightarrow 0$  зануляется, а в случае, когда  $x \rightarrow x_0$ , выражение  $-\frac{x}{\sqrt{x_0^2 - x^2}}$  уходит в минус-бесконечность.

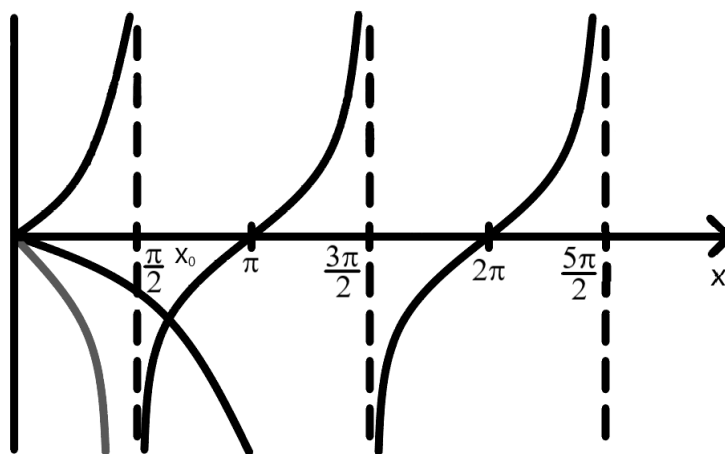


Рис. 8.5. Графическое решение трансцендентного уравнения



**Замечание 8.3.** Отметим, что точка пересечения в нуле не должна вызывать сомнений, так как нулевая энергия является непрерывным спектром. Порог непрерывного спектра для Шредингеровских задач является верхней границей ямы. Однако, например, для задач Дирака это не так. В этом случае порог нижнего континуума, или позитронного,  $-mc^2$ , является дискретным уровнем.

Так, пока  $x_0 \leq \frac{\pi}{2}$ , нечетные уровни не могут появиться. Свойство существования хотя бы одного уровня является свойством четных.

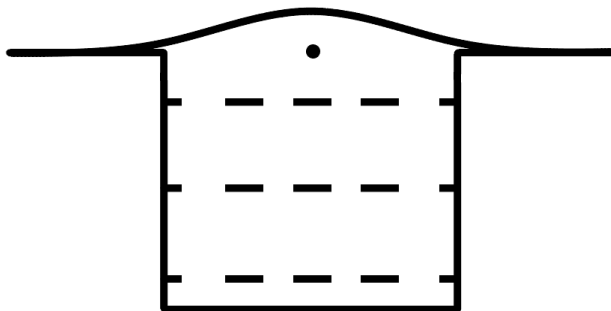


Рис. 8.6. Иллюстрация свойства четных

Таким образом, нечетный уровень может появиться только тогда, когда  $x_0 \geq \frac{\pi}{2}$ . Данный уровень, естественно, появится на верхней границе ямы, так как нижний четный уже будет спущен.

**Упражнение 8.1.** Лектором предлагается решить самостоятельно задачу с потенциальной ямой при условии разновысоких стенок. Такая яма уже не обязательно будет обеспечивать хотя бы одно связанное состояние. Связанное состояние появится лишь при определенных условиях на глубину и ширину ямы.

### Бесконечно глубокая потенциальная яма.

Существует предельный переход от конечной ямы к бесконечно глубокой или бесконечно узкой, который будет определяться дельта-пределом. Такую яму можно получить с помощью модификации исходной ямы, рассмотренной в предыдущей задаче, делая ее все время глубже и уже так, чтобы площадь, занимаемая прямоугольником, сохранялась.

С точки зрения уравнения Шредингера дельта-предел и дельта-образные потенциалы вполне допустимы:

$$V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Omega \delta(x) . \quad (8.29)$$

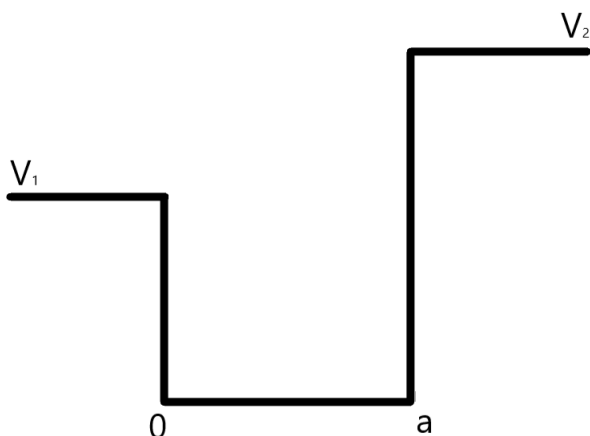


Рис. 8.7. Задача на разновысокие стенки

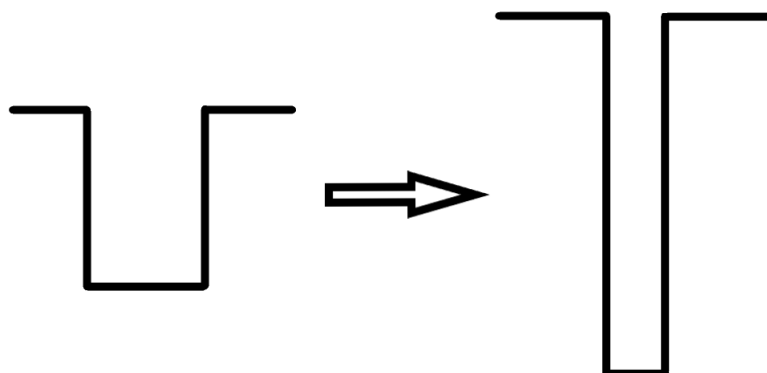


Рис. 8.8. Переход к дельта-яме

Допустимы они и с точки зрения физики, так как в широком классе задач размер источника потенциала по масштабу задачи не важен, так как он очень маленький, поэтому самым простым вариантом записи будет являться использование дельта-функции.

В случае потенциала (8.29) дельта-функцию можно посадить в любой точке на оси, однако из-за того, что исходное уравнение Шредингера трансляционно-инвариантно (вторая производная не зависит от того, где обозначалось начало отсчета на выбранной оси), поместим дельта-функцию в начало координат.

Для таких задач уравнение Шредингера должно решаться на основе следующих условий: волновая функция в точке, где сидит дельта-функция, должна быть непре-

рывна, а ее производная уже может претерпевать разрыв. Таким образом, в данном случае условие на непрерывность производной отменяется.

## Семинар 9. Одномерные задачи на потенциальные барьеры и ямы

### Задача на потенциал вида $\delta$ -ямы

Ранее нами была разобрана квадратная яма. Теперь же перейдем к рассмотрению дельта-предела, получаемого в результате сужения и увеличения высоты стенок ямы так, чтобы потенциал в пределе был записан в виде

$$V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Omega \delta(x) . \quad (9.1)$$

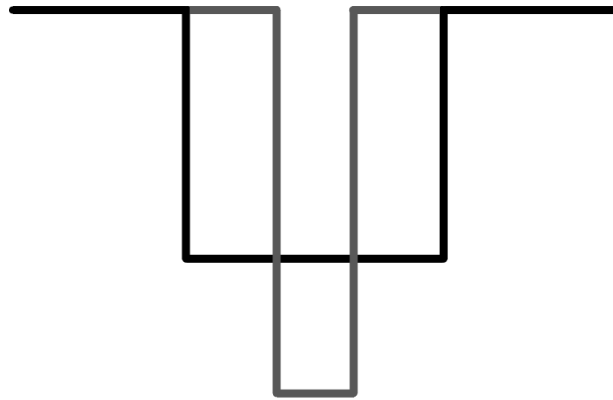


Рис. 9.1. Переход к  $\delta$ -яме

Поскольку  $\delta$ -яма является предельным случаем квадратной ямы, заведомо ясно, что в ней будет хотя бы один уровень. Из свойств уравнения Шредингера следует, что задачи на  $\delta$ -потенциалы могут быть разрешимы при условии, что волновая функция является непрерывной в точке  $\delta$ -ямы, а ее производная претерпевает скачок.

Одномерное уравнение Шредингера для такой задачи может быть записано в виде

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' - \frac{\hbar^2}{2m} \Omega \delta(x) \psi = E \psi . \quad (9.2)$$

Стоит отметить, что аргумент дельта функции может быть сдвинут, и в таком случае алгоритм решения задачи не изменится. Для того чтобы разобраться со скачком производной волновой функции, проинтегрируем уравнение (9.2) в пределах от  $-\varepsilon$  до  $\varepsilon$ , где  $\varepsilon$  - бесконечно малая положительная величина. Тогда:

$$\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} dx \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \psi' \Big|_{-\varepsilon}^{\varepsilon} - \frac{\hbar^2}{2m} \Omega \psi(0) = E \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} dx \psi(x) . \quad (9.3)$$

Поскольку  $\psi$  - непрерывная функция, то интеграл в правой части (9.3) от  $-\varepsilon$  до  $\varepsilon$  при  $\varepsilon \rightarrow +0$  будет равен нулю. Тогда

$$\psi' \Big|_{-0}^{+0} = -\Omega \psi(0) , \quad (9.4)$$

где  $\Omega$  имеет размерность обратных сантиметров.

Далее решим задачу на нахождение дискретного уровня в  $\delta$ -потенциале (9.1).

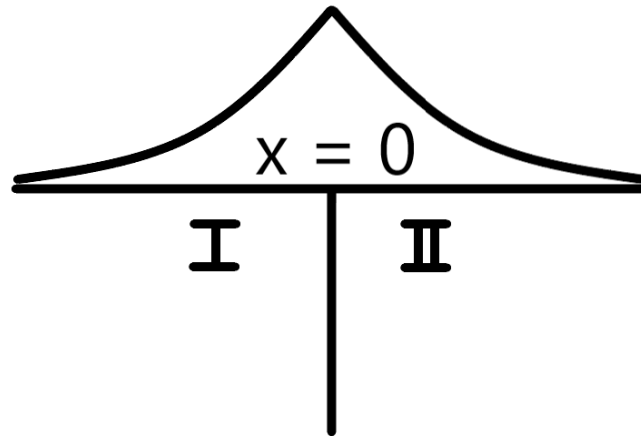


Рис. 9.2. Вид волновой функции для  $\delta$ -ямы

Дельта-яма делит пространство на две области:  $I$  и  $II$ . В этих областях волновая функция и её производная являются непрерывными, а на их стыке происходит скачок производной. Поскольку  $\delta$ -функция четная, запишем волновые функции в областях  $I$  и  $II$  в виде

$$\begin{cases} \psi_I = A e^{\kappa x} \\ \psi_{II} = A e^{-\kappa x} \end{cases} \quad (9.5)$$

где

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m} \kappa^2 . \quad (9.6)$$

Подставим волновые функции из выражения (9.5) в условие скачка производной (9.4):

$$\psi'_{II}(0) - \psi'_I(0) = -A\kappa - A\kappa = -2A\kappa = -\Omega A . \quad (9.7)$$

Тогда из (9.7) получим равенство

$$\kappa = \frac{\Omega}{2} . \quad (9.8)$$

Таким образом, из равенства (9.8) можно получить энергию единственного уровня  $\delta$ -ямы

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\Omega}{2}\right)^2. \quad (9.9)$$

### Задача на две $\delta$ -ямы

Потенциал такой задачи может быть записан в виде:

$$V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Omega [\delta(x+a) + \delta(x-a)], \quad (9.10)$$

где для удобства был выбран потенциал в виде двух симметричных ям, расстояние между которыми  $2a$ .

Как и для случая ям любых форм, имеющих одинаковые по высоте стенки, в рассматриваемой системе должен быть как минимум один дискретный уровень. Для нахождения второго дискретного уровня необходимо провести дополнительные выкладки. На данном этапе можно утверждать, что следующий уровень будет нечетным. Найдем сначала нижнее состояние системы. Сразу редуцируем задачу по четности и будем рассматривать область от  $0$  до  $\infty$ . Введем две области:  $I$  и  $II$  так, как показано на рис. 9.3.

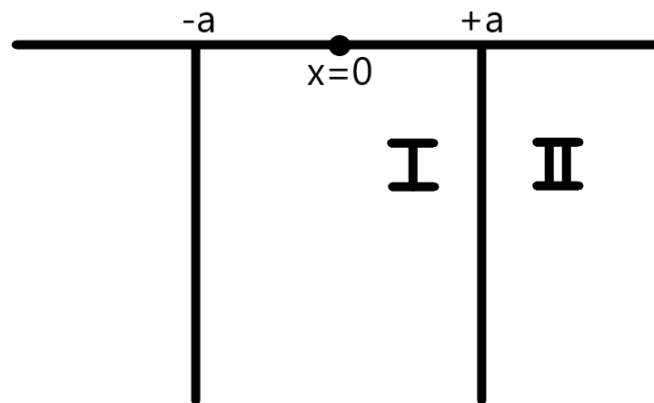


Рис. 9.3. Задача на две  $\delta$ -ямы

Преобразуем энергию системы к виду

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m} \kappa^2. \quad (9.11)$$

Для четной волновой функции в областях  $I$  и  $II$  запишем

$$\begin{cases} \psi_I = A \cosh(\kappa x) \\ \psi_{II} = C e^{-\kappa x} \end{cases} \quad (9.12)$$

Осуществим сшивку волновых функций  $\psi_I$  и  $\psi_{II}$  по непрерывности результирующей волновой функции в точке  $a$ :

$$A \cosh(\kappa a) = C e^{-\kappa a} \quad (9.13)$$

Для скачка производной выражение запишем равенство

$$-C \kappa e^{-\kappa a} - A \kappa \sinh(\kappa a) = -\Omega C e^{-\kappa a} \quad (9.14)$$

Выражения (9.13) и (9.14) представляют собой систему линейных уравнений на коэффициенты  $A$  и  $C$ . Перед тем, как приступить к решению данной системы, перепишем второе уравнение (9.14) в форме

$$A \kappa \sinh(\kappa a) = C (\Omega - \kappa) e^{-\kappa a} \quad (9.15)$$

Для того чтобы найти энергию четного уровня, не нужно находить коэффициенты  $A$  и  $C$ . Необходимо поделить уравнение (9.15) на (9.13), в результате чего получим трансцендентное уравнение

$$\text{th}(\kappa a) = \frac{\Omega - \kappa}{\kappa} \quad (9.16)$$

Уравнение (9.16) легко может быть проанализировано графически (рис. 9.4).

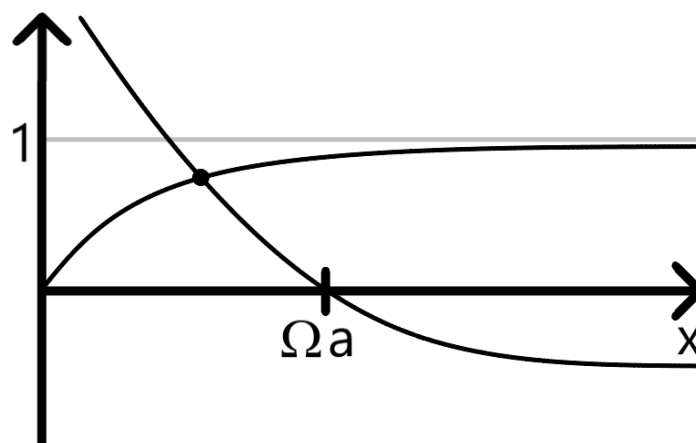


Рис. 9.4. Трансцендентное уравнение на нечетный уровень энергии

Произведем замену переменных:  $x = \varkappa a$ . Тогда (9.16) можно переписать в виде:

$$\operatorname{th}(x) = \frac{\Omega a - x}{x}. \quad (9.17)$$

При любом сколь угодно малом  $\Omega a$  будет существовать хотя бы один уровень энергии.

Далее рассмотрим нечетное решение и выясним, при каких условиях на параметры нашей конфигурации в виде двух  $\delta$ -функции это решение существует. Запишем нечетные волновые функции в виде

$$\begin{cases} \psi_I = B \sinh(\varkappa x) \\ \psi_{II} = C e^{-\varkappa x} \end{cases} \quad (9.18)$$

Затем необходимо осуществить сшивку волновых функций (9.18) в точке  $a$  по непрерывности волновой функции и записать условие для скачка производной, после чего получится система уравнений на коэффициенты  $B$  и  $C$ , решив которую, можно получить трансцендентное уравнение

$$\operatorname{th}(\varkappa a) = \frac{\varkappa}{\Omega - \varkappa}. \quad (9.19)$$

Осуществим замену переменной  $x = \varkappa a$  и получим, что

$$\operatorname{th}(x) = \frac{x}{\Omega a - x}. \quad (9.20)$$

Трансцендентное уравнение (9.20) может быть снова решено графическим методом (рис. 9.5).

Функция  $\frac{x}{\Omega a - x}$  по построению такова, что при  $x = 0$  она выходит из нуля и претерпевает разрыв при  $x = \Omega a$ . Когда  $x > \Omega a$ , эта функция выходит из  $-\infty$  и при  $x \rightarrow \infty$  стремится к  $-1$ .

Точки пересечения между функциями может не быть, если уменьшать значение  $\Omega a$ . В таком случае функция  $\frac{x}{\Omega a - x}$  очень быстро будет стремиться к бесконечности и не будет пересекаться с  $\operatorname{th}(x)$ .

Критерием появления нечетного уровня энергии будет являться условия равенства производных, с которыми обе функции выражения (9.20) будут выходить из точки  $x = 0$ . Если производная  $\operatorname{th}(x)$  будет больше, чем производная  $\frac{x}{\Omega a - x}$ , то нечетный уровень будет существовать. Найдем производные функций в точке  $x = 0$ :

$$(\operatorname{th} x)' = \frac{1}{\cosh x^2} \Big|_{x=0} = 1. \quad (9.21)$$



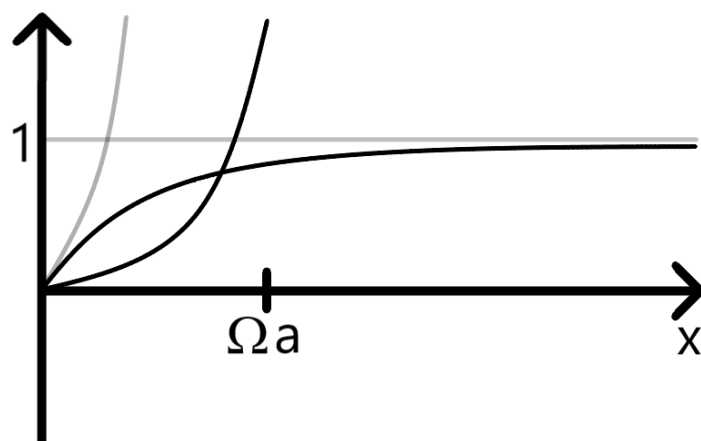


Рис. 9.5. Трансцендентное уравнение на четный уровень энергии

$$\left( \frac{x}{\Omega a - x} \right)' \Big|_{x=0} = \frac{1}{\Omega a} . \quad (9.22)$$

Следовательно, условие на существование нечетного уровня может быть записано в виде:

$$\Omega a > 1 . \quad (9.23)$$

### Задача на эффект надбарьерного отражения

Пусть электрон движется из металла на границу  $x = 0$  (рис. 9.6). Значение  $-V_0$  соответствует дну ямы, в которой движется электрон, и равно работе выхода. Электрон движется с положительной энергией за счет того или иного типа возмущения, например, термонагрева. В таком случае электрон должен частично отразиться и частично пройти дальше.

Запишем энергию электрона

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} > 0 . \quad (9.24)$$

Энергия в выражении (9.24) выбирается положительной для того, чтобы частица выходила за пределы барьера.

Волновая функция в первой области может быть записана следующим образом:

$$\psi_I = e^{ik_1x} + B e^{-ik_1x} , \quad (9.25)$$

где

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0)} \quad (9.26)$$

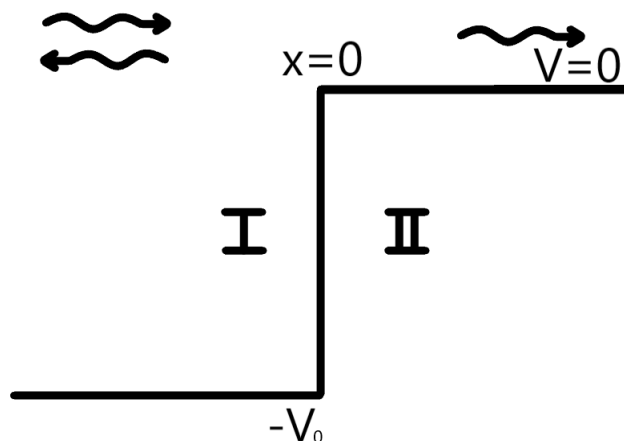


Рис. 9.6. Надбарьерное отражение электрона в металле

Величина  $k_1$  оказывается больше величины  $k$ , поскольку область  $I$  соответствует движению электрона в яме. Волновая функция в области  $II$ , соответствующей области движения свободной частицы, может быть записана в виде

$$\psi_{II} = C e^{ikx} . \quad (9.27)$$

Для нахождения коэффициентов при волновых функциях воспользуемся свойством непрерывности волновой функции вместе и её производной на границе областей:

$$\begin{cases} 1 + B = C \\ i k_1 (1 - B) = i k C \end{cases} . \quad (9.28)$$

Коэффициент  $B$  в выражении для волновой функции в области  $I$  стоит при экспоненте, отвечающей за отраженную волну, поэтому он может быть найден с помощью подстановки  $C$  из первого уравнения (9.28) во второе:

$$k_1 (1 - B) = k (1 + B) . \quad (9.29)$$

Тогда выразим коэффициент  $B$  из (9.29):

$$B = \frac{k_1 - k}{k_1 + k} = \frac{\sqrt{E + V_0} - \sqrt{E}}{\sqrt{E + V_0} + \sqrt{E}} . \quad (9.30)$$

Интересно также проанализировать численные значения найденных коэффициентов. Реальные условия выхода электрона с термокатода, например, для лампы, соответствуют нагреву до температуры порядка  $1000^\circ$ , что аналогично энергии  $E = 0.1$

эВ, а работа выхода равняется  $V_0 = 10$  эВ. В таком случае при рассмотрении вероятности выхода электрона из термокатода ее оказывается гораздо меньше вероятности отражения. Коэффициент  $B$  для записанных параметров может быть преобразован к виду

$$B = \frac{\sqrt{1 + \frac{E}{V_0}} - \sqrt{\frac{E}{V_0}}}{\sqrt{1 + \frac{E}{V_0}} + \sqrt{\frac{E}{V_0}}} \approx \frac{1 - \sqrt{\frac{E}{V_0}}}{1 + \sqrt{\frac{E}{V_0}}}, \quad (9.31)$$

где было использовано разложение

$$\sqrt{1 + \frac{E}{V_0}} \approx 1 + \frac{E}{2V_0} + \dots \quad (9.32)$$

Коэффициент отражения для рассматриваемого случая запишется в виде

$$R = |B|^2 \approx 1 - 4\sqrt{\frac{E}{V_0}} \approx 0.6. \quad (9.33)$$

Как видно из полученного в (9.33) значения коэффициента, несмотря на то, что энергия электрона оказывается больше нуля, коэффициент отражения имеет достаточно большое значение. Полученное значение  $R$  соответствует случаю, когда электронов отражается больше, чем проходит. Если вычислить точно значение  $R$ , то оно будет примерно равно  $\frac{2}{3}$ . С точки зрения истории вопроса, когда только начиналась радиотехника, она работала на лампах, а когда потребовались мощные источники тока, то оказалось, что сделать их на лампах практически невозможно, поскольку из-за эффекта надбарьерного отражения резко снижалась эффективность термокатодов.

## Эффект холодной эмиссии

Эффект холодной эмиссии заключается в том, что к металлу прикладывается электрическое поле, которое создает потенциал в области барьера

$$V(x) = -\varepsilon x. \quad (9.34)$$

Другими словами, приложение электрического поля к металлу приводит к «срезу барьера». Для осуществления данного эффекта поле должно быть достаточно сильным. В этом случае электроны, находящиеся внутри металла под поверхностью Ферми, смогут протунеллировать наружу с ненулевой вероятностью. Именно это решение максимально широко применяется на сегодняшний день.

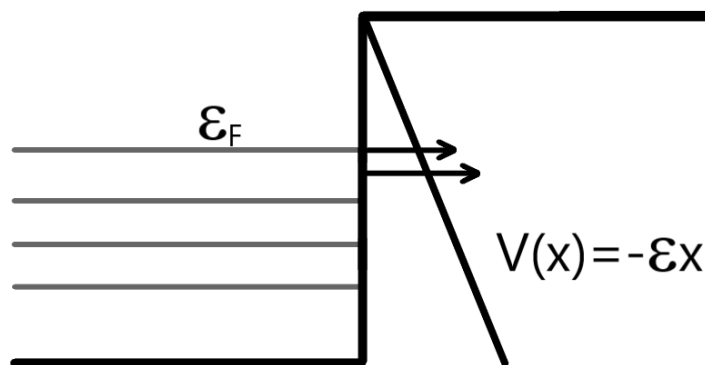


Рис. 9.7. Эффект холодной эмиссии

Для рассмотрения эффекта холодной эмиссии необходимо изначально узнать, что такое поверхность Ферми и вырожденный электронный газ, поэтому более подробно этот эффект будет рассмотрен позднее.

На текущем этапе отметим, что ток холодной эмиссии из металла в вакуум описывается формулой Фаулера-Нордгейма:

$$j = C_1 \varepsilon^2 e^{-\frac{C_2}{\varepsilon}}. \quad (9.35)$$

**Замечание 9.1.** Выражение (9.35) устанавливает зависимость тока от приложенного напряжения.

**Замечание 9.2.** В квантовой электродинамике аналогичная формула описывает рождение пар в постоянном сильном электрическом поле.

Константы  $C_1$  и  $C_2$  являются различными для каждой конкретной задачи. В случае убывания значения  $\varepsilon$  ток экспоненциально уменьшается и становится сильно подавленным. При больших значениях  $\varepsilon$  экспонента будет примерно равна единице, и ток окажется пропорциональным квадрату  $\varepsilon$ , благодаря чему удастся добиться очень больших значений тока. Для сравнения в законе Ома ток пропорционален первой степени напряженности.

**Упражнение 9.1.** Лектором предлагается самостоятельно без учета поля решить более сложную задачу по сравнению с задачей про надбарьерное отражение. Вообще говоря, при наличии поля необходимо дополнительно учитывать эффект электростатического изображения: налетающий электрон наводит своё изображение в металле или проводник, в результате чего потенциал, изображенный на

рис. 9.6, становится сглаженным (рис. 9.8). Такой потенциал может быть задан следующим образом:

$$V(x) = -\frac{V_0}{1 + e^{\frac{x}{a}}}. \quad (9.36)$$

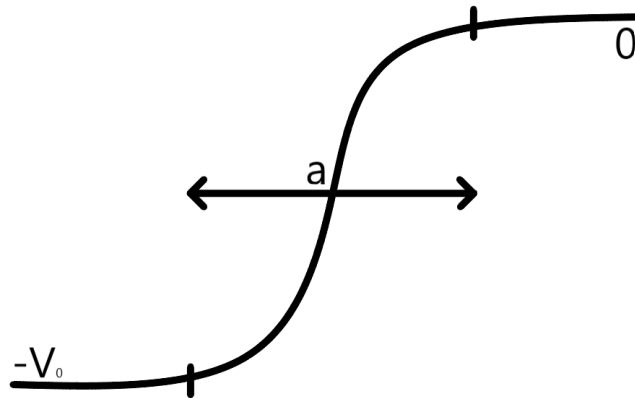


Рис. 9.8. Сглаженный потенциал

Задание заключается в поиске аналитического выражения коэффициента отражения для потенциала из (9.36), а также в получении его численного значения для параметров  $V_0 = 10$ ,  $E = 0.1$ ,  $a = 1 \text{ \AA}$ .

В случае если электрон движется с положительной энергией на потенциал вида прямоугольной ямы, то в классическом рассмотрении при попадании в область ямы он будет ускоряться, а при вылете - замедляться. В квантовом же случае частица будет испытывать ненулевое отражение при попадании в область ямы, а также на выходе из нее (рис. 9.9).

## Задача на отражение от барьера

Далее рассмотрим ту же самую задачу, что ранее была решена для эффекта надбарьерного отражения, с единственной разницей в энергии частицы:  $-V_0 < E < 0$  (рис. 9.10).

Попробуем понять, что происходит с данной частицей при ее движении на потенциальный барьер. Формально, слева от барьера присутствуют падающая и отраженная волны поэтому волновая функция для данной области может быть записана в виде:

$$\psi_I = e^{ik_1x} + B e^{-ik_1x}, \quad (9.37)$$

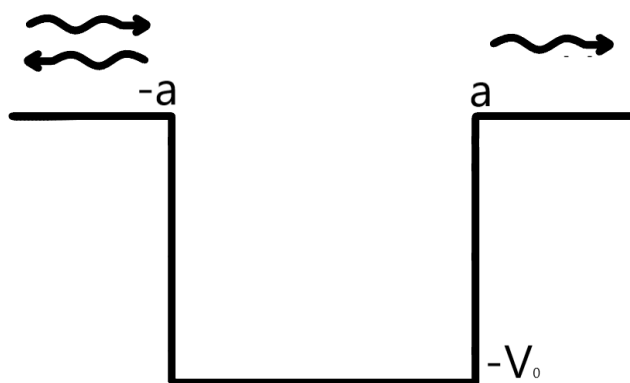


Рис. 9.9. Эффект надбарьерного отражения для случая прямоугольной ямы

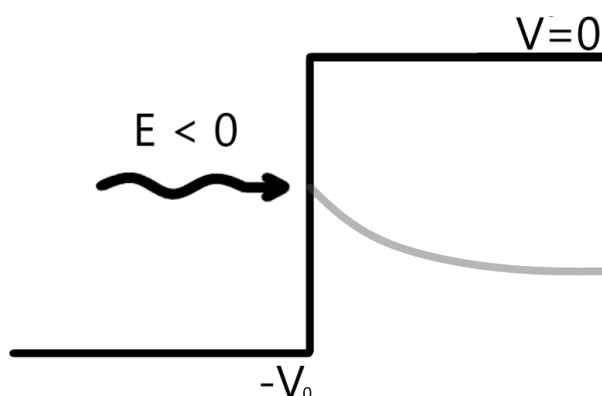


Рис. 9.10. Отражение от потенциала ступенька

где  $k_1$  - вещественная величина, поскольку в левой области энергия частицы выше энергии дна ямы.

В правой области волновая функция представима как

$$\psi_{II} = C e^{-\kappa x}, \quad (9.38)$$

где энергия меньше нуля и может быть параметризована следующим образом:

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m} \kappa^2. \quad (9.39)$$

Можно сразу выписать ответ для коэффициента отражения, как уже было сделано ранее в терминах  $k_1$  и  $k$  с одной лишь только разницей в том, что  $k$  заменяется на  $i\kappa$ . Следовательно, коэффициент  $B$  будет равен:

$$B = \frac{k_1 - i\kappa}{k_1 + i\kappa}, \quad (9.40)$$

где

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0)} . \quad (9.41)$$

$k_1$  - вещественная величина, поскольку как видно из (9.41), пока  $E > -V_0$ , что выполняется при любом условии, величина под корнем является вещественной.

Запишем ответ для коэффициента отражения  $R$ :

$$R = |B|^2 = 1 . \quad (9.42)$$

Несмотря на то что коэффициент отражения равен единице, волновая функция в запрещенной для движения классической частицы области будет ненулевой и соответствовать туннелированию. Плотность вероятности обнаружить частицу в запрещенной области будет равен нулю, поскольку левая область соответствует непрерывному спектру, для которого характерно описание в терминах волновых пакетов, а волновой пакет, налетая на барьер из бесконечности, после отражения полностью улетает обратно на бесконечность. Вероятность обнаружить частицу на любом конечном интервале при этом будет равна нулю.

## Задача на потенциальную яму со стенками конечной и бесконечной высоты

Рассмотрим задачу на потенциальную яму с бесконечно высокой стенкой в точке  $x = -L$  и стенкой конечной высоты в точке  $x = 0$ . Граничное условие в точке  $x = -L$  на волновую функцию будет состоять в равенстве нулю функции и её производной в этой точке. Яма не является симметричной, поэтому уровни энергии в ней будут не всегда, но поскольку далее мы будем предполагать, что ширина ямы может быть сдвинута за счет сдвига её левой стенки влево, то количество уровней будет увеличиваться.

Внутри ямы в области  $I$  волновая функция будет записываться в виде

$$\psi_I = A \sin [k_1 (x + L)] , \quad (9.43)$$

где функция была выбрана так, чтобы в точке  $x = -L$  синус был равен нулю, а следовательно, и сама волновая функция,  $k_1$  же - величина, которая определяется аналогично (9.41).

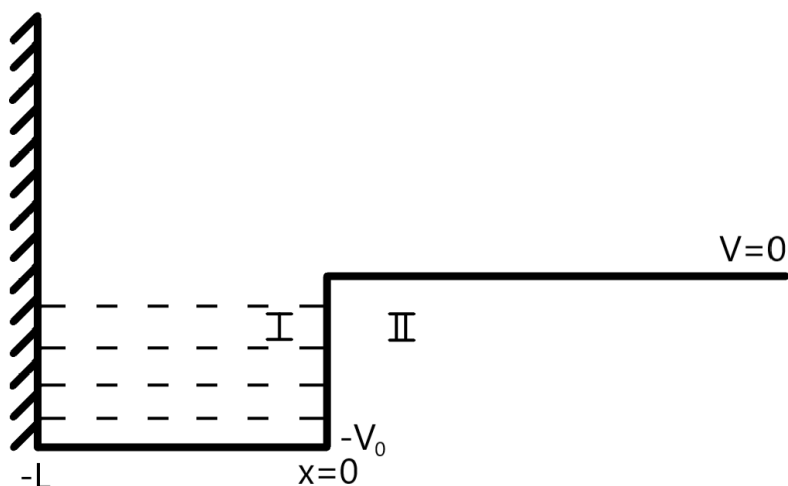


Рис. 9.11. Потенциальная яма с бесконечно высокой стенкой в точке  $x = -L$  и стенкой конечной высоты в точке  $x = 0$

В области  $II$  волновая функция будет представлять собой убывающую экспоненту:

$$\psi_{II} = C e^{-\kappa x} . \quad (9.44)$$

Далее сшиваем волновые функции, получая тем самым трансцендентное уравнение на уровни энергии. Число уровней будет зависеть от параметров  $L$  и  $V_0$ . Далее нормируем волновую функцию на единицу. Для этого вычислим интеграл

$$\int_{-L}^{\infty} |\psi|^2 dx = \left[ \int_{-L}^{\infty} = \int_{-L}^0 + \int_0^{\infty} \right] = A^2 \int_{-L}^0 \underbrace{\sin^2 [k_1 (x + L)]}_{\frac{1}{2}(1 - \cos [2k_1 (x+L)])} dx + \quad (9.45)$$

$$+ \frac{C^2}{2\kappa} \approx \frac{A^2}{2} L + \frac{C^2}{2\kappa} ,$$

где в выражении был опущен интеграл для слагаемого с косинусом, поскольку он является осциллирующей функцией.

При увеличении величины  $L$  осуществляется предельный переход к случаю потенциала «ступенька». Если взять величину  $L$  достаточно большой, то нормировка сводится к следующему:

$$A \longrightarrow \sqrt{\frac{2}{L}} . \quad (9.46)$$

Тогда нормированная волновая функция будет иметь общий нормировочный коэффициент в виде (9.46). Квадрат модуля волновой функции будет содержать множитель  $\frac{1}{L}$ , и тогда интеграл по любой конечной области будет обращаться в нуль.

Таким образом, рассматривая данную задачу, мы можем предельным переходом перейти к задаче на потенциальный барьер, в которой присутствует непрерывный



спектр, при переходе к которому все уходит на пространственную бесконечность, а вероятность обнаружить частицу на конечном интервале оказывается пренебрежимо малой. Реальный эффект, обусловленный эффектом туннелирования, связан с парением электронов над поверхностью металла, который возникает за счет того, что у электронного газа ненулевая плотность на единицу объема, вследствие чего нормированный таким образом поток при направлении на поверхность металла компенсирует множитель  $L$  в знаменателе, и вероятность обнаружить частицу вблизи металла окажется ненулевой.

**Замечание 9.3.** Крайне полезно также знать потенциал следующего вида:

$$V(x) = -\frac{V_0}{\cosh\left(\frac{x}{a}\right)^2}. \quad (9.47)$$

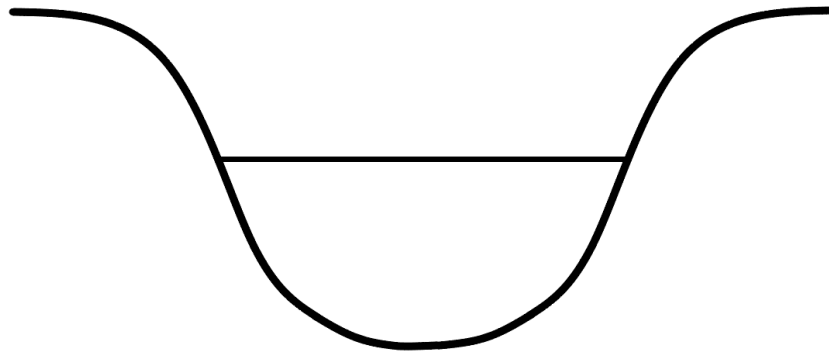


Рис. 9.12. Потенциал вида (8.47)

Данный потенциал представляет собой гладкую яму с экспоненциально убывающими стенками в точку  $x = 0$ . Яма является симметричной, поэтому хотя бы один уровень в ней всегда существует. Задача для такого потенциала решается точно. Примечательно, что он обладает одним очень интересным свойством: при определенных соотношениях между  $V_0$  и  $a$  имеет место так называемый эффект безотражательности, т. е. в этом случае не будет коэффициента отражения, будет только коэффициент прохождения, который, однако, не будет равен «чистой» единице в силу общего соотношения

$$R + T = 1, \quad (9.48)$$

где  $T$  задается выражением

$$T = \frac{k_1}{k} |C|^2, \quad (9.49)$$

где коэффициент  $C$  определен с точностью до фазы.

## Задача на дельта-барьер

Далее перейдем к рассмотрению задачи с  $\delta$ -функцией, то есть зададим потенциал так, чтобы в качестве барьера выступал  $\delta$ -потенциал. Такой потенциал может быть получен в результате предельного перехода от прямоугольного к бесконечно узкому и бесконечно высокому барьеру. Так, запишем потенциал для такой задачи:

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \Omega \delta(x) . \quad (9.50)$$

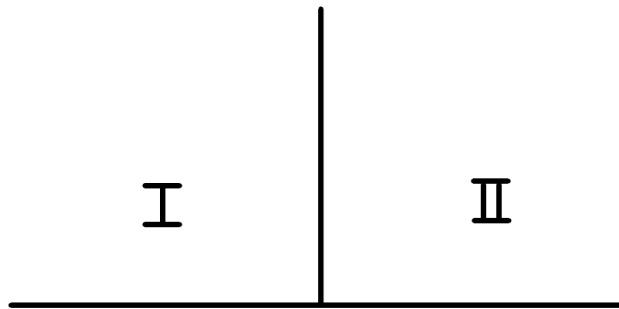


Рис. 9.13.  $\delta$ -барьер

Целью задачи будет являться определение коэффициентов прохождения и отражения. Как видно из рис. 9.13, в левой области будут существовать падающая и отраженная волны, а в правой области - только прошедшая. Энергия частицы может быть записана в виде

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 . \quad (9.51)$$

Очевидно, что в задаче не будут возникать уровни энергии, будет только непрерывный спектр.

