А.Л. Барабанов

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

Часть 1

Москва 2005

В этой книге представлен конспект лекций по курсу квантовой механики, прочитанных мной в весеннем (часть 1) и осеннем (часть 2) семестрах 2004 года студентам факультета физической и квантовой электроники Московского физико-технического института. По построению и кругу обсуждаемых вопросов этот курс примерно соответствует годовым курсам квантовой механики, читаемых на других факультетах МФТИ.

Идея создания конспекта принадлежит студенту группы 154 А.В. Шелаеву. Он же, Артем Шелаев, выполнил основную часть работы по составлению конспекта (включая набор формул и создание рисунков в пакете LaTeX). Со своей стороны я не только внимательно прочел представленные Артемом тексты, но также исправил их, дополнил (стараясь не выходить за рамки заданного жанра – конспект) и отредактировал. Поэтому я несу полную ответственность за все формулировки в этой книге и, разумеется, за все возможные оплошности и опечатки. Буду признателен всем, кто пришлет мне свои замечания по адресу a_l_barabanov@mail.ru .

Я очень благодарен Артему Шелаеву, без инициативы которого эта книга не появилась бы, а также всем, кто ему помогал. Я также очень признателен всем своим коллегам по кафедре теоретической физики МФТИ за многочисленные обсуждения проблем квантовой механики и вопросов, связанных с ее изложением, в особенности, Б.В. Гешкенбейну, С.А. Гордюнину, Г.С. Ирошникову, Э.П. Котовой, В.П. Кузнецову, В.И. Манько, Д.Л. Осипову, В.П. Смилге, А.И. Тернову, С.В. Толоконникову, С.В. Фомичеву. Отдельно хотелось бы выразить благодарность С.П. Аллилуеву и Ю.М. Белоусову – не только за поддержку и вдохновляющие дискуссии, но и за последовательное утверждение на кафедре творческой и доброжелательной атмосферы. Особая признательность – Н.Н. Пастушковой – за неоценимый вклад в образ и стиль жизни кафедры теоретической физики МФТИ.

А.Л. Барабанов

Лекция №1. Квантовое описание свободного движения

Волна де Бройля

Попытки применить классическую механику к описанию движения микрочастиц, как правило, не приводят к успеху. Опыты по дифракции электронов указывают на необходимость отказа от траекторий. Следовательно мы не можем в любой момент t приписать частице определенное положение $\mathbf{r}$. Вместо этого мы вводим волновую функцию $\Psi(\mathbf{r},\, t)$. По определению $|\Psi(\mathbf{r},\, t)|^2 d^3r$ – это вероятность того, что в момент t частица находится в объеме d^3r вблизи $\mathbf{r}$.

Функция $|\Psi|^2$ тогда – плотность вероятности. Функция Ψ – амплитуда плотности вероятности или, просто, амплитуда вероятности.

Условие нормировки волновой функции имеет вид

$$\int\limits_{\mathbb{R}^3} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r = 1.$$

Гипотеза де Бройля состоит в том, что свободной частице соответствует волновая функция вида (волна де Бройля)

$$\Psi(\mathbf{r},\, t) = \Psi_0 e^{i\frac{\mathbf{pr}-Et}{\hbar}}.$$

Но при таком описании свободной частицы возникают две трудности.

1) Интеграл

$$\int\limits_{\mathbb{R}^3} |\Psi(\mathbf{r},\, t)|^2 d^3r = |\Psi_0|^2 \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3r$$

не сходится.

2) Пусть v – классическая скорость частицы. Тогда фазовая скорость волны де Бройля (а никакой другой скорости у волны де Бройля нет)

$$v_\text{ф} = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p}$$

не совпадает с v. Действительно, в нерелятивистском случае

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad \Rightarrow \quad v_\text{ф} = \frac{p}{2m} = \frac{v}{2}\,,$$

тогда как в релятивистском случае

$$E = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4} \quad \Rightarrow \quad v_{\text{ф}} = \frac{E}{p} = \sqrt{c^2 + \frac{m^2c^4}{p^2}} > c.$$

Поэтому, не отказываясь от волны де Бройля, наметим иной (более глубокий) подход к описанию свободной частицы.