Далее запишем волновые функции в областях  $I$  и  $II$ :

$$\begin{cases} \psi_I = e^{ikx} + B e^{-ikx} \\ \psi_{II} = C e^{ikx} . \end{cases} \quad (9.52)$$

Условием сшивки волновых функций будет являться условие на непрерывность функций:

$$1 + B = C , \quad (9.53)$$

и скачка производных на границе областей:

$$ikC - ik(1 - B) = \Omega C . \quad (9.54)$$

Выразим из уравнения (9.53) коэффициент  $B$  и подставим его в (9.54). В итоге после элементарных преобразований получим

$$(C - 1) = \frac{\Omega}{2ik} C . \quad (9.55)$$

Из уравнения (9.55) получим выражение для коэффициента  $C$ :

$$C = \frac{1}{1 - \frac{\Omega}{2ik}} . \quad (9.56)$$

Следовательно, коэффициент прохождения  $T$  будет равен

$$T = \frac{1}{1 + \left(\frac{\Omega}{2k}\right)^2} . \quad (9.57)$$

Перепишем (9.57) в более наглядном виде:

$$T = \frac{4k^2}{4k^2 + \Omega^2} . \quad (9.58)$$

Проверим правильность полученного выражения. Если  $k$  устремить к бесконечности, то в случае сообщения частице большую энергию она пройдет потенциальный барьер с вероятностью, равной единице. Если же при фиксированной энергии устремить  $\Omega$  к бесконечности, то коэффициент прохождения станет равным нулю.

В формуле (9.56) важным является тот факт, что коэффициент  $C$  имеет полюс при  $2ik = \Omega$ . Вспомним введенное ранее соотношение между  $k$  и  $\varkappa$ :  $k \rightarrow i\varkappa$ . Следовательно,  $\varkappa$  в точке полюса будет равно

$$\varkappa = -\frac{\Omega}{2} . \quad (9.59)$$

С другой стороны,  $\varkappa$  определяет уровень энергии дискретного уровня:

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m} \varkappa^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\Omega}{2}\right)^2 . \quad (9.60)$$

Таким образом, мы подошли к важному для квантовой теории выводу, которой заключается в том, что полюс амплитуды рассеяния соответствует дискретному уровню.

## Конечный кристалл

Далее рассмотрим  $n$  одинаковых  $\delta$ -функций, расположенных на одном и том же расстоянии  $a$  друг от друга (рис. 9.14). Потенциал для такой задачи запишем следующим образом:

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \Omega \sum_{n=1}^N \delta(x - na) . \quad (9.61)$$

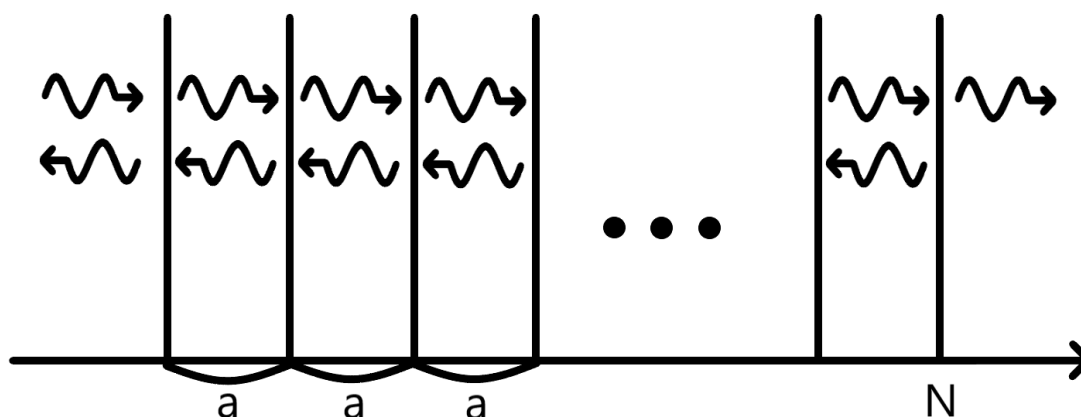


Рис. 9.14. Модель конечного кристалла

Отметим, что совершенно неважно, какую именно точку необходимо выбрать за начало конечного кристалла, поскольку можно осуществить сдвиг по оси  $x$  на произвольный шаг.

**Замечание 9.4.** Каждая камера работает на эффекте просветленной оптики, который описывают задачей на конечный кристалл. Эффект просветленной оптики заключается в том, что на поверхности линз, призм и других оптических деталей напыляется некоторое количество слоев материала с определенными коэффициентами преломления. За счет этого в определенном диапазоне энергий, т.е. частот фотонов, соответствующих видимому свету, коэффициент прохождения оказывается равным примерно единице, а для других областей частот доминирует поглощение и отражение.

Пусть на конечный кристалл приходит падающая волна, которая будет частично отражаться и частично проходить. На следующем  $\delta$ -барьере будет аналогичная ситуация. Таким образом, на каждом  $\delta$ -барьере волна будет частично проходить и частично отражаться. В случае, когда фазы прохождения и отражения оказываются такими, что прошедшие волны усиливают друг друга, а отраженные - гасят, имеет место режим усиленного прохождения (эффект просветления). В случае, если, наоборот, фазы прошедших волн оказываются сдвинутыми на  $\pi$ , прошедшие волны будут гасить друг друга, а отраженные будут усиливаться.

Для более подробного рассмотрения задачи рассмотрим один из  $\delta$ -барьеров, изображенных на рис. 9.14.

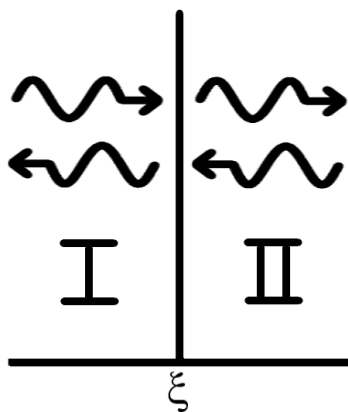


Рис. 9.15. Один из  $\delta$ -барьеров, изображенных на рис. 9.14

Как видно из данного рисунка, в областях  $I$  и  $II$  для волновой функции частицы с энергией

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad (9.62)$$

будет присутствовать часть, ответственная за прохождение и отражение, поэтому:

$$\begin{cases} \psi_I = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \\ \psi_{II} = C e^{ikx} + D e^{-ikx}, \end{cases} \quad (9.63)$$

где для волновой функции в области  $II$  коэффициент  $D$  соответствует отраженной от следующего дельта-барьера волне. Выразим коэффициенты  $C$  и  $D$  через  $A$  и  $B$  через уравнение непрерывности волновой функции в точке  $x = \xi$ :

$$A e^{ik\xi} + B e^{-ik\xi} = C e^{ik\xi} + D e^{-ik\xi}. \quad (9.64)$$

Далее запишем условие скачка волновой функции:

$$(C e^{ik\xi} - D e^{-ik\xi}) - (A e^{ik\xi} - B e^{-ik\xi}) = \frac{\Omega}{ik} (A e^{ik\xi} + B e^{-ik\xi}). \quad (9.65)$$

Таким образом, уравнения (9.64) и (9.65) представляют собой систему неоднородных уравнений на коэффициенты  $C$  и  $D$ , которые могут быть выражены через коэффициенты  $A$  и  $B$ .

Сложим уравнения (9.64) и (9.65):

$$2C e^{ik\xi} = \frac{\Omega}{ik} (A e^{ik\xi} + B e^{-ik\xi}) + 2A e^{ik\xi} = A \left(2 + \frac{\Omega}{ik}\right) e^{ik\xi} + \frac{\Omega}{ik} B e^{-ik\xi}. \quad (9.66)$$

Выражение для коэффициента  $D$  через  $A$  и  $B$  может быть получено вычитанием (9.65) из (9.64):

$$2D e^{-ik\xi} = -\frac{\Omega}{ik} (A e^{ik\xi} + B e^{-ik\xi}) + 2B e^{-ik\xi} = B \left(2 - \frac{\Omega}{ik}\right) e^{-ik\xi} - \frac{\Omega}{ik} A e^{ik\xi}. \quad (9.67)$$

**Упражнение 9.2.** Лектором предлагается самостоятельно доделать задачу про конечный кристалл. Для этого необходимо использовать начальную волну в виде:

$$e^{ikx} + B e^{-ikx} . \quad (9.68)$$

Далее необходимо проделать итерации с целью определения коэффициентов  $C$  и  $D$ . Для каждого  $\delta$ -барьера необходимо выразить коэффициенты прохождения и отражения через коэффициенты прохождения и отражения на предыдущем  $\delta$ -барьере, в результате чего коэффициенты  $C$  и  $D$  окажутся функциями от коэффициента  $B$ . После прохождения последнего барьера отраженная волна будет отсутствовать. Следовательно, в последней области коэффициент  $D$  необходимо приравнять к нулю и таким образом найти коэффициент отражения  $B$ . В конечном итоге коэффициент  $B$  будет зависеть от энергии и равняться то близким к нулю, то близким к единице.

**Замечание 9.5.** Если решать задачу на  $n$  прямоугольных барьеров, то ответ для нее может быть получен аналогичным образом, описанным в упражнении 8.2.

## Семинар 10. Доклад „Эффект Казимира на сфере“

Доклад подготовил Бойцов Михаил Александрович

Замечание 10.1. Для удобства в дальнейшем будем считать, что:

$$\hbar = c = 1, \quad (10.1)$$

тогда

$$E = \frac{1}{2} \sum_s (\omega_s - \bar{\omega}_s), \quad (10.2)$$

где  $\omega_s$  - частоты.

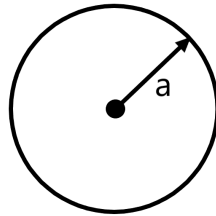


Рис. 10.1. ГУ для сферы с  $R = a$

Запишем разрешенные граничные условия для сферы радиуса  $R = a$ .

Замечание 10.2.  $\bar{\omega}_s$  - частоты при  $a \rightarrow \infty$ .

Граничные условия для ТЕ и ТМ волн:

ТЕ:

$$\begin{cases} j_l(\omega a) = 0 & \text{— внутри} \\ h_l^{(1)}(\omega a) = 0 & \text{— снаружи} \end{cases} \quad (10.3)$$

ТМ:

$$\begin{cases} \left. \frac{d}{dr} [r j_l(\omega r)] \right|_{r=a} = 0 & \text{— внутри} \\ \left. \frac{d}{dr} [r h_l^{(1)}(\omega r)] \right|_{r=a} = 0 & \text{— снаружи} \end{cases} \quad (10.4)$$

Следовательно,

$$j_l(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2z}} J_{l+\frac{1}{2}}(z); \quad h_l^{(1)}(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2z}} H_{l+\frac{1}{2}}^{(1)}(z). \quad (10.5)$$

Нас интересует только диапазон частот:  $\omega_{nl} > 0!$

Далее перепишем выражение для суммы по  $\omega_s$ :

$$\frac{1}{2} \sum_s \omega_s = \frac{1}{2} \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \sum_{n=1}^{+\infty} \omega_{ln} = \sum_{l=1}^{+\infty} \left( l + \frac{1}{2} \right) S_l, \quad (10.6)$$

где

$$S_l = \sum_{n=1}^{+\infty} \omega_{nl}. \quad (10.7)$$

Обозначим

$$S_l^{(\alpha)} = \sum_{n=1}^{+\infty} \omega_{nl}^{(\alpha)}, \quad (10.8)$$

где  $\omega_{nl}^{(\alpha)}$  - корни уравнений (10.3-10.4) ( $\alpha = 1, 2, 3, 4$ ).

Далее воспользуемся теоремой Коши:

$$S_l^{(\alpha)} = \frac{1}{2\pi i} \oint_C dz z \frac{d}{dz} \ln f^{(\alpha)}(z, a), \quad (10.9)$$

причем  $f^{(\alpha)}(\omega_n, a) = 0$ .

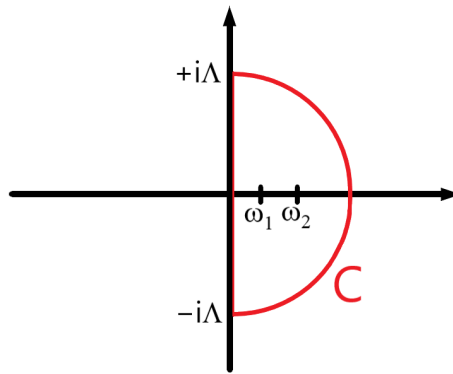


Рис. 10.2. Контур интегрирования

Из физических соображений:

$$f^{(\alpha)}(\omega, a) = f^{(\alpha)}(-\omega, a), \quad \omega > 0, \quad (10.10)$$

тогда

$$S_l = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\Lambda}^{\Lambda} dy y \frac{d}{dy} \ln f^{(\alpha)}(iy, a) + \frac{1}{2\pi i} \int_{C_n} z d \ln f^{(\alpha)}(z, a). \quad (10.11)$$

Первый интеграл в формуле (10.11) возьмем по частям, после чего обратим неинтегральный член в ноль в силу физических соображений (10.10).



Аналогичные действия проведем и с  $\tilde{\omega}_3$ :

$$\tilde{S}_l^{(\alpha)} = S_l^{(\alpha)} \Big|_{a \rightarrow +\infty} . \quad (10.12)$$

Далее заметим, что в силу осциллирующего поведения  $f^\alpha(z, a)$  на  $n$  будем иметь следующее:

$$\lim_{a \rightarrow +\infty} f^\alpha(z, a) = f^\alpha(z, a) , \quad (10.13)$$

тогда

$$S_l^{(\alpha)} - \tilde{S}_l^{(\alpha)} = \frac{1}{\pi} \int_0^{+\infty} dy \ln \left[ \frac{f^\alpha(iy, a)}{f^\alpha(iy, a \rightarrow +\infty)} \right] . \quad (10.14)$$

С помощью аккуратной подстановки асимптотик функций Бесселя получим следующее:

$$E = \frac{1}{\pi a} \sum_{l=1}^{+\infty} \left( l + \frac{1}{2} \right) \int_0^{+\infty} dy \ln \left[ 1 - (\sigma'_l(y))^2 \right] , \quad (10.15)$$

где

$$\sigma_l(y) = y I_\nu(y) K_\nu(y) \quad \left( \nu = l + \frac{1}{2} \right) . \quad (10.16)$$

Заметим, что

$$Q_l = \frac{l + \frac{1}{2}}{\pi} \int_0^{+\infty} dy \ln \left[ 1 - (\sigma'_l(y))^2 \right] . \quad (10.17)$$

**Замечание 10.3.** Для больших  $l$   $Q_l \rightarrow -3/64$  при  $l \rightarrow +\infty \Rightarrow$  сумма будет расходиться.

$$E = \frac{1}{a} \sum_{l=1}^{+\infty} \left( Q_l + \frac{3}{64} - \frac{3}{64} \right) = \frac{1}{a} \underbrace{\sum_{l=1}^{+\infty} \tilde{Q}_l}_{\text{сходится}} - \frac{3}{64a} \sum_{l=1}^{+\infty} \left( l + \frac{1}{2} \right)^0 \quad (10.18)$$

Воспользуемся  $\zeta$ -функцией Гурвица:

$$\zeta(z, q) = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{1}{(q+n)^z} . \quad (10.19)$$

Вспомнив связь функции (10.19) с  $\zeta$ -функцией Римана получим, что

$$-\frac{3}{64a} \sum_{l=1}^{+\infty} \left( l + \frac{1}{2} \right)^0 = -\frac{3}{64a} \left( \zeta \left( 0, \frac{1}{2} \right) - 1 \right) = \frac{3}{64a} . \quad (10.20)$$

Сумму  $\sum_{l=1}^{+\infty} \tilde{Q}_l$  можно вычислить численно. Результат вычисления будет равен:

$$\sum \tilde{Q}_l = -0.000514... . \quad (10.21)$$

Таким образом:

$$E \approx \frac{1}{a} \cdot 0.046361... \quad (10.22)$$

## Семинар 11. Задача на яму конечной глубины с $\delta$ -ямой. Гребенка Дирака

### Одномерная потенциальная яма конечной глубины с $\delta$ -ямой

Рассмотрим потенциал, представляющий собой симметричную потенциальную яму конечной глубины  $V_0$  с дельта-ямой в точке  $x = 0$ .

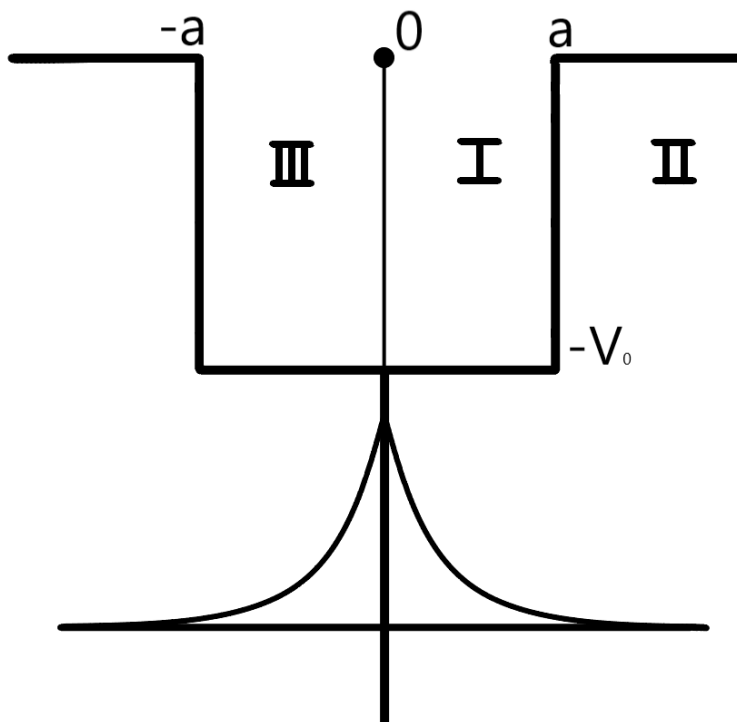


Рис. 11.1. Потенциальная яма конечной глубины с  $\delta$ -ямой

Для такой задачи потенциал  $V(x)$  запишется в виде

$$V(x) = -V_0 \theta(a - |x|) - \frac{\hbar^2}{2m} \Omega \delta(x) . \quad (11.1)$$

Формально, в рассматриваемом случае яма не имеет нижнего предела по энергии, и, следовательно, дискретные уровни могут уходить бесконечно глубоко в зависимости от параметра  $\Omega$ . Будем рассматривать задачу в трех областях:  $I$  - область внутри прямоугольной ямы,  $II$  - подбарьерная область и  $III$  - область, которую необходимо рассматривать для сшивки волновых функций при переходе через дельта яму.

Поскольку нас интересуют связанные состояния, то

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m} \kappa^2 . \quad (11.2)$$

Введем также переобозначение для  $V_0$ :

$$V_0 = \frac{\hbar^2}{2m} k_0^2 . \quad (11.3)$$

Далее будем решать задачу на дискретные уровни уравнения Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' + V \psi = E \psi . \quad (11.4)$$

Начнем работать сначала с нечетной серией уровней, поскольку для нее волновые функции в нуле должны обязательно обращаться в нуль, а поскольку скачок производной волновой функции в правой части содержит  $\psi(0)$ , то у нечетных уровней скачка не будет. В результате, вся задача для нечетных уровней будет сведена к задаче на нечетные уровни в потенциальной яме конечной глубины. Следовательно, нечетные уровни нам уже известны.

Для четных уровней энергии волновая функция претерпевает скачок производной, поэтому для них необходимо решать задачу более аккуратно. Запишем в области  $I$  уравнение Шредингера:

$$\psi_I'' + \underbrace{(k_0^2 - \kappa^2)}_{=-\lambda^2} \psi_I = 0 . \quad (11.5)$$

Решение необходимо выбрать так, чтобы условие скачка производной при переходе через точку  $x = 0$  было выполнено. Такому условию удовлетворяет функция:

$$\psi_I = A \sinh \lambda x + B \cosh \lambda x . \quad (11.6)$$

Решение в области  $III$  может быть получено из соображений четности. Так, гиперболический синус должен поменять знак в области  $III$ , а гиперболический косинус остаться с тем же знаком ( $\psi_{III}(x) = \psi_I(-x)$ ). Тогда

$$\psi_{III} = -A \sinh \lambda x + B \cosh \lambda x . \quad (11.7)$$

Очевидно, что для области  $II$  решение должно представлять собой убывающую экспоненту.

Далее воспользуемся условиями сшивки волновых функций и их производных. Для условия непрерывности функций  $\psi_I$  и  $\psi_{III}$  уравнение на нахождение коэффициентов будет обращено в тождество  $B = B$ , поэтому мы будем рассматривать условие

скачка производных волновых функций в нуле. Для этого необходимо вспомнить, что

$$\psi' \Big|_{-0}^{+0} = -\Omega \psi(0) . \quad (11.8)$$

Тогда, подставив в точке  $x = +0$  волновую функцию в области  $I$ , а в точке  $x = -0$  волновую функцию в области  $III$  получим, что

$$2\lambda A = -B\Omega . \quad (11.9)$$

Далее на границе областей  $I$  и  $II$  используем условие непрерывности волновых функций и их производных. Тогда получим, что

$$\begin{cases} A \sinh \lambda a + B \cosh \lambda a = C e^{-\varkappa a} \\ \lambda (A \cosh \lambda a + B \sinh \lambda a) = -\varkappa C e^{-\varkappa a} \end{cases} . \quad (11.10)$$

В итоге, мы получили три уравнения на коэффициенты  $A$ ,  $B$  и  $C$ . Для того чтобы найти решение задачи на четные уровни, необходимо составить определитель из данных уравнений на коэффициенты и, приравняв его к нулю, получить уравнение на нахождение уровней энергии. Можно упростить вычисления, поделив второе уравнение из (11.10) на первое:

$$\lambda \frac{A \cosh \lambda a + B \sinh \lambda a}{A \sinh \lambda a + B \cosh \lambda a} = -\varkappa . \quad (11.11)$$

Из выражения (11.9) выразим величину  $B$  и подставим в (11.11), сократив при этом числитель и знаменатель на  $A$ :

$$\lambda \frac{\cosh \lambda a - \frac{2\lambda}{\Omega} \sinh \lambda a}{\sinh \lambda a - \frac{2\lambda}{\Omega} \cosh \lambda a} = -\varkappa . \quad (11.12)$$

Выражение (11.12) может быть подвержено еще большему упрощению, если разделить его числитель и знаменатель в левой части на  $\cosh \lambda a$  и умножить на  $\Omega$ . Так, после деления правой и левой части на  $\lambda$  получим

$$\frac{\Omega - 2\lambda \operatorname{th} \lambda a}{\Omega \operatorname{th} \lambda a - 2\lambda} = -\frac{\varkappa}{\lambda} . \quad (11.13)$$

В целях упрощения и удобства осуществим следующие замены переменных:

$$\Omega a = \xi; \quad \lambda a = x; \quad k_0 a = x_0 . \quad (11.14)$$

Тогда  $\kappa a = \sqrt{x_0^2 + x^2}$ , в результате чего выражение (11.13) может быть преобразовано к виду

$$\frac{\xi - 2x \operatorname{th} x}{\xi \operatorname{th} x - 2x} = -\frac{\sqrt{x_0^2 + x^2}}{x}. \quad (11.15)$$

Исследуем полученный ответ на качественном уровне. Наиболее интересным случаем для рассмотрения является случай, когда  $\Omega \rightarrow \infty$ . При этом в силу замен (11.14)  $\xi \rightarrow \infty$ . Тогда можно убедиться, что нижний уровень вместе с увеличением величины  $\Omega$  будет опускаться ниже, и при больших  $\Omega$  ответ для значения уровня энергии будет иметь вид  $E = \frac{\Omega}{2}$ .

Далее разберемся с тем, где именно находятся другие четные уровни энергии. По общим законам уравнения Шредингера, четные и нечетные уровни должны чередоваться, в силу теоремы о нулях. В силу того, что нечетные уровни энергии не ощущают дельта-ямы, четные уровни энергии не могут быть опущены ниже положения нечетных (даже при стремлении  $\Omega$  к бесконечности).

При этом с увеличением параметра  $\Omega$  волновая функция четного уровня будет искажаться таким образом, что будет становиться похожей на волновую функцию нечетного уровня. В пределе  $\Omega$ , стремящегося к бесконечности, нули четных функций будут стягиваться к нулям нечетных, поэтому произведение  $\Omega$  на значение функции в нуле, которое определяет скачок производной волновой функции, будет оставаться конечным. Следовательно, волновая функция четного уровня будет стремиться к виду модуля от нечетной волновой функции (см. рис. 11.2). Как результат, в пределе уровни станут вырожденными.

**Замечание 11.1.** Волновая функция нижнего четного уровня энергии в случае конечной величины  $\Omega$  имеет непрерывную производную на границе областей I и III. Однако при стремлении  $\Omega$  к бесконечности в пределе волновая функция будет совпадать с волновой функцией для задачи на  $\delta$ -яму.

**Замечание 11.2.** В случае, если вместо  $\delta$ -ямы в прямоугольной яме будет  $\delta$ -барьер, то нечетные по-прежнему будут оставаться на своем месте, а четные - будут подниматься выше вплоть до положения вышележащего нечетного уровня. В случае, если нечетных уровней нет, может возникать ситуация, когда в яме вообще не будет уровней энергии.

**Замечание 11.3.** В большом числе приложений встречается задача следующего

вида:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' - \frac{\alpha}{|x|} \psi = E \psi . \quad (11.16)$$

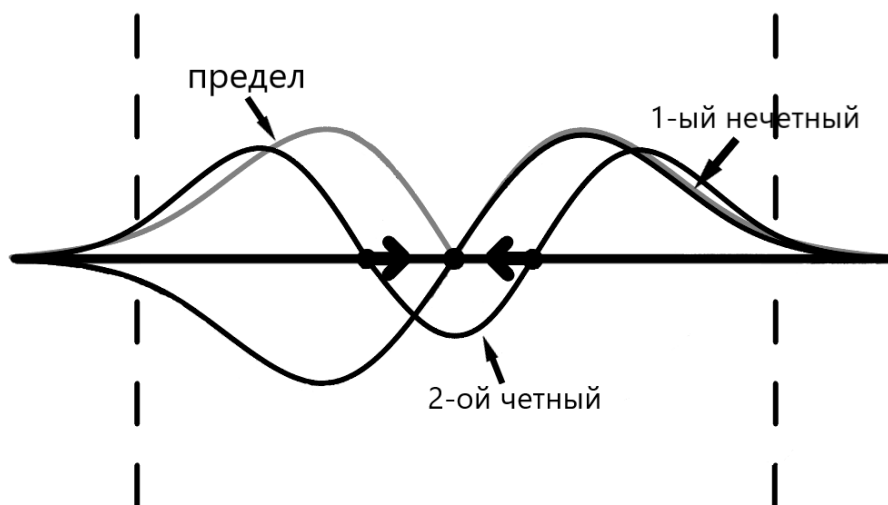


Рис. 11.2. Изменение ВФ четных уровней на примере 2-го четного уровня

Существует знаменитая работа Лоудона, который первый в приложении к полупроводникам пришел к уравнению (11.16) и извлек из него много различных свойств. Примером задач на такое уравнение является сильно сжатый полем атом водорода так, что задачу можно рассматривать как одномерную и, соответственно, описывать уравнением (11.16). При этом вид потенциала приводит к тому, что задача не является самосопряженной. Для решения данной проблемы, например, можно сгладить потенциал в точке  $x = 0$ , добавив в знаменателе некоторый сглаживающий параметр  $a$  такой, что

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' - \frac{\alpha}{|x| + a} \psi = E \psi . \quad (11.17)$$

## Гребенка Дирака

Далее перейдем к задаче на модель решетки, представляющую собой гребенку Дирака. Рассмотрим её простейший вариант, а именно: гребенку, направленную вверх, с постоянным расстоянием  $a$  между стенками (рис. 11.3).

Для рассматриваемого случая потенциал гребенки Дирака может быть записан в следующем виде:

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \Omega \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na) . \quad (11.18)$$

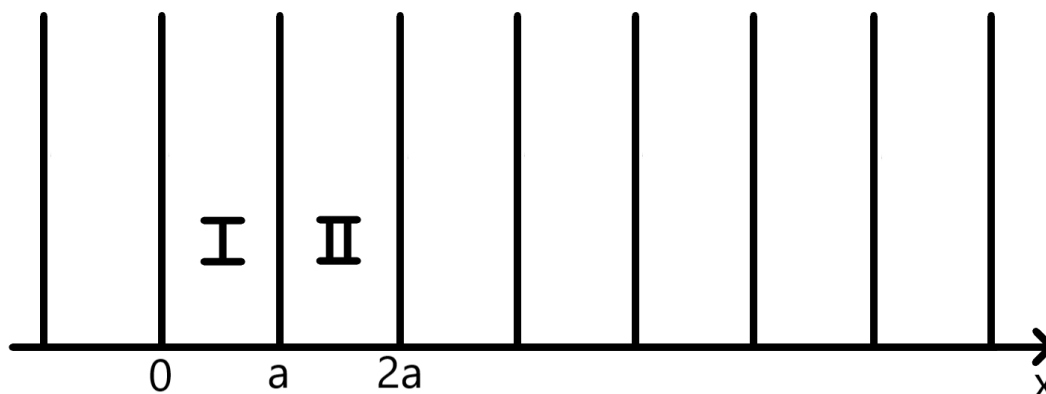


Рис. 11.3. Гребенка Дирака

В силу того, что гребенка направлена вверх, энергия частицы может находиться в диапазоне от нуля до бесконечности, а также может быть параметризована:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} q^2 . \quad (11.19)$$

Решение задачи осуществляется по схеме, разобранный ранее в общем случае: необходимо так удобно выбрать два соседних периода, что область  $I$  будет расположена в диапазоне от 0 до  $a$ , а  $II$  - в области от  $a$  до  $2a$ . При этом на границе областей будет находиться  $\delta$ -барьер.

Запишем решение для волновых функций в областях  $I$  и  $II$ . Важно заметить, что в диапазоне рассматриваемых областей потенциал равен нулю, что приводит к волновым функциям

$$\begin{cases} \psi_I = A e^{iqx} + B e^{-iqx} \\ \psi_{II} = e^{iKa} (A e^{iq(x-a)} + B e^{-iq(x-a)}) \end{cases} , \quad (11.20)$$

где  $e^{iKa}$  - фактор Флоке,  $K$  - квазиимпульс.

Далее запишем условия сшивки волновых функций в точке  $x = a$  (условия непрерывности волновых функций на границе областей и скачка производной):

$$\begin{cases} A e^{iqa} + B e^{-iqa} = e^{iKa} (A + B) \\ iq e^{iKa} (A - B) - iq (A e^{iqa} - B e^{-iqa}) = \Omega e^{iKa} (A + B) \end{cases} . \quad (11.21)$$

В результате мы получим систему линейных однородных уравнений на определение коэффициентов  $A$  и  $B$ . Для её решения необходимо приравнять определитель матрицы к нулю.



Перенесем в первом уравнении из системы (11.21) все слагаемые в левую часть и вынесем общие множители в виде коэффициентов  $A$  и  $B$ :

$$A(e^{iqa} - e^{iKa}) + B(e^{-iqa} - e^{iKa}) = 0. \quad (11.22)$$

Далее аналогичным образом преобразуем второе уравнение из (11.21), предварительно поделив правую и левую части на  $iq$ :

$$A\left(e^{iKa} - e^{iqa} - \frac{\Omega}{iq} e^{iKa}\right) + B\left(-e^{iKa} + e^{-iqa} - \frac{\Omega}{iq} e^{iKa}\right) = 0. \quad (11.23)$$

Составим определитель из уравнений (11.22) и (11.23) и распишем его в виде

$$\begin{aligned} & (e^{iqa} - e^{iKa}) \left(-e^{iKa} + e^{-iqa} - \frac{\Omega}{iq} e^{iKa}\right) - \\ & - (e^{-iqa} - e^{iKa}) \left(e^{iKa} - e^{iqa} - \frac{\Omega}{iq} e^{iKa}\right) = 0. \end{aligned} \quad (11.24)$$

Раскроем скобки в выражении (11.24) и получим:

$$\begin{aligned} & -e^{i(K+q)a} + 1 - \frac{\Omega}{iq} e^{i(K+q)a} + e^{2iKa} - e^{i(K-q)a} + \frac{\Omega}{iq} e^{2iKa} - e^{i(K-q)a} + \\ & + 1 + \frac{\Omega}{iq} e^{i(K-q)a} + e^{2iKa} - e^{i(K+q)a} - \frac{\Omega}{iq} e^{2iKa} = 0. \end{aligned} \quad (11.25)$$

Упростив уравнение (11.25), получим равенство

$$1 - e^{i(K+q)a} + e^{2iKa} - e^{i(K-q)a} - \frac{\Omega}{2iq} e^{i(K+q)a} + \frac{\Omega}{2iq} e^{i(K-q)a} = 0. \quad (11.26)$$

Домножим каждое из слагаемых уравнения (11.26) на  $e^{-iKa}$ . Тогда

$$-e^{iqa} + e^{-iKa} - \frac{\Omega}{2iq} e^{iqa} + e^{iKa} - e^{-iqa} + \frac{\Omega}{2iq} e^{-iqa} = 0. \quad (11.27)$$

В (11.27) экспоненты можно привести к виду синусов и косинусов. Тогда окончательно получим, что:

$$\boxed{\cos Ka = \cos qa + \frac{\Omega}{2q} \sin qa}. \quad (11.28)$$

Равенство (11.28) представляет собой простейшее дисперсионное соотношение, связывающее  $q$ , то есть энергию частицы, с квазиимпульсом  $K$ . Зависимость  $E$  от  $K$  называется дисперсионным соотношением, которое характеризует зонную структуру.

В силу того, что косинус в левой части (11.28) ограничен единицей, возникает условие

$$\left| \cos qa + \frac{\Omega}{2q} \sin qa \right| \leq 1. \quad (11.29)$$

Для удобства приведем сумму под модулем к виду

$$\sqrt{1 + \left(\frac{\Omega}{2q}\right)^2} |\sin(qa + \varphi)| \leq 1, \quad (11.30)$$

где

$$\operatorname{tg} \varphi = \frac{2q}{\Omega}. \quad (11.31)$$

Неравенство (11.31) удобно переписать в виде

$$|\sin(qa + \varphi)| \leq \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{\Omega}{2q}\right)^2}}. \quad (11.32)$$

График неравенства (11.32) изображен на рис. 11.4. При малых значениях  $qa$  тангенс величины  $\varphi$  будет стремиться к нулю, поэтому в этом случае фазового сдвига не будет, в связи с чем график функции будет представлять собой модули синусов. Если же  $qa$  устремить к бесконечности, то тангенс  $\varphi$  также будет стремиться к бесконечности, а  $\varphi$  - к  $\frac{\pi}{2}$ . Из этого следует, что максимум синуса окажется сдвинутым на величину  $\frac{\pi}{2}$ . Примечательно, что правая часть неравенства (11.32) ведет абсолютно аналогичным образом: если  $q$  стремится к нулю, то знаменатель стремится к бесконечности, а полное выражение, соответственно, стремится к нулю. Если же, наоборот,  $q$  устремить к бесконечности, то корень будет гладко стремиться к единице.

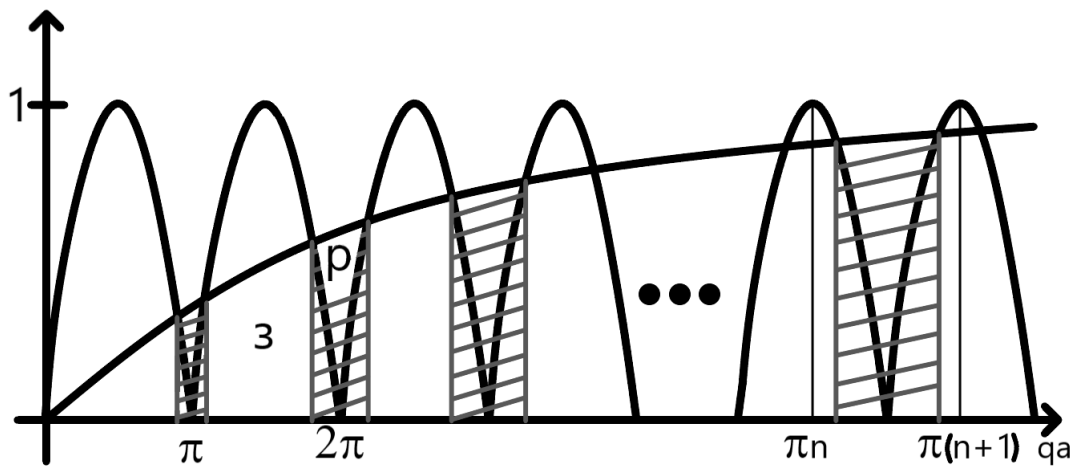


Рис. 11.4. Решение неравенства (11.32), где  $Z$  - запрещенная область,  $P$  - разрешенная область

Как видно из рисунка 11.4, сначала неравенство не выполняется, вследствие чего первая зона от нуля до первой точки пересечения кривых является самой широкой

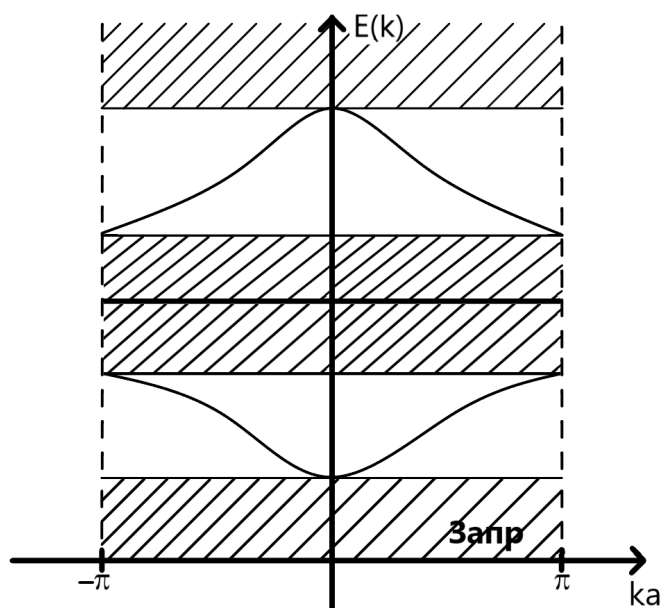


Рис. 11.5. Зависимость энергии от квазиимпульса

запрещенной зоной. За ней следует самая узкая разрешенная зона, выделенная на рисунке серыми линиями. После первой разрешенной зоны вновь следует запрещенная зона, более узкая по сравнению с первой. Затем же вновь начинается разрешенная область. При большом значении  $qa$  разрешенные зоны будут очень широкими по сравнению с запрещенными. Таким образом, может быть восстановлена общая картина зонной структуры в виде графика  $E$  от  $K$  (рис. 11.5).

## Семинар 12. Доклад „Уравнение Кортевега-де Фриза“

Доклад подготовила Степанова Анастасия Павловна

### Метод обратной задачи рассеяния

Известное уравнение Кортевега-де Фриза обладает скрытой алгебраической симметрией, приводящей к «интегрируемости» с помощью метода обратной задачи для вспомогательного линейного оператора.

Роль преобразования Фурье в этом методе играет отображение коэффициентных функций некоторого линейного дифференциального оператора в совокупность «данных рассеяния».

Уравнение Кортевега-де Фриза интегрируется с помощью перехода от потенциала одномерного уравнения Шредингера:

$$-\frac{d^2\psi}{dx^2} + U(x)\psi = k^2\psi, \quad (12.1)$$

к коэффициенту отражения  $r(k)$  на этом потенциале; при эволюции потенциала в силу уравнения Кортевега-де Фриза зависимость коэффициента отражения от времени:

$$r(k, t) = r(k, 0) e^{-8ik^3t}. \quad (12.2)$$

Таким образом задача интегрирования уравнения Кортевега-де Фриза приводит к задаче о восстановлении потенциала  $U(x)$  по данному коэффициенту отражения - обратной задаче квантовой теории рассеяния.

Рассмотрим одномерный оператор Шредингера (оператор Штурма-Лиувилля)

$$L = -\frac{d^2}{dx^2} + U(x) \quad (12.3)$$

на всей прямой  $-\infty < x < \infty$ . Вещественный потенциал  $U(x)$  будем считать достаточно гладким и обращающимся в нуль при  $|x| \rightarrow \infty$ .

Задачу на СЗ

$$L\psi = \frac{d^2\psi}{dx^2} + U(x)\psi = \lambda\psi, \quad (12.4)$$

будем рассматривать в классе ограниченных на всей оси функций  $\psi(x)$ . Кроме дискретного спектра, СФ которого квадратично интегрируемы, имеется двукратно вы-

рожденный непрерывный спектр с ненормированными СФ. Непрерывный спектр заполняет вещественную ось  $\lambda \geq 0$ . СЗ дискретного спектра оператора  $L$  отрицательны.

Потенциалы с бесконечным числом связанных состояний мы будем исключать, налагая на  $u(x)$  ограничение:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |u(x)| (1 + |x|) dx < \infty . \quad (12.5)$$

### Описание задачи рассеяния

Вместо энергии  $\lambda$  будем пользоваться импульсом  $k$  ( $\lambda = k^2$ ). Уравнение на СФ будет иметь вид

$$-\frac{d^2\psi}{dx^2} + U(x)\psi = k^2\psi . \quad (12.6)$$

Непрерывному спектру теперь отвечают вещественные  $k$ , а дискретному соответствуют  $k = i\kappa_n$ , где  $n = 1, 2, \dots, N$ ,  $\kappa_n > 0$ .

При каждом вещественном  $k \neq 0$  множество решений уравнения (12.6) образует двумерное линейное пространство  $G_k$ . Фиксируем в  $G_k$  два базиса.

Первый из них состоит из решений  $\psi_{1,2}(x, k)$  уравнения (12.6), определяемых асимптотическим условием на  $+\infty$  по  $x$ :

$$\begin{cases} \psi_1(x, k) = e^{-ikx} + o(1) \\ \psi_2(x, k) = e^{ikx} + o(1) \end{cases} \quad x \rightarrow +\infty , \quad (12.7)$$

а второй базис  $\varphi_{1,2}(x, k)$  задается аналогичными условиями на  $-\infty$ :

$$\begin{cases} \varphi_1(x, k) = e^{-ikx} + o(1) \\ \varphi_2(x, k) = e^{ikx} + o(1) \end{cases} \quad x \rightarrow -\infty . \quad (12.8)$$

Ввиду вещественности потенциала:

$$\varphi_1(x, k) = \overline{\varphi_2(x, k)}; \quad \psi_1(x, k) = \overline{\psi_2(x, k)} , \quad (12.9)$$

$$\varphi_1(x, k) = \varphi_2(x, -k); \quad \psi_1(x, k) = \psi_2(x, -k) . \quad (12.10)$$

Векторы любого из базисов являются линейной комбинацией векторов другого:

$$\varphi_i(x, k) = \sum_{l=1,2} T_{i,l}(k) \psi_l(x, k) , \quad (12.11)$$

где

$$T(k) = \begin{pmatrix} a(k) & b(k) \\ \bar{b}(k) & \bar{a}(k) \end{pmatrix} - \text{матрица перехода} . \quad (12.12)$$

В дальнейшем индекс 1 у функций  $\varphi_1$  и  $\psi_1$  будем опускать.

Таким образом,

$$\varphi(x, k) = a(k) \psi(x, k) + b(k) \bar{\psi}(x, k) . \quad (12.13)$$

Определитель Вронского

$$W(f_1, f_2) = f_1 \frac{df_2}{dx} - f_2 \frac{df_1}{dx} \quad (12.14)$$

любой пары решений уравнения (12.1) не зависит от  $x$ .

$$W(\varphi, \bar{\varphi}) = W(\psi, \bar{\psi}) = 2ik . \quad (12.15)$$

Соотношение (12.15) вместе с (12.13) означает, что

$$|a(k)|^2 - |b(k)|^2 = 1 , \quad (12.16)$$

т.е. матрица перехода унимодулярна:

$$\boxed{\det T(k) = 1} . \quad (12.17)$$

Величины  $a^{-1}(k)$  и  $b(k)a^{-1}(k)$  - это коэффициенты прохождения и отражения для волны, падающей на потенциал  $u(x)$  справа, т.к. асимптотика СФ  $\varphi(x, k)a^{-1}(k)$  при  $x \rightarrow +\infty$ :

$$\frac{\varphi(x, k)}{a(k)} = e^{-ikx} + \frac{b(k)}{a(k)} e^{ikx} + o(1) , \quad (12.18)$$

т.е. представляет собой суперпозицию падающей -  $e^{-ikx}$  и отраженной -  $b a^{-1} e^{ikx}$  волн.

На другом конце прямой  $x$ :

$$\frac{\varphi(x, k)}{a(k)} = \frac{e^{-ikx}}{a(k)} + o(1) , \quad (12.19)$$

т.е. имеем прошедшую волну. Иными словами

$$\begin{cases} t(k) = a^{-1}(k) \\ r(k) = b(k) a^{-1}(k) \end{cases} , \quad (12.20)$$

где  $t(k)$  - амплитуда рассеяния вперед, а  $r(k)$  - назад.

Из (12.16) следует, что рассеяние унитарно, т.е.

$$|t(k)|^2 + |r(k)|^2 = 1. \quad (12.21)$$

Известно, что  $t(\lambda)$  является аналитической функцией энергии  $\lambda$  на физическом листе римановой поверхности  $\sqrt{\lambda}$  ( $\text{Im}\lambda > 0$ ), за исключением точек дискретного спектра  $\lambda = \lambda_n$ , в которой амплитуда имеет простые полюсы (риманова поверхность - название одномерного комплексного дифференцируемого многообразия).

Амплитуда рассеяния вперед не обращается в нуль на физическом листе. Для функции  $a(k)$  это означает, что  $a(k)$  аналитична в верхней полуплоскости  $k$  и имеет простые нули в точках  $k_n = i\kappa_n$ ,  $\kappa_n^2 = -\lambda_n$ .

$$a(k) \xrightarrow[k \rightarrow \infty]{} 1, \quad \text{Im}k \geq 0. \quad (12.22)$$

Это важные аналитические свойства диагональных матриц перехода.

### Схема интегрирования уравнения Кортевега-де Фриза методом обратной задачи рассеяния

Возникновение обратной задачи рассеяния связано с наблюдением Гарнера, Грина, Крускала и Миуры (ГГКМ).

Рассмотрим уравнение Шредингера

$$-\frac{d^2 f}{dx^2} + u(x, t) f = k^2 f, \quad (12.23)$$

с убывающим на бесконечности потенциалом  $u(x)$ . Для определенности под  $f$  будем понимать какое-нибудь специальное решение задачи (12.23), например, задаваемое асимптотикой:

$$f(x, k) = e^{-ikx} + o(1); \quad x \rightarrow -\infty. \quad (12.24)$$

Если потенциал в уравнении (12.23) зависит от дополнительного параметра  $t$  (времени), то  $\varphi(x, k)$  тоже приобретает зависимость от времени  $t$ .

Также как и данные рассеяния, асимптотика  $\varphi(x, k)$  на  $+\infty$  по  $x$  имеет вид:

$$\varphi(x, k) = a(k, t) e^{-ikx} + b(k, t) e^{ikx} + o(1). \quad (12.25)$$

В случае произвольной зависимости  $u(x, t)$  от  $t$  найти зависимость данных рассеяния от  $t$  невозможно. Но если  $u(x, t)$  меняется во времени как решение уравнения Кортевега-де Фриза

$$u_t - 6u u_x + u_{xxx} = 0, \quad (12.26)$$

то  $a(k, t)$  и  $b(k, t)$  подчиняются уравнениям ГГКМ:

$$\dot{a}(k) = 0; \dot{b}(k, t) = 8ik^3b(k, t), \quad (12.27)$$

а зависимость  $\varphi(x, k)$  от  $t$  дается уравнением:

$$\dot{\varphi}(x, k) = -A\varphi(x, k) + 4ik^3\varphi(x, k), \quad (12.28)$$

где оператор  $A$ :

$$A = 4\frac{d^3}{dx^3} - 3\left(u\frac{d}{dx} + \frac{d}{dx}u\right). \quad (12.29)$$

Верно и обратное утверждение: если данные рассеяния меняются во времени как решения ГГКМ (Гарденера, Грина, Крускала и Миуры), то потенциал  $u(x)$  (однозначно ими определяемый) удовлетворяет уравнению Кортевега-де Фриза.

Простейший способ в этом убедиться - заметить, что уравнение Кортевега-де Фриза тождественно для операторов  $L = -\frac{d^2}{dx^2} + u$  и  $A$  (см. выше):

$$\dot{L} = [L, A] - \text{пара Лакса}. \quad (12.30)$$

Действительно,  $\dot{L}$  есть оператор умножения на  $u_t$ , а коммутатор  $[L, A]$  является оператором умножения на  $3uu_x - u_{xxx}$ , так что (12.30) совпадает с уравнением Кортевега-де Фриза. Это представление эволюционных уравнений называется представлением Лакса.

Следствием этого представления является независимость собственных чисел оператора  $L$  от времени, так как ввиду антисимметричности  $A$  в  $L_2(R)$ , оператор  $L(t)$  унитарно эквивалентен  $L(0)$ .

Таким образом, СЗ  $L$  суть интегралы уравнения Кортевега-де Фриза.

Рассмотрим теперь уравнение Шредингера (12.23) и продифференцируем его по времени:

$$\dot{L}f + L\dot{f} = k^2\dot{f} \left( \frac{dk^2}{dt} = 0 \right), \quad (12.31)$$

откуда с учетом (12.30) получим:

$$(L - k^2)(\dot{f} + Af) = 0, \quad (12.32)$$

т.е.  $\dot{f} + Af$  является СФ  $L$  с теми же СЗ, что и  $f$ . Обозначим  $\tilde{f} = \dot{f} + Af$ , откуда следует:

$$(L - k^2)\tilde{f} = 0. \quad (12.33)$$



Ранее мы фиксировали  $f$  ее асимптотикой на  $-\infty$  по  $x$ :  $f = \varphi(x, k)$ . Это однозначно определяет решение  $\tilde{f}$ : асимптотика  $f$  при  $x \rightarrow -\infty$  не зависит от времени и имеет вид  $e^{-ikx}$ , следовательно,

$$\dot{f} + Af \longrightarrow 4ik^3 e^{-ikx}, \quad (12.34)$$

т.е.

$$\boxed{\tilde{f} = 4ik^3 e^{-ikx} + o(1)}, \quad x \rightarrow -\infty, \quad (12.35)$$

или

$$\tilde{f} = 4ik^3 \varphi(x, k). \quad (12.36)$$

Таким образом уравнение  $\tilde{f} = \dot{f} + Af$ ,  $(L - k^2)\tilde{f} = 0$  совпадает с

$$\dot{\varphi}(x, k) = -A\varphi(x, k) + 4ik^3 \varphi(x, k). \quad (12.37)$$

Уравнения же ГГКМ являются немедленным следствием

$$\dot{\varphi}(x, k) = -A\varphi(x, k) + 4ik^3 \varphi(x, k) \quad (12.38)$$

и определения данных рассеяния

$$\varphi(x, k) = a(k, t) e^{-ikx} + b(k, t) e^{ikx} + o(1). \quad (12.39)$$

Устремляя  $x \rightarrow \infty$  в (12.38) и полагая  $u(x) = 0$ :

$$\dot{a}e^{-ikx} + \dot{b}e^{ikx} = \left( -4 \frac{d^3}{dx^3} + 4ik^3 \right) (ae^{-ikx} + be^{ikx}), \quad (12.40)$$

т.е. уравнения ГГКМ.

Также решается задача об эволюции во времени в дискретном спектре  $\varkappa_n(t); b_n(t); n = 1, \dots, N$ . Как уже выяснилось, СЗ  $\lambda_n = -\varkappa_n^2$  не зависит от времени, так как  $L(t)$  эквивалентно  $L(0)$ .

Этот же результат извлекается из уравнения  $\dot{a}(k) = 0$ :  $i\varkappa_n$  являются нулями не зависящей от времени аналитической функции  $a(k)$ , т.е.  $\dot{\varkappa}_n = 0$ . Зависимость  $b_n(t)$  находится из уравнения:

$$\dot{\varphi}(x, k) = -A\varphi(x, k) + 4ik^3 \varphi(x, k), \quad (12.41)$$

так как  $b_n$  по определению является коэффициентом в асимптотическом разложении:

$$\varphi(x, i\varkappa_n) = b_n(t) e^{-\varkappa_n x} + o(e^{-\varkappa_n x}), \quad x \rightarrow +\infty. \quad (12.42)$$

Подставляя эту асимптотику в (12.41) при  $k = i\kappa_n$ :

$$\dot{b}_n = 8\kappa_n^3 b_n . \quad (12.43)$$

Итак, эволюция данных рассеяния во времени

$$s(t) = \left\{ r(k, 0) e^{8ik^3 t}, \kappa_n, b_n e^{8\kappa_n^3 t}, n = 1, \dots, N \right\} . \quad (12.44)$$

Фактически мы проинтегрировали уравнение Кортевега-де Фриза путем (неявной) замены переменных  $u(x) \rightarrow s$ . В новых переменных уравнение движения

$$\dot{s} = F(s) , \quad (12.45)$$

превратилось в совокупность тривиально интегрируемых дифференциальных уравнений. Обращение замены  $s(t) \rightarrow u(x, t)$  дает решение уравнения Кортевега-де Фриза.

Таким образом схема решения задачи Коши для уравнения Кортевега-де Фриза:

$$u(x, 0) \xrightarrow{I} s(0) \xrightarrow{II} s(t) \xrightarrow{III} u(x, t) . \quad (12.46)$$

Представленные в (12.46) шаги можно описать следующим образом:

- I вычисление данных рассеяния  $s(0)$  по начальному условию  $u(x, t) \Big|_{t=0} = u(x, 0)$  с помощью решения уравнений на СФ оператора Шредингера с потенциалом  $u(x, 0)$ ;
- II решение задачи Коши в терминах данных рассеяния. Ее общее решение дается формулами (12.44);
- III указываем потенциал  $u(x, t)$  в операторе Шредингера, имеющий  $s(t)$  в качестве данных рассеяния - т.е. решить обратную задачу рассеяния.

Несмотря на то, что общее аналитическое решение как прямой, так и обратной задачи рассеяния отсутствует, последовательное применение метода позволяет исследовать решения уравнения Кортевега-де Фриза с той же степенью подробности, что и решения линейного уравнения в частных производных. Мы сможем получить множество весьма точных решений уравнения Кортевега-де Фриза, а также описать явными формулами асимптотику общего решения  $u(x, t)$ ,  $t \rightarrow \infty$  задачи Коши непосредственно в терминах начальных данных. То есть все, что можно сделать в линейных задачах.

## Семинар 13. Гребенка Дирака вниз. Задачи на квазиклассическое приближение

### Гребенка Дирака вниз

На предыдущем семинаре была рассмотрена задача на модель решетки, представляющую собой гребенку Дирака. Так, был рассмотрен ее простейший вариант, когда гребенка была направлена вверх с постоянным расстоянием  $a$  между стенками. Теперь же решим аналогичную задачу с одной лишь только разницей в том, что гребенка будет направлена вниз (см. рис. 13.1).

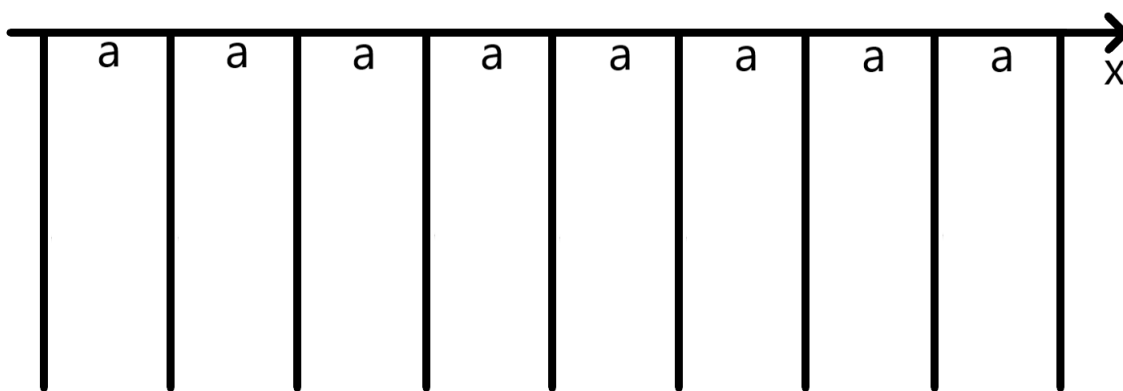


Рис. 13.1. Гребенка Дирака, направленная вниз

Для рассматриваемого случая потенциал гребенки Дирака может быть записан в виде

$$V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Omega \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na) . \quad (13.1)$$

Формально, с точки зрения общих свойств уравнения Шредингера спектр снизу является неограниченным, так как  $\delta$ -функции уходят на  $-\infty$ . Однако возникает вопрос устройства нижних энергетических зон.

Введем следующую параметризацию для нижних энергетических зон

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m} \varkappa^2 . \quad (13.2)$$

Далее запишем дисперсионное уравнение, аналогичное (11.28), осуществив замену  $q \rightarrow i\varkappa$ :

$$\cos Ka = \cosh \varkappa a - \frac{\Omega}{2\varkappa} \sinh \varkappa a . \quad (13.3)$$

Для того чтобы исследовать расположение нижних зон в данном случае необходимо осуществить оценку по модулю на правую часть дисперсионного уравнения (13.3).

Для гиперболических функций известны следующие соотношения:

$$\begin{cases} \cosh(x \pm y) = \cosh x \cosh y \pm \sinh x \sinh y \\ \sinh(x \pm y) = \sinh x \cosh y \pm \cosh x \sinh y . \end{cases} \quad (13.4)$$

Из уравнения (13.3) легко заметить, что в данной задаче будет необходимо рассматривать два случая. Записав известное тождество

$$\cosh^2 x - \sinh^2 x = 1 , \quad (13.5)$$

можно увидеть, что необходимо учитывать величину отношения  $\frac{\Omega}{2\kappa}$ .

Рассмотрим случай, когда  $\frac{\Omega}{2\kappa} > 1$ . Тогда

$$\begin{aligned} \cosh(\kappa a) - \frac{\Omega}{2\kappa} \sinh(\kappa a) &= \sqrt{\left(\frac{\Omega}{2\kappa}\right)^2 - 1} \cdot \\ \cdot (\cosh(\kappa a) \sinh(\xi) - \sinh(\kappa a) \cosh(\xi)) . \end{aligned} \quad (13.6)$$

Воспользовавшись формулой разности гиперболического синуса из (13.4) получим, что

$$\cos(Ka) = \sqrt{\left(\frac{\Omega}{2\kappa}\right)^2 - 1} \sinh(\xi - \kappa a) . \quad (13.7)$$

Условием существования решения уравнения (13.7) является выполнение неравенства

$$\left| \sqrt{\left(\frac{\Omega}{2\kappa}\right)^2 - 1} \sinh(\xi - \kappa a) \right| \leq 1 . \quad (13.8)$$

Из этого следует, что

$$|\sinh(\xi - \kappa a)| \leq \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{\Omega}{2\kappa}\right)^2 - 1}} . \quad (13.9)$$

При этом важно помнить, что

$$\text{th } \xi = \frac{2\kappa}{\Omega} \leq 1 . \quad (13.10)$$

Далее будет исследовать неравенство (13.9). Учтем, что  $\kappa a$  не может превосходить величину  $\frac{\Omega a}{2}$ , однако данное условие является далеко не таким простым, каким оно

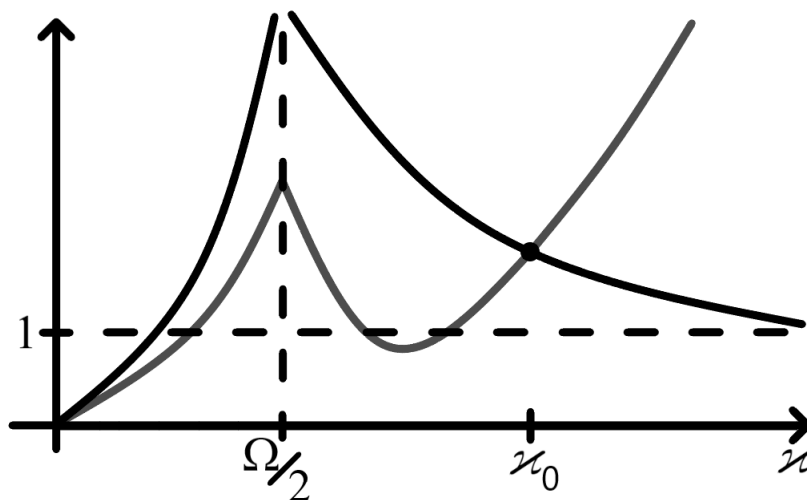


Рис. 13.2. Графическое решение задачи на гребенку Дирака, направленную вниз может казаться на первый взгляд. Для наглядности будем решать задачу графически (см. рис. 13.2).

В случае, когда  $\varkappa \rightarrow 0$ ,  $\text{th } \xi \rightarrow 0$  и  $\xi \rightarrow 0$ , при этом правая часть неравенства также будет стремиться к нулю, поэтому очень важно понять, какая из частей неравенства будет больше. Учитывая равенство в (13.10), распишем гиперболический синус следующим образом:

$$\sinh(\xi - \varkappa a) \rightarrow \frac{2\varkappa}{\Omega} - \varkappa a < \frac{2\varkappa}{\Omega}. \quad (13.11)$$

Из этого следует, что гиперболический синус в нуле будет идти ниже выражения с корнем.

Далее рассмотрим случай, когда  $\varkappa = \frac{\Omega}{2}$ . Каждая из частей неравенства (13.9) будет иметь сингулярность. Для правой части неравенства это объясняется тем, что если  $2\varkappa \rightarrow \Omega$ , то  $\text{th } \xi \rightarrow 1$ , что происходит при  $\xi \rightarrow \infty$ . Тогда при стремлении  $\varkappa \rightarrow \frac{\Omega}{2}$  обе части неравенства устремятся к бесконечности, вследствие чего их асимптотическое поведение снова необходимо исследовать более подробно, чтобы понять, какая из функций будет иметь большее значение вблизи рассматриваемой точки.

Так, рассмотрим правую часть неравенства. Так как в данном случае  $\xi \rightarrow \infty$ , то, поскольку  $a$  конечно, его можно опустить:

$$\sinh \xi = \frac{\text{th } \xi}{\sqrt{1 - \text{th}^2 \xi}}. \quad (13.12)$$

Таким образом, получаем

$$\sinh \xi \longrightarrow \frac{\frac{2\kappa}{\Omega}}{\sqrt{1 - \left(\frac{2\kappa}{\Omega}\right)^2}} = \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{\Omega}{2\kappa}\right)^2 - 1}} = \frac{1}{2} e^{\xi}. \quad (13.13)$$

При записи последнего равенства в (13.13) было учтено, что при больших значениях  $\xi$  можно пренебречь слагаемым  $e^{-\xi}$ , которое возникает, если представить гиперболический синус через экспоненты.

Далее запишем левую часть неравенства (13.9) в более аккуратном виде:

$$\sinh(\xi - \kappa a) \longrightarrow \frac{1}{2} e^{\xi - \kappa a} = e^{-\kappa a} \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{\Omega}{2\kappa}\right)^2 - 1}}. \quad (13.14)$$

Важно заметить, что корень из последнего равенства в (13.14) был взят из равенства в (13.13).

Заменяя гиперболический синус на итоговое выражение, полученное в (13.14), сравним правую и левую части неравенства (13.9), после чего сразу станет видно, что левая часть на графике, изображенном на рис. 13.2, будет идти ниже, или опаздывать, что подтверждает выполнение неравенства. Таким образом, в рассмотренной области мы имеем разрешенную энергетическую зону.

Далее найдем запрещенную энергетическую зону, а также ответим на вопрос, почему она может возникать в такой системе. Существование запрещенной зоны может быть объяснено наличием бесконечного набора  $\delta$ -функций, каждая из которых имеет связанное состояние с энергией  $\frac{2\kappa}{\Omega}$ . Однако в данном случае связанных состояний бесконечно много. Благодаря совокупному синфазному действию  $\delta$ -ям, уровни будут опускаться ниже величины  $\frac{2\kappa}{\Omega}$ , то есть в область полностью разрешенной энергетической зоны.

Чтобы найти запрещенную энергетическую зону необходимо рассмотреть второй случай, когда  $\frac{\Omega}{2\kappa} < 1$ . В этом случае дисперсионное уравнение (13.3) может быть преобразовано следующим образом:

$$\cos(Ka) = \cosh(\kappa a) - \frac{\Omega}{2\kappa} \sinh(\kappa a) = \sqrt{1 - \left(\frac{\Omega}{2\kappa}\right)^2} \cdot (\cosh(\kappa a) \cosh(\xi) - \sinh(\kappa a) \sinh(\xi)). \quad (13.15)$$

Воспользовавшись формулой разности гиперболического косинуса из (13.4), получим, что

$$\cos(Ka) = \sqrt{1 - \left(\frac{\Omega}{2\kappa}\right)^2} \cosh(\kappa a - \xi). \quad (13.16)$$

В этом случае будет действовать замена

$$\operatorname{th} \xi = \frac{\Omega}{2\kappa} . \quad (13.17)$$

Аналогично первому случаю произведем оценку по модулю на правую часть преобразованного дисперсионного уравнения (13.16), в результате чего получим следующее неравенство:

$$|\cosh(\kappa a - \xi)| \leq \frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{\Omega}{2\kappa}\right)^2}} . \quad (13.18)$$

Анализ поведения правой и левой части данного неравенства является существенно проще исследования, проведенного в первом случае, потому что если устремить  $\kappa \rightarrow \infty$  в области справа от точки  $\kappa = \frac{\Omega}{2}$ , то гиперболический косинус будет расти, а выражение с корнем будет стремиться к единице, так как  $\Omega = \text{const}$ . Из этого следует, что при больших значениях  $\kappa$  неравенство (13.18) не будет выполняться. Таким образом, точкой пересечения правой и левой части данного неравенства при  $\kappa_0$  будет являться конец разрешенной зоны (см. рис. 13.2). Данная точка будет также являться решением уравнения

$$\cosh(\kappa_0 a - \xi) = \frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{\Omega}{2\kappa}\right)^2}} . \quad (13.19)$$

**Замечание 13.1.** Факт, что нижняя зона уходит за величину  $\frac{\Omega a}{2}$  вниз, является весьма нетривиальным. Положение начала запрещенной зоны достаточно тяжело решается аналитически, гораздо удобнее решать его численно.

**Упражнение 13.1.** Лектором предлагается самостоятельно проделать задачу со следующим переменным потенциалом:

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \Omega_1 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - 2na) - \frac{\hbar^2}{2m} \Omega_2 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - (2n + 1)a) . \quad (13.20)$$

Графическая интерпретация потенциала к данной задаче представлена на рис. 13.3.

Важно отметить, что стенкам, направленным вверх, соответствует  $\Omega_1$ , а стенкам, направленным вниз, соответствует  $\Omega_2$ . Вопрос задачи заключается в следующем: как в зависимости от соотношения между  $\Omega_1$  и  $\Omega_2$  будут расположены нижние зоны? Прямой аналогией данной задачи является нормальный кристалл, содержащий два типа узлов. Приближение  $\delta$ -потенциалов применяется в случае,

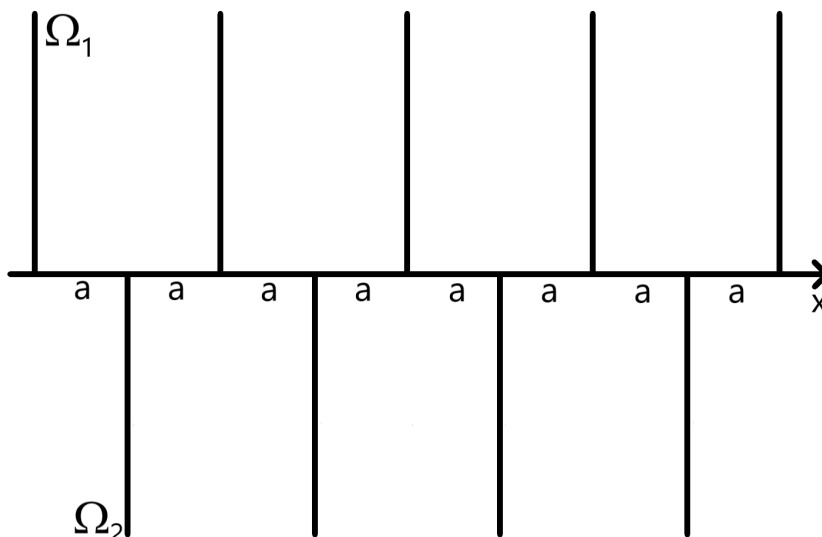


Рис. 13.3. График потенциала, заданного выражением (13.20)

когда можно пренебречь размером узлов по сравнению с постоянной решетки. Лектором также предлагается ответить на вопрос, как в конкуренции между  $\Omega_1$  и  $\Omega_2$  будет вести себя нижняя разрешенная зона, где она окажется?

**Замечание 13.2.** Так, например, в предыдущей задаче нижняя разрешенная зона «сползла» ниже величины  $\frac{\Omega a}{2}$  за счет синфазной работы всех отрицательных  $\delta$ -функций. Очевидно, что когда  $\delta$ -ямы одна, она будет давать уровень на  $-\frac{\Omega a}{2}$ , а если их много, то они, естественно будут опускать уровень ниже.

## Модель Кронига-Пенни

**Упражнение 13.2.** Лектором также предлагается самостоятельно решить задачу на модель Кронига-Пенни, представляющую собой основу всей физики твердого тела (упорядоченные системы). Потенциал такой задачи можно получить из потенциала (13.12), заменив  $\delta$ -функции на прямоугольники. Так, данная модель представляет собой последовательность барьеров и ям (см. рис. 13.4).

Величина  $c$  является периодом решетки,  $a$  - ширина барьера,  $b$  - ширина ямы.

$$c = a + b . \quad (13.21)$$

В отличие от предыдущей задачи, такая модель потенциала имеет ограниченную высоту. Выбор отсчета энергии произволен.



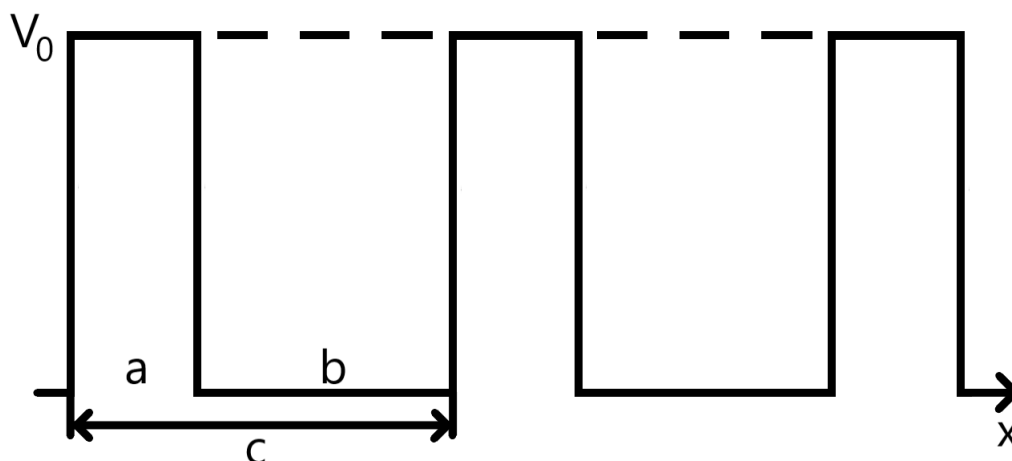


Рис. 13.4. Модель Кронига-Пенни

## Эффект Андерсона

Эффект Андерсона представляется обязательным к изучению на качественном уровне, так как очень важно уметь разбираться с неупорядоченными системами, которые достаточно часто встречаются в реальной жизни. Так, примером может служить всевозможные аморфные тела, а также пластилин, у которого нет ближнего порядка расположения атомов.

Ранее нами уже была изучена задача на  $n$  число  $\delta$ -функций, более того, в этом семинаре была рассмотрена задача на бесконечное число  $\delta$ -функций. Ответим же на вопрос: за счет чего возникают зоны? За счет чего осуществляется просветление оптики? За счет того, что при определенных энергиях в потенциале, состоящем из системы  $\delta$ -функций, представленном на рис. 13.5, в зависимости от энергии или волнового числа, доминирует либо прохождение, либо отражение. В первом случае фаза прохождения и прошедшие волны усиливают друг друга, а отраженные друг друга гасят, приходя в противофазе. В таком случае волны спокойно проходят, и для конечного кристалла будет наблюдаться эффект просветления оптики. Когда же кристалл является бесконечным наблюдается формирование разрешенной зоны. В случае, когда за счет сдвига фаз начинает доминировать отражение, для конечного кристалла наблюдается затемнение оптики, а для бесконечного - формирование запрещенной зоны.

Далее рассмотрим случай, когда потенциал является хаотичным, что соответствует, например, аморфному телу. В силу того, что  $\delta$ -функции расположены произволь-

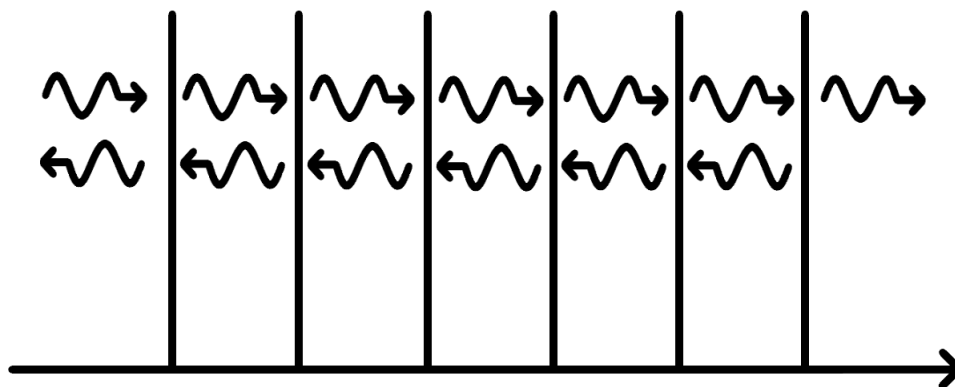


Рис. 13.5. Бесконечное число  $\delta$ -функций

ным образом, будет наблюдаться эффект Андерсона, который заключается в том, что, если «посадить» в данный потенциал частицу при условии того, что эффект будет зависеть от энергии частицы и от того, насколько сильно воздействует на нее потенциал, то частица будет пытаться пройти либо вправо, либо влево, но при этом её фаза прохождения и в ту и в другую сторону за счет аперидичности потенциала будет гаситься, и она, несмотря на то, что потенциал является положительным, окажется в связанном состоянии. При этом стоит заметить, что при высокой энергии частица сможет спокойно вылететь. Для аккуратного описания данного эффекта в таких системах необходимо ввести понятие беспорядка, что требует нетривиального подхода.

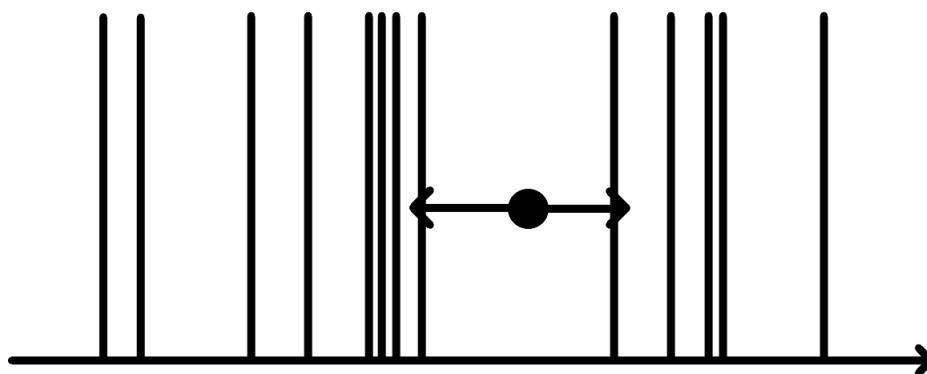


Рис. 13.6. Потенциал, соответствующий аморфному телу

## Квазиклассический метод

Перейдем к квазиклассическому приближению и рассмотрим задачу на осцилляционный потенциал. Как уже было показано ранее, задача на такой потенциал может быть решена абсолютно точно большим числом различных методов.

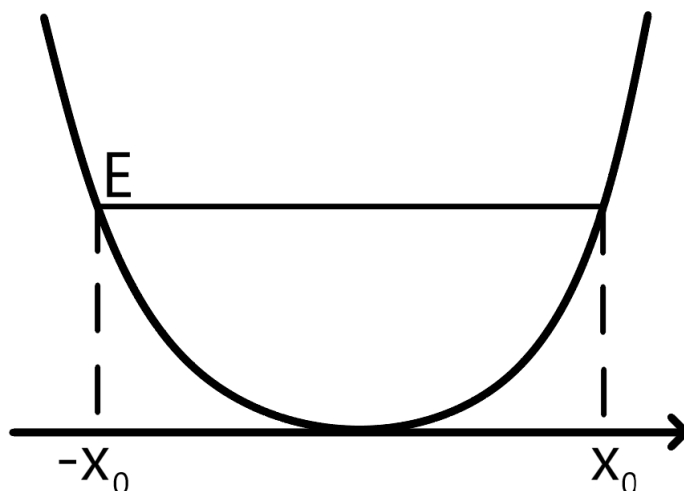


Рис. 13.7. Гармонический осциллятор в квазиклассическом приближении

Напомним, что гамильтониан для такой задачи будет записан в виде

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 . \quad (13.22)$$

Далее зададим в данном потенциале уровень с энергией  $E$ , которая будет равняться следующему выражению:

$$E = \frac{m\omega^2}{2} x_0^2 . \quad (13.23)$$

Запишем для рассматриваемой системы условие квантования Бора-Зоммерфельда для высоковозбужденных состояний:

$$\int_{-x_0}^{x_0} \sqrt{2m(E - V(x))} dx = \pi\hbar \left( n + \frac{1}{2} \right) , \quad (13.24)$$

где в выражении в правой части записано слагаемое  $\frac{1}{2}$ , поскольку потенциал является гладким с обеих сторон.