Суперпозиция волн де Бройля

Пусть частица летит вдоль оси Ox, т.е. $\mathbf{p}||Ox$. Тогда одномерная волна де Бройля имеет вид

$$\Psi(x,\, t) = \Psi_0 e^{i\frac{px - Et}{\hbar}},$$

где p – импульс, E – энергия. Предположим, что уравнение для волновой функции является линейным. Тогда суперпозиция волн де Бройля также является волновой функцией. Складывая (интегрируя) волны де Бройля с весами $C(p)$, получаем волновую функцию вида:

$$\Psi(x,\, t) = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} C(p)\Psi_0 e^{i\frac{px - Et}{\hbar}} dp.$$

Такую волновую функцию называют волновым пакетом.

Исследуем интеграл от квадрата модуля волнового пакета:

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,\, t)|^2 dx = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \left(\int\limits_{-\infty}^{+\infty} C^*(p')\Psi_0^* e^{-i\frac{p'x - E't}{\hbar}} dp' \right) \times$$

$$\times \left(\int\limits_{-\infty}^{+\infty} C(p)\Psi_0 e^{i\frac{px - Et}{\hbar}} dp \right) dx =$$

$$= |\Psi_0|^2 \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dp' \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dp\; C^*(p')C(p) e^{i\frac{(E'-E)t}{\hbar}} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{i\frac{(p-p')x}{\hbar}} dx =$$

$$= \left| \text{т. к.} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{i\frac{(p-p')x}{\hbar}} dx = 2\pi\hbar\, \delta(p - p') \right| =$$

$$= 2\pi\hbar\,|\Psi_0|^2 \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dp' \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dp\; C^*(p')C(p)e^{i\frac{(E'-E)t}{\hbar}}\delta(p-p') =$$

$$= 2\pi\hbar\,|\Psi_0|^2 \int\limits_{-\infty}^{+\infty} |C(p)|^2 dp.$$

Пусть $\Psi_0 = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$, тогда условие нормировки приобретает вид

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,\,t)|^2 dx = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} |C(p)|^2 dp = 1.$$

Итак, пусть волна де Бройля – это

$$\Psi_p(x,\,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, e^{i\frac{px-Et}{\hbar}}.$$

Тогда волновой пакет имеет вид

$$\Psi(x,\,t) = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} C(p)\Psi_p(x,\,t)dp.$$

Мы доказали, что при любой весовой функции $C(p)$ такой, что $\int\limits_{-\infty}^{+\infty} |C(p)|^2 dp = 1$, волновой пакет нормирован на единицу. Естественно предположить, что $C(p)$ – это амплитуда вероятности того, что частица, волновая функция которой задана волновым пакетом, обладает импульсом p. Тогда $|C(p)|^2 dp$ – это вероятность того, что при измерении импульса частицы будет получено значение от p до $p+dp$.

Модельный волновой пакет

Исследуем теперь скорость движения волнового пакета. Для этого воспользуемся следующей моделью. Пусть функция $C(p)$ такова, что

$$C(p) = \begin{cases} C_0, & p \in (p_0 - \Delta p;\, p_0 + \Delta p), \\ 0, & p \in (-\infty;\, p_0 - \Delta p) \bigcap (p_0 + \Delta p;\, +\infty). \end{cases}$$

И пусть $\Delta p \ll p_0$ (неопределенность импульса мала). Тогда в окрестности p_0 справедливо

$$E(p) \approx E_0 + (p - p_0)\left(\frac{dE}{dp}\right)\bigg|_0 .$$

Запишем Ψ-функцию, отвечающую такой $C(p)$:

$$\Psi(x,\, t) = C_0 \int\limits_{p_0-\Delta p}^{p_0+\Delta p} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, e^{i\frac{px-Et}{\hbar}}\, dp =$$

$$= \frac{C_0}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int\limits_{p_0-\Delta p}^{p_0+\Delta p} e^{i\frac{px - E_0 t - (p-p_0)\left(\frac{dE}{dp}\right)_0 t}{\hbar}}\, dp =$$