Подставим  $E$  и  $V(x)$  в (13.24), после чего вычислим интеграл следующим образом:

$$\int_{-x_0}^{x_0} \sqrt{2m \left( \frac{m\omega^2}{2} x_0^2 - \frac{m\omega^2}{2} x^2 \right)} dx = m\omega \int_{-x_0}^{x_0} \sqrt{x_0^2 - x^2} dx . \quad (13.25)$$

Произведем замену  $t = \frac{x}{x_0}$ , в результате чего получим, что

$$m \omega x_0^2 \int_{-1}^1 \sqrt{1-t^2} dt = [t = \sin \varphi] = m \omega x_0^2 \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos^2 \varphi d\varphi. \quad (13.26)$$

Используем формулу косинуса двойного угла для того, чтобы вычислить последний интеграл в (13.26), тогда

$$m \omega x_0^2 \frac{1}{2} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} (1 + \cos 2\varphi) d\varphi = \frac{\pi}{2} m \omega \frac{2E}{m\omega^2} = \frac{\pi E}{\omega} = \pi \hbar \left( n + \frac{1}{2} \right). \quad (13.27)$$

Таким образом, итоговый ответ получится равным

$$E_n = \hbar \omega \left( n + \frac{1}{2} \right). \quad (13.28)$$

**Замечание 13.3.** Как видно из полученного в (13.28) выражения, уровни энергии  $E_n$  совпадают с ответом, который мог бы быть получен для чисто квантового рассмотрения. Даже для низких уровней энергии, для которых действие сопоставимо по порядку величины с  $\hbar$  ответ совпадает, что обусловлено необычными свойствами потенциала гармонического осциллятора.

Далее рассмотрим случай потенциала гармонического осциллятора с бесконечно высокой стенкой в отрицательной области координат. Такой потенциал может быть записан в виде

$$V(x) = \begin{cases} \frac{m\omega^2}{2} x^2, & x > 0 \\ \infty, & x \leq 0. \end{cases} \quad (13.29)$$

Данная задача может быть решена устно, поскольку у потенциала вида (13.29) будут оставаться только нечетные уровни, так как в этом случае будет выполняться условие равенства нулю волновой функции и её производной в точке  $x = 0$ . Таким образом

$$E_n = \hbar \omega \left( 2n + 1 + \frac{1}{2} \right), \quad (13.30)$$

где  $n$  принимает целые значения.

Условие Бора-Зоммерфельда для задачи с потенциалом вида (13.29) может быть переписано в виде

$$\int_0^{x_0} \sqrt{2m(E - V(x))} dx = \pi \hbar \left( n + \frac{3}{4} \right), \quad (13.31)$$

где слагаемое  $\frac{3}{4}$  появляется благодаря тому, что одна стена является гладкой.

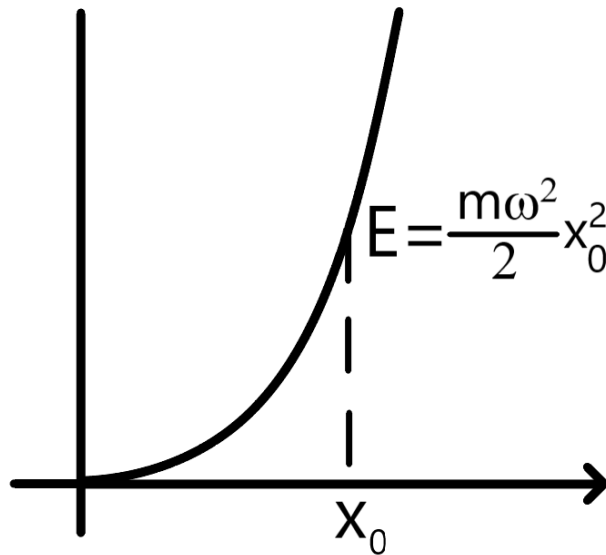


Рис. 13.8. Гармонический осциллятор с бесконечно высокой стенкой при  $x \leq 0$

Процедура вычисления интеграла мало отличается от той, что была проделана выше для обычного потенциала гармонического осциллятора за исключением изменения нижнего предела интегрирования:

$$\begin{aligned} \int_0^{x_0} \sqrt{2m \dots} \rightarrow m \omega x_0^2 \frac{1}{2} \int_0^{\pi/2} (1 + \cos 2\varphi) d\varphi = \\ = m \omega x_0^2 \frac{\pi}{4} = m \omega \frac{2E}{m\omega^2} \frac{\pi}{4} = \pi \hbar \left( n + \frac{3}{4} \right) . \end{aligned} \quad (13.32)$$

Из (13.32) получим окончательное выражение для уровней энергии рассматриваемой ямы:

$$E_n = \hbar \omega \left( 2n + \frac{3}{2} \right) . \quad (13.33)$$

## Семинар 14. Dancing Ball. Трехмерные задачи квантовой механики

### Dancing Ball

Рассмотрим задачу, которая называется задачей на танцующий шарик (Dancing Ball) (рис. 14.1).

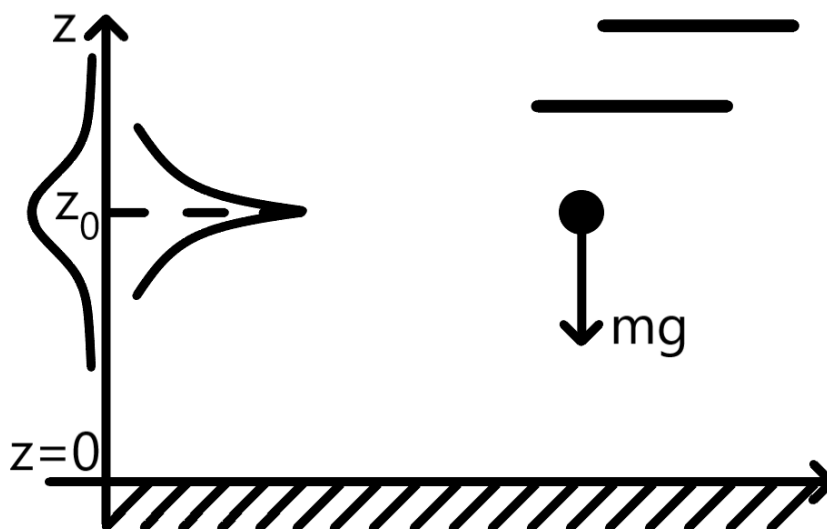


Рис. 14.1. Задача про танцующий мячик

Пусть над поверхностью абсолютно жесткого стола с помощью атомной иглы помещается шарик массой  $m$ . Этот шарик не является электроном или даже протоном, а представляет собой сложную молекулярную структуру (например, фуллерен). С очевидностью, данный объект является квантовым. На шарик будет действовать сила тяжести  $mg$ , а его потенциальная энергия на высоте  $z_0$  будет равна

$$E = mgz_0 . \quad (14.1)$$

**Замечание 14.1.** *Приближение абсолютно жесткого стола является идеализацией, поскольку ни один реально существующий шарик не будет испытывать абсолютно упругое столкновение со столом. Причин для этого несколько: во-первых, при столкновении шарик и поверхность стола будут деформироваться, во-вторых, при приближении к поверхности стола шарик может образовывать химические связи с материалом стола, а также испытывать силу трения.*

Поэтому если подобрать условия так, чтобы свести образование химических связей к минимуму, то на некотором временном интервале удар можно будет считать абсолютно упругим.

Далее исследуем, что будет с шариком, если отпустить его на высоте  $z_0$  от поверхности стола. В данном случае в классической механике, с очевидностью, шарик при абсолютно упругом ударе будет отскакивать от поверхности стола на ту же самую высоту, с которой его отпустили, однако в квантовом же исход будет иной. Так, в квантовом случае мы будем иметь дело с задачей на стационарные состояния в потенциале, изображенном на рис. 14.2.

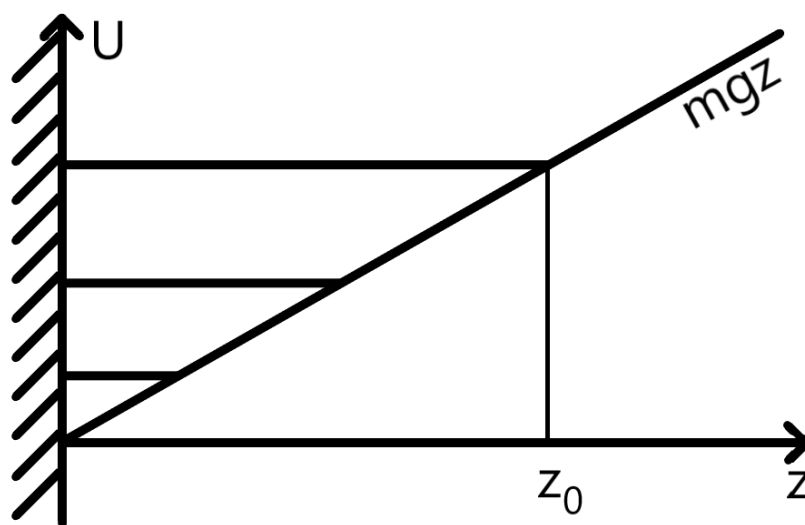


Рис. 14.2. Вид потенциала задачи

Потенциал линейно зависит от высоты  $z$ . Как видно из рис. 14.2, он имеет разрешенную область, в которой будут находиться дискретные уровни, а также и запрещенную область, в которую частицы могут туннелировать.

Задача может быть решена точно путем решения уравнения Шредингера в разрешенной и запрещенной областях и последующей сшивке волновых функций в точках  $z = 0$  и на границе прямой  $U = mgz$ . Для нашего же рассмотрения будет достаточно воспользоваться квазиклассическим приближением для случая, когда одна из стенок является вертикальной, поскольку реальные шарики, на которых можно провести эксперимент для данной задачи, представляют собой фуллерены  $C_{720}$  или  $C_{540}$ , для которых с хорошей степенью точности выполняется квазиклассическое приближение. Исходя из этого, условие на уровне энергии шарика и, соответственно, на

высоты, на которых он может стационарно колебаться, может быть записано в виде

$$\int_0^{z_0} \sqrt{2m(E - mgz)} dz = \pi \hbar \left( n + \frac{3}{4} \right), \quad (14.2)$$

где выражение в правой части представляет собой формулу Бора-Зоммерфельда для случая, когда одна из стенок является бесконечно высокой. Данная формула уже была получена нами ранее.

Подставим вместо  $E$  в (14.2) выражение (14.1) и получим

$$\int_0^{z_0} \sqrt{2m(mgz_0 - mgz)} dz = m \sqrt{2g} \int_0^{z_0} \sqrt{z_0 - z} dz. \quad (14.3)$$

Произведем в (14.3) замену переменных  $z = z_0 t$  и тогда получим, что

$$m \sqrt{2g} z_0^{\frac{3}{2}} \int_0^1 \sqrt{1-t} dt = m \sqrt{2g} z_0^{\frac{3}{2}} \frac{2}{3}. \quad (14.4)$$

Выразим из (14.1)  $z_0$ . Тогда:

$$m \sqrt{2g} \left( \frac{E}{mg} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{2}{3} = \frac{2}{3} g \sqrt{\frac{m}{2}} = \pi \hbar \left( n + \frac{3}{4} \right). \quad (14.5)$$

Стоит помнить, что в отличие от случая задачи на гармонический осциллятор для обоснованности использования квазиклассического приближения необходимо, чтобы выполнялось условие  $n \gg 1$ . Тогда окончательный ответ для энергии уровней дискретного спектра будет иметь вид:

$$E_n = \left[ \frac{3}{2} g \sqrt{\frac{m}{2}} \pi \hbar \left( n + \frac{3}{4} \right) \right]^{\frac{2}{3}}. \quad (14.6)$$

**Замечание 14.2.** Лектором предлагается решить данную задачу точно, так как это уже было прописано ранее. В результате получится трансцендентное уравнение на определение значений энергии дискретных уровней. Затем же через предел  $n \gg 1$  можно убедиться в совпадении значений энергии с теми, что получаются по формуле (14.6).

После того, как нам удалось найти уровни энергии, мы можем определить и собственные векторы гамильтониана. В квазиклассическом приближении эти функции будут представлять собой синус в разрешенной области и убывающую экспоненту в запрещенной.

Если поместить шарик на такую высоту, что энергия шарика будет в точности совпадать с энергией уровня, то шарик будет постоянно находиться в стационарном



состоянии. В случае же, если энергия шарика не будет соответствовать энергии уровня, необходимо описывать шарик волновым пакетом, который можно представить в виде

$$\psi(z, 0) = \sum a_n \varphi_n(z) , \quad (14.7)$$

где нулевой аргумент функции  $\psi$  соответствует  $t = 0$ , т. е. моменту времени, когда шарик отстреливается от атомной иглы. Разложение волнового пакета представляет собой сумму по базису дискретного спектра, поскольку потенциальная яма представляет собой клин с бесконечно высокими стенками, в следствие чего спектр является чисто дискретным.

**Замечание 14.3.** *Функции  $\varphi_n$  представляют собой собственные функции задачи*

$$H \varphi_n = E_n \varphi_n . \quad (14.8)$$

Если отстреливать шарик достаточно высоко, то нижние уровни энергии, которые не удовлетворяют квазиклассическому приближению, будут присутствовать в разложении (14.7) с пренебрежимо малыми коэффициентами. Так, средняя величина  $H$  для рассматриваемого случая будет равна

$$\bar{H} = \int_0^\infty z |\psi(z, 0)|^2 dz , \quad (14.9)$$

где волновой пакет  $\psi(z, 0)$  является нормированным:

$$\int_0^\infty dz |\psi(z, 0)|^2 = 1 . \quad (14.10)$$

**Замечание 14.4.** *Атомная игла позволяет захватывать молекулы разного рода, а также и молекулярные структуры, такие, как, например, фуллерен за счет того, что на конце атомной иглы создастся очень большая напряженность, такая, что игла своим потенциалом будет оттягивать на себя электронную плотность (порядок величины потенциала  $\gtrsim 10^6 \frac{B}{cm}$ ).*

*Для того чтобы снять молекулу с атомной иглы, необходимо прекратить подачу напряжения.*

*Обычно на иглу подается потенциал в 1 В или меньше, однако за счет того, что игла устроена по принципу последнего атома, на её конце возникнет очень большой потенциал.*

Далее проанализируем, что будет происходить, если с помощью атомной иглы отпустить шарик на высоте  $z_0$  с учетом написанных ранее соображений. Поскольку

с большой долей вероятности шарик не попадет по энергии в свое стационарное состояние, то состояние шарика будет описываться (14.7), а, как известно, в эволюции волновой пакет будет расплываться и вести себя по спадающему закону. Следовательно, при измерении мы будем регистрировать положение шарика то выше, то ниже. В таком случае на высоте выше той, с которой был отпущен шарик, расположим уловитель, на который нанесем специальный молекулярный клей, который в зависимости от напряжения может либо поймать шарик, приклеив его к себе, либо не приклеить вовсе, и с некоторой ненулевой вероятностью поймает наш шарик. Далее с помощью атомной иглы захватим шарик, после чего уберем уловитель и отпустим шарик с высоты, на которой стоял уловитель. После этого снова установим уловитель, однако в уже на высоте выше исходной. Прodelывая данную операцию снова и снова, мы сможем увеличить потенциальную энергию шарика, не потратив при этом никакой энергии.

На самом деле это не так, поскольку атомная игла подключена к классическому источнику энергии, который является бесконечно огромным по сравнению с рассматриваемой системой. Когда мы захватываем шарик, мы добавляем ему энергию, и в этот момент работает классический прибор, который спрятан за иглой. Далее происходит «отстрел» шарика, в результате чего возникает квантовая сила между иглой и шариком, которую мы можем представить в виде оператора. При этом в зависимости от того, какое значение принимает этот оператор, шарик полетит либо выше, либо ниже за счет передачи или забора энергии через отталкивающую силу классическим источником энергии. Следовательно, задачу лучше интерпретировать в виде ансамбля из  $N$  одинаковых шариков с  $N$  одинаковыми приборами, и в каждом из элементов ансамбля одновременно отстреливать шарик и рассматривать уже полное распределение шариков, которое будет соответствовать распределению вероятности обнаружить то или иное собственное значение оператора квантовой силы.

Для корректного описания данной системы необходимо использовать матрицу плотности, поскольку, как уже было оговорено ранее, атомная игла устроена таким образом, что при движении от последнего атома иглы с каждым новым слоем ток распределяется между все большим и большим числом атомов, после чего система переходит из квантовой в классическую. Именно поэтому разделить систему на квантовую и классическую части нельзя.

## Трехмерная сферически симметричная потенциальная яма конечной глубины

Рассмотрим задачу на потенциал вида

$$V(r) = -V_0 \theta(a - r) , \quad (14.11)$$

где  $\theta(a - r)$  - функция Хевисайда, такая что при  $r \leq a$  функция равна единице, а при  $r > a$  - нулю.

Задача на потенциал (14.11) представляет собой задачу на сферическую потенциальную яму. Её решение тривиально, при условии грамотного задания начальных условий. Сразу же запишем задачу в терминах функции  $u = rR$  с начальным условием  $u(0) = 0$ , поскольку нас интересуют связанные состояния:

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} u'' + V_{\text{eff}} u = -\frac{\hbar^2}{2m} \varkappa^2 u \\ u(0) = 0 , \end{cases} \quad (14.12)$$

где  $V_{\text{eff}}$  записывается в виде

$$V_{\text{eff}} = V(r) + \frac{\hbar^2}{2mr^2} l(l+1) . \quad (14.13)$$

В силу того, что нас интересуют нижние уровни ямы, которые соответствуют нулевой центробежной энергии, будем рассматривать случай  $l = 0$ , который соответствует так называемой s-волне:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} u'' + V u = -\frac{\hbar^2}{2m} \varkappa^2 u . \quad (14.14)$$

В таком случае задача «совпадет» с задачей для одномерного уравнения Шредингера с бесконечно высокой потенциальной стенкой в точке  $r = 0$ . В таком случае решение будет представлять собой нечетную серию уровней, поскольку волновая функция будет равна нулю в точке  $r = 0$ . Условием появления в яме хотя бы одного уровня будет являться выражение:

$$k_0 a \leq \frac{\pi}{2} . \quad (14.15)$$

Величина  $k_0$  в таком случае вводится как параметризация  $V_0$ :

$$V_0 = \frac{\hbar^2}{2m} k_0^2 . \quad (14.16)$$

Так, если выразить из (14.16)  $k_0$ , а затем подставить его в (14.15) и возвести в квадрат, получим условие

$$\frac{2m V_0 a^2}{\hbar^2} \geq \left(\frac{\pi}{2}\right)^2 . \quad (14.17)$$

## Сферическая оболочка

Далее рассмотрим задачу на сферическую полупрозрачную оболочку с потенциалом вида:

$$V(r) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Omega \delta(r - a) . \quad (14.18)$$

Такая сферическая оболочка может создавать связанные состояния и является моделью простейшего фуллера. При этом толщиной углеродного слоя мы пренебрегаем, считая что фуллерен является достаточно большим по размерам (например,  $C_{540}$  или  $C_{720}$ ).

Задача является схожей с одномерной задачей на две дельта-ямы, расположенные в точках  $x = a$  и  $x = -a$  (рис. 14.3)

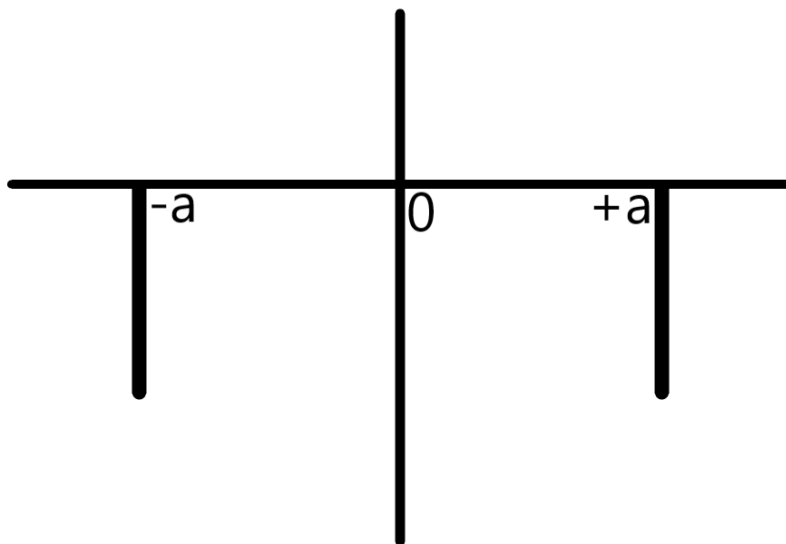


Рис. 14.3. Одномерная задача на две дельта-ямы

Потенциал, изображенный на рис. 14.3 может быть записан в виде

$$V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Omega [\delta(x + a) + \delta(x - a)] . \quad (14.19)$$

Нечетное решение для такого случая существует при  $\Omega a > 1$ . Возвращаясь к трехмерному случаю, получим задачу на дельта-яму в точке  $r = a$  с бесконечно высокой стенкой в  $r = 0$ . Такая задача ничем не отличается от задачи на две дельта-ямы. Бесконечно высокая стенка в нуле требует наличия начального условия  $u(0) = 0$ , которое означает, что необходимо искать нечетный уровень одномерной задачи на две дельта-ямы. При этом условие наличия уровня в трехмерной яме будет записываться как  $\Omega a > 1$ .

## Задача на кулоновский потенциал с технической добавкой

Рассмотрим задачу на потенциал вида

$$V(r) = -\frac{\alpha}{r} - \frac{\beta}{r^2}, \quad (14.20)$$

где  $\alpha$  и  $\beta$  - некоторые константы.

Для потенциала (14.20) задача на радиальную часть в общем виде может быть записана как

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} u'' + \left( \frac{\hbar^2}{2mr^2} l(l+1) - \frac{\alpha}{r} - \frac{\beta}{r^2} \right) u = E u \\ u(0) = 0. \end{cases} \quad (14.21)$$

Задача (14.21) может быть решена для любого  $l$ . Объединим слагаемые с  $\frac{1}{r^2}$  с помощью введения величины  $s$  такой, что

$$s(s+1) = l(l+1) - \frac{2m\beta}{\hbar^2}. \quad (14.22)$$

Очевидно, что при таком способе введения величина  $s$  оказывается равной

$$s = -\frac{1}{2} + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - \frac{2m\beta}{\hbar^2}}, \quad (14.23)$$

где помимо решения с плюсом, перед корнем может возникать также решение и с минусом, однако оно не будет нам подходить, поскольку необходимо, чтобы при  $\beta = 0$  величина  $s$  совпадала с  $l$ .

Таким образом, после замены (14.22) первое уравнение из системы (14.21) можно переписать следующим образом:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} u'' + \left( \frac{\hbar^2}{2mr^2} s(s+1) - \frac{\alpha}{r} \right) u = E u. \quad (14.24)$$

Далее необходимо выполнить процедуру обезразмеривания и перейти к естественным параметрам. Поскольку величина  $\alpha$  соответствует величине  $Ze^2$ , то можно ввести аналог боровского радиуса по формуле

$$a = \frac{\hbar^2}{m\alpha}. \quad (14.25)$$

Для энергии же, поскольку мы пытаемся найти дискретные уровни, будет возникать знак минус, в результате чего выражение для энергии будет представлено в виде

$$E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2} \gamma^2. \quad (14.26)$$

После выполнения обезразмеривания необходимо сделать замену

$$\rho = r/a . \quad (14.27)$$

Таким образом, мы осуществили переход от размерного радиуса к безразмерному. В таком случае можем преобразовать уравнение (14.24) к виду

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{a^2} \frac{\partial^2 u}{\partial \rho^2} + \left( \frac{\hbar^2 s(s+1)}{2ma^2 \rho^2} - \frac{\alpha}{a\rho} \right) u = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2} \gamma^2 u . \quad (14.28)$$

Далее в каждом из слагаемых (14.28) заменим  $a$  на выражение в (14.25), в результате чего получим

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{m^2 \alpha^2}{\hbar^4} \frac{\partial^2 u}{\partial \rho^2} + \left( \frac{\hbar^2 s(s+1)}{2m\rho^2} \frac{m^2 \alpha^2}{\hbar^4} - \frac{\alpha}{\rho} \frac{m\alpha}{\hbar^2} \right) u = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2} \gamma^2 u . \quad (14.29)$$

Упростим выражение (14.29):

$$-\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2} \frac{\partial^2 u}{\partial \rho^2} + \left( \frac{m\alpha^2 s(s+1)}{2\hbar^2 \rho^2} - \frac{m\alpha^2}{\hbar^2 \rho} \right) u = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2} \gamma^2 u . \quad (14.30)$$

Разделим уравнение (14.30) на  $\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}$  и перенесем слагаемое с  $\gamma^2$  в левую часть. Тогда окончательная задача на нахождение функции  $u$  будет иметь вид

$$\begin{cases} u'' + \left( \frac{2}{\rho} - \frac{s(s+1)}{\rho^2} - \gamma^2 \right) u = 0 \\ u(0) = 0 . \end{cases} \quad (14.31)$$

После того, как было получено уравнение (14.31), можно сразу заметить, что его решением будет являться функция Уиттекера, однако мы будем действовать другим способом. Уравнение (14.31) представляет собой дифференциальное уравнение второго порядка с особыми точками в нуле и на бесконечности. Решение данного уравнения будем искать методом Фрабениуса.

Введем асимптотики функции в нуле и на бесконечности. При стремлении  $\rho$  к нулю оставим слагаемое со второй производной и  $\frac{1}{\rho^2}$ :

$$\rho \rightarrow 0 : \quad u'' - \frac{s(s+1)}{\rho^2} u = 0 . \quad (14.32)$$

Решениями уравнения будут являться  $\rho$  в степени  $s+1$  и  $-s$ . Из данных решений необходимо выбрать  $\rho$  со степенью  $s+1$ , поскольку такое решение будет обеспечивать равенство нулю функции  $u(0)$ :

$$u \xrightarrow{\rho \rightarrow 0} \rho^{s+1} . \quad (14.33)$$

Далее разберемся с асимптотикой функции  $u$  на бесконечности. При стремлении  $\rho$  к бесконечности первое уравнение системы (14.31) может быть записано в виде

$$u'' - \gamma^2 u = 0 . \quad (14.34)$$

Решениями (14.34) будут являться возрастающая и убывающая действительные экспоненты. Поскольку на бесконечности функция должна быть ограниченной, то оставим решение с убывающей экспонентой

$$u \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} e^{-\gamma \rho} , \quad (14.35)$$

где величина  $\gamma$  больше нуля.

Таким образом, функцию  $u$  необходимо искать в виде

$$u = \rho^{s+1} e^{-\gamma \rho} f , \quad (14.36)$$

где  $f$  - некоторая функция, которую необходимо найти.

Вычислим вторую производную выражения (14.36) и подставим её в первое уравнение (14.31), после чего сократим на  $\rho^{s+1} e^{-\gamma \rho}$ . Тогда получим, что

$$\begin{aligned} \frac{(s+1)s}{\rho^2} f + \gamma^2 f + f'' - 2 \frac{(s+1)}{\rho} \gamma f + 2 \frac{(s+1)}{\rho} f' - 2 \gamma f' + \\ + \left( \frac{2}{\rho} - \frac{s(s+1)}{\rho^2} - \gamma^2 \right) f = 0 . \end{aligned} \quad (14.37)$$

Упростим выражение (14.37) и получим уравнение на определение функции  $f$ :

$$\rho f'' + (2(s+1) - 2\gamma\rho) f' + (2 - 2\gamma(s+1)) f = 0 . \quad (14.38)$$

Решением уравнения (14.38) является функция Кулмера или конфлюэнтная гипергеометрическая функция, которая появляется во многих задачах атомной и ядерной физики, в которых присутствует кулоновский потенциал.

Далее распишем решение уравнения более подробно. Решение (14.38) можно искать в виде степенного ряда

$$f = \sum_{n=0}^{\infty} f_n \rho^n . \quad (14.39)$$

**Замечание 14.5.** *Степенные ряды очень удобны, поскольку для них есть общее утверждение: если степенной ряд тождественно равен нулю, как функция аргумента  $x$ :*

$$\sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n = 0 , \quad (14.40)$$

то все коэффициенты  $a_n = 0$ . Для доказательства данного утверждения положим  $x = 0$  и получим, что коэффициент  $a_0$  должен быть равен нулю. Далее дифференцируем (14.40) и снова положим, что  $x = 0$ , тем самым получив равенство  $a_1 = 0$  и так далее для всех остальных  $a_n$ .

Подставим (14.39) в (14.38), в результате чего получим уравнение, представляющее собой степенной ряд. Поскольку в правой части уравнения (14.38) стоит нуль, то, в силу замечания 11.5, коэффициенты при  $\rho$  будут равны нулю, следовательно, для степени  $n$  будет выполняться следующее соотношение:

$$\rho^n : n(n+1)f_{n+1} + 2(s+1)(n+1)f_{n+1} - 2\gamma n f_n + (2 - 2\gamma(s+1))f_n = 0. \quad (14.41)$$

Тогда из (14.41) получим соотношение между  $f_{n+1}$  и  $f_n$ :

$$\frac{f_{n+1}}{f_n} = \frac{2\gamma(n+s+1) - 2}{(n+1)(2(s+1) + n)}. \quad (14.42)$$

Далее действуем по рекурсии, доходя до коэффициента  $f_0$ . Как итог, имеем следующее:

$$f_n = \frac{(2\gamma)^n}{n!} \frac{\Gamma\left(n+s+1-\frac{1}{\gamma}\right)}{\Gamma\left(s+1-\frac{1}{\gamma}\right)} \frac{\Gamma(2s+2)}{\Gamma(2s+2+n)}, \quad (14.43)$$

где выражение записано таким образом, что коэффициент  $f_0$  оказывается равным единице. При составлении рекурсивного соотношения стоит помнить важное свойство гамма-функции, которое заключается в том, что  $\Gamma(x+1) = \Gamma(x)x$ .

Таким образом, легко может быть установлена связь между  $f_n$  и  $f_{n+1}$  через соотношение

$$f_{n+1} = \frac{2\gamma}{n+1} \frac{n+s+1-\frac{1}{\gamma}}{2s+2+n} f_n. \quad (14.44)$$

Выражение (14.43) можно переписать в терминах символа Похгаммера, равного по определению

$$(a)_n = \frac{\Gamma(n+a)}{\Gamma(a)}. \quad (14.45)$$

В таком случае с учетом равенства (14.45) получим выражение

$$f_n = \frac{(2\gamma)^n}{n!} \frac{\left(s+1-\frac{1}{\gamma}\right)_n}{(2s+2)_n}. \quad (14.46)$$

Если записывать ответ в терминах конфлюэнтной гипергеометрической функции, то ответ для  $f$  будет записан в виде

$$f = {}_1F_1\left(s+1-\frac{1}{\gamma}, 2s+2, 2\gamma\rho\right), \quad (14.47)$$



где функция  ${}_1F_1$ , по определению равна

$${}_1F_1(\alpha, \gamma, z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha)_n}{(\gamma)_n} \frac{z^n}{n!}. \quad (14.48)$$

При больших значениях величины  $\rho$  в разложении  $f$  главный вклад будут давать старшие степени  $\rho$ , т. е. большие значения  $n$ . Для больших  $n$  наше соотношение между  $f_n$  и  $f_{n+1}$  резко упрощается:

$$\rho \rightarrow \infty : \frac{f_{n+1}}{f_n} \rightarrow \frac{2\gamma}{n+1}. \quad (14.49)$$

Рекуррентное соотношение (14.49) соответствует экспоненциальному ряду. Так, если расписать  $e^{2\gamma x}$  в виде ряда, то получится выражение

$$e^{2\gamma x} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2\gamma)^n}{n!} x^n. \quad (14.50)$$

Таким образом, при больших значениях  $\rho$  функция  $f$  будет представлять собой растущую экспоненту, при подстановке которой в (14.36) видно, что функция  $u$  начинает неограниченно возрастать с ростом  $\rho$ :

$$\rho \rightarrow \infty : f(\rho) \rightarrow e^{2\gamma\rho}. \quad (14.51)$$

Поскольку такой случай не является физическим, то для того, чтобы получить осмысленный ответ, необходимо ограничить степенной ряд так, чтобы, начиная с некоторого номера  $n$ , коэффициенты  $f_n$  обращались в нуль. В таком случае степенной ряд будет превращен в полином  $n$ -ой степени, который с ростом  $\rho$  всегда будет расти медленнее, чем будет убывать экспонента  $e^{-\gamma\rho}$ . В таком случае условием на степенной ряд будет выражение

$$n_r + s + 1 = \frac{1}{\gamma}, \quad (14.52)$$

где  $n_r$  - радиальное квантовое число.

Из уравнения (14.52) выразим величину  $\gamma$  и получим, что

$$\gamma = \frac{1}{n_r + s + 1}, \quad n_r = 0, 1, \dots \quad (14.53)$$

Возведем (14.53) в квадрат и выразим из (14.26) величину  $\gamma$ . Так, получим следующее выражение для энергии

$$E_{n_r l} = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2 (n_r + s + 1)^2}, \quad (14.54)$$

где энергия зависит от двух квантовых чисел  $n_r$  и  $l$ , причем зависимость от  $l$  проявляется через зависимость от  $s$ . В случае, когда  $\beta = 0$ , величина  $s$  совпадет с  $l$ , в результате чего выражение (14.54) будет задавать энергию уровней в атоме водорода.

## Семинар 15. Доклад „Обратная задача рассеяния“

Доклад подготовила Степанова Анастасия Павловна

Матрица перехода  $T(k)$  доставляет нам исчерпывающую информацию о непрерывном спектре оператора Шредингера. Вся информация о  $T(k)$  содержится в коэффициенте отражения:

$$\boxed{r(k) = \frac{b(k)}{a(k)}}. \quad (15.1)$$

Матрица перехода выглядит следующим образом:

$$T(k) = \begin{pmatrix} a(k) & b(k) \\ \bar{b}(k) & \bar{a}(k) \end{pmatrix}. \quad (15.2)$$

$r(k)$  достаточно задать на полуоси, так как в силу вещественности потенциала имеем, что

$$\varphi_1(x, k) = \bar{\varphi}_2(x, k); \quad \psi_1(x, k) = \bar{\psi}_2(x, k), \quad (15.3)$$

$$\varphi_1(x, k) = \varphi_2(x, -k); \quad \psi_1(x, k) = \psi_2(x, -k), \quad (15.4)$$

поэтому  $r(k)$  необходимо задать только лишь на  $k > 0$ .

Отметим также, что

$$r(-k) = \bar{r}(k). \quad (15.5)$$

Из того, что матрица перехода унимодулярна, то есть  $\det T(k) = 1$ :  $|a(k)|^2 - |b(k)|^2 = 1$ , то

$$\boxed{|a(k)|^2 = (1 - |r(k)|^2)^{-1}}, \quad (15.6)$$

то есть модуль  $r(k)$  однозначно определяет  $|a(k)|$ .

Зная нули аналитической в верхней полуплоскости функции  $a(k)$ , можно однозначно определить аргумент последней по ее модулю. Для этого введем функцию  $a_1(k)$  следующим образом:

$$a_1(k) = a(k) \prod_{n=1}^N \frac{k + i\chi_n}{k - i\varphi_n}. \quad (15.7)$$

Функция  $a_1(k)$  аналитична при  $\text{Im} k > 0$ , но уже не имеет там нулей, так что  $\ln a_1(k)$  аналитичен в верхней полуплоскости и обращается в нуль при  $k \rightarrow \infty$ . На вещественной оси  $|a_1(k)| = |a(k)|$ .

Итак,  $a(k)$  может быть восстановлена по модулю коэффициента отражения. Функция же  $b(k) = r(k) \cdot a(k)$ .

Далее опишем соответствующие характеристики дискретного спектра оператора Шредингера: СФ, соответствующие СЗ  $\lambda_n = -\kappa_n^2$ , удовлетворяют уравнению:

$$-\frac{d^2\psi}{dx^2} + u(x)\psi = -\kappa_n^2\psi . \quad (15.8)$$

На  $\infty$  СФ имеют асимптотики:

$$\psi \longrightarrow C_{\pm} e^{\mp \kappa_n x} , \quad x \rightarrow \pm \infty . \quad (15.9)$$

Фиксируем СФ  $\varphi^{(n)}(x)$  ее асимптотикой на  $-\infty$  по  $x$ :

$$\varphi^{(n)}(x) = n^{\kappa} e^{\kappa x} + o(n^{\kappa} e^{\kappa x}) , \quad (15.10)$$

при этом при  $x \rightarrow +\infty$  данные функции являются вещественными:

$$\varphi^{(n)}(x) = b_n e^{-\kappa x} n^{\kappa} + o(e^{-\kappa x} n^{\kappa}) , \quad (15.11)$$

откуда следует, что  $b_n$  также вещественны.

Далее занумеруем  $\lambda_n$  в порядке возрастания:

$$\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_N , \quad (15.12)$$

где  $\lambda_1$  является энергией основного состояния.

$\varphi^{(1)}$  представляет собой волновую функцию основного состояния, которая не имеет нулей.  $\varphi^{(n)}$  же ровно  $n - 1$  раз проходит через нуль. В результате этого можем записать следующее равенство:

$$b_n = |b_n| (-1)^{n-1} . \quad (15.13)$$

Далее выведем уравнение обратной задачи рассеяния. Умножим функцию

$$\varphi(x, k) = a(k) \psi(x, k) + b(k) \bar{\psi}(x, k) , \quad (15.14)$$

на  $\exp(ikx)a^{-1}(k)$  и учтем определение  $\chi_+(x, k) = \varphi(x, k) \exp(ikx)$ , удовлетворяющее:

$$\chi_+(x, k) = 1 + \int_{-\infty}^x \frac{e^{2ik(x-x')} - 1}{2ik} u(x') \chi_+(x', k) dx' , \quad (15.15)$$

а  $\chi_-(x, k) = \psi(x, k) \exp(ikx)$  удовлетворяет следующему:

$$\chi_-(x, k) = 1 - \int_x^{\infty} \frac{e^{2ik(x-x')} - 1}{2ik} u(x') \chi_-(x', k) dx' . \quad (15.16)$$

Таким образом, получим, что:

$$\frac{\chi_+(x, k)}{a(k)} = \chi_-(x, k) + r(k) \bar{\chi}_-(x, k) e^{2ikx} . \quad (15.17)$$

Левая часть уравнения (15.17) аналитична в верхней полуплоскости  $k$ , за исключением точек мнимой оси  $k = i\kappa_n$ ,  $n = 1, 2, \dots, N$ , в которых  $\chi_+(x, k)a^{-1}(k)$  имеет простые полюсы.

Функция  $\chi_-(x, k)$  аналитична при  $\text{Im}k \geq 0$ .

Рассмотрим следующую функцию:

$$\Phi(x, k) = \begin{cases} \chi_+(x, k) a^{-1}(k) & \text{Im}k > 0 \\ \chi_-(x, k) & \text{Im}k < 0 \end{cases} . \quad (15.18)$$

Функция  $\Phi(x, k)$  имеет простые полюсы в верхней полуплоскости и скачок на вещественной оси, равный, как следует из (15.17)  $r(x) \bar{\chi}_-(x, k) \exp(2ikx)$ . Во всех остальных точках комплексной плоскости функция  $\Phi(x, k)$  аналитична и на  $\infty$  имеет своим предельным значением единицу.