$$= \frac{C_0}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, e^{i\frac{p_0 x - E_0 t}{\hbar}} \int\limits_{p_0-\Delta p}^{p_0+\Delta p} e^{i\frac{(p-p_0)\left(x - \left(\frac{dE}{dp}\right)_0 t\right)}{\hbar}}\, dp =$$

$$= \left|\begin{array}{l} \xi = \dfrac{p-p_0}{\hbar} \\ dp = \hbar\, d\xi \end{array}\right| = \frac{C_0\hbar}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, e^{i\frac{p_0 x - E_0 t}{\hbar}} \int\limits_{-\frac{\Delta p}{\hbar}}^{\frac{\Delta p}{\hbar}} e^{i\xi\left(x - \left(\frac{dE}{dp}\right)_0 t\right)} d\xi =$$

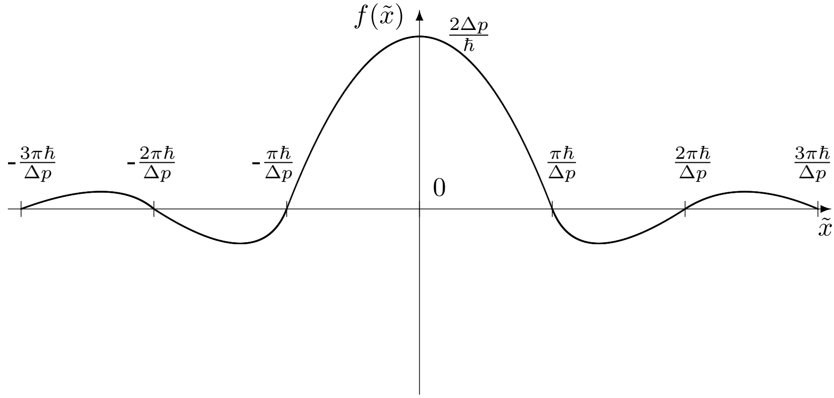
$$= \frac{C_0\hbar}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, e^{i\frac{p_0 x - E_0 t}{\hbar}} f(x - \left(\frac{dE}{dp}\right)_0 t),$$

где

$$f(\tilde{x}) = \int\limits_{-\frac{\Delta p}{\hbar}}^{\frac{\Delta p}{\hbar}} e^{i\xi\tilde{x}} d\xi = \frac{1}{i\tilde{x}} e^{i\xi\tilde{x}}\bigg|_{-\frac{\Delta p}{\hbar}}^{\frac{\Delta p}{\hbar}} = \frac{2\sin\frac{\Delta p \tilde{x}}{\hbar}}{\tilde{x}}.$$

График функции $f(\tilde{x})$ представлен на рисунке. Найдем отношение высот двух первых максимумов $|f(\tilde{x})|$:

$$\left| f\left(\frac{3\pi\hbar}{2\Delta p}\right)\right| = \left|\frac{2\sin\left(\frac{3}{2}\pi\right)}{(3\pi\hbar)/(2\Delta p)}\right| = \frac{4\Delta p}{3\pi\hbar} = \frac{2\Delta p}{\hbar}\left(\frac{2}{3\pi}\right) \approx \frac{f(0)}{5}.$$



Лекция №2. Операторы физических величин

Групповая скорость

Как было показано на прошлой лекции, модельный волновой пакет может быть записан в следующей форме

$$\Psi(x,\,t) = \frac{C_0\hbar}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, e^{i\frac{p_0 x - E_0 t}{\hbar}} f(x - \left(\frac{dE}{dp}\right)_0 t).$$

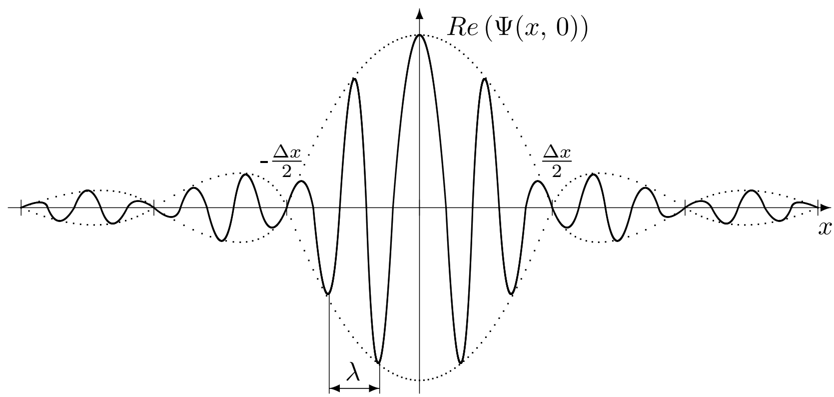


График функции $Re\,(\Psi(x,\,0))$ представлен на рисунке. Для длины волны имеем:

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p_0} \ll \frac{2\pi\hbar}{\Delta p}, \quad \text{т.к.} \quad p_0 \gg \Delta p.$$

Частица локализована преимущественно в области $[x_0 - \dfrac{\Delta x}{2};\, x_0 + \dfrac{\Delta x}{2}]$ шириной Δx, где $x_0 = \left(\dfrac{dE}{dp}\right)_0 t$ и $\Delta x = \dfrac{2\pi\hbar}{\Delta p}$. То есть справедливо

$$\Delta x \Delta p \simeq 2\pi\hbar.$$

Групповая скорость волны (скорость движения области локализации частицы) есть

$$v_{\text{гр}} = \left(\frac{dE}{dp}\right)_0.$$

Как в нерелятивистском случае

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad \Rightarrow \quad v_{\text{гр}} = \frac{p}{m} = v_{\text{част}},$$

так и в релятивистском случае

$$E = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4} \quad \Rightarrow \quad v_{\text{гр}} = \frac{c^2 p}{\sqrt{p^2c^2 + m^2c^4}} = \frac{c^2 p}{E} = v_{\text{част}},$$

групповая скорость совпадает со скоростью частицы.

Замечание. В области локализации частицы волновая функция хорошо апроксимируется волной де-Бройля.

Свойства волн де Бройля

В процессе вычисления интеграла от квадрата модуля $|\Psi(x,\,t)|^2$ волнового пакета мы получили

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*_{p'}(x,\,t)\Psi_p(x,\,t)dx = \frac{1}{2\pi\hbar}\, e^{i\frac{(E'-E)t}{\hbar}} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{i\frac{(p-p')x}{\hbar}} dx =$$

$$= \left| \text{т. к.} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{i\frac{(p-p')x}{\hbar}} dx = 2\pi\delta\left(\frac{p-p'}{\hbar}\right) = 2\pi\hbar\,\delta(p-p') \right| =$$

$$= e^{i\frac{(E'-E)t}{\hbar}} \delta(p-p') = \delta(p-p').$$

Этот результат называется условием нормировки волн де Бройля на δ-функцию

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*_{p'}(x,\, t)\Psi_p(x,\, t)dx = \delta(p-p').$$

Замечание. Если $p = p'$, то правая часть обращается в бесконечность. В этом смысле, как уже ранее было указано, интеграл от квадрата модуля волны де Бройля не сходится.

Замечание. Волна де Бройля Ψ_p – это волновая функция состояния, которое не может быть осуществлено (состояние свободного движения частицы со строго определенным импульсом p). Поэтому нет причин беспокоиться по поводу того, что волна де Бройля не может быть нормирована на единицу.

Аналогично, в силу того, что p и x входят в волну де Бройля симметрично, справедливо

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*_{p}(x',\, t)\Psi_p(x,\, t)dp = \delta(x-x').$$

Это условие называется "условие полноты". Смысл названия будет ясен из дальнейшего.

Амплитуда $C(p)$

По известной $C(p)$ можно построить волновую функцию $\Psi(x,\, t)$

$$\Psi(x,\, t) = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} C(p)\Psi_p(x,\, t)dp.$$

Легко понять, что, зная $\Psi(x,\,t)$, можно найти соответствующую ей $C(p)$, так как $C(p)$ – это, по существу, фурье-образ волновой функции $\Psi(x,\,t)$. Действительно,

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*_{p'}(x,\,t)\Psi(x,\,t)dx = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} C(p)\left(\int\limits_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*_{p'}(x,\,t)\Psi_p(x,\,t)dp\right) = C(p').$$

Таким образом

$$C(p) = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*_p(x,\,t)\Psi(x,\,t)dx.$$