Функция  $\Phi(x, k)$  может быть представлена в следующем виде:

$$\Phi(x, k) = 1 + \sum_{n=1}^N \frac{\Gamma_n(x)}{k - i\kappa_n} + \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{r(k') \bar{\chi}_-(x, k') e^{2ik'x} dk'}{k' - k} , \quad (\text{Im}k \neq 0) , \quad (15.19)$$

где  $\Gamma_n(x)$ - это вычет функции  $\Phi(x, k)$  в точке  $k = i\kappa_n$ . Это является следствием формулы Коши:

$$\Phi(x, k) - 1 = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma} \frac{\Phi(x, k') - 1}{k' - k} dk' , \quad (15.20)$$

где  $\gamma$  - контур интегрирования.

Величину  $\Gamma_n(x)$  можно связать со значением  $\Phi(x, k)$  в точке нижней полуплоскости  $k = -i\kappa_n$  (то есть с  $\bar{\chi}_-(x, -i\kappa_n)$ ).

Используя то, что

$$\varphi(x, i\kappa_n) = b_n \bar{\psi}(x, -i\kappa_n) = b_n \psi(x, -i\kappa_n) , \quad (15.21)$$

имеем следующее:

$$\Gamma_n = \frac{\varphi(x, i\kappa_n) e^{-\kappa_n x}}{a'(i\kappa_n)} = \frac{b_n \psi(x, -i\kappa_n) e^{-\kappa_n x}}{a'(i\kappa_n)} = \frac{b_n}{a'(i\kappa_n)} \chi_-(x, -i\kappa_n) e^{-2\kappa_n x} . \quad (15.22)$$

Определяя  $\chi_-(x, -i\kappa_n)$  с помощью:

$$\Phi(x, k) = 1 + \sum_{n=1}^N \frac{\Gamma_n(x)}{k - i\kappa_n} + \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{r(k') \bar{\chi}_-(x, k') e^{2ik'x}}{k' - k} dk' , \quad (15.23)$$

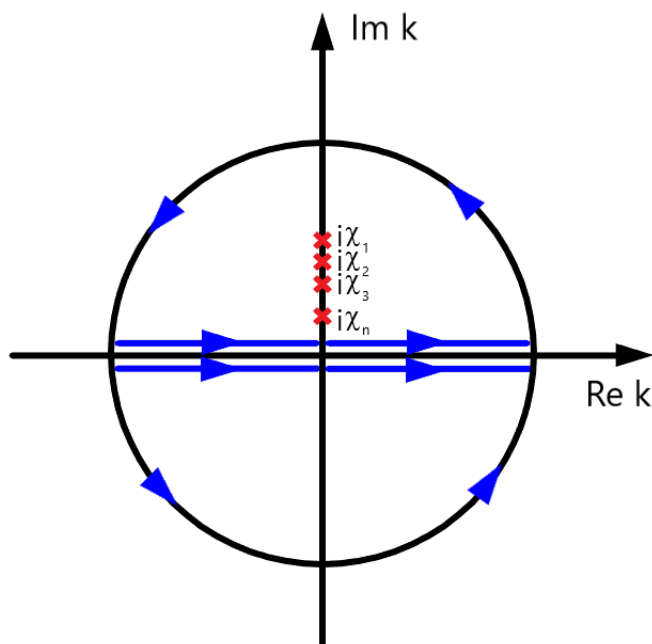


Рис. 15.1. Контур интегрирования  $\gamma$

найдем, что

$$\Gamma_n(x) = \frac{b_n e^{-2\chi_n x}}{a'(i\chi_n)} \left\{ 1 + i \sum_{m=1}^N \frac{\Gamma_m(x)}{\chi_n + \chi_m} + \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{r(k') \bar{\chi}_-(x, k') e^{2ik'x}}{k' + i\chi_n} dk' \right\}. \quad (15.24)$$

В формуле для  $\Phi(x, k)$  устремим  $k$  к вещественной оси снизу. В силу того, что по определению

$$\Phi(x, k) = \begin{cases} \chi_+(x, k) a^{-1}(k), & \text{Im} k > 0 \\ \chi_-(x, k), & \text{Im} k < 0 \end{cases} \quad (15.25)$$

Получаем, что

$$\Phi(x, k - i0) = \chi_-(x, k) = 1 + \sum_{n=1}^N \frac{\Gamma_n(x)}{k - i\chi_n} + \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{r(k') \bar{\chi}_-(x, k') e^{2ik'x}}{k' - k + i0} dk'. \quad (15.26)$$

Выражение типа

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(k')}{k' - k \pm i0} dk', \quad (15.27)$$

будем понимать как

$$\mp \pi i f(k) + V.p. \int_{-\infty}^{\infty} dk', \quad (15.28)$$

где  $V.p. \int$  представляет собой интеграл в смысле главного значения (V.p.).

Соотношение (15.24) и (15.26) являются замкнутой системой линейных уравнений на функцию  $\chi_-(x, k)$  и набор  $\Gamma_n(x)$ ,  $n = 1, 2, \dots, N$ , то есть на собственные функции

оператора  $L$ . Более того, они являются одним из вариантов записи обратной задачи. Выразим потенциал  $u(x)$  через решение системы уравнений (15.24 и 15.26).

Так, уравнения

$$\Gamma_n(x) = \frac{b_n e^{-2\kappa_n x}}{a'(i\kappa_n)} \left\{ 1 + i \sum_{m=1}^N \frac{\Gamma_m(x)}{\kappa_n + \kappa_m} + \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{r(k') \bar{\chi}_-(x, k') e^{2ik'x}}{k' + i\kappa_n} dk' \right\} \quad (15.29)$$

и

$$\Phi(x, k - i0) = \chi_-(x, k) = 1 + \sum_{n=1}^N \frac{\Gamma_n(x)}{k - i\kappa_n} + \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{r(k') \bar{\chi}_-(x, k') e^{2ik'x}}{k' - k + i0} dk' \quad (15.30)$$

однозначно разрешимы.

В качестве СЗ  $\kappa_n$  можно выразить произвольные положительные числа  $\kappa_1 > \kappa_2 > \dots > \kappa_n > 0$ . От величин  $C_n = (-1)^{n-1} b_n$ ,  $n = 1, 2, \dots, N$  тоже требуется лишь положительность.

Коэффициентом  $\Gamma(k)$  может являться любая комплексная функция, удовлетворяющая следующим условиям:

- 1)  $r(-k) = \bar{r}(k)$ ;
- 2)  $|r(k)| < 1$ ,  $k \neq 0$ ;
- 3)  $r(k) = o(1/k)$ ,  $|k| \rightarrow \infty$ ;
- 4) преобразование Фурье коэффициента  $b(k)$ , построенного по  $\Gamma(k)$ :

$$B(x) = \int_{-\infty}^{\infty} b(k) e^{ikx} dx, \quad (15.31)$$

должно удовлетворять следующему условию:

$$\int_{-\infty}^{\infty} (1 + |x|) \left| \frac{dB}{dx} \right| dx < \infty. \quad (15.32)$$

В частности, можно рассматривать потенциалы, для которых  $\Gamma(k) = 0$  при всех  $k$ . Такие потенциалы называются безотражательными и полностью определяются характеристиками дискретного спектра.

Мы написали уравнение обратной задачи в виде сингулярных интегральных уравнений. Для оператора Шредингера более известной формой записи уравнений обратной задачи является уравнение Гельфанда-Левитана-Марченко.

Заметим, что преобразование Фурье аналитической в нижней полуплоскости функции  $\chi_-(x, k)$  обрывается, то есть  $\chi_-$  - всегда представима в виде:

$$\chi_-(x, k) = 1 + \int_0^\infty A(x, y) e^{-iky} dy. \quad (15.33)$$

Для  $\psi(x, k)$  это означает, что существует такая функция  $K(x, y)$ , что:

$$\psi(x, k) = e^{-ikx} + \int_x^{+\infty} K(x, y) e^{-iky} dy, \quad (15.34)$$

где

$$K(x, y) = A(x, y - x). \quad (15.35)$$

Следовательно, существует оператор, преобразующий уравнение Шредингера с нулевым потенциалом  $e^{-ikx}$  в решение этого уравнение с потенциалом  $u(x)$ . Функция  $K(x, y)$  называется ядром оператора преобразования.

В силу того, что  $\psi(x, -k) = \psi(x, k)$ , то  $\text{Im}k = 0$ , следовательно,  $K$  вещественный.

Умножим  $\varphi(x, k) = a(k)\psi(x, k) + b(k)\bar{\psi}(x, k)$  на  $e^{iky}/a(k)$  и проинтегрируем по всем вещественным  $k$ :

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left( \frac{\varphi(x, k) e^{iky}}{a(k)} - e^{ik(x-y)} \right) dk = \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{iky} [\psi(x, k) - e^{-ikx} + r(k)\bar{\psi}(x, k)]. \quad (15.36)$$

Вычислим интеграл в левой части формулы (15.36). Подынтегральная функция

$$\frac{\varphi(x, k) e^{iky}}{a(k)} - e^{ik(x-y)}, \quad (15.37)$$

имеет в верхней полуплоскости лишь конечное число простых полюсов и убывает при  $|k| \rightarrow \infty$ . Поэтому интеграл представляется в виде:

$$2\pi i \sum_{n=1}^N \frac{\varphi(x, i\kappa_n) e^{-\kappa_n y}}{a'(i\kappa_n)}. \quad (15.38)$$

Используем то, что

$$\varphi(x, i\kappa_n) = b_n \bar{\psi}(x, -i\kappa_n) = b_n \psi(x, -i\kappa_n) \quad (15.39)$$

и

$$\psi(x, k) = e^{-ikx} + \int_x^\infty K(x, y) e^{-iky} dy, \quad (15.40)$$

при  $k = i\kappa_n, n = 1, \dots, N$ :

$$2\pi i \sum_{n=1}^N \frac{b_n e^{-\kappa_n(x+y)}}{a'(i\kappa_n)} + 2\pi i \int_x^\infty K(x, z) \sum_{n=1}^N \frac{b_n e^{-\kappa_n(z+y)}}{a'(i\kappa_n)} dz. \quad (15.41)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left( \frac{\varphi(x, k) e^{iky}}{a(k)} - e^{ik(x-y)} \right) dk = \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{iky} [\psi(x, k) - e^{-ikx} + r(k) \bar{\psi}(x, k)] . \quad (15.42)$$

Введем следующее обозначение:

$$F(x) = \sum_{n=1}^N \frac{b_n e^{-\varkappa_n x}}{ia'(i\varkappa_n)} + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} r(k) e^{ikx} dk . \quad (15.43)$$

Тогда окончательный вид уравнения Гельфанда-Левитана-Марченко:

$$K(x, y) + F(x + y) + \int_x^{\infty} K(x, z) F(z + y) dz = 0 . \quad (15.44)$$

Из (15.40) следует асимптотическое разложение  $\chi_-(x, k)$ :

$$\chi_-(x, k) = 1 + \frac{1}{ik} K(x, x) + O\left(\frac{1}{2k^2}\right) , \quad |k| \rightarrow \infty . \quad (15.45)$$

Сравним (15.45) со следующим уравнением:

$$\chi_-(x, k) = 1 + \frac{1}{2ik} \int_x^{\infty} u(x') dx' + O\left(\frac{1}{k^2}\right) , \quad (15.46)$$

и получим, что

$$u(x) = -2 \frac{d}{dx} K(x, x) . \quad (15.47)$$

Таким образом, мы получили выражение для потенциала  $u(x)$  через ядро оператора преобразования.

Существует класс потенциалов, для которых как прямая, так и обратная задача рассеяния решается точно. Это безотражательные потенциалы, для которых коэффициент отражения  $\Gamma(k) = 0$  при всех  $k$ . С этим классом потенциалов связано семейство точных решений уравнения Кортевега-де Фриза - так называемые  $N$ -солитонные решения. Они описывают процесс столкновения солитонов. особенность уравнения Кортевега-де Фриза заключается в отсутствии неупругих эффектов при столкновении солитонов. Так, после столкновения возникают те же солитоны, что и до столкновения.

Рассмотрим данные рассеяния вида:  $s = (r(k) = 0, \varkappa_n b_n, n = 1, 2, \dots, N)$ . Так как  $b(k) = 0$ , то  $|a(k)| = 1$ , и  $a(k)$  однозначно определяется своими нулями:

$$a(k) = \prod_{n=1}^N \frac{k - i\varkappa_n}{k + i\varkappa_n} , \quad (15.48)$$



ПОЭТОМУ МЫ МОЖЕМ СЧИТАТЬ ИЗВЕСТНЫМИ ВЕЛИЧИНЫ:

$$\left. \frac{da}{dk} \right|_{k=i\kappa_n} = a'(i\kappa_n). \quad (15.49)$$

При этом  $ia'(i\kappa_n)$  вещественны. Таким образом, ядро  $F(x)$  уравнения Гельфанда-Левитала имеет следующий вид:

$$F(x) = \sum_{n=1}^N \beta_n e^{-\kappa_n x}; \quad \beta_n = \frac{b_n}{ia'(i\kappa_n)} > 0, \quad (15.50)$$

Отметим, что уравнение

$$K(x, y) + F(x + y) + \int_x^\infty K(x, z) F(z + y) dz = 0, \quad (15.51)$$

легко решается, так как данное уравнение является уравнением с вырожденным ядром в виде:

$$K(x, y) = \sum_{n=1}^N K_n(x) e^{-x_n y}. \quad (15.52)$$

Выполняя интегрирование, получаем систему линейных уравнений на функции  $K_n(x)$ :

$$K_n(x) + \sum_{m=1}^N \frac{\beta_m}{\kappa_n + \kappa_m} e^{-(\kappa_n + \kappa_m)x} K_m(x) = -\beta_n e^{-\kappa_n x}, \quad n = 1, 2, \dots, N. \quad (15.53)$$

Обозначим через  $A(x)$  квадратную матрицу  $N \times N$  с элементами:

$$A_{mn} = \delta_{nm} + \frac{\beta_m}{\kappa_n + \kappa_m} e^{-(\kappa_n + \kappa_m)x}. \quad (15.54)$$

Согласно формуле из линейной алгебры, решение системы будет выглядеть следующим образом:

$$K_n(x) = \frac{\det A^{(n)}(x)}{\det A(x)}, \quad (15.55)$$

где через  $A$  обозначена матрица, получающаяся из матрицы  $A$  заменой  $n$ -ого столбца в последней на столбец  $-\beta_m \exp(-\kappa_m x)$ :

$$A_{mn}^{(n)} = -\beta_m e^{-\kappa_m x}, \quad m = 1, 2, \dots, N. \quad (15.56)$$

Поскольку потенциал  $u(x)$  определяется функцией  $K(x, x)$ , для которой:

$$K(x, y) = \sum_{n=1}^N K_n(x) e^{-x_n y}, \quad (15.57)$$

то  $K(x, x)$  имеет следующий вид:

$$K(x, x) = (\det A)^{-1} \sum_{n=1}^N \det A^{(n)}(x) e^{-\varkappa_n x} . \quad (15.58)$$

Следовательно:

$$K(x, x) = \frac{d}{dx} \ln \det A(x) , \quad (15.59)$$

$$u(x) = -2 \frac{d^2}{dx^2} \ln \det A(x) . \quad (15.60)$$

Формула (15.60) дает описание всего семейства безотражательных потенциалов. Так как свойство безотражательности сохраняется во времени при динамике уравнения Кортевега-де Фриза, то уравнение определяет набор точных решений уравнения Кортевега-де Фриза.

Временная динамика безотражательных потенциалов получается простой заменой матрицы  $A$ :

$$\beta_n \longrightarrow \beta_n e^{8\varkappa_n^3 t} . \quad (15.61)$$

Простейший нетривиальный безотражательный потенциал имеет один единственный дискретный уровень  $-\varkappa_n^2$ :

$$A(x) = 1 + \frac{\beta e^{-2\varkappa x + 8\varkappa^3 t}}{2\varkappa} , \quad (15.62)$$

тогда  $u(x)$  имеет вид:

$$u(x, t) = - \frac{2\varkappa^2}{\cosh^2 \varkappa (x - 4\varkappa^3 t - \varphi)} , \quad (15.63)$$

где

$$\varphi = \frac{1}{2\varkappa} \ln \frac{\beta}{2\varkappa} = \frac{1}{2\varkappa} \ln b . \quad (15.64)$$

Это солитонные уравнения Кортевега-де Фриза. Таким образом, солитон - это безотражательный потенциал, в котором имеется одно связанное состояние. Энергий этого состояния  $-\varkappa^2$  определяет как амплитуду, так и скорость  $v$  солитона:  $v = 4\varkappa^2$ , где  $\varphi$  - координата центра солитона при  $t = 0$  (фаза солитона).

## Семинар 16. Кулоновский потенциал с технической добавкой. Уровни Ландау

### Рождение $e^+ e^-$ пар электрическим полем

Пусть вакуум флуктуирует, в результате чего рождается пара  $e^+e^-$ , при этом в системе присутствует электрическое поле, направленное таким образом, как показано на рис. 16.1.

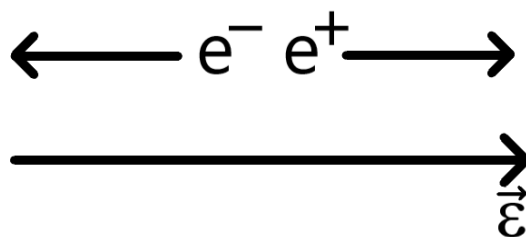


Рис. 16.1. Рождение  $e^+ e^-$  пар электрическим полем

Такое поле автоматически будет «растаскивать» виртуальную пару в разные стороны. В нормальной ситуации за счет сил притяжения пара немедленно «схлопнется», однако при достаточно сильном электрическом поле может быть преодолен туннельный барьер, в результате чего виртуальная пара станет реальной.

Вероятность рождения такой пары будет пропорциональна:

$$P \sim e^{-\pi \varepsilon_{\text{QED}} / \varepsilon}, \quad (16.1)$$

где  $\varepsilon_{\text{QED}}$  представляется собой квантовоэлектродинамическая напряженность, а  $\varepsilon$  - реальную актуальную напряженность. Коэффициент  $\pi$  также имеет квантовоэлектродинамическое происхождение.

Данная зависимость является достаточно резкой. Так, при достаточно низких энергиях вероятность будет близка к нулю, но при высоких - отлична от нуля.

Ответим на вопрос, откуда возникает энергия как минимум  $2mc^2$  после рождения пары. Отметим, что внешнее конечное (порядка  $10^{16} \frac{\text{Вт}}{\text{см}}$ ) постоянное электрическое поле, однако оно не является причиной возникновения столь большой энергии. Ответ заключается в наличии генератора Ван де Граафа. Так, для того чтобы растащить виртуальные заряды, необходимо совершить конечную положительную работу по

перемещению зарядов на соответствующее расстояние порядка комптоновской длины электрона. Для этого у поля должен быть источник, который и будет производить эту работу. На самом деле это источник, который создает это постоянное поля и далее поддерживает его.

Реально, можно взять ни к чему не подключенный конденсатор, который очень нужно очень сильно зарядить. Тогда при рождении пар его заряд бы падал. Конечно, ответ на вопрос: «хватит ли падения заряда?»,- напрямую зависит от того, какой конденсатор будет использован. Заряженный ни к чему не подключенный конденсатор смог бы родить столько пар, на сколько у него хватило бы энергии.

**Замечание 16.1.** Отметим, что генератор Ван де Граафа, например, также устроен по принципу конденсатора.

На рис. 16.2 изобразим черную дыру. Поверхностное ускорение зададим как  $\chi c^2$ .

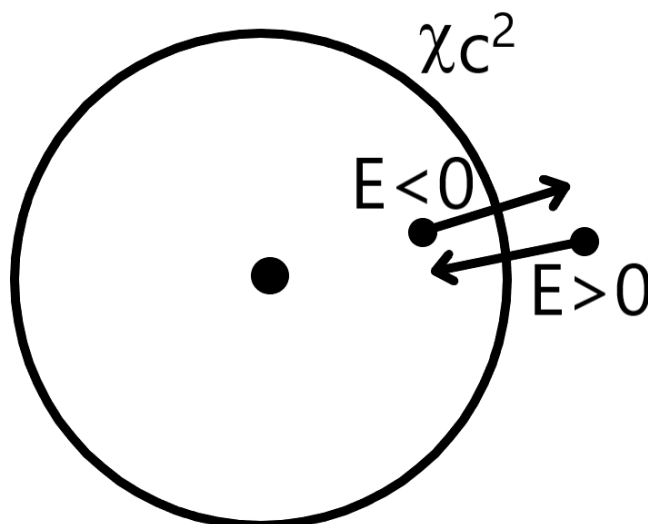


Рис. 16.2. Рождение пары фотонов в черной дыре

Представим, что в окрестность данной поверхности родилась пара фотонов, один из которых обладает положительной энергией, а другой - отрицательной. Каждому фотону, по соотношению Эйнштейна, можно сопоставить массу

$$m = \frac{E}{c^2}. \quad (16.2)$$

Фотон с положительной энергией и, соответственно, с положительной массой будет притягиваться к центру изображенного объема. Так

$$F = m \chi c^2 = E \chi. \quad (16.3)$$

У второго фотона энергия отрицательна, масса отрицательна, поэтому такая же сила будет выталкивать его наружу, как показано на рис. 16.2. Естественно, фотоны будут стремиться «схлопнуться». Ответим на вопрос, с какой вероятностью они «разойдутся», в результате чего один фотон станет реальным, а другой - виртуальным.

Так, коэффициент прохождения будет пропорционален  $e^{-\frac{2}{\hbar}S_{\text{tunn}}}$ , где

$$S_{\text{tunn}} = p \Delta x . \quad (16.4)$$

Оценим  $p$  по известному соотношению, из которого следует, что фотон движется со скоростью  $c$ :

$$p \sim \frac{E}{c} . \quad (16.5)$$

Тогда время, за которое должен произойти процесс разделения фотонов можно определить из уравнений обычной механики:

$$\frac{\Delta p}{\Delta t} = F . \quad (16.6)$$

Величину  $\Delta p$  оценим аналогичным (16.5) способом:

$$\Delta p \sim \frac{E}{c} , \quad (16.7)$$

тогда

$$\Delta t = \frac{1}{\chi c} . \quad (16.8)$$

Зная величину  $\Delta t$ , немедленно определим  $\Delta x$ :

$$\Delta x = c \Delta t = \frac{1}{\chi} . \quad (16.9)$$

Подставив (16.4) и (16.9) в (16.3) получим, что

$$S_{\text{tunn}} = \frac{E}{c} \frac{1}{\chi} . \quad (16.10)$$

Таким образом, мы получили выражение искомой вероятности

$$P \sim e^{-2\pi E/\chi c \hbar} = e^{-\frac{E}{kT}} , \quad (16.11)$$

где  $T$  представляет собой температуру

$$T = \frac{\hbar \chi c}{2\pi k} . \quad (16.12)$$

Таким образом, удалось показать испарение черной дыры за счет того, что у нее есть температура. Раз у нее есть температура, то, как и любое нагретое тело, она должна излучать фотоны.

Фотон с положительной энергией притягивается, а фотон с отрицательной - выходит, то есть фактически излучается фотон с отрицательной энергией. Что представляет собой фотон с отрицательной энергией сказать трудно, однако факт рождения пары установлен.

## Продолжение задачи на кулоновский потенциал с технической добавкой

Запишем сферически-симметричный кулоновский потенциал с технической добавкой, являющейся очень полезной с точки зрения вычисления различных матричных элементов, а также демонстрирующий эффект падения частицы на центр:

$$V(r) = -\frac{\alpha}{r} - \frac{\beta}{r^2}. \quad (16.13)$$

Известно, что  $-\frac{\beta}{r^2}$  является своего рода перевальным случаем. Так, если сингулярность в нуле будет сильнее, то самосопряженность пропадет, и частица упадет на центр. Если же сингулярность в нуле будет меньше, то частица будет удерживаться. Так, в случае зависимости  $-\frac{\beta}{r^2}$  существует конкуренция между орбитальным моментом и постоянной  $\beta$ .

Данная задача решалась в семинаре №11 с использованием следующей параметризации:

$$E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2} \gamma^2, \quad (16.14)$$

где  $\gamma$  в результате работы с рядом по функции Куммера равняется следующему:

$$\gamma = \frac{1}{n_r + s + 1}, \quad n_r = 0, 1, \dots, \quad (16.15)$$

где  $n_r$  является радиальным квантовым числом, задающим степень полинома, в который вырождается функция Куммера на каждом собственном значении. Величина  $s$  равняется следующему:

$$s = -\frac{1}{2} + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - \frac{2m\beta}{\hbar^2}}. \quad (16.16)$$

Из выражения для  $s$  видно, что если орбитальный момент «побеждает», то подкоренное выражение будет неотрицательным, в результате чего уровень будет вещественным. Если же «побеждает» постоянная  $\beta$ , то подкоренное выражение будет отрицательным,  $s$  станет комплексным числом, входящим в ответ для энергии, которая также станет комплексной. Известно, что у самосопряженного оператора комплексного собственного значения быть не может, что означает, что при таком соотношении величин  $l$  и  $\beta$  радиальный гамильтониан потеряет свою самосопряженность, по-прежнему оставаясь эрмитовым.

**Замечание 16.2.** У самосопряженного оператора все  $CZ$  всегда вещественны, а у эрмитова они могут и не быть вещественными, что хорошо видно на примере данной задачи.

Пока нами был рассмотрен лишь общий случай. Теперь же перейдем к частности: если устремить  $\beta \rightarrow 0$ , то  $s = l$ , в результате чего можно получить совершенно обычный ответ для водородоподобного иона:

$$E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2 n^2}, \quad n = n_r + l + 1, \quad (16.17)$$

где  $n$  - это главное квантовое число. Кратность вырождения каждого уровня определяется изменением  $l$  от 0 до  $n - 1$ . Для третьей проекции орбитального момента она определяется как  $2l + 1$ . Кратность вырождения каждого кулоновского уровня будет являться  $n^2$  по орбитальным числам, и если учитывать спин, то  $2n^2$ .

**Замечание 16.3.** Отметим, что по-прежнему конкретизация по величине  $\alpha$  в выражении (16.17) отсутствует. Так, если, например, исследовать задачу с кулоновским центром с зарядом ядра  $Z$ , то  $\alpha^2 = Z^2 e^4$ .

В реальных задачах очень часто встречаются матричные элементы от кулоновских состояний, когда  $\beta = 0$  (то есть случай чисто кулоновского потенциала), по состояниям  $n, l, m$  от степеней радиус-вектора:

$$\langle nlm | r^k | nlm \rangle. \quad (16.18)$$

Такие матричные элементы нужны для оценки размера электронной оболочки и, соответственно, самого размера атома с учетом дисперсии, а также для оценки среднего потенциала внутри атома  $\frac{1}{r}$ , средней напряженности  $\frac{1}{r^2}$ .

**Замечание 16.4.** Также они используются и в задачах, связанных с тонкой структурой, где необходимо получить среднее от  $\frac{1}{r^3}$ . Тонкую структуру наиболее просто получить из уравнения Дирака, однако для ее получения можно воспользоваться и элементарными соображениями, о которых говорится в курсе атомной физики.

Наша задача состоит в том, чтобы научиться находить такие матричные элементы. Известно, что их вычисление происходит в два этапа. Первый этапом основывается на использовании теоремы Феймана-Хеллмана, или адиабатической теоремы.

### Теорема Феймана-Хеллмана.

Пусть есть оператор  $F$ , вещественно зависящий от параметра  $\lambda$ . У данного оператора имеется дискретный уровень, так же зависящий от параметра  $\lambda$ . Помимо этого он является эрмитовым:

$$F(\lambda) = F^+(\lambda) . \quad (16.19)$$

У данного оператора имеется дискретный уровень, так же зависящий от параметра  $\lambda$ . СЗ оператора обозначим как  $f(\lambda)$ :

$$F(\lambda) |f(\lambda)\rangle = f(\lambda) |f(\lambda)\rangle , \quad (16.20)$$

при этом учитываем, что СВ нормирован на единицу:  $\langle f|f\rangle = 1$ .

Тогда, если есть возможность дифференцирования оператора по параметру  $\lambda$ , то среднее значение от производной этого оператора является новым оператором по исходному собственному вектору  $|f(\lambda)\rangle$ :

$$\left\langle f(\lambda) \left| \frac{\partial F}{\partial \lambda} \right| f(\lambda) \right\rangle = \frac{\partial f}{\partial \lambda} . \quad (16.21)$$

Так, в правой части уравнения (16.21) находится производная по СЗ.

Докажем данную теорему Феймана-Хеллмана следующим образом:

#### Доказательство.

Запишем следующее очевидное равенство:

$$\langle f(\lambda) | F(\lambda) | f(\lambda) \rangle = f(\lambda) . \quad (16.22)$$

Далее продифференцируем данное равенство по  $\lambda$ , так как  $\lambda$  представляет собой непрерывно меняющийся параметр. Такая структура может быть дифференцируема



ровно так же, как и произведение. Так, например, в случае непрерывного представления (неважно по какой именно переменной: координатной, импульсной, либо любой другой) можно переписать исходный матричный элемент (16.18) следующим образом:

$$\iint d\xi d\xi' f^*(\lambda, \xi) F(\xi, \xi'; \lambda) f(\lambda, \xi'). \quad (16.23)$$

По условию, такой двойной интеграл сходится, так как он представляет собой наш исходный матричный элемент. Его дифференцирование по  $\lambda$  представляет собой дифференцирование трех сомножителей по формуле Лейбница. Таким образом

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} : \frac{\partial \langle f | F | f \rangle}{\partial \lambda} + \langle f | F \frac{\partial | f \rangle}{\partial \lambda} + \left\langle f \left| \frac{\partial F}{\partial \lambda} \right| f \right\rangle = \frac{\partial f}{\partial \lambda}. \quad (16.24)$$

Так, сначала дифференцируем бра и кет вектора, а затем функцию  $F(\xi, \xi'; \lambda)$ , представляющую собой интегральное ядро в (16.23). С одной стороны, левая часть выражения (16.24) равняется производной СЗ по  $\lambda$ . С другой стороны, учитывая, что оператор  $F$  является эрмитовым, из чего следует, что можно записать его прямое действие на бра и кет вектор так:

$$\frac{\partial f}{\partial \lambda} = f \underbrace{\left( \frac{\partial \langle f |}{\partial \lambda} | f \rangle + \langle f | \frac{\partial | f \rangle}{\partial \lambda} \right)}_{=0} + \langle f | \frac{\partial F}{\partial \lambda} | f \rangle. \quad (16.25)$$

Множитель  $f$ , являющийся СЗ, был вынесен из скобки, которая, вообще говоря, равняется нулю, потому что выражение в скобках представляет собой дифференцирование нормы вектора  $|f\rangle$ . Так, поскольку для каждого  $\lambda$  вектор  $|f\rangle$  нормирован на единицу, выражение в скобке даст ноль.

Таким образом, из равенства (16.25) видно, что среднее от производной есть производная от СЗ. ■

Данное утверждение имеет большую область применимости не только в квантовой механике, но и в квантовой статистике. Мы же проиллюстрируем его применение конкретно на нашей задаче.

Так, рассмотрим такое среднее:  $\langle nlm | \frac{1}{r} | nlm \rangle$ . Запишем гамильтониан задачи

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{\alpha}{r}. \quad (16.26)$$

Очевидно, что  $\frac{1}{r}$  представляет собой производную от гамильтониана (16.26) со знаком «-»:

$$\frac{\partial H}{\partial \alpha} = -\frac{1}{r}. \quad (16.27)$$

Таким образом, перепишем среднее  $\langle nlm | \frac{1}{r} | nlm \rangle$  следующим образом:

$$\left\langle nlm \left| \frac{1}{r} \right| nlm \right\rangle = -\frac{\partial}{\partial \alpha} \left( -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2 n^2} \right) = \frac{m\alpha}{\hbar^2 n^2}. \quad (16.28)$$

Вспомним выражение для боровского радиуса для атома с зарядом ядра  $Z$  :

$$a_B = \frac{\hbar^2}{m\alpha}. \quad (16.29)$$

Следовательно, среднее значение может быть переписано следующим образом:

$$\left\langle nlm \left| \frac{1}{r} \right| nlm \right\rangle = \frac{1}{a_B n^2}, \quad (16.30)$$

где сразу видно, что размерность совпадает, так как среднее от  $\frac{1}{r}$  представляет собой единицу, разделенную на параметр размерности длины, домноженную на  $n^2$ .

Далее рассмотрим иное среднее:  $\langle nlm | \frac{1}{r^2} | nlm \rangle$ . Для того чтобы найти такое среднее, необходимо добавить в гамильтониан (16.26) рабочий, или технический, член  $-\frac{\beta}{r^2}$ :

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{\alpha}{r} - \frac{\beta}{r^2}. \quad (16.31)$$

Аналогично способу поиска среднего от  $\frac{1}{r}$  с помощью производной получим, что

$$\left\langle nlm \left| \frac{1}{r^2} \right| nlm \right\rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \left( -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2 (n_r + s + 1)^2} \right) \Bigg|_{\beta=0}. \quad (16.32)$$

Отметим, что после дифференцирования необходимо положить, что  $\beta = 0$  для того, чтобы перейти к интересующему нас кулоновскому случаю. Заметим так же, что в выражении (16.32) была использована величина  $s$ , так как она зависит от параметра  $\beta$  и определяется следующим образом:

$$s = -\frac{1}{2} + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - \frac{2m\beta}{\hbar^2}}. \quad (16.33)$$

Таким образом, получаем следующее выражение для данного среднего:

$$\left\langle nlm \left| \frac{1}{r^2} \right| nlm \right\rangle = \frac{1}{a_B^2 n^3 \left(l + \frac{1}{2}\right)}. \quad (16.34)$$

Полученные результаты следуют из ранее приведенной теоремы Феймана - Хеллмана. Данный способ очень удобен, так как он не подразумевает вычисление радиальных интегралов, что представляет собой довольно трудоемкую задачу, а, наоборот, требует выполнения мгновенных элементарных операций.

**Замечание 16.5.** В дальнейшем нам понадобится вычисление среднего и от положительных степеней  $r$ , для которых уже нельзя будет применить данный способ, потому что потенциалы, имеющие линейную или квадратичную зависимость от  $r$ , уже не смогут быть так просто разрешимы при наличии кулоновского члена. Так, придется комбинировать кулоновский член с, например, линейным потенциалом. Более того, есть и такие сложные потенциалы, с которыми невозможно решить задачу аналитически.

### Формулы Крамерса

Для таких сложных случаев очень удобными для использования являются формулы Крамерса, которые представляют собой рекуррентные соотношения. Именно с помощью данных формул находятся матричные элементы от положительных степеней  $r$ , что необходимо для оценки линейных размеров атома, а также оценки дисперсии.

Запишем формулы Крамерса не для размерного  $r$ , а для безразмерного  $\rho = \frac{r}{a_B}$ :

$$-\frac{k+1}{n^2} \overline{\rho^k} + (2k+1) \overline{\rho^{k-1}} - k \overline{\rho^{k-2}} \left[ l(l+1) - \frac{k^2-1}{4} \right] = 0. \quad (16.35)$$

Так, мы записали трехчленное выражение, два члена из которых мы, вообще говоря, уже нашли в (16.30) и (16.34).

Заметим, что в случае  $k = -1$ , самый левый член уравнения (16.35) обратится в ноль, в результате чего легко будет определить выражение для среднего от  $\frac{1}{r^3}$ .

Для того чтобы пойти в обратную сторону, производя поиск среднего от  $r^k$  при  $k > 0$ , необходимо знать матричный элемент от  $r^0$ , который, по определению, равен единице.

**Упражнение 16.1.** Лектором предлагается самостоятельно решить задачу на высоковозбужденный атом, размеры которого могут достигать сотые миллиметра. На земле и в солнечной системе такие атомы встретить практически невозможно, так как если они и появляются, то это происходит в хорошо разогретой плазме. Такие атомы можно встретить в голубых звездах, являющихся самыми горячими звездами во Вселенной. Конечно, их продолжительность жизни небольшая, однако их много.

Задача заключается в том, чтобы оценить размер высоковозбужденного атома, главное квантовое число  $n$  которого - 1000, с помощью формул Крамерса. Можно

ли такой атом увидеть невооруженным глазом?

На самом деле, такой атом увидеть действительно можно, его размер будет сравним с толщиной очень тонкого волоса.

**Упражнение 16.2.** Для закрепления пройденного материала лектором также предлагается решить и следующую задачу. Для электрического кулоновского нормального квадруполь оцените среднее от  $r^2$  с квантовыми числами  $n$ ,  $l$ ,  $m$  с помощью формул Крамерса.

Далее перейдем к решению задач с учетом магнитного поля. Для начала будем рассматривать постоянное поле. Так, первая задача будет посвящена уровням Ландау.

## Уровни Ландау

Пусть заряженная бесспиновая частица попадает в постоянное однородное магнитное поле, направленное вдоль оси  $z$ :

$$\vec{\mathcal{H}} = (0, 0, \mathcal{H}) . \quad (16.36)$$

В классическом рассмотрении такая частица будет двигаться по спирали (рис. 16.3) за счет силы Лоренца, которая будет закручивать частицу в плоскости, перпендикулярной магнитному полю.

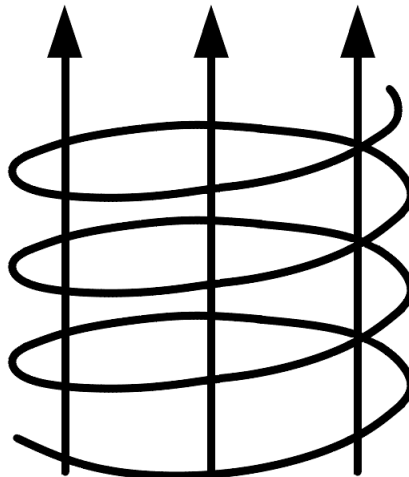


Рис. 16.3. Движение по спирали заряженной частицы в однородном магнитном поле

При этом сама сила Лоренца равна:

$$\vec{F}_L = \frac{e}{c} [\vec{V} \times \vec{\mathcal{H}}] . \quad (16.37)$$

Таким образом, в классическом рассмотрении траектория движения частицы представляет собой винтовую линию. Так, скорость и, соответственно, импульс частицы не изменяются вдоль поля, поскольку по данному направлению сила Лоренца равняется нулю, а в направлении, перпендикулярном полю, частица двигается по окружности с Ларморовой частотой прецессии.

Поскольку магнитные поля крайне часто встречаются в таких практических приложениях, как: твердотельных, плазменных, атомных, - задачу стоит разобрать довольно подробно.