Вычисление средних значений

По определению волновой функции, $|\Psi(x,\,t)|^2dx$ – это вероятность найти частицу в интервале от x до $x+dx$. Тогда среднее значение координаты есть

$$\langle x\rangle = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} x|\Psi(x,\,t)|^2dx.$$

Аналогично

$$\langle p\rangle = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} p|C(p)|^2dp.$$

Преобразуем это выражение:

$$\langle p\rangle = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} p\,|C(p)|^2dp = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} p\,C^*(p)C(p)dp =$$

$$= \int\limits_{-\infty}^{+\infty} p\,C^*(p)\left(\int\limits_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*_p(x,\,t)\Psi(x,\,t)dx\right)dp =$$

$$= \left| \text{т. к. } p\,\Psi_p^*(x,\,t) = i\hbar\frac{d}{dx}\Psi_p^*(x,\,t) \right| =$$

$$= \int\limits_{-\infty}^{+\infty} C^*(p)\left(i\hbar\int\limits_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\Psi_p^*(x,\,t)}{dx}\Psi(x,\,t)dx \right) dp.$$

Проинтегрируем выражение в скобках по частям:

$$i\hbar\int\limits_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\Psi_p^*(x,\,t)}{dx}\Psi(x,\,t)dx = i\hbar\,\Psi_p^*(x,\,t)\Psi(x,\,t)\Big|_{-\infty}^{+\infty} -$$

$$-i\hbar\int\limits_{-\infty}^{+\infty} \Psi_p^*(x,\,t)\frac{d\Psi(x,\,t)}{dx}\,dx,$$

и учтем, что $\Psi(-\infty,\,t) = \Psi(+\infty,\,t) = 0$ в силу того, что интеграл $\int\limits_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,\,t)|dx$ конечен. Продолжаем преобразовывать выражение для $\langle p\rangle$:

$$\langle p\rangle = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} C^*(p)\left(i\hbar\int\limits_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\Psi_p^*(x,\,t)}{dx}\Psi(x,\,t)dx \right) dp =$$

$$= \int\limits_{-\infty}^{+\infty} C^*(p)\left(-i\hbar\int\limits_{-\infty}^{+\infty} \Psi_p^*(x,\,t)\frac{d\Psi(x,\,t)}{dx}\,dx \right) dp =$$

$$= \int\limits_{-\infty}^{+\infty} (-i\hbar)\left(\int\limits_{-\infty}^{+\infty} C^*(p)\Psi_p^*(x,\,t)dp \right) \frac{d\Psi(x,\,t)}{dx}\,dx =$$

$$= -i\hbar\int\limits_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,\,t)\frac{d\Psi(x,\,t)}{dx}\,dx = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,\,t)\left(-i\hbar\frac{d}{dx} \right)\Psi(x,\,t)dx.$$

Таким образом мы получили формулу для определения $\langle p \rangle$, в которую входит непосредственно волновая функция $\Psi(x,\, t)$.

Выпишем полученные соотношения:

$$\langle x \rangle = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,\, t)(\hat{x}\, \Psi(x,\, t))dx, \quad \hat{x} = x,$$

$$\langle p \rangle = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,\, t)(\hat{p}\, \Psi(x,\, t))dx, \quad \hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}.$$

Таким образом мы получили вид оператора координаты $\hat{x}$ и оператора импульса $\hat{p}$.

Замечание. При переходе от классической к квантовой механике мы теряем однозначность определения x, p, ..., но приобретаем взаимосвязи между этими физическими величинами. В классической физике траектория и импульс точно определены и не связаны друг с другом. В квантовой механике как траектория, так и импульс точно не определены, но их распределения (амплитуды вероятностей – $\Psi(x,\, t)$ и $C(p)$) связаны друг с другом.

Постановка задачи на собственные функции и собственные значения операторов

Для волны де Бройля справедливо

$$\hat{p}\Psi_p(x,\, t) = p\Psi_p(x,\, t).$$

Задача о поиске функций $\Psi_f(\mathbf{q})$, удовлетворяющих уравнению общего вида

$$\hat{F}\Psi_f(\mathbf{q}) = f\Psi_f(\mathbf{q}),$$

называется задачей о нахождении собственных функций $\Psi_f(\mathbf{q})$ и отвечающих им собственных значений f оператора $\hat{F}$. Набор всех значений $\{f\}$ называется спектром оператора $\hat{F}$.