Рассмотрим один из возможных способов решения данной задачи. Прежде всего необходимо запишем гамильтониан при условии того, что в нем в явном виде должен присутствовать вектор-потенциал. Так, вектор-потенциал, соответствующий постоянному полю, может быть записан в виде

$$\vec{A} = \frac{1}{2} [\vec{\mathcal{H}} \times \vec{r}] . \quad (16.38)$$

Для того чтобы проверить правильность выражения (16.38), запишем, как через вектор-потенциал можно выразить  $\vec{\mathcal{H}}$ :

$$\vec{\mathcal{H}} = \text{rot} \vec{A} , \quad (16.39)$$

и распишем ротор из равенства (16.39) и векторное произведение из (16.38) с использованием записи через символ Леви-Чивиты:

$$\mathcal{H}_i = \epsilon_{ijk} \partial_j A_k = \epsilon_{ijk} \frac{1}{2} \partial_j \epsilon_{klm} \mathcal{H}_l r_m = \epsilon_{ijk} \frac{1}{2} \epsilon_{klm} \mathcal{H}_l \delta_{jm} = \delta_{il} \mathcal{H}_l = \mathcal{H}_i , \quad (16.40)$$

где производная действует только на  $r_m$ , поскольку  $\mathcal{H}_l$  является постоянной величиной. В процессе преобразований было использовано свойство перестановки индексов символа Леви-Чивиты и следующее свойство их произведения:

$$\epsilon_{kij} \epsilon_{klm} = \delta_{il} \delta_{jm} - \delta_{im} \delta_{jl} . \quad (16.41)$$

**Замечание 16.6.** Выражение (16.40) выполняется только для случая постоянного поля.

Гамильтониан, описывающий движение заряженной частицы в постоянном магнитном поле, строится по принципу удлинения импульса:

$$H = \frac{1}{2m} \left( \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}(r) \right)^2 . \quad (16.42)$$

Отметим, что принцип удлинения импульса при движении в электромагнитном поле должен быть известен из других ранее пройденных курсов.

Для того чтобы найти уровни Ландау, введем оператор скорости и, пользуясь тем, что  $\dot{\vec{r}} = \frac{d\vec{r}}{dt}$ , запишем уравнение Гейзенберга для  $\dot{\vec{r}}$ :

$$\dot{\vec{r}} = \vec{v} = \frac{i}{\hbar} [H, \vec{r}] . \quad (16.43)$$

Подставим выражение для гамильтониана (16.42) в (16.43) и получим, что

$$\begin{aligned} [H, \vec{r}] &= \frac{1}{2m} \left( \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}(r) \right) \left[ \left( \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}(r) \right), \vec{r} \right] + \\ &+ \frac{1}{2m} \left[ \left( \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}(r) \right), \vec{r} \right] \left( \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}(r) \right) , \end{aligned} \quad (16.44)$$

где было использовано свойство коммутаторов  $[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$ . Величина  $\vec{A}$  будет коммутировать с  $\vec{r}$ , а коммутатор  $[\vec{p}, \vec{r}] = \hbar/i$ , следовательно

$$[H, \vec{r}] = \frac{1}{2m} \frac{\hbar}{i} \left( \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}(r) \right) . \quad (16.45)$$

Таким образом, получили, что

$$\dot{\vec{r}} = \vec{v} = \frac{1}{m} \left( \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) . \quad (16.46)$$

В терминах скоростей гамильтониан (16.42) можно переписать в следующем виде:

$$H = \frac{m\vec{v}^2}{2} . \quad (16.47)$$

Скорость в (16.47) является оператором, причем её компоненты не коммутируют между собой, поскольку

$$[v_i, v_j] = \frac{1}{m^2} \left[ p_i - \frac{e}{c} A_i, p_j - \frac{e}{c} A_j \right] , \quad (16.48)$$

где коммутаторы  $[p_i, p_j]$  и  $[A_i, A_j]$  равны нулю, поэтому

$$[v_i, v_j] = \frac{ie\hbar}{m^2c} (\partial_i A_j - \partial_j A_i) = \frac{ie\hbar}{m^2c} F_{ij} = \frac{ie\hbar}{m^2c} \epsilon_{ijk} \mathcal{H}_k , \quad (16.49)$$

где  $F_{ij}$  - это элемент тензора электромагнитного поля, который выражается через компоненты магнитного поля.

Из (16.49) следует, что компоненты обобщенной скорости не коммутируют друг с другом в магнитном поле. Если же магнитное поле по условию направлено так, как записано в (16.36), то коммутаторы

$$[v_z, v_x] = [v_z, v_y] = 0 , \quad (16.50)$$

поскольку поле  $\vec{\mathcal{H}}$  направлено вдоль третьей оси, т. е. индекс  $k$  в (16.49) соответствует проекции  $\mathcal{H}_z$ , и, следовательно, если один из членов коммутатора соответствует проекции скорости  $v_z$ , то в символе Леви-Чивиты будут присутствовать два совпадающих индекса. Как результат, в таком случае данный символ и сам коммутатор обратятся в нуль.

Таким образом, проекция скорости  $v_z$  будет коммутировать с  $H$ :

$$[H, v_z] = 0 , \quad (16.51)$$

поскольку  $H$  равен:

$$H = \frac{m}{2} (v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) . \quad (16.52)$$

Из (16.51) следует, что величина  $v_z$  является интегралом движения и может быть задана независимо. Величины  $v_x$  и  $v_y$  при этом не коммутируют, и соответствующий коммутатор равен:

$$[v_x, v_y] = \frac{ie\hbar}{m^2c} \mathcal{H}_z . \quad (16.53)$$

Произведем замену переменных так, чтобы величины  $v_x$  и  $v_y$  были равны

$$\begin{cases} v_x = \sqrt{\frac{e\hbar}{m^2c} \mathcal{H}} Q \\ v_y = \sqrt{\frac{e\hbar}{m^2c} \mathcal{H}} P \end{cases} . \quad (16.54)$$

При такой замене переменных коммутатор величин  $Q$  и  $P$  будет равен:

$$[Q, P] = i . \quad (16.55)$$

Гамильтониан (16.52) в терминах  $Q$  и  $P$  будет иметь вид

$$H = \frac{mv_z^2}{2} + \frac{e\hbar}{mc} \mathcal{H} (P^2 + Q^2) . \quad (16.56)$$

Таким образом, в гамильтониане (16.56) присутствует слагаемое, отвечающее за произвольное, не связанное с поперечной частью поля, движение частицы вдоль оси  $z$  с кинетической энергией  $\frac{mv_z^2}{2}$ , а также слагаемое, соответствующее гамильтониану осциллятора.

Обозначим за  $\omega_L$  выражение

$$\omega_L = \frac{e\mathcal{H}}{mc} , \quad (16.57)$$

где  $\omega_L$  - Ларморова частота прецессии. Далее перепишем (16.56) в виде

$$H = \frac{mv_z^2}{2} + \hbar\omega_L (P^2 + Q^2) . \quad (16.58)$$

Таким образом, спектр гамильтониана для заряженной частицы в магнитном поле представляет собой сумму непрерывной компоненты, соответствующей движению вдоль оси  $z$ , и дискретной компоненты, имеющей спектр гармонического осциллятора:

$$H = \frac{mv_z^2}{2} + \hbar\omega_L \left( n + \frac{1}{2} \right) , \quad (16.59)$$

где  $n$  - квантовое число, соответствующее различным уровням Ландау в плоскости  $xy$ .

В случае, если скорость частицы вдоль оси  $z$  равна нулю, будет наблюдаться квантованное движение частицы по круговой орбите, что существенно отличается от классического случая, в котором радиус орбиты частицы может быть задан произвольным образом.

Далее рассмотрим задачу в более явном виде и найдем волновые функции и радиусы орбит Ландау. Будем рассматривать задачу в кулоновской калибровке, что подразумевает выполнение условия

$$\operatorname{div}\vec{A} = 0 . \quad (16.60)$$

Выберем направление вектора  $\vec{\mathcal{H}}$  по третьей оси, а направление вектора  $\vec{A}$  зададим следующим образом:

$$\vec{A} = (-\mathcal{H}y, 0, 0) . \quad (16.61)$$

Проверим, что в случае вектор-потенциала, определенного выражением (16.61), напряженность магнитного поля будет направлена вдоль оси  $z$ :

$$\mathcal{H}_z = \epsilon_{zxy} (\partial_x A_y - \partial_y A_x) = \mathcal{H} . \quad (16.62)$$

Далее запишем выражение для гамильтониана с вектор-потенциалом, заданным выражением (16.61), с учетом того, что удлинение импульса будет происходить только для  $x$ -компоненты, поскольку остальные компоненты вектор-потенциала равны нулю:

$$H = \frac{1}{2m} \left( p_x + \frac{e}{c} \mathcal{H} y \right)^2 + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m} . \quad (16.63)$$



Интегралами движения для (16.63) будут два слагаемых с  $p_x$  и  $p_z$ . Отдельно выделим слагаемое с  $p_z$ , а величину  $p_x$  переобозначим за величину  $y_0$  таким образом, что

$$y_0 = -\frac{p_x c}{e\mathcal{H}}. \quad (16.64)$$

С учетом (16.64) гамильтониан (16.63) может быть переписан в виде

$$H = \frac{p_z^2}{2m} + \frac{1}{2m} \left( \frac{e\mathcal{H}}{c} \right)^2 (y - y_0)^2 + \frac{p_y^2}{2m}. \quad (16.65)$$

Далее снова введем Ларморову частоту прецессии, заданную выражением (16.57), и перепишем гамильтониан следующим образом:

$$H = \frac{p_z^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{m}{2} \omega_L^2 (y - y_0)^2. \quad (16.66)$$

Выражение (16.66) представляет собой гамильтониан гармонического осциллятора с Ларморовой частотой прецессии в качестве круговой частоты, сдвинутый по оси  $y$  на  $y_0$ . В силу того, что точка отсчета по  $y$  может быть выбрана произвольно, можно осуществить сдвиг по оси  $y$  на  $y_0$  и получить обычный гамильтониан осциллятора.

Дискретные уровни гамильтониана будут обладать энергией

$$E_n = \hbar\omega_L \left( n + \frac{1}{2} \right). \quad (16.67)$$

Волновая функция  $\psi_n$  будет устроена следующим образом:

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \sqrt[4]{\frac{m\omega_L}{\pi\hbar}} e^{-\frac{1}{2\hbar}m\omega_L(y-y_0)^2} H_n(y - y_0). \quad (16.68)$$

Для того чтобы оценить радиус первого уровня Ландау, необходимо ввести величину, которая называется длиной Ландау и равняется следующему:

$$a_H = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_L}} = \sqrt{\frac{\hbar c}{e\mathcal{H}}}. \quad (16.69)$$

В таком случае волновая функция может быть переписана как

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \sqrt[4]{\frac{m\omega_L}{\pi\hbar}} e^{-\frac{1}{2a_H^2}(y-y_0)^2} H_n(y - y_0). \quad (16.70)$$

Таким образом, величина  $a_H$  оказывается равной величине дисперсии гауссового волнового пакета. Соответственно, данная величина является оценкой размера первого уровня Ландау. Из (16.69) видно, что с ростом величины  $\mathcal{H}$  величина  $a_H$  убывает как обратный корень от напряженности магнитного поля. При больших значениях  $\mathcal{H}$  в плоскости, перпендикулярной направлению поля, движение электрона будет ограничено величиной  $a_H$ , и за её пределами вероятность обнаружить частицу будет убывать по гауссовому закону.

## Задача на одномерный кулоновский потенциал

Далее проанализируем, почему одномерный кулоновский потенциал является специфичным и почему решение задачи на данный потенциал требует дополнительных приближений.

Гамильтониан для частицы в одномерном кулоновском потенциале выглядит следующим образом:

$$H = \frac{p_z^2}{2m} - \frac{\alpha}{|z|}, \quad (16.71)$$

где  $\alpha$  - некоторая константа.

Далее необходимо решить задачу на СЗ и СФ гамильтониана

$$H \psi = E \psi. \quad (16.72)$$

Для  $\psi$  сделаем замену

$$\psi(z) = z \varphi(z). \quad (16.73)$$

Замена (16.73) является обратной той замене, которая была осуществлена в радиальном уравнении Шредингера, поэтому уравнение (16.72) будет иметь вид радиального уравнения Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{z^2} \frac{\partial}{\partial z} \left( z^2 \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right) - \frac{\alpha}{|z|} \varphi = E \varphi. \quad (16.74)$$

Если рассматривать задачу на полупрямой  $z > 0$ , то в этом случае она становится полностью эквивалентной радиальной задаче, и ответ для энергии будет задан Бальмеровской серией уровней:

$$E_n = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2 n^2}, \quad n = 1, \dots. \quad (16.75)$$

Функция  $\varphi$  в точке  $z = 0$  обращается в нуль, в то время как в одномерных Шредингеровских задачах волновая функция основного состояния не может иметь нуля, из чего следует, что спектр задачи определен не полностью. Таким образом, возникает вопрос относительно того, как именно необходимо определить энергию и волновую функцию нижнего уровня. Данный вопрос обусловлен тем, что для одномерного кулоновского потенциала задача перестает быть самосопряженной, а нижний уровень кулоновского потенциала опускается бесконечно глубоко по энергии.

Для того чтобы рассмотреть поведение нижнего уровня задачи с гамильтонианом (16.71), необходимо сместить знаменатель потенциала на величину  $a$ , после чего решить задачу. Далее, уменьшая величину  $a$  до нуля, следует наблюдать за тем, как уровень основного состояния будет опускаться вниз по энергии.

## Семинар 17. Сложение моментов. Задачи на использование шаровых спиноров

### Сложение моментов

Найдем вектор, получаемый в результате сложения двух спинов

$$\vec{S} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2, \quad (17.1)$$

где абсолютные значения спинов одинаковы и равны

$$s_1 = s_2 = \frac{1}{2}. \quad (17.2)$$

Исходя из общего правила сложения моментов получим, что

$$S = 0, 1, \quad (17.3)$$

где  $S = 0$  соответствует синглету, а  $S = 1$  - триплету.

Наиболее простым способом решения данной задачи является разложение по полному двухспиновому базису, который в самом простом варианте записывается следующим образом:

$$\begin{matrix} \uparrow_1\uparrow_2 & \uparrow_1\downarrow_2 & \downarrow_1\uparrow_2 & \downarrow_1\downarrow_2 \\ S_z=+1 & S_z=0 & S_z=0 & S_z=-1 \end{matrix}. \quad (17.4)$$

Так, у нас есть четыре возможных состояния, так как каждый спин имеет две степени свободы, то есть два базисных вектора. Состояния  $\uparrow_1\uparrow_2$  и  $\downarrow_1\downarrow_2$  являются триплетными, так как из правила сложения моментов следует, что полный  $S_z$  состоит из суммы

$$S_z = s_{1z} + s_{2z}. \quad (17.5)$$

Остается открытым вопрос по поводу состояний  $\uparrow_1\downarrow_2$  и  $\downarrow_1\uparrow_2$ , так как для каждого из них  $S_z = 0$ , однако сказать, что именно соответствует синглету, а что - триплету сразу нельзя. Обратимся к следующей линейной комбинации с коэффициентами  $a$  и  $b$ :  $a\uparrow_1\downarrow_2 + b\downarrow_1\uparrow_2$ . Ответим на вопрос: при каких значениях коэффициентов  $a$  и  $b$  можно получить синглет, а при каких - триплет?

Каноническим решением задачи является взятие данного спектра и применение к нему оператора  $\vec{S}^2$ :

$$\vec{S}^2 = s_1^2 + 2\vec{s}_1 \vec{s}_2 + s_2^2 = \frac{3}{2} + 2\vec{s}_1 \vec{s}_2. \quad (17.6)$$

Так, после действия оператора (17.6) на линейную комбинацию  $a \uparrow_1 \downarrow_2 + b \downarrow_1 \uparrow_2$  необходимо так подобрать коэффициенты  $a$  и  $b$ , чтобы данный вектор являлся СВ оператора  $\vec{S}^2$  либо с СЗ, равным нулю, либо - единице. Данным способ является честным и очень трудоемким, однако более изящным способом является обыгрывание имеющейся в этой задаче симметрии перестановки индексов 1 и 2 (так как от перестановки слагаемых сумма в данном случае не изменится).

Таким образом, полный спин будет коммутировать с оператором перестановки  $P_{12}$ , который условно является оператором перестановки двух объектов или частиц:

$$[\vec{S}, P_{12}] = 0 . \quad (17.7)$$

Таким образом,  $P_{12}^2$  по определению самого оператора равняется:

$$P_{12}^2 = 1 , \quad (17.8)$$

так как двойная перестановка является тождественным преобразованием.

Таким образом, можем найти СЗ данного оператора:

$$P_{12} \psi_\lambda = \lambda \psi_\lambda . \quad (17.9)$$

Очевидно, что чтобы удовлетворялось равенство (17.8), СЗ будет равняться:

$$\lambda = \pm 1 . \quad (17.10)$$

Это означает, что в ответе обязательно должны присутствовать либо четные, либо нечетные комбинации спинов, причем  $P_{12}$  коммутирует со всеми тремя компонентами. Иными словами, все состояния с различной проекцией, но с одним и тем же  $S$  принадлежат одному типу четности. Так, триплетные состояния являются четными, поэтому для них  $\lambda = 1$ . Третьим же состоянием с  $\lambda = 1$  будет являться следующее состояние, записанное уже с учетом нормировки:

$$|S = 1, \sigma = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [\uparrow_1 \downarrow_2 + \downarrow_1 \uparrow_2] . \quad (17.11)$$

Тогда синглетным состоянием с СЗ  $\lambda = -1$  является следующее состояние:

$$|S = 0, \sigma = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [\uparrow_1 \downarrow_2 - \downarrow_1 \uparrow_2] . \quad (17.12)$$

**Замечание 17.1.** Любая симметрия, которая имеется в задаче, сразу же должна быть использована, поскольку решение задачи с ее учетом колоссально упрощается.

**Упражнение 17.1.** Рассмотрим резонансную пр-систему, в которой могут быть долгоживущие резонансы, длина рассеяния которых (то есть эффективный радиус взаимодействия) в синглете больше, чем в триплете. Тем не менее, в синглете рассеяние все таки произойдет, а в триплете возникнет очередной парадокс ядерной физики, заключающийся в том, что, несмотря на то, что эффективный радиус взаимодействия будет меньше, образуется дейтрон. Дейтрон представляет собой связанное состояние со спином, равным единице.

Пусть образовалось метастабильное состояние. Пока оно метастабильно, оно будет вести себя как квазисвязанное состояние. Так, состояние представляет собой синглет по полному спину. Выберем некоторую ось  $\vec{n}$ , направленную следующим образом:

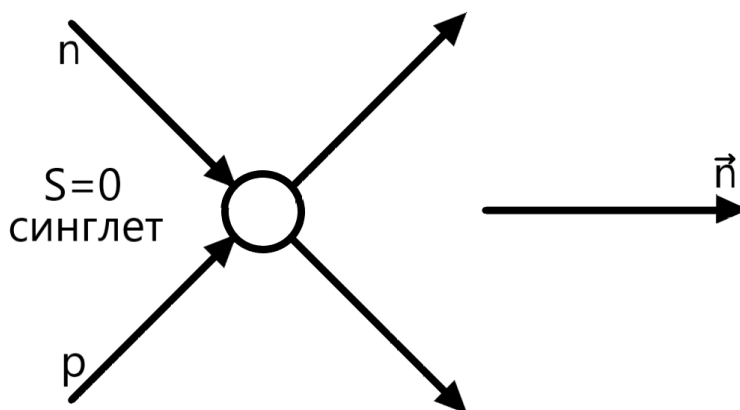


Рис. 17.1. Направление оси  $\vec{n}$

С какой вероятностью проекции спина нейтрона и протона на эту ось будут обнаружены равными  $\frac{1}{2}$  при условии, что проекции были измерены одновременно (то есть отдельно в одно время будет измерена проекция нейтрона и проекция протона)?

Проекции спина нейтрона и протона в синглете всегда противоположны, что всегда будет верно для любого направления оси. По этой причине, значения проекций спинов всегда будут равны  $\frac{1}{2}$  и  $-\frac{1}{2}$ , в силу чего искомая в упражнении вероятность будет равняться нулю. Напротив, если бы вопрос задачи звучал следующим образом: С какой вероятностью проекции спина нейтрона и протона на эту ось будут обнаружены равны  $\frac{1}{2}$  и  $-\frac{1}{2}$  при условии, что проекции были измерены одновременно?, - то ответ бы являлся единицей.

Далее перейдем к задаче про шаровые спиноры, которая заключается в сложении спина с орбитальным моментом.

## Задача про атомный орбитальный электрон

На самом деле, данная задача может быть сведена и к работе с любыми дираковскими фермионами, так как в силу того, что фермионы являются частицами со спином  $\frac{1}{2}$ , когда они оказываются в орбитальном состоянии с моментом  $l$ , наиболее удобным способом их описания являются шаровые спиноры. Шаровые спиноры представляют собой результат сложения орбитального момента  $l$  и спина  $s$ , поэтому о них очень важно иметь хотя бы минимальное представление, более того, они также намного важнее, например, функций Трикоми и Неймана для логарифмического случая.

Если у частицы есть орбитальный момент  $l$  и ее спин  $s$ , тогда они могут складываться в полный момент частицы  $j$ :

$$\vec{l} + \vec{s} = \vec{j}. \quad (17.13)$$

Так как исследуемая частица является дираковским фермионом, то спин  $s = \frac{1}{2}$ . Так, наиболее простой для описания частицей будет являться орбитальный электрон в атоме, у которого есть орбитальное квантовое число  $l$ . В общем случае описание может быть построено на основе базиса  $|lm_l m_s\rangle$ . При таком варианте описания каждая подсистема, орбитальная и спиновая, задаются своими квантовыми числами. Данный способ фактически представляет собой то же описание, что уже было пройдено нами ранее при изучении общей задачи о сложении моментов с использованием базиса  $|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$ . Вторым же вариантом является переход к описанию в терминах полного момента  $j$  и его СЗ  $j_z$ . Единственным условием, заведомо выполняемым для орбитальных электронов, является то, что при сложении модули моментов будут сохраняться. Таким образом, в этом случае базис будет выглядеть следующим образом:  $|j l s m_j\rangle$ , где вместо квантовых чисел  $m_l$  и  $m_s$  возникают числа  $j$  и  $m_j$ . При этом  $j$  равно:

$$j = l \pm \frac{1}{2}. \quad (17.14)$$

Единственным ограничением является случай  $l = 0$ , для которого в (17.14) остается только знак «+».

Данное состояние раскладывается в суперпозицию  $l, m_l, s, m_s$  с соответствующими коэффициентами Клебша-Гордана, вычисление которых в явном виде и представляет собой суть исследуемой задачи. Будем решать задачу последовательно. Отметим, что оператор  $\vec{j}^2$  имеет СЗ  $j(j+1)$ , оператору  $\vec{l}^2$  соответствует  $l(l+1)$ , оператору  $\vec{s}^2 - s(s+1)$ , а  $j_z$  соответствует  $m_j$ . Так, четыре коммутирующих между собой оператора задают чистое состояние в терминах чисел  $j, l, s, m_j$ .

Начнем с разложения  $j_z$ :

$$j_z = l_z + s_z = -i \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -i \frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (17.15)$$

Так, в (17.15) был осуществлен переход к сферическим координатам с учетом того, что  $l_z = -i \frac{\partial}{\partial \varphi}$ , в то время как  $s_z$  в этом случае может быть выражен через сигма-матрицу.

Далее вспомним, что частицы, имеющие спин, могут быть описаны с помощью спинового столбца. Для нашего случая реализация данного вектора является спинором.

$$\psi(\vec{r}, \sigma) = \begin{pmatrix} \psi_1(\vec{r}) \\ \psi_2(\vec{r}) \end{pmatrix}. \quad (17.16)$$

Далее решим задачу на СЗ оператора  $j_z$ , то есть будем искать  $m_j$  для нашего исходного состояния:

$$j_z \psi = m_j \psi. \quad (17.17)$$

Это означает, что к столбцу (17.16) будет применена диагональная матрица из последнего равенства (17.15):

$$\begin{cases} (-i \partial_\varphi + \frac{1}{2}) \psi_1 = m_j \psi_1 \\ (-i \partial_\varphi - \frac{1}{2}) \psi_2 = m_j \psi_2 \end{cases}. \quad (17.18)$$

Общее решение системы (17.18), очевидно, в сферических координатах выглядит следующим образом:

$$\begin{cases} \psi_1(\vec{r}) = R_1(r) \Phi_1(\theta) e^{i(m_j - \frac{1}{2})\varphi} \\ \psi_2(\vec{r}) = R_2(r) \Phi_2(\theta) e^{i(m_j + \frac{1}{2})\varphi} \end{cases}. \quad (17.19)$$

Данные функции не фиксированы относительно переменных  $r$  и  $\theta$ , фиксируется только зависимость от  $\varphi$ . Далее опустим проверку оператора  $\vec{s}^2$ , так как значение  $\frac{3}{4}$  выполняется автоматически.

Перейдем к оператору  $\vec{l}^2$ :

$$\begin{cases} \vec{l}^2 \psi_1 = l(l+1) \psi_1 \\ \vec{l}^2 \psi_2 = l(l+1) \psi_2 . \end{cases} \quad (17.20)$$

Отметим, что  $\vec{l}$  представляет собой чисто координатный оператор, который в спиновом пространстве является единичной матрицей, поэтому и  $\psi_1$  и  $\psi_2$  должны быть СФ оператора  $\vec{l}^2$  с одним и тем же СЗ  $l(l+1)$ . Для того чтобы это было так, в выражении для функций  $\psi_1(\vec{r})$  и  $\psi_2(\vec{r})$  должна содержаться сферическая функция с  $Y_{l, m_j \pm \frac{1}{2}}(\theta, \varphi)$ :

$$\begin{cases} \psi_1(\vec{r}) = R_1(r) Y_{l, m_j - \frac{1}{2}}(\theta, \varphi) \\ \psi_2(\vec{r}) = R_2(r) Y_{l, m_j + \frac{1}{2}}(\theta, \varphi) . \end{cases} \quad (17.21)$$

**Замечание 17.2.** Нас никак не должен смущать второй индекс сферической функции  $m_j \pm \frac{1}{2}$ , так как  $j$  является полуцелым, следовательно,  $m_j$  также полуцелое, следовательно,  $m_j \pm \frac{1}{2}$  является целым.

Таким образом, нам удалось уже практически целиком найти угловую зависимость.

Далее зафиксируем функции  $R_1(r)$  и  $R_2(r)$ .

**Замечание 17.3.** Заметим, что мы решаем задачу только по угловым степеням свободы, радиальная же функция ищется из радиального уравнения, которое определяется типом задачи и типом радиального потенциала. Так, например, если речь идет о многоэлектронном атоме, то мы имеем дело с самосогласованным полем. Если же речь идет об атоме водорода, то потенциал будет кулоновский.

Так как в нашей задаче мы не будем привлекать радиальное уравнение, сама по себе радиальная функция как общий множитель фиксирована не будет, однако связь между функциями  $R_1(r)$  и  $R_2(r)$  может быть полностью зафиксирована. Для этого перейдем к рассмотрению оператора  $\vec{j}^2$ . Отметим, что правило сокращенного квадрата будет выполняться в силу того, что операторы  $\vec{l}$  и  $\vec{s}$  коммутируют (спинорбитальные степени свободы обязательно коммутируют):

$$\vec{j}^2 = \vec{l}^2 + 2\vec{l}\vec{s} + \vec{s}^2 . \quad (17.22)$$

Далее заменим рассмотренные операторы  $\vec{l}^2$  и  $\vec{s}^2$  на их СЗ:

$$\vec{j}^2 = l(l+1) + \frac{3}{4} + \vec{l}\vec{s} = \begin{pmatrix} l(l+1) + \frac{3}{4} + l_z & l_x - il_y \\ l_x + il_y & l(l+1) + \frac{3}{4} - l_z \end{pmatrix} . \quad (17.23)$$



При записи последнего равенства в (17.23) было расписано скалярное произведение  $\vec{l}\vec{\sigma}$  с использованием явного вида сигма-матриц.

Подействуем оператором  $\vec{j}^2$  на столбец (17.16):

$$\vec{j}^2 \psi = j(j+1) \psi . \quad (17.24)$$

Запишем систему уравнений (17.24) в явном виде:

$$\begin{cases} (l(l+1) + \frac{3}{4} + m_j - \frac{1}{2}) \psi_1 + l_- \psi_2 = j(j+1) \psi_1 \\ l_+ \psi_1 + (l(l+1) + \frac{3}{4} - (m_j + \frac{1}{2})) \psi_2 = j(j+1) \psi_2 . \end{cases} \quad (17.25)$$

Преобразуем полученные уравнения системы (17.25):

$$\begin{cases} \left( (l + \frac{1}{2})^2 - j(j+1) + m_j \right) \psi_1 + l_- \psi_2 = 0 \\ l_+ \psi_1 + \left( (l + \frac{1}{2})^2 - j(j+1) - m_j \right) \psi_2 = 0 . \end{cases} \quad (17.26)$$

Вспомним процесс фиксации фаз для удобства работы с  $l_{\pm}$ :

$$l_{\pm} Y_{lm} = \sqrt{(l \mp m)(l \pm m + 1)} Y_{l, m \pm 1} . \quad (17.27)$$

Таким образом, получим следующую систему с одинаковым коэффициентом  $\sqrt{(l + \frac{1}{2})^2 - m_j^2}$ :

$$\begin{cases} l_- Y_{l, m_j + \frac{1}{2}} = \sqrt{(l + \frac{1}{2})^2 - m_j^2} Y_{l, m_j - \frac{1}{2}} \\ l_+ Y_{l, m_j - \frac{1}{2}} = \sqrt{(l + \frac{1}{2})^2 - m_j^2} Y_{l, m_j + \frac{1}{2}} . \end{cases} \quad (17.28)$$

В результате действия  $l_-$  и  $l_+$  на сферические функции в верхнем уравнении системы (17.28) будут стоять одинаковые сферические функции  $Y_{l, m_j - \frac{1}{2}}$ , а в нижнем уравнении -  $Y_{l, m_j + \frac{1}{2}}$ . Таким образом, сферические функции будут сокращены, в результате чего получаем линейную однородную систему на  $R_1$  и  $R_2$ :

$$\begin{cases} \left( (l + \frac{1}{2})^2 - j(j+1) + m_j \right) R_1 + \sqrt{(l + \frac{1}{2})^2 - m_j^2} R_2 = 0 \\ \sqrt{(l + \frac{1}{2})^2 - m_j^2} R_2 + \left( (l + \frac{1}{2})^2 - j(j+1) - m_j \right) R_2 = 0 . \end{cases} \quad (17.29)$$

Для того чтобы найти решение такой системы, необходимо приравнять ее определитель к нулю:

$$\left( \left( l + \frac{1}{2} \right)^2 - j(j+1) \right)^2 - m_j^2 - \left( l + \frac{1}{2} \right)^2 + m_j^2 = 0 . \quad (17.30)$$

Из (17.30) сразу же видно, что слагаемое  $m_j^2$  сократится, в результате чего остается уравнение на связь  $j$  и  $l$ . Очевидно, что решение данного уравнения можно найти мгновенно, вспомнив лишь закон сложения моментов, однако мы выберем более честный способ и все аккуратно распишем:

$$j(j+1) = \left(l + \frac{1}{2}\right)^2 \pm \left(l + \frac{1}{2}\right) = \left(l + \frac{1}{2}\right) \begin{cases} l + \frac{3}{2} \\ l - \frac{1}{2} \end{cases}. \quad (17.31)$$

Из уравнения (17.31) сразу же следует, что

$$j = l \pm \frac{1}{2}. \quad (17.32)$$

Далее окончательно найдем связь между  $R_1$  и  $R_2$ , так как она входит в структуру шаровых спиноров и поэтому является для нас крайне необходимой.

Из двух уравнений системы (17.29) можем взять лишь одно, например, верхнее, так как нижнее будет выполняться автоматически, и для определенности запишем его в случае, когда  $j = l + \frac{1}{2}$ :

$$\left[ \left(l + \frac{1}{2}\right) \left(l + \frac{3}{2}\right) - \left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - m_j^2 \right] R_1 = \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - m_j^2} R_2. \quad (17.33)$$

Преобразуем уравнение (17.33):

$$\left(l + \frac{1}{2} - m_j\right) R_1 = \sqrt{\left(l + \frac{1}{2} - m_j\right) \left(l + \frac{1}{2} + m_j\right)} R_2. \quad (17.34)$$

В силу того, что  $j = l + \frac{1}{2}$ , то  $m_j$  не будет превосходить величину  $l + \frac{1}{2}$ , поэтому оба подкоренных множителя являются неотрицательными, что позволяет нам сократить уравнение (17.34) на корень  $\sqrt{\left(l + \frac{1}{2} - m_j\right)}$ :

$$\sqrt{l + \frac{1}{2} - m_j} R_1 = \sqrt{\left(l + \frac{1}{2} + m_j\right)} R_2. \quad (17.35)$$

Таким образом, функция  $R_1(r)$  может быть выражена как произведение коэффициента в виде подкоренного выражения на некоторую неизвестную нам общую радиальную функцию  $R(r)$ :

$$R_1 = \sqrt{l + m_j + \frac{1}{2}} R(r). \quad (17.36)$$

Аналогично и для функции  $R_2(r)$ :

$$R_2 = \sqrt{l - m_j + \frac{1}{2}} R(r) . \quad (17.37)$$

Далее введем дополнительное стандартное условие нормировки спинора, представляющий собой двухкомпонентный столбец:

$$\int d\vec{r} (|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2) = 1 . \quad (17.38)$$

По общему договору, радиальная часть также нормируется на единицу с помощью радиального интеграла:

$$\int_0^\infty r^2 dr R^2(r) = 1 . \quad (17.39)$$

Тогда по отдельности на единицу должна нормироваться и угловая часть. Таким образом, от интеграла (17.38) останется следующий угловой интеграл по телесному углу:

$$\int d\Omega \left[ \left( l + m_j + \frac{1}{2} \right) |Y_{l, m_j - \frac{1}{2}}|^2 + \left( l - m_j + \frac{1}{2} \right) |Y_{l, m_j + \frac{1}{2}}|^2 \right] . \quad (17.40)$$

Далее вспомним, что сферические функции, по определению, вводятся так, чтобы выполнялось условие ортонормированности

$$\int d\Omega Y_{lm}^* Y_{l'm'} = \delta_{ll'} \delta_{mm'} . \quad (17.41)$$

Таким образом, интеграл (17.40) будет равен значению  $2l + 1$ . Это означает, что в процессе нормировки угловой части необходимо добавить множитель  $\frac{1}{\sqrt{2l+1}}$ . В результате мы получим правильно нормированные шаровые спиноры:

$$\begin{cases} \Omega_{jlm_j}^{(+)} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{l+m_j+\frac{1}{2}}{2l+1}} Y_{l, m_j - \frac{1}{2}} \\ \sqrt{\frac{l-m_j+\frac{1}{2}}{2l+1}} Y_{l, m_j + \frac{1}{2}} \end{pmatrix} \\ \Omega_{jlm_j}^{(-)} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{l-m_j+\frac{1}{2}}{2l+1}} Y_{l, m_j - \frac{1}{2}} \\ -\sqrt{\frac{l+m_j+\frac{1}{2}}{2l+1}} Y_{l, m_j + \frac{1}{2}} \end{pmatrix} \end{cases} . \quad (17.42)$$

Шаровые спиноры являются крайне важными объектами, так как они могут использоваться в самых разнообразных задачах, а именно: задачах атомной и ядерной физики, а также во всех задачах, где присутствуют дираковские фермионы.

**Замечание 17.4.** Для того чтобы наиболее точно определить свое барионное число, необходимо взвеситься, так как наш вес практически полностью состоит из

массы протонов и электронов, которые на самом деле почти одинаковы. Основная погрешность будет приходиться на погрешность весов.

Как же определить число электронов? Так как мы в основном состоим из легких элементов, то число электронов в легких атомах является в два раза меньшим атомного веса.

Шаровые спиноры (17.42) нормированы на единицу и для любых спиновых функций они будут представлять собой базис. Отметим, что такой вид шаровых спиноров соответствует нашему случаю определения всех фаз сферических функций.

Найдем соответствующие коэффициенты векторного сложения. Возьмем шаровой спинор  $\Omega_{jlm_j}^{(+)}$  и разложим его в линейную комбинацию вида

$$\Omega_{jlm_j}^{(+)} = \sqrt{\frac{l+m_j+\frac{1}{2}}{2l+1}} Y_{l,m_j-\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \sqrt{\frac{l-m_j+\frac{1}{2}}{2l+1}} Y_{l,m_j+\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (17.43)$$

$|l, m_l = m_j - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$                        $|l, m_l = m_j + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$

Из (17.43) сразу же видно, что мы имеем дело с состоянием с фиксированными числами орбитального и спинового момента. Таким образом, мы получили честные правильно нормированные коэффициенты векторного сложения для случая сложения  $l$  и  $s$ .

**Упражнение 17.2.** Предположим, что орбитальный электрон с орбитальным моментом  $l$  с оболочки  $nl$  находится в состоянии

$$j = l + \frac{1}{2}. \quad (17.44)$$

С какой вероятностью можно обнаружить у него проекцию орбитального момента  $m_l = m_j + \frac{1}{2}$  и проекцию спина  $m_s = +\frac{1}{2}$ . Ответом будет являться ноль, так как сумма третьих проекций должна быть равна  $m_j$ . Так, если  $m_l = m_j + \frac{1}{2}$  и проекцию спина  $m_s = +\frac{1}{2}$ , результатом суммы будет являться  $m_j + 1$ .

Далее рассмотрим следующую задачу: пусть орбитальный электрон на оболочке  $nl$  находится в точке с радиус-вектором  $\vec{r}$  (см. рис. 17.2):

Заметим, что углам  $\varphi$  и  $\theta$  соответствуют полярный и аксиальный углы, соответственно.

Для конкретности электрон находится в состоянии с  $j = l + \frac{1}{2}$  с фиксированной проекцией  $m_j$ . Ответим на вопрос, куда будет направлен спин электрона?

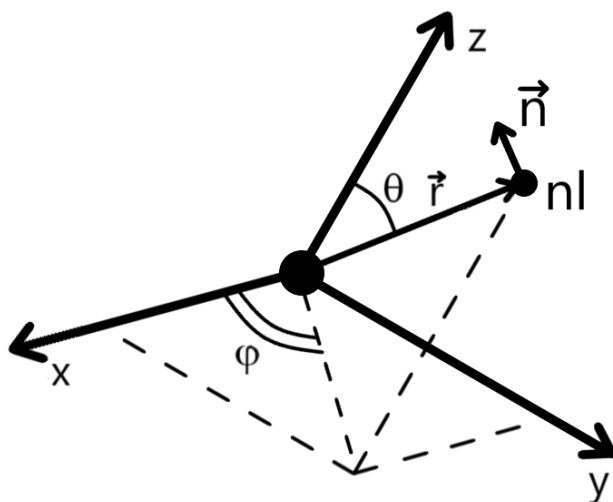


Рис. 17.2. Направление вектора  $\vec{n}$  для электрона на оболочке  $nl$

Направление спина - это направление, задаваемое направлением  $\vec{n}$ , представляющим собой единичный вектор при условии, что  $\vec{n}^2 = 1$ . Вообще говоря, это то направление в пространстве, проекция спина на которое равна  $+\frac{1}{2}$  (с вероятностью, равной единице). Запишем, что

$$S_n \psi = +\frac{1}{2} \psi . \quad (17.45)$$

Отметим, что вектор  $\vec{n}$  задается своими собственными направляющими углами, не совпадающими с углами радиус-вектора  $\vec{r}$ . Более того, поиск этих углов и является нашей задачей:

$$\vec{n} = \{ \sin \alpha \cos \beta, \sin \alpha \sin \beta, \cos \alpha \} . \quad (17.46)$$

Так как в условии задачи сказано, что орбитальный электрон находится на оболочке  $nl$ , а также из условия нам известны  $j$  и  $m_j$ , то мы знаем и спинор волновой функции с точностью до радиальной части, которая нам, собственно, здесь и не понадобится.

Так, если нам необходимо найти спиновое состояние с проекцией  $+\frac{1}{2}$  на направление вектора  $\vec{n}$ , то соответствующий спинор должен иметь следующий вид:

$$\psi = \begin{pmatrix} \cos \frac{\alpha}{2} \\ e^{i\beta} \sin \frac{\alpha}{2} \end{pmatrix} \longleftrightarrow R_{nl}(r) \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{l+m_j+\frac{1}{2}}{2l+1}} Y_{l,m_j-\frac{1}{2}}(\theta, \varphi) \\ \sqrt{\frac{l-m_j+\frac{1}{2}}{2l+1}} Y_{l,m_j+\frac{1}{2}}(\theta, \varphi) \end{pmatrix} . \quad (17.47)$$

Так, было проведено взаимно однозначное соответствие с точностью до радиальной части с состоянием электрона, которое было задано изначально. Для того чтобы

увидеть соответствие, сначала необходимо осознать, что общая фаза векторов нас не интересует в отличие от относительной фазы, которая определяется экспоненциальными функциями, спрятанными в сферических функциях. Так, относительной фазой между верхней и нижней сферическими функциями, находящимися в правом столбце (17.47), является  $e^{i\varphi}$ , в то время как относительной фазой между компонентами левого столбца в (17.47) является  $e^{i\beta}$ . Из этого следует, что

$$\beta = \varphi + \pi . \quad (17.48)$$

Далее найдем угол  $\alpha$ , который может быть зафиксирован отношением

$$\operatorname{ctg} \frac{\alpha}{2} = \sqrt{\frac{l+m_j+\frac{1}{2}}{l-m_j+\frac{1}{2}}} \sqrt{\frac{(l-m_j+\frac{1}{2})!(l+m_j+\frac{1}{2})!}{(l+m_j-\frac{1}{2})!(l-m_j-\frac{1}{2})!}} . \quad (17.49)$$

При этом нормировка может быть записана следующим образом:

$$N_{lm} = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} . \quad (17.50)$$

В результате множественных преобразований получим следующее выражение для  $\operatorname{ctg} \frac{\alpha}{2}$ :

$$\operatorname{ctg} \frac{\alpha}{2} = \left( l + m_j + \frac{1}{2} \right) \frac{P_l^{m_j-\frac{1}{2}}(\cos \theta)}{P_l^{m_j+\frac{1}{2}}(\cos \theta)} , \quad (17.51)$$

где  $P_l^{m_j-\frac{1}{2}}(\cos \theta)$  и  $P_l^{m_j+\frac{1}{2}}(\cos \theta)$  являются присоединенными функциями.

## Семинар 18. Доклад „Введение в квазикристаллы“

Доклад подготовила Мурга Елизавета Алексеевна

**Определение 18.1.** Квазикристалл – (от лат. *quasi* – нечто вроде, как будто и кристалл), особый тип упаковки атомов в твердом теле, характеризующийся икосаэдрической симметрией, дальним ориентационным порядком и отсутствием трансляционной симметрии, присущей обычному кристаллическому состоянию. (Dan Shechtman 1984,  $Al_{0.86}Mn_{0.14}$ )

### Что такое квазикристалл

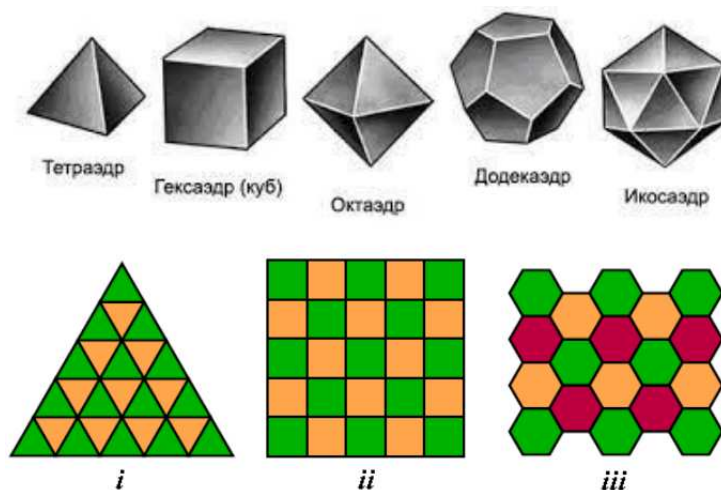


Рис. 18.1. Виды кристаллов

В кристаллах можно выделить элементарную ячейку, нанометровых размеров, который бесконечно много или очень много раз, фактически бесконечно много раз повторяется (транслируется) в трех измерениях и этим повторением заполняет полностью пространство. Таким образом, структура кристалла может полностью быть описана структурой, положением атомов и размерами этого маленького «ящичка». Именно трансляция накладывает ограничения на возможные порядки осей симметрии.

В квазикристаллах этого нет. В квазикристаллах очень причудливое заполнение пространства, двумя и более типами элементарных ячеек, которые друг с другом комбинируются, не производя трансляционной периодичности. Но структура обладает дальним порядком. Дальний порядок, можно грубо сказать, что, если вы знаете

кусок этой структуры, вы можете предсказать, как эта структура будет вести себя на некоем удалении. А если выразать это несколько более точно, то дифракционная картина (рассеяние рентгеновского луча структурой квазикристалла) будет состоять из четких, острых, строго определенно расположенных брегговских пиков при рассмотрении вдоль оси симметрии. При этом интенсивность дифракционных пятен не уменьшалась с расстоянием от центра дифракционной картины. Точно так же, как в случае кристалла. При рассмотрении последовательности рефлексов от центра дифракционной картины к её периферии оказалось, что расстояния между рефлексами связаны степенями числа  $\tau = (\sqrt{5} + 1)/2$  — золотого сечения.

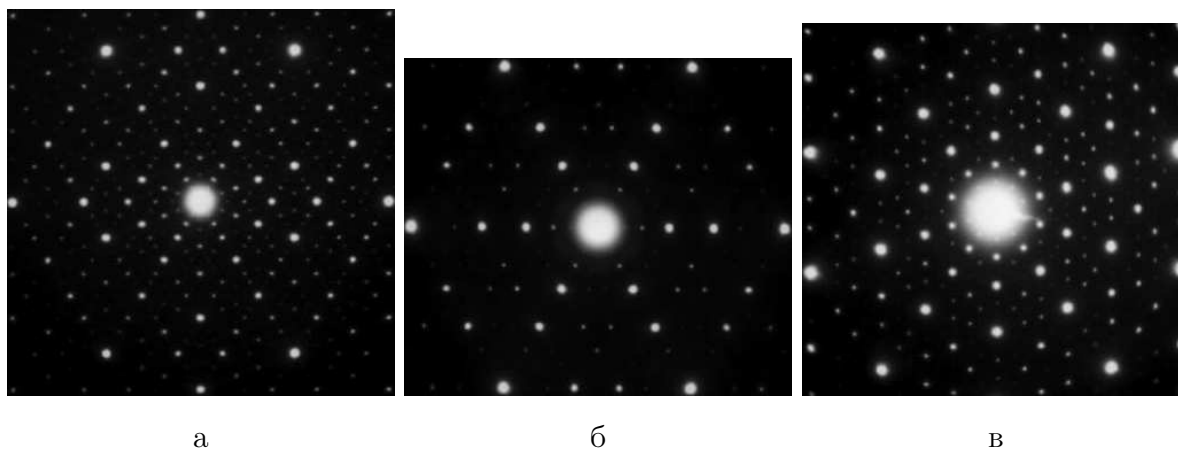


Рис. 18.2. Картины дифракции электронов икосаэдрической фазы  $Al_{69.5}Pd_{21}Mn_{9.5}$  вдоль оси симметрии второго порядка (а), вдоль оси симметрии третьего порядка (б), вдоль оси симметрии пятого порядка (в) (по данным К. Эдагавы)

### Математическое описание

Среди предложенных моделей остова структуры квазикристаллических объектов самой распространённой, по-видимому, следует считать двухфрагментарную модель, основанную на квазипериодическом покрытии прямой, плоскости или пространства двумя элементарными структурными единицами. Для одномерного квазикристалла данная модель приводит к последовательности Фибоначчи коротких  $S$  и длинных  $L$  отрезков с  $S = 1$  и  $L = \tau$ . В двумерном случае двухфрагментарная модель представляет собой паркет Пенроуза, составленный из ромбов двух типов с острыми углами при вершинах  $\psi/5$  и  $2\psi/5$ , а в трёхмерном - образуемое ромбоэдрами двух типов обобщение паркета Пенроуза, называемое сетью Аммана-Маккея.



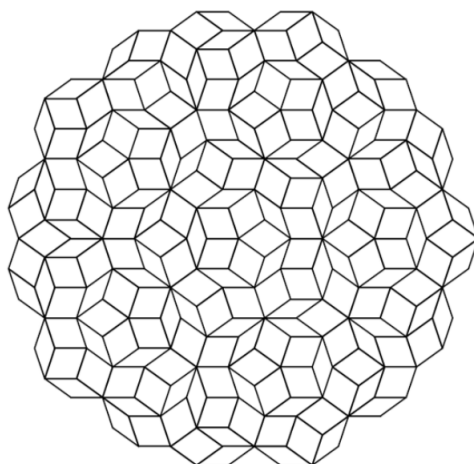


Рис. 18.3. Ромбическая мозаика Пенроуза

Общим для перечисленных выше реализаций двухфрагментарной модели является отсутствие дальнего порядка трансляционного типа при сохранении дальнего порядка ориентационного типа, что приводит к свойству, известному в случае паркета Пенроуза как теорема Конвея: любая конечная конфигурация паркета встречается в нём квазипериодически бесконечное число раз.

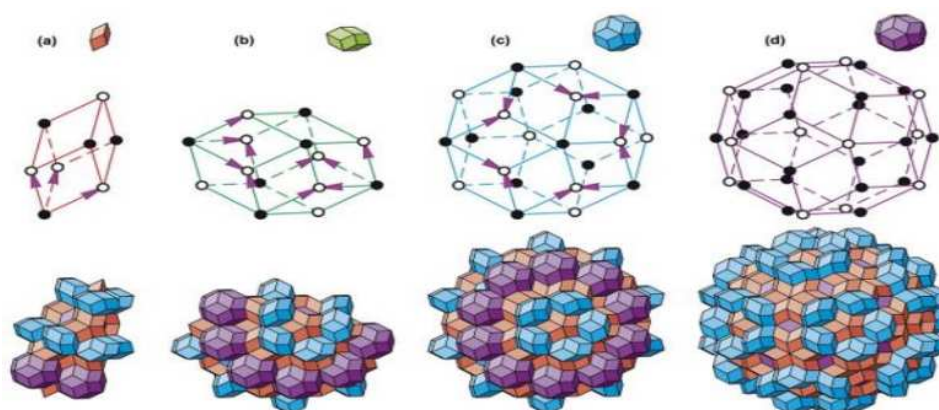


Рис. 18.4. Четыре типа зоноэдров, служащих элементарными ячейками для икосаэдрических квазикристаллов. (a), (b), (c) и (d) ромбоэдр, ромбический додекаэдр, ромбический икосаэдр и ромбический триаконтаэдр соответственно (Alexey E. // Madison, RSC Adv., 2015)

Существуют три основных способа построения двух-фрагментарной модели: проекционный метод, метод мультигридов и метод, использующий свойство самоподобия квазипериодической структуры. Наиболее удобным для теоретических целей явля-

ется проекционный метод. На примере 1D кристалла.

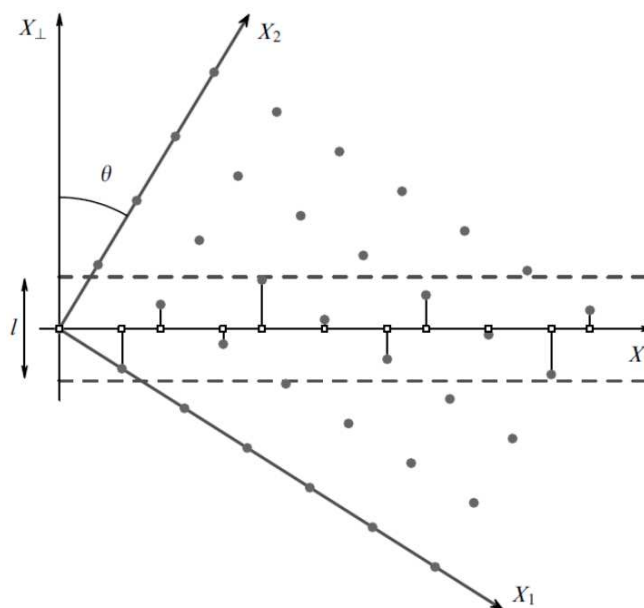


Рис. 18.5. Построение одномерного квазикристалла (цепочки Фибоначчи) проекционным методом; угол наклона оси  $x_{\parallel}$ , т.е. параллельного подпространства, относительно оси  $x_1$  двумерной квадратной решетки,  $\theta = \arctan \tau^{-1}$ ; ширина трубы проецирования  $l$  равна  $a(\cos \theta + \sin \theta)$

Рассмотрим проекционный метод на примере одномерного квазикристалла. Построим на плоскости с координатами  $x_1, x_2$  квадратную решетку с постоянной  $a$  (рис. 18.5). Введем вторую систему координат  $x_{\parallel}, x_{\perp}$ , оси которой повернуты на угол  $\theta = \arctan \tau^{-1}$  по отношению к осям  $x_1, x_2$ . Назовем ось  $x_{\parallel}$  физическим, или параллельным пространством, а ось  $x_{\perp}$  - дополнительным, или перпендикулярным пространством. Спроецируем на физическое пространство  $x_{\parallel}$  все узлы квадратной решетки, попадающие в трубу проецирования, - параллельную  $x_{\parallel}$  полосу, ширина которой равна  $a(\cos \theta + \sin \theta)$ , т.е. проекции элементарной ячейки квадратной решетки на дополнительное пространство  $x_{\perp}$ . На рис. 18.5 труба проецирования ограничена штриховыми прямыми, параллельными  $x_{\parallel}$ . Проекция попадающих в трубу проецирования узлов квадратной решетки на физическое пространство  $x_{\parallel}$  определяют положение узлов решетки одномерного квазикристалла. Расстояния между узлами такой решетки принимают значения  $L = a \cos \theta$  или  $S = a \sin \theta$ , а их последовательность представляет собой последовательность Фибоначчи.

Квазикристаллические структуры могут быть построены и методом сечения, ко-

торый имеет определенные преимущества при анализе экспериментальных дифрактограмм. В случае одномерного квазикристалла узлы квадратной решетки декорируются отрезками прямой, параллельными дополнительному пространству  $x_{\perp}$  и равными проекции элементарной ячейки квадратной решетки на  $x_{\perp}$ . Пересечения этих отрезков, называемых атомными поверхностями, с осью  $x_{\parallel}$  определяют положение узлов решетки одномерного квазикристалла. В общем случае элементарная ячейка двумерной решетки может содержать несколько атомных поверхностей, что дает отображение атомов других сортов и соответствует решеткам с базисом в случае периодически упорядоченных кристаллов.

Фурье-преобразование получающейся одномерной модели квазикристалла приводит к следующему выражению для структурного фактора:

$$S(q_{\parallel}) = \frac{\sin(lq_{\perp}/2)}{lq_{\perp}/2}, \quad (18.1)$$

где  $q_{\parallel}$  и  $q_{\perp}$  - соответственно параллельная и перпендикулярная компоненты вектора обратной решетки двумерного кристалла, а  $l$  - ширина трубы проецирования. Для получения обратной решетки квазикристалла проекционная техника сохраняется с одним лишь отличием: размер трубы проецирования не фиксирован. Из выражения для структурного фактора  $S(q_{\parallel})$  видно, что интенсивность дифракционных пятен ослабевает с ростом  $|q_{\perp}|$ , т.е. с удалением узла обратной решетки двумерного кристалла от параллельного подпространства  $q_{\parallel}$ . В отсутствие базиса двумерной решетки квадрат модуля структурного фактора, пропорциональный интенсивности расстояния, зависит только от  $q_{\perp}$ . В более сложном случае решетки с базисом появляется также и зависимость от  $q_{\parallel}$ . С учетом иррациональности тангенса угла наклона параллельного подпространства  $q_{\parallel}$  относительно осей обратной решетки двумерного кристалла, выражение для структурного фактора одномерной модели квазикристалла показывает, что дифракционная картина данной структуры всюду плотна в том смысле, что наиболее интенсивные брэгговские рефлексы, соответствующие малым значениям  $|q_{\parallel}|$ , окружены рефлексами, имеющими меньшую интенсивность, и т. д.

Проекционный формализм обобщается и на случай двумерной и трехмерной двухфрагментарных моделей квазикристаллов. Для построения сети Аммана-Маккея используется целочисленная гиперрешетка в шестимерном пространстве и трехмерные физическое и дополнительные пространства, ориентированные иррациональным образом по отношению к гиперрешетке.

Несмотря на то, что проекционный метод и метод мультигридов позволяют по-

строить двухфрагментарную квазипериодическую модель совершенного квазикристалла, иногда (особенно для численных расчетов) проще использовать самоподобие структуры упомянутой модели, отражением которой является теорема Конвея. Цепочку Фибоначчи коротких  $S$  и длинных  $L$  отрезков с помощью этого метода можно построить, применяя преобразование инфляции  $L \rightarrow LS, S \rightarrow L$ . Данное преобразование подразумевает локальную замену всех букв цепочки. Начиная с простого сегмента (например,  $L$ ) и применяя данное преобразование, можно получить последовательность Фибоначчи. Действительно,

$$L, LS, LSL, LSLLS, LSLLSLSL, \dots \quad (18.2)$$

В трехмерном случае сети Аммана-Маккея преобразование инфляции ( $\tau^3$ -скейлинг) производит матрица

$$M(\tau^3) = \tau_{\parallel}^3 P_{\parallel} - \tau_{\perp}^{-3} P_{\perp} = 2M(\tau) + I, \quad (18.3)$$

где

$$M(\tau) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad (18.4)$$

$I$  - единичная матрица,  $P_{\parallel ij} = e_{i\parallel} e_{j\parallel}$ ,  $P_{\perp ij} = e_{i\perp} e_{j\perp}$ , а  $e_{i\parallel}$  и  $e_{i\perp}$  - проекции единичных ортов шестимерной гиперрешетки в параллельное и перпендикулярное подпространства. Аналогичными свойствами обладает и паркет Пенроуза.

Метод сечения позволяет установить связь между квазикристаллами и их периодическими аппроксимантами. Изменим наклон оси  $x_{\parallel}$  относительно оси  $x$  двумерной решетки на отношение двух последовательных чисел Фибоначчи, например,  $\tan \theta = (3/2)^{-1}$ . Тогда точки пересечения оси  $x_{\parallel}$  атомными поверхностями образуют периодическую структуру, состоящую из одинаковых сегментов одномерного квазикристалла, в данном случае  $LSLSL$ . Полученную структуру принято называть  $3/2$  оптимальной рациональной аппроксимантой квазипериодической структурной цепочки Фибоначчи. Чем ближе отношение двух последовательных чисел Фибоначчи, т.е. чем больше порядок аппроксиманты, тем больше период получающейся структуры, локально изоморфной одномерному квазикристаллу, и тем труднее по диффракционной картине отличить ее от одномерного квазикристалла.

## Физико-химические свойства

Икосаэдрические кристаллы – это, как правило, сплавы металлических элементов. Их физические свойства отличаются от свойств типичных металлов и сплавов:

- 1) Не изоляторы и не полупроводники;
- 2) Большинство квазикристаллических сплавов – диамагнетики, однако сплавы с марганцем – парамагнетики;
- 3) Электросопротивление многих квазикристаллов уменьшается при возрастании температуры, концентрации примесей, структурных дефектов;
- 4) Обладают очень низкой теплопроводностью, сравнимой с теплопроводностью стекла, которая при температурах выше комнатной, заметно растет с увеличением температуры;
- 5) Обладают низким коэффициентом трения;
- 6) Хрупки и малопластичны, поскольку подвижность дефектов структуры, определяющих пластичность твердых тел, в них очень мала.

## Электронный спектр и Волновые функции

Трудности анализа электронного спектра и электронных транспортных свойств квазикристаллов обусловлены, главным образом, неприменимостью теоремы Блоха. В приближении сильной связи задача решается аналитически. При этом оказывается, что спектр имеет самоподобную структуру энергетических щелей, называемую "чёртовой лестницей" (лестница кантора), и общая ширина зон стремится к нулю по степенному закону с увеличением размера системы  $\sim N^a$ . Энергетический спектр представляет собой канторово множество меры Лебега нуль. Другой особенностью электронной структуры одномерного квазикристалла является критическое поведение волновых функций электронов, которые не являются ни делокализованными, ни локализованными.

Согласно классификации по нормировочному интегралу, волновая функция  $\psi(r)$  является локализованной, если интеграл  $\int_{\infty} |\psi(r)|^2 dr$  сходится; делокализованной или протяженной, если  $\int_{|r|<R} |\psi(r)|^2 dr \sim R^d$ , где  $d$  - размерность пространства;

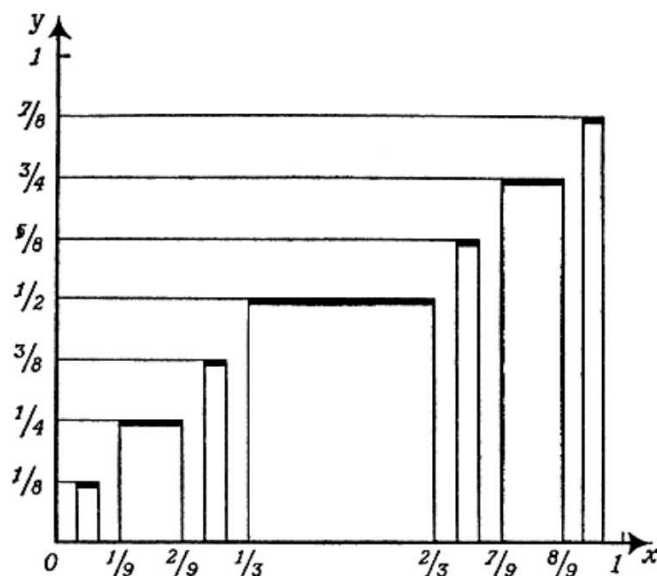


Рис. 18.6. Лестница Кантора

критической, если нормировочный интеграл не описывается двумя вышеупомянутыми случаями. В соответствии с этим определение степенная волновая функция  $\psi(r) \sim |r|^{-\alpha}$  является локализованной, если  $\alpha > d/2$ . Соответственно электросопротивление одномерного квазикристалла степенным образом зависит от длины.

Характерные для одномерного квазикристалла свойства не обязательно являются общими для квазипериодических объектов более высокой размерности. Особенность одномерных периодических систем хорошо известна в проблеме локализации Андерсона: волновые функции остаются всегда локализованными, при сколь угодно малой степени беспорядка. В то же время для последовательности Фибоначчи волновые функции всегда критические. Ещё более важным является тот факт, что цепочка Фибоначчи рассматривается в задаче, подразумевающей распределение двузначных потенциалов или интегралов перескока по топологически регулярной решётке. Реальные же квазикристаллы топологически непериодичны в трёхмерном пространстве, и некоторые из результатов, полученных для цепочки Фибоначчи, характерны только для 1D систем.

Характерной особенностью электронного спектра икосаэдрических квазикристаллов, на которую указывают как расчёты электронных спектров, так и экспериментальные данные по теплоёмкости, фотоэмиссии, ядерному магнитному резонансу (ЯМР), а также результаты туннельных экспериментов, является наличие псевдощели в плотности состояний на уровне Ферми. Основной причиной образования псевдо-

щели в электронном спектре является касание сферы Ферми с гранями зоны Бриллюэна. В результате интерференции электронных волн с волновыми векторами  $\mathbf{k} + \mathbf{G}$  появляется псевдощель. Здесь  $\mathbf{G}$  — вектор обратной решётки, соответствующий брэгговскому отражению и удовлетворяющий условию  $|\mathbf{G}| = 2K_F$ , где  $K_F$  — радиус ферми-сферы. Хотя зоны Бриллюэна, строго говоря, не могут быть сконструированы для аперiodических кристаллов, для квазикристаллов можно ввести псевдозоны Бриллюэна, соответствующие первым сильным брэгговским рефлексам. Из-за высокого фактора повторяемости таких рефлексов псевдозоны Бриллюэна в квазикристаллах являются почти сферическими, и соответственно псевдощель получается более широкой и глубокой, по сравнению, например, с псевдощелью в кристаллических аппроксимантах. Псевдощель наблюдается и в аморфных, и в кристаллических сплавах, однако, в квазикристаллах она более ярко выражена. Попадание уровня Ферми в псевдощель при определённом соотношении числа валентных электронов на атом стабилизирует структуру.

### Источники

- 1) Векилов и Черников. Квазикристаллы // УФН, 2010;
- 2) Векилов, Гордеев, Исаев. Электронный спектр двумерной решётки Фибоначчи // ЖЭТФ, 1999;
- 3) Оленев, Исаев, Векилов. Электронный спектр и волновые функции икосаэдрических кристаллов // ЖЭТФ, 1998;
- 4) Jaszczak. Watching Quasicrystals Grow // Physics 8, 78, 2015.

### Дополнительно

- 1) Tsai and Cui. Crystal Growth of Quasicrystals // HANDBOOK OF CRYSTAL GROWTH;
- 2) P. A. Kalugin, A. Yu. Kitaev, and L. S. Levitov. Electron spectrum of a one-dimensional quasicrystal;
- 3) Nagao et al. Experimental Observation of Quasicrystal Growth // Phys. Rev.;
- 4) Ostlund et al. One-Dimensional Schrodinger Equation with an Almost Periodic Potential // Phys. Rev.;

- 5) A. P. Smith and N. W. Ashcroft. Pseudopotentials and Quasicrystals // Phys. Rev.;
- 6) Stadnik. Physical properties of QCs, 1999.



## Семинар 19. Доклад „Одномерный атом водорода“

Доклад подготовила Лурсманашвили Клавдия Александровна

Углеродная нанотрубка – это аллотропная форма углерода, которую можно представить в виде многоатомного слоя графита, свернутого в цилиндр (однослойная УНТ).

Одним из самых интересных и отличительных свойств квазиодномерных полупроводников является наличие в них огромных энергий связи экситонов, которые возникают из-за усиления кулоновских эффектов в одном измерении.

Loudon R. - 1959 г.: Теория для экситонов в сильных магнитных полях на примере 1D атома водорода. Результат работы заключается в построении спектра одномерного атома водорода в виде серии Бальмера с двукратно вырожденными уровнями, за исключением уровня, соответствующего основному состоянию четной серии и обращающегося в  $\infty$  в кулоновском пределе. Данная тема является очень актуальной. Эта область исследований имеет как прикладную (сверхпрочные материалы, сверхплоские дисплеи, а также транзисторы размера примерно 1 мкм), так и очевидную фундаментальную (изучение физических явлений в одном измерении) ценность.

### Постановка задачи об экситонных возбуждениях в квазиодномерных полупроводниках

#### Кулоновская модель как предельный случай

Пусть  $\psi_v(k_v, r)$  и  $\psi_c(k_c, r)$  - Блоховские волновые функции электронов валентной зоны и зоны проводимости квазиодномерного полупроводникового кристалла соответственно:

$$\psi_{c,v}(k_{c,v}, r) = e^{ik_{c,v}z} u_{c,v}(k_{c,v}, r) , \quad (19.1)$$

где  $r$  - радиус-вектор,  $k_{c,v}$  - z-компонента квазиимпульса электрона.

Таким образом, волновая функция покоящегося экситона большого радиуса:

$$\Psi(r_1, r_2) = \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \Phi(k) \psi_c(k, r_1) \psi_v(k, r_2) dk , \quad k = k_c - k_v . \quad (19.2)$$

Гамильтониан такой системы имеет следующий вид:

$$\hat{H}_{exc} = \hat{H}_c + \hat{H}_v - \frac{e^2}{|r_1 - r_2|} . \quad (19.3)$$

Получим уравнение для огибающей функции  $\Phi(k)$ :

$$(\varepsilon_c(k) - \varepsilon_v(k)) \Phi(k) + \frac{a}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} J(k, k') \Phi(k') dk' = E_{exc} \Phi(k) , \quad (19.4)$$

где  $\varepsilon_c(k)$  и  $\varepsilon_v(k)$  - зонные энергии электронов с квазиимпульсом  $k$ .

$$J(k, k') = - \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{a}{L} \iint_{E_3^L} \psi_c(k, r_1) \bar{\psi}_v(k, r_2) \frac{e^2}{|r_1 - r_2|} \bar{\psi}_c \psi_v dr_1 dr_2 . \quad (19.5)$$

Ядро  $J(k, k')$  соответствует системе двух частиц, взаимодействующих друг с другом посредством не экранированного кулоновского потенциала.

$$E_3^L = E_2 \times (0 < z < L) . \quad (19.6)$$

В рамках длинноволнового приближения также возможно и применение методы эффективной массы, согласно которому в окрестности краев запрещенной зоны дисперсионные уравнение валентной зоны и зоны проводимости, обладающие на этих краях экстремумом:

$$\left. \frac{\partial \varepsilon_{c,v}(k)}{\partial k} \right|_{k_{edge}} = 0 , \quad (19.7)$$

с точностью до членов  $\sim k^2$  могут быть представлены в виде:

$$\varepsilon_c(k) \approx \varepsilon_c(k_{edge}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*} , \quad \varepsilon_v(k) \approx \varepsilon_v(k_{edge}) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h^*} , \quad (19.8)$$

$$m_{e,h}^* = \hbar^2 \left( \left. \frac{\partial^2 \varepsilon_{c,v}(k)}{\partial k^2} \right) \right|_{k_{edge}}^{-1} , \quad (19.9)$$

где  $m_{e,h}^*$  - эффективные массы электрона и дырки.

Таким образом, с учетом приближений, уравнение для  $\Phi(k)$  будет выглядеть следующим образом:

$$\left( E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \right) \Phi(k) + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{V}(k - k') \Phi(k') dk' = E_{exc} \Phi(k) , \quad (19.10)$$

где  $E_g = \varepsilon_c(k_{edge}) - \varepsilon_v(k_{edge})$  - ширина запрещенной зоны,  $\mu = \frac{m_e^* m_h^*}{(m_e^* + m_h^*)}$  - приведенная эффективная масса,  $\tilde{V}(k)$  Фурье-образ эффективного сглаженного потенциала:

$$V(z) = - \iint_{E_3^a} \frac{dr_1 dr_2 e^2}{[(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 + (z + z_1 - z_2)^2]^{1/2}} \times \\ \times |u_c(k_{edge}, r_1)|^2 |u_v(k_{edge}, r_2)|^2 . \quad (19.11)$$

Легко увидеть, что уравнение для  $\Phi(k)$  удовлетворяет одномерному уравнению Шредингера (на действительной оси):

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\phi''(z) + V(z)\phi(z) = E\phi(z), \quad (19.12)$$

где

$$E = E_{exc} - E_g. \quad (19.13)$$

В формуле (19.12) - компонента Фурье-образа огибающей экситона,  $E$  - энергия связи экситона, а  $E_{exc}$  - энергия возбуждения.

Заметим, что независимо от типа квазиодномерного полупроводника:

$$V(z) \Big|_{z \rightarrow \pm\infty} \approx -\frac{e^2}{|z|} + o\left(\frac{1}{|z|}\right). \quad (19.14)$$

Проблема заключается в том, что из-за особенности потенциала  $V_0(z) = -e^2/|z|$  одномерный оператор Шредингера для водородоподобных систем остается неопределенным без нахождения волновых функций некоторых (самосопряженных) граничных условий в точке  $z = 0$ .

Таким образом, для того чтобы определить одномерный гамильтониан экситона, необходимо либо точно задать граничные условия, либо "смягчить" (регуляризовать) особенность потенциала на расстояниях, малых по отношению к  $V(z)$  и экранирующим эффектам со стороны электронов и полупроводников.

### Одномерный атом водорода. Четные и нечетные серии

Модель одномерного гамильтониана экситона может быть задана следующим выражением:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dz^2} - \frac{e^2}{\varepsilon|z|}, \quad (19.15)$$

где  $\varepsilon_e$  - константа экранирования среды, окружающей полупроводник.

Функции  $\phi(z)$  - дважды дифференцируемы в  $L_2(-\infty, \infty)$  на полуосях  $(-\infty, 0)$ ,  $(0, \infty)$  и вместе со своими производными для  $\forall \delta > 0 \in L_2(-\infty, -\delta)$ ,  $L_2(\delta, \infty)$ , а также удовлетворяют определенному граничному условию в точке  $z = 0$ . Данное граничное условие должно обеспечивать самосопряженность оператора  $\hat{H}$ .

Если не существует причин для нарушения зеркальной симметрии (закона действия и противодействия), то физически приемлемы лишь те самосопряженные расширения вышеприведенного оператора, для которых подпространства четных и нечетных функций из  $L_2(-\infty, \infty)$  инварианты по отношению  $\hat{H}$ .

Для четных потенциалов  $V(z) = V(|z|)$ , менее сингулярных, чем кулоновский потенциал, и удовлетворяющих следующим условиям:

$$\int_0^L |V(z)|^2 dz < \infty, \quad 0 < L < \infty \quad (19.16)$$

Спектры связи состояний - отрицательные СЗ для краевой задачи на полуоси  $(0, \infty)$  с граничными условиями:

$$\begin{cases} \phi(0) = 0 & - \text{для нечетной серии} \\ \phi'(0) = 0 & - \text{для четной серии} . \end{cases} \quad (19.17)$$

Среди самосопряженных расширений оператора  $\hat{H}$  бесконечно много таких, для которых подпространства четных и нечетных функций инвариантны. Подобные расширения отличаются самосопряженными граничными условиями в точке  $z = 0$  и, следовательно, могут быть различимы по энергиям их основных состояний.

Так как функции из области определения любого подобного расширения не дифференцируемы при  $z = 0$ , то из всех подходящих самосопряженных граничных условий в точке  $z = 0$  невозможно выделить единственное «правильное» без дополнительных физических соображений.

Одним из возможных расширений, сочетаемых с симметрией инверсии по  $z$ , для кулоновского потенциала является распадающееся расширение  $\hat{H}_0$ , определяемое граничным условием:  $\phi(0) = 0$ , такое, что  $\forall \phi \in \text{dom } \hat{H}_0$ :

$$\begin{cases} \left( \hat{H}_0 \phi \right) (z) = - \left( \frac{\hbar^2}{2\mu} \right) \phi''(z) + \left( \frac{e^2}{\varepsilon_e z} \right) \phi(z) , & z < 0 \\ \left( \hat{H}_0 \phi \right) (z) = - \left( \frac{\hbar^2}{2\mu} \right) \phi''(z) + \left( \frac{e^2}{\varepsilon_e z} \right) \phi(z) , & z > 0 \\ \phi(-0) = \phi(+0) = 0 \end{cases} \quad (19.18)$$

Благодаря заданному граничному условию в начале координат -  $\hat{H}_0$  изоморфен ортогональной сумме двух приведенных «классических» операторов Шредингера для  $s$ -состояний атома водорода.

Следовательно, отрицательный спектр данного гамильтониана является серией Бальмера, каждое СЗ которой двухкратно вырождено.

Несмотря на кулоновскую особенность при  $z = 0$ , любое решение такого уравнения:

$$\frac{d^2 \phi}{dz^2} + \left( \frac{2k\kappa}{|z|} - \kappa^2 \right) \phi = 0 , \quad (19.19)$$

где

$$k = \frac{\mu e^2}{\varkappa h^2}, \quad \varkappa = \sqrt{\frac{2\mu|E|}{h^2}}, \quad (19.20)$$

имеет непрерывные левый и правый пределы в  $z = 0$ . Из этого следует, что непрерывные решения из нечетной серии должны удовлетворять следующему граничному условию:  $\phi(0) = 0$ .

Таким образом, спектр связанных состояний нечетной серии совпадает со спектром связанных  $s$ -состояний водородоподобного атома.

Тем не менее, из-за все той же кулоновской особенности, часть гамильтониана на подпространстве четных функций не определена однозначно даже при условии, что функции из ее области определения непрерывны везде на действительной оси, включая и точку  $z=0$ .

Если бы потенциал в рассматриваемой задаче был бы не сингулярен или, по крайней мере, интегрируем, то естественным граничным условием было бы:  $\phi'(0) = 0$ .

Однако любое решение уравнения (19.19), отличное от нуля в нуле, не дифференцируемо в точке  $z = 0$ .

Попытки регуляризации, сохраняющей четность кулоновского потенциала в некоторой  $\delta$ -окрестности начала координат выбрать для четной части подходящие граничные условия в точке  $z = 0$  приводят к неоднозначным результатам.

Результаты будут зависеть от путей регуляризации и предельного перехода при  $\delta \rightarrow 0$ .

Рассмотрим регуляризованный потенциал вида:

$$V_\delta(z) \begin{cases} -\frac{e^2}{|z|}, & |z| > \delta \\ -\frac{e^2}{|\delta|}, & |z| < \delta \end{cases} \quad (19.21)$$

так как  $-e^2/|z| \leq V_\delta(z)$ , то

$$E_{odd}(\delta) \geq -\frac{\mu e^4}{2h^2}, \quad (19.22)$$

где  $E_{odd}$  наименьшее СЗ нечетной серии  $\hat{H}_r$ .

Определим четную часть  $\hat{H}_\delta$ , предполагая, что четные функции из его области определения удовлетворяют следующему граничному условию:

$$\phi'(-0) + h_\delta \phi(-0) = \phi'(0) + h_\delta \phi(0). \quad (19.23)$$

Выбрав любую энергию для четной серии:

$$E_{even} < -\frac{\mu e^4}{2h^2} \leq E_{odd}(\delta), \quad (19.24)$$

можно добиться (подбором  $h_\delta$  в ГУ), чтобы она была СЗ оператора  $\hat{H}_\delta$ .

С этой целью заметим, что при  $z > \delta$  СФ  $\phi_{even}(z)$ , соответствующая СЗ  $E_{even}$ , с точностью до постоянного множителя совпадает с решением уравнения (19.19), убывающим при  $z \rightarrow \infty$ , с  $E \leftrightarrow E_{even}$ :

$$\phi_{even}(z) = C W_{k_{even}, 1/2}(2\kappa_{even}z), \quad (19.25)$$

где  $W_{k_{even}, 1/2}$  - функция Уитткера.

Таким образом, при  $0 < z < \delta$  получим, что

$$\phi_{even}(z) = C' \left[ \cos qz + \frac{h_r}{q} \sin qz \right], \quad (19.26)$$

где

$$q = \left( \frac{2\mu}{h^2} \cdot \frac{e^2}{\delta - |E_{even}|} \right)^{1/2}. \quad (19.27)$$

Условие непрерывности логарифмической производной  $\phi_{even}(z)$  в точке  $z = \delta$  дает:

$$\begin{aligned} h_\delta &= q \frac{\frac{2\kappa_{even} W'(2\kappa_{even}\delta) \cos q\delta + q W(2\kappa_{even}\delta) \sin q\delta}{q W(2\kappa_{even}\delta) \cos q\delta - 2\kappa_{even}}, W'(2\kappa_{even}\delta) \sin q\delta}{\delta \rightarrow 0} \approx \\ &\approx -2\kappa_{even} k_{even} \ln(2\kappa_{even} k_{even} \delta) \end{aligned} \quad (19.28)$$

Так как  $E_{even} < E_{odd}(\delta)$ , а СЗ четной и нечетной серии чередуются, то можно сделать вывод, что  $E_{even}$ - наименьшее СЗ  $\hat{H}_r$ . То есть посредством надлежащего выбора  $h_\delta$  можно получить последовательность гамильтонианов с регуляризованными потенциалами и фиксированными наименьшими СЗ.

В качестве ближайшего аналога граничного условия для ВФ четной серии  $\phi(0) = 0$ , согласно (19.28), выберем:

$$\lim_{z \rightarrow 0} \frac{d}{dz} [(1 + 2Az \ln(2Az)) \phi(z)] = 0, \quad (19.29)$$

где

$$A = \frac{e^2 \mu}{h^2}. \quad (19.30)$$

Дифференцируемый оператор  $\hat{H}$  в  $L_2(0, \infty)$ , определенный данным граничным условием является самосопряженным.

Действительно, исходя из формулы фон Неймана можно показать, что для любого самосопряженного расширения  $\hat{H}$  в  $L_2(0, \infty)$  функции из его области  $D(\hat{H})$  определения непрерывны на полуоси.

Пусть  $\phi_1, \phi_2 \in D(\widehat{H})$ , то есть  $\widehat{H}\phi_1, \widehat{H}\phi_2 \in L_2(0, \infty)$ . Тогда, используя непрерывность  $\phi_1, \phi_2$ , в точке  $z = 0$  получим, что:

$$\begin{aligned} & \int_0^\infty \left[ \left( \widehat{H}\phi_1 \right) (z) \overline{\phi_2(z)} - \phi_1(z) \overline{\left( \widehat{H}\phi_2 \right) (z)} \right] dz = \\ & = \lim_{\delta \rightarrow 0} \int_0^\infty \left[ \left( \widehat{H}\phi_1 \right) (z) \overline{\phi_2(z)} - \phi_1(z) \overline{\left( \widehat{H}\phi_2 \right) (z)} \right] dz = \\ & = \frac{h^2}{2\mu} \lim_{\delta \rightarrow 0} \left[ \phi_1(z) \overline{\phi_2'(z)} - \phi_1'(z) \overline{\phi_2(z)} \right]_{z=\delta} = \frac{h^2}{2\mu} \lim_{\delta \rightarrow 0} \left\{ \frac{1}{1+2Az \ln 2Az}, \phi_1(z) \cdot \right. \\ & \left. \cdot \frac{d}{dz} \left[ (1+2Az \ln 2Az) \overline{\phi_2(z)} \right] - \overline{\phi_2(z)} \frac{d}{dz} \left[ (1+2Az \ln 2Az) \phi_1(z) \right] \right\}_{z=\delta} = 0 \end{aligned} \quad (19.31)$$

Поэтому  $\widehat{H}$  является симметричным оператором.

Предположим, что  $\widehat{H}$  не является самосопряженным. Тогда для любого не вещественного  $\omega$  существует решения уравнения:

$$-\frac{h^2}{2\mu} \frac{d^2 W}{dz^2} - \frac{e^2}{|z|} W = \overline{\omega} W, \quad (19.32)$$

принадлежащие  $L_2(0, \infty)$  и ортогональные множеству  $(\widehat{H} - \omega)D(\widehat{H})$ . Но можно убедиться, что такое решение

$$W = C W_{k, 1/2}(2\kappa_\omega z), \quad k = \frac{\mu e^2}{\kappa_\omega h^2}, \quad \kappa_\omega = \sqrt{\frac{2\mu |\overline{\omega}|}{h^2}} \quad (19.33)$$

тождественно равно нулю.

Действительно, как было показано выше, можно записать следующее:

$$\begin{aligned} & \int_0^\infty \left[ \overline{\phi(z)} \left( \widehat{H} - \overline{\omega} \right) C W_{k, 1/2}(2\kappa_\omega z) - C W_{k, 1/2} \left( 2\kappa_\omega \overline{\left( \widehat{H} - \omega \right) \phi(z)} \right) \right] dz = \\ & = \frac{h^2}{2\mu} \lim_{\delta \rightarrow \infty} \left[ C W_{k, 1/2}(2\kappa_\omega z) \overline{\phi'(z)} - \overline{\phi(z)} C W'_{k, 1/2}(2\kappa_\omega z) \right]_{z=\delta} = \\ & = -\frac{h^2}{2\mu} \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{1}{1+2Az \ln 2Az} \overline{\phi(z)} C \frac{d}{dz} \left[ (1+2Az \ln 2Az) W_{k, 1/2}(2\kappa_\omega z) \right]_{z=\delta} \end{aligned} \quad (19.34)$$

При этом оба слагаемых в левой части в силу приведенных выше условий, очевидно, равны нулю. Однако правая часть обращается в нуль лишь при  $C = 0$ , поскольку при не вещественных  $\omega$  для  $W_{k, 1/2}(2\kappa_\omega z)$  не выполняется условие.

Таким образом, энергетические уровни четной серии определяются как собственные значения гамильтониана:

$$\widehat{H} = -\frac{h^2}{2\mu} \frac{d^2}{dz^2} - \frac{e^2}{|z|}, \quad (19.35)$$

на множестве дважды дифференцируемых функций  $\phi(z)$  на полуоси  $(0, \infty)$ , удовлетворяющий граничным условиям.

На полуоси  $(-\infty, 0)$ , естественно, рассматриваются четные продолжения соответствующих СФ.

Используя асимптотическое разложение функции Уиттекера  $W_{k,1/2}(2\kappa z)$  при  $z \rightarrow 0$ , получим из граничных условий для непрерывных решений нечетной серии:

$$\phi(0) = 0 . \quad (19.36)$$

СЗ нечетной серии:

$$\frac{1}{\Gamma(1-k)} = 0; \Rightarrow 1 - k = n, n = 0, 1, 2, K, \quad (19.37)$$

следовательно,

$$\boxed{E_n = -\frac{\mu e^4}{2h^2} \frac{1}{n^2}}, n = 1, 2, 3, K . \quad (19.38)$$

Используя условие (19.28), получим, что СЗ четной серии:

$$E_p = -\frac{\mu e^4}{2h^2} \frac{1}{p^2}, \quad (19.39)$$

где  $p$  в соответствии с условием (19.28) определяется из уравнения:

$$-p \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{j(j-p)} + \frac{1}{2p} - \ln p + \gamma - 1 = 0, \quad (19.40)$$

следовательно,

$$p = n + \frac{1}{2} + \Delta(n), n = 0, 1, 2, K, \quad (19.41)$$

где  $\gamma \approx 0.5772$  - постоянная Эйлера-Маскерони.

$\Delta(n)$  - медленно растущая функция целого неотрицательного числа  $n$ , которая в интервале  $n \in [0, 10]$  приобретает значения от -0.013 до 0.0156.

Соответствующие нормированные ВФ, удовлетворяющие уравнению (19.19) и граничное условие:

$$\begin{cases} \phi_n(z) = \left( \frac{A}{2n(n-1)^2(n-1)!^2} \right)^{1/2} L_{n-1}^1 \left( \frac{2A|z|}{n} \right) \frac{2A|z|}{n} e^{-\frac{A|z|}{n}}, n = 2, 3, 4, K \\ \phi_1(z) = \sqrt{2} A^{3/2} z e^{-A|z|} \end{cases} \quad (19.42)$$

где  $L_{n-1}^1(2A|z|/n)$  - обобщенный полином Лагерра.

Для четной серии в соответствии с уравнением (19.19) и условием (19.28) получим следующее:

$$\phi_p(z) = C_p W_{p,1/2} \left( \frac{2A|z|}{p} \right), \quad (19.43)$$



где  $C_p$  - нормировочный множитель.

Итак, нам удалось продемонстрировать, что волновое уравнение для огибающей экситона большого радиуса в квазиодномерных полупроводниках может быть сведено к одномерному уравнению Шредингера с притягивающим потенциалом, стремящемся к кулоновскому на больших расстояниях между электроном и дыркой, формирующими экситон. Далее мы проанализировали предельный случай кулоновского притяжения двух точечных зарядов в одном измерении на всей действительной оси, при этом пересматривали общепринятый подход Лаудона к решению подобной задачи. Напомним, что полученный Лаудоном спектр СЗ задачи являлся следствием выбора специфических способов регуляризации кулоновского потенциала в начале координат с последующим предельным переходом к чисто кулоновскому потенциалу и имел вид серии Бальмера с двухкратновырожденными уравнениями, за исключением уровня, соответствующего основному состоянию из подмножества четных СФ задачи и уходящего на  $\infty$  в кулоновском пределе.

Вообще говоря, в одномерном пространстве спектр СЗ гамильтониана с кулоновской потенциальной частью строго зависит от выбора граничного условия для СФ в начале координат, при этом выбор конкретного граничного условия может быть сделан только на основе дополнительных физических соображений для конкретного квазиодномерного объекта. Из-за четности кулоновского потенциала множество СФ задачи разбивается на четное и нечетное подмножества. При этом, так как любые ненулевые СФ одномерного гамильтониана с кулоновской потенциальной частью не дифференцируемы в нуле, возникает вопрос о граничном условии в начале координат для четных СФ. Мы показали, что возможен выбор такого специального граничного условия, при котором спектр СЗ будет невырожденным, а СЗ, соответствующие основному состоянию, конечными.

## Одномерный атом водорода в импульсном представлении

Уравнение Шредингера в координатном представлении для электрона, движущегося в одномерном кулоновском потенциале, имеет следующий вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \frac{e^2}{|x|} \psi(x) = E\psi(x). \quad (19.44)$$

Поскольку  $\hat{x} \rightarrow i\hbar \frac{d}{dp}$ , то

$$\frac{\hat{1}}{x} \longrightarrow \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^p \dots dp'. \quad (19.45)$$

Запишем уравнение (19.44) для областей  $x > 0$  и  $x < 0$  отдельно, а затем, используя (19.45), запишем уравнение Шредингера в импульсном представлении в виде пары интегральных уравнений Вольтерра:

$$\frac{p^2}{2m}\varphi_+(p) + \frac{ie^2}{\hbar} \int_{-\infty}^p \varphi_+(p') dp' = E\varphi_+(p) , \quad (19.46)$$

$$\frac{p^2}{2m}\varphi_-(p) - \frac{ie^2}{\hbar} \int_{-\infty}^p \varphi_-(p') dp' = E\varphi_-(p) . \quad (19.47)$$

ВФ в импульсном пространстве связаны с ВФ в координатном пространстве следующим образом:

$$\psi_{\pm}(x) = (2\psi\hbar)^{-1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar}px} \varphi_{\pm}(p) dp , \quad (19.48)$$

где пространственно-координатная часть функции  $\psi_+(x)$  ( $\psi_-(x)$ ) соответствует решению уравнения задачи на СЗ (19.44) справа (слева) от начала координат.

Другими словами,  $\psi_+(x)$  ( $\psi_-(x)$ ) определена только для  $x \geq 0$  ( $x \leq 0$ ), в то время как функции  $\varphi_+$  и  $\varphi_-$  определены на всем диапазоне значений  $p$  от  $-\infty$  до  $+\infty$ .

Основная проблема заключается в том, как нужно объединить  $\psi_+$  и  $\psi_-$  при  $x = 0$ ?

Одним из преимуществ импульсного представления является то, что не нужно беспокоиться о значении  $\psi$  и ее производной в начале координат, чтобы получить СЗ энергии и СФ задачи.

При комплексном сопряжении уравнение (19.46) переходит в (19.47) и наоборот. Это равносильно тому, что замена:

$$\varphi_{\pm}(p) \longrightarrow \varphi_{\mp}^*(p) , \quad (19.49)$$

оставляет уравнение Шредингера неизменным.

Нас интересуют СЗ уравнений, поэтому, следуя Лаудону, введем безразмерный вещественный параметр  $\alpha$ :

$$E = -\frac{\hbar^2}{2ma_0^2\alpha^2} , \quad (19.50)$$

где  $a_0$  - радиус Бора:

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} . \quad (19.51)$$

Также безразмерная импульсная переменная:

$$k = \frac{pa_0}{\hbar} . \quad (19.52)$$

Следовательно,

$$\begin{matrix} (19.46) \\ (19.47) \end{matrix} \longrightarrow (1 + \alpha^2 k^2) \varphi_{\pm}(k) \pm i 2\alpha^2 \int_{-\infty}^k \varphi_{\pm}(k') dk' = 0 . \quad (19.53)$$

Единственные решения для  $\alpha = 0$  одинаково обращаются в нуль:

$$\varphi_{\pm}(k) = 0 , \quad (19.54)$$

что означает, что основное состояние Лаудона с  $\infty$  энергией недопустимо.

Далее воспользуемся операцией дифференцирования и получим два простых уравнения:

$$\frac{d\varphi_{\pm}}{dk} + \frac{2(k \pm i)}{k^2 + \alpha^{-2}} \varphi_{\pm} = 0 . \quad (19.55)$$

Решения этих дифференциальных уравнений могут быть записаны в виде:

$$\varphi_{\pm}^{\alpha}(k) = \frac{\alpha^2 A_{\pm}}{(1 + \alpha^2 k^2)} \left( \frac{1 \mp i\alpha k}{1 \pm i\alpha k} \right)^{\alpha} , \quad (19.56)$$

где  $A_{\pm}$  - константы интегрирования.

$\varphi_{+}^{\alpha}$  и  $\varphi_{-}^{\alpha}$  в общем случае являются многозначными от  $k$  и, следовательно, они не пригодны в качестве СФ для данной задачи.

Только тогда, когда  $\alpha$  принимает целочисленное значение, функции  $\varphi_{\pm}^{\alpha}$  становятся однозначными.

Но значение  $\alpha = 0$  не допустимо, так как в таком случае функции одинаково обращаются в ноль, в то время как отрицательные значения  $\alpha$  просто меняют «ролями»  $\varphi_{+}^{\alpha}$  и  $\varphi_{-}^{\alpha}$ , и нет необходимости учитывать их отдельно.

Таким образом, очевидно, что соответствующие СФ связанного состояния могут быть сформированы только при положительном целом  $\alpha = n$ ,  $n = 1, 2, 3, \dots$

СЗ энергии задаются с помощью формулы Бальмера:

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{e^2}{a_0} \frac{1}{n^2} . \quad (19.57)$$

Нормированные СФ, соответствующие  $n$ -ому энергетическому уровню, выглядят следующим образом:

$$\varphi_{+}^n(p) = \left( \frac{2a_0 n}{\pi \hbar} \right)^{1/2} \left[ 1 + \left( \frac{n p a_0}{\hbar} \right)^2 \right]^{-1} \times \left( \frac{1 - i \left( \frac{n p a_0}{\hbar} \right)}{1 + i \left( \frac{n p a_0}{\hbar} \right)} \right)^n , \quad (19.58)$$

$$\varphi_{-}^n(p) = \left( \frac{2a_0 n}{\pi \hbar} \right)^{1/2} \left[ 1 + \left( \frac{n p a_0}{\hbar} \right)^2 \right]^{-1} \times \left( \frac{1 + i \left( \frac{n p a_0}{\hbar} \right)}{1 - i \left( \frac{n p a_0}{\hbar} \right)} \right)^n . \quad (19.59)$$

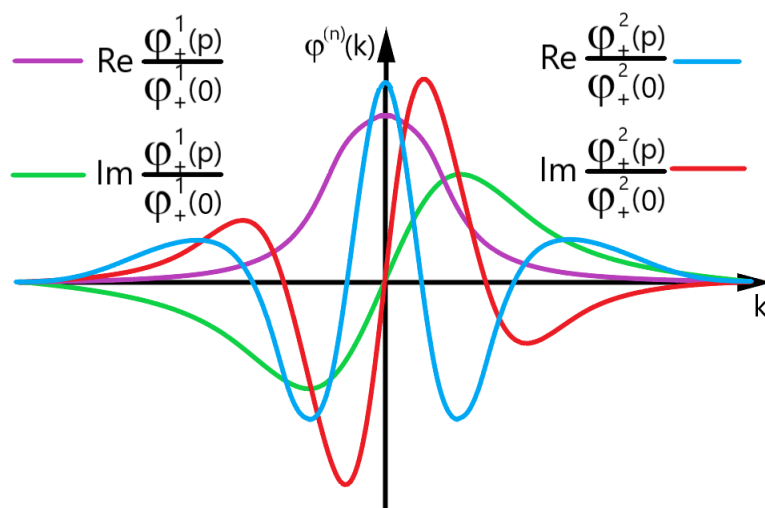


Рис. 19.1. Действительные и мнимые части ВФ импульсного пространства

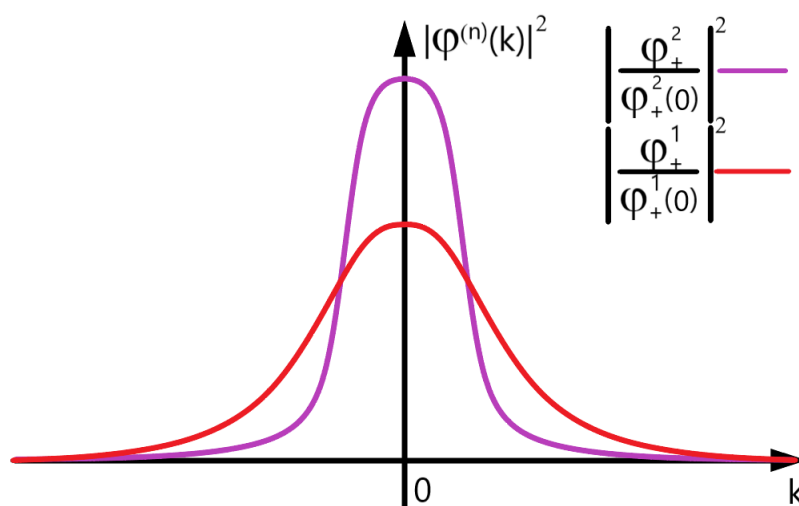


Рис. 19.2. Соответствующие действительным и мнимым частям ВФ импульсного пространства плотности вероятности

Соотношение  $|\varphi_+^n(p)|^2 = |\varphi_-^n(p)|^2$ , которое справедливо для всех  $n$ , является одним из проявлений нарушения симметрии отображения в системе.

Казалось бы, что функция  $\varphi_+$  описывает электрон, движущийся справа от сингулярности, а  $\varphi_-$  описывает его движение столько слева от нее. Тем не менее, поскольку на движение электрона в одной из этих областей не влияет то, что происходит в другой области, функции  $\varphi_+$  и  $\varphi_-$  должны рассматриваться как полные СФ системы.

Обратим внимание, что СФ импульсного пространства  $\varphi_{\pm}^n$  являются не собственными состояниями четности, а «зеркальными отражениями» друг друга.

Для оператора четности  $\hat{P}$  имеем следующее:

$$\hat{P}\varphi_{\pm}^n = \varphi_{\mp}^n . \quad (19.60)$$

В координатном представлении уравнение:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_{\pm}^n(p) dp = 0 , \quad (19.61)$$

означает, что все допустимые СФ должны обращаться в нуль в начале координат:

$$\psi_{\pm}^n(x) \Big|_{x=0} = 0 . \quad (19.62)$$

Фактически, уравнения (19.61, 19.62) оказываются единственными совместимыми с сингулярной природой кулоновского потенциала уравнениями.

Если эти условия не выполняются, то оператор гамильтониана становится не эрмитовым по отношению к набору собственных состояний.

Рассмотрим уравнение (19.61). Если мы имеем систему в произвольном состоянии  $\Phi$ , то суммарный поток частиц, пересекающий начало координат с одной стороны сингулярности в другую, всегда равен нулю.

Так как функция  $\Phi$  всегда выражена в качестве линейной комбинации СФ, и все они обращаются в нуль в начале координат, то поток:

$$j = \frac{i\hbar}{m} \left( \Phi \frac{\partial \Phi^*}{\partial x} - \Phi^* \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right) , \quad (19.63)$$

безусловно, должен зануляться при  $x = 0$ .

Физически это означает, что если у нас есть электрон, движущийся справа (слева) от сингулярности, он останется там навсегда. Имея это в виду, приступим к вычислению аналогов  $\varphi_{\pm}^n$  в координатном представлении.

Подставляя уравнение (19.58 или 19.59) в (19.48) и интегрируя по контуру, получим, что:

$$\psi_+^n(x) = \begin{cases} \left(\frac{4}{a_0^3 n^3}\right)^{1/2} (-1)^{n-1} x L_{n-1}^1\left(\frac{2x}{na_0}\right) e^{-\frac{x}{na_0}} , & x > 0 \\ 0 , & x \leq 0 \end{cases} \quad (19.64)$$

$$\psi_-^n(x) = \begin{cases} 0 , & x \geq 0 \\ \left(\frac{4}{a_0^3 n^3}\right)^{1/2} (-1)^n x L_{n-1}^1\left(\frac{2x}{na_0}\right) e^{\frac{x}{na_0}} , & x < 0 \end{cases} \quad (19.65)$$

где  $L_{n-1}^1(z)$  - соответствующие многочлены Лаггера.

Таким образом, (19.64 , 19.65) являются СФ в координатном пространстве функций одномерного атома водорода.

Из СФ  $\varphi_{\pm}^n$  можно построить собственные состояния четности:

$$\begin{aligned}\varphi_{even}^n &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_+^n + \varphi_-^n) \\ \varphi_{odd}^n &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_+^n - \varphi_-^n)\end{aligned}\tag{19.66}$$

Аналогично для координатного пространства:

$$\begin{aligned}\psi_{even}^n &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_+^n + \psi_-^n) \\ \psi_{odd}^n &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_+^n - \psi_-^n)\end{aligned}\tag{19.67}$$

Уравнение (19.67) соответствует конечным энергетическим СФ, полученным Лаудоном.

Однако уравнения (19.66, 19.67) не представляют физически реализуемые состояния системы.

Таким образом, одномерный атом водорода не имеет собственных состояний с определенной четностью.

## Семинар 20. Доклад „Конфайнмент атомных систем“

Доклад подготовил Бойцов Михаил Александрович

Ранее на семинарах мы решали задачи только в неограниченном пространстве. Теперь же ознакомимся с задачами, которые ставятся изначально не во всем пространстве, а в некоторой области. Примером такой задачи является атом в сферической полости.

### Атом в сферической полости

Для начала вспомним общий вид постановки таких задач. Обычно мы записывали гамильтониан, однако в этом случае необходимо записать энергетический функционал, вернувшись на шаг назад:

$$E[\psi] = \int_{\Omega} d\vec{r} \left[ \frac{\hbar^2}{2m} |\vec{\nabla}\psi|^2 + U(r) |\psi|^2 \right] + \frac{\hbar^2}{2m} \int_{\Sigma} d\sigma \lambda(\vec{r}) |\psi|^2, \quad (20.1)$$

где  $\lambda(\vec{r})$  в формуле (20.1) представляет собой контактное взаимодействие с поверхностью, ограничивающее объем. Тем не менее, важно отметить, что мы работаем с приближением, так как частица, находясь внутри полости, прекрасно может видеть свое окружение.

Отметим, что:

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1 \text{ (нормировка)}. \quad (20.2)$$

Далее проварьируем энергетический функционал по бра вектору и таким образом, получим привычное нам уравнение Шредингера, но уже в объеме:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{r}) \right] \psi = E\psi, \quad r \in \Omega. \quad (20.3)$$

Запишем граничное условие:

$$\left[ \vec{n} \vec{\nabla} + \lambda(\vec{r}) \right] \psi = 0, \quad r \in \Sigma, \quad (20.4)$$

где  $\vec{n}$  - внешняя нормаль к поверхности, ограничивающей объем.

Таким образом, мы получили условие на поверхности на волновую функцию  $\psi$ . Данное условие является условием третьего рода и не подразумевает ни зануление

самой функции, ни зануление ее производной. В данном случае условие более общее и сложное.

Рассмотрим несколько частных случаев. Например, рассмотрим водородоподобный атом в некоторой сферической области:

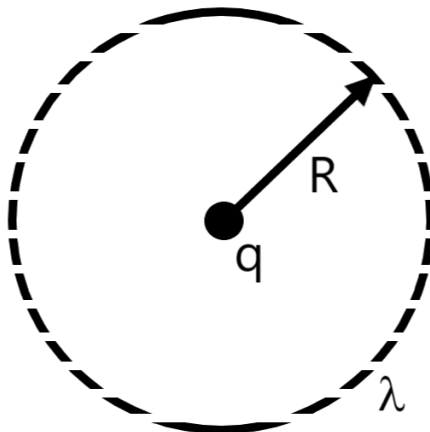


Рис. 20.1. Водородоподобный атом в сферической полости

В качестве контактного потенциала выберем константу. Потенциал внутри объема задается обычным кулоновским потенциалом:

$$U(r) = -\frac{q}{r}, \quad (20.5)$$

где

$$q = Ze^2 \quad (20.6)$$

Теперь мы можем записать решение уравнения (20.3), так как для потенциала (20.5) мы уже знаем решение в неограниченном случае:

$$R_l(r) = A e^{-\gamma r} r^l \Phi(b_l, c_l, 2\gamma r), \quad (20.7)$$

где  $\Phi$  - это функция Куммера. В (20.7) введена следующая параметризация:

$$\begin{cases} \gamma = \sqrt{-2E} \\ b_l = l + 1 - \frac{q}{\gamma} \\ c_l = 2l + 2 \end{cases} \quad (20.8)$$

Необходимо, чтобы решение (20.7) удовлетворяло граничному условию (20.4):

$$\left[ \vec{n} \vec{\nabla} + \lambda \right] \psi \longrightarrow \left[ \frac{d}{dr} + \lambda \right] R_l = 0. \quad (20.9)$$



Воспользуемся следующей формулой:

$$\Phi' = \frac{b}{x} [\Phi(b_+) - \Phi(b)] , \quad (20.10)$$

где

$$\Phi(b) = \Phi(b, c, x) ; \Phi(b_+) = \Phi(b + 1, c, x) . \quad (20.11)$$

Далее подставим функцию (20.5) в (20.10) при  $r = R$ :

$$\left[ \frac{q}{\gamma} + (\lambda - \gamma) R - 1 \right] \Phi_R + \left[ l + 1 - \frac{q}{\gamma} \right] \Phi_R(b_+) = 0 . \quad (20.12)$$

Таким образом, мы получили трансцендентное уравнение на параметр энергии  $\gamma$ . Разберемся с тем, как решить данное уравнение.

Проведем следующий анализ. Предположим, что  $r \rightarrow 0$ . Тогда можно предположить, что  $\gamma$  также будет функцией радиуса  $R$  при условии, что при  $R \rightarrow 0$ ,  $\gamma$  будет регулярно:

$$\gamma(R) = \gamma_0 + \gamma_1 R + \gamma_2 R^2 + \dots . \quad (20.13)$$

Фактически, мы выполнили разложение в ряд. Отметим, что гипергеометрические функции Куммера также можно разложить в степенной ряд. Таким образом, подставим все разложения в уравнение (20.12), приравнявая коэффициенты при равных степенях  $R$ , в результате чего получим:

$$l = 0, \lambda = q, \gamma_0 = q^2, \gamma_n = 0, n \geq 1 . \quad (20.14)$$

Первым интересным свойством, которое можно заметить, является то, что  $\gamma$  не зависит от  $R$ . То есть

$$E = E_{1s} = -\frac{q^2}{2} , \quad (20.15)$$

что является энергией основного состояния атома водорода

Таким образом, мы столкнулись с так называемым «Чеширским Котом». Независимо от того, есть ли граница или нет, энергия будет одинаковой. Более того, не изменятся и функции, описывающее данное состояние. Атом не будет чувствовать введение границы при таком контактном взаимодействии.

Данную задачу можно решать и другим способом. Так,  $\gamma(R)$  может иметь сингулярность в нуле и быть разложенной в ряд:

$$\gamma(R) = \frac{\varepsilon}{\sqrt{R}} + \varepsilon_0 + \varepsilon_1 \sqrt{R} + \dots . \quad (20.16)$$

Метод решения при таком разложении совершенно аналогичен предыдущему, однако он подразумевает наличие гораздо более сложных выкладок, поэтому имеет смысл сразу выписать ответ для энергии:

$$E(R) = -\frac{3(q-\lambda)}{2R} - \frac{q^2 + 3q\lambda + 6\lambda^2}{20} + O(\sqrt{R}) . \quad (20.17)$$

Легко заметить, что в случае  $q = \lambda$  получается выражение (20.15).

Далее рассмотрим ту же задачу, но с одним исключением, а именно: сместим ядро из центра сферической полости.

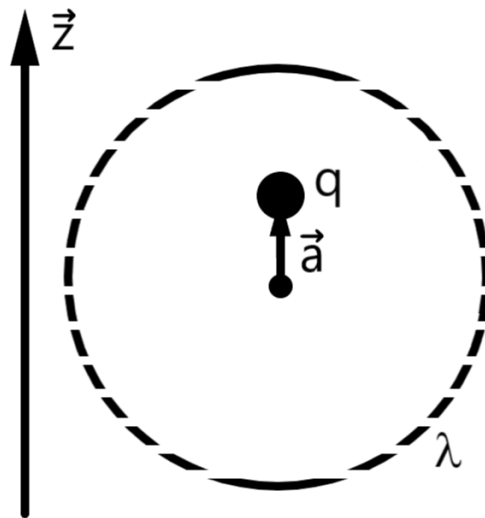


Рис. 20.2. Смещенный водородоподобный атом в сферической полости

Казалось бы, в этой задаче заведомо есть сферическая симметрия, однако это не так. Посмотрим, как будет изменяться энергия как функция от смещения.

Запишем гамильтониан для внутренней области:

$$H = -\frac{1}{2}\Delta_r - \frac{q}{|\vec{r} - \vec{a}|} . \quad (20.18)$$

В данной задаче происходит наложение сферической (гамильтониан) и цилиндрической (граничное условие) симметрии. Если обозначить  $\vec{r}' = \vec{r} - \vec{a}$  и «сесть» в смещенный центр, то при вращении все граничные условия будут сохраняться с точностью до поворота на угол  $\varphi$ . Решать такую задачу очень трудоемко.

Как проанализировать такую систему? Выберем некоторую произвольную пробную функции:

$$\psi_{tr} = \sum_{l=0}^N C_l R_l(r) P_l(\cos \theta) . \quad (20.19)$$

Отметим, из каких соображений была выбрана именно эта пробная функция. Так, мы знаем, что сферическая симметрия уже нарушена, однако цилиндрическая симметрия все еще сохраняется, то есть сохраняется третья проекция орбитального момента (квантовое число  $m$ ). Известно, что зависимость от  $m$  находится в экспоненте, поэтому, положив  $m = 0$ , «выключим» данную зависимость, оставив только зависимость от  $\theta$ .

Выберем следующий вид для функции  $R_l$ :

$$R_l(r) = d_l r^l e^{-\gamma_l r}, \quad (20.20)$$

где  $d_l$  - нормировочный коэффициент,  $\gamma_l$  - это коэффициенты, определяемые из граничных условий,  $l$  - это вещественные числа ( $C_l \in \mathbf{R}$ ). Выпишем явный вид для  $\gamma_l$  и  $d_l$ :

$$\gamma_l = \lambda + \frac{l}{R}; \quad d_l = \left( \frac{2l+1}{4\pi} \frac{(2\gamma_l)^{2l+3}}{\Gamma(2l+3, 0, 2\gamma R)} \right). \quad (20.21)$$

Обобщенная гамма функция отличается от обычной расстановкой пределов в интеграле:

$$\Gamma(x, x_0, x_1) = \int_{x_0}^{x_1} dt t^{x-1} e^{-t}. \quad (20.22)$$

Определим норму пробной функции:

$$\langle \psi_{tr} | \psi_{tr} \rangle = \sum_l C_l^2. \quad (20.23)$$

Определим энергетический функционал в терминах пробных функций:

$$E[\psi_{tr}] = \langle \psi_{tr} | H | \psi_{tr} \rangle = \sum_{l,s} C_l A_{ls} C_s. \quad (20.24)$$

Так, мы задали энергетический функционал как билинейную форму с матрицей  $A_{ls}$ . Далее задача сводится к вычислению интегралов (например, в программе Wolfram Mathematica). Тогда энергия основного состояния может быть вычислена из обычного уравнения на собственные значения:

$$\det(A_{ls} - E_{tr} \delta_{ls}) = 0. \quad (20.25)$$

Итак, из уравнения (20.25) сразу же можно найти энергию пробной функции посредством выбора минимального СЗ, которое объявляется наиболее удачной и низколежащей по энергии комбинацией из наших пробных функций. Даже при  $n = 10$

энергия оказывается меньшей, чем энергия при некотором заданном параметре смещения (то есть минимум «из всех минимумов по  $a$ » оказывается меньше, чем состояние в центре). Однако присутствует сильная зависимость от параметра  $\lambda$ .

Относительно аналогичным способом можно «победить» задачу с атомом водорода над плоскостью.

### Атом водорода над плоскостью

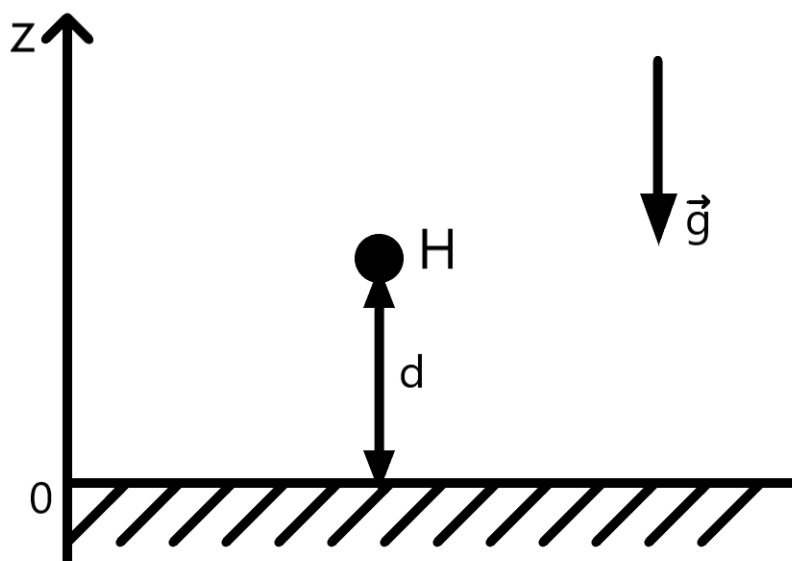


Рис. 20.3. Парение атома водорода над плоскостью

**Замечание 20.1.** «Победить» данную задачу нельзя, но можно продемонстрировать, что в ней наблюдается эффект парения атома над плоскостью.

В виде плоскости будем считать бесконечный жесткий стол. Над ним далеко от него отпускается атом водорода в основном состоянии, который под действием силы тяжести начинает опускаться на стол. Диссипацией пренебрегаем, считаем, что все в вакууме. Упадет ли атом водорода на стол?

Для атома стол представляет собой бесконечно высокую потенциальную стенку, ниже стола он опустится не может. Если есть барьер, то есть граничное условие при  $z = 0$ , при котором волновая функция должна зануляться. Вспомним, как устроена волновая функция атома: обычная кулоновская функция, так как у нас есть ядро и электрон:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R_{ln} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}. \quad (20.26)$$

Плоскости соответствует координата  $z = 0$ , что с точки зрения угла  $\theta = \pi/2$ . При каких  $l$  и  $m$  зануление волновой функции (20.26) будет выполняться?

$$\psi\left(\theta = \frac{\pi}{2}\right) = 0 \longrightarrow P_l^m(\cos\theta) = P_l^m(0) . \quad (20.27)$$

Четность полиномов Лежандра  $(-1)^l$ , а четность  $P_{lm} - (-1)^{l-m}$ . Таким образом, условием на зануление  $P_{lm}(0) = 0$ :

$$l - m = \text{нечетное} . \quad (20.28)$$

Такой атом на плоскость приземлится.

Если же состояние атома  $1s$ , то  $l = m = 0$ , из чего следует, что такой атом на плоскость не приземлится, он остановится, хоть его и притягивает гравитационное поле. Такой атом может попасть на плоскость в  $p$  состоянии с  $m = 0$ . В случае же  $2p$  состояния с  $m = \pm 1$  атом зависнет над плоскостью, так как  $m$  сохраняется (аксиальная симметрия сохраняется), он может попасть только куда-то выше. Выше это, например, состояние  $3d$ , которое имеет меньшую энергию связи, следовательно, нужно добавлять энергию атома.

Аналогичным способом можно показать, что на плоскости тоже будет наблюдаться данный эффект парения. Для этого нужно рассмотреть ситуацию немного сложнее, с другим энергетическим функционалом:

$$E = \int_0^{+\infty} dz \int \rho d\rho \left[ \frac{1}{2} |\nabla\psi|^2 + U(\rho, z) |\psi|^2 \right] + \frac{\lambda}{2} \int \rho d\rho |\psi(\rho, 0)|^2 , \quad (20.29)$$

где интеграл по  $d\varphi$  был опущен в силу того, что  $m = 0$ . Также отметим, что:

$$U(\rho, z) = -\frac{q}{\sqrt{\rho^2 + (z-d)^2}} . \quad (20.30)$$

Выберем пробную функцию в следующем виде:

$$\psi_{tr} = C \exp \left[ -A\sqrt{\rho^2 + (z-d)^2} - B(z-d) \right] , \quad (20.31)$$

где  $C$  - это нормировочный член, а по параметрам  $A$  и  $B$  будем осуществлять варьирование. Таким образом, получаем энергетический функционал:

$$E = \langle \psi_{tr} | H | \psi_{tr} \rangle = -\frac{q^2}{2} \left( \frac{1 - e^{-2qd} (1 + 2\lambda d + \lambda/q - qd) / 2}{1 - e^{-2qd} (1 + qd) / 2} \right) . \quad (20.32)$$

Соответственно, мы получили минимизированное по параметрам  $A$  и  $B$  выражение для энергии. Проанализируем, как выражение (20.32) зависит от параметра  $d$ .

В случае, если  $q_d \gg 1$ , то есть, когда  $d \gg a_0$ , выражение для энергии примет следующий вид:

$$E = -\frac{q^2}{2} + e^{-2qd} \left[ \frac{\lambda}{q} + 2qd[\lambda(q-1)] \right] + O(e^{-4qd}) . \quad (20.33)$$

Формула (20.33) трактуется как наличие небольшой поправки к энергии основного состояния, что и ожидалось.

Далее, варьируя выражение (20.32) по  $d$ , можно обнаружить, что минимальное значение энергии достигается при  $d$  не равно 0 и  $\infty$ , а при  $d$ , равном:

$$d_{min} = \frac{1}{2(q-\lambda)} . \quad (20.34)$$

Так, оказалось, что расстояние от плоскости, при котором энергия принимает минимальное значение, является ненулевым.

**Замечание 20.2.** Если  $q = \delta$ , то  $d$  устремится в  $\infty$ , что соответствует отлету атома на  $\infty$ . Если  $\lambda > q$ , то отталкивание от плоскости «побеждает», и атом снова улетает на  $\infty$ .

Нас же интересует случай отрицательных значений  $\lambda$ , то есть случай притяжения, в котором расстояние от плоскости до атома в состоянии с минимальной энергией будет ненулевым, что и демонстрирует эффект парения атома над плоскостью. Если же устремить  $\lambda \rightarrow \infty$ , то есть имитировать случай бесконечного притяжения, то атом сядет на плоскость.

Эффект парения атома давно известен и подтвержден экспериментально.



ФИЗИЧЕСКИЙ  
ФАКУЛЬТЕТ  
МГУ ИМЕНИ  
М.В. ЛОМОНОСОВА

*teach-in*  
ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