Если спектр дискретен, т.е. $\{f\} = f_1,\, f_2,\, \ldots,\, f_n,\, \ldots$, то пользуются обозначением $\Psi_{f_n}(\mathbf{q}) = \Psi_n(\mathbf{q})$. Тогда

$$\hat{F}\Psi_n(\mathbf{q}) = f_n\Psi_n(\mathbf{q}).$$

Однако спектр может быть и непрерывной величиной. В частности, спектром оператора импульса $\hat{p}$ является вся действительная ось $p \in (-\infty; +\infty)$.

Лекция №3. Постулаты квантовой механики

Обозначения и определения

Введем обозначения для описания произвольных квантовых систем.

Пусть $(q_1, q_2, \cdots, q_n) \equiv \mathbf{q}$ – конфигурационное пространство (пространство обобщенных координат физической системы), $\mathbf{q}$ — действительный вектор. Интеграл

$$\int \Phi^*(\mathbf{q})\Psi(\mathbf{q})dq \equiv \langle\Phi|\Psi\rangle = \langle\Psi|\Phi\rangle^*$$

называется проекцией Ψ на Φ. Если $\langle\Phi|\Psi\rangle = 0$, то говорят, что Φ и Ψ ортогональны.

Тогда в новых обозначениях основные соотношения запишутся следующим образом:

$\langle\Psi|\Psi\rangle = 1$ – условие нормировки на единицу,

$\langle\Psi_{p'}|\Psi_p\rangle = \delta(p - p')$ – условие нормировки на δ-функцию,

$\langle\Psi_p|\Psi\rangle = C(p)$ – импульсная амплитуда вероятности,

$\langle p\rangle = \langle\Psi|\hat{p}\,\Psi\rangle$ – средний импульс,

$\langle x\rangle = \langle\Psi|\hat{x}\,\Psi\rangle$ – средняя координата.

В общем случае

$$\langle\Phi|\hat{F}\Psi\rangle = \int \Phi^*(\mathbf{q})(\hat{F}\Psi(\mathbf{q}))dq,$$

$$\langle\hat{G}\Phi|\Psi\rangle = \int(\hat{G}\Phi(\mathbf{q}))^*\Psi(\mathbf{q})dq,$$

где $\langle\Phi|\hat{F}\Psi\rangle \equiv \langle\Phi|\hat{F}|\Psi\rangle$ – матричный элемент $\hat{F}$ по Φ и Ψ. Величина $\langle\Psi|\hat{F}\Psi\rangle$ называется диагональным матричным элементом.

Определение: $\hat{F}^+$ – оператор, эрмитово сопряженный по отношению к $\hat{F}$ на множестве функций Ω, если

$$\forall \Phi,\, \Psi \in \Omega \quad \rightarrow \quad \langle \Phi | \hat{F} \Psi \rangle = \langle \hat{F}^+ \Phi | \Psi \rangle.$$

Определение: Если $\hat{F}^+ = \hat{F}$, то $\hat{F}$ – самосопряженный или эрмитовый оператор.

Если $\hat{F}$ – эрмитовый оператор, то

$$\langle \Psi | \hat{F} \Psi \rangle = \langle \hat{F}^+ \Psi | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{F}^+ \Psi \rangle^* = \langle \Psi | \hat{F} \Psi \rangle^*,$$

то есть $\langle \Psi | \hat{F} \Psi \rangle$ – действителен.

Определение: $\hat{F}$ называют линейным на множестве функций Ω, если

$$\hat{F}(c_1 \Psi_1 + c_2 \Psi_2) = c_1 \hat{F} \Psi_1 + c_2 \hat{F} \Psi_2 \quad \forall \Phi,\, \Psi \in \Omega, \quad \forall c_1,\, c_2 \in \mathbb{C}.$$

Постулаты

Теперь сформулируем 4 постулата квантовой механики и получим некоторые следствия из них.

I постулат. Пусть произвольной системе соответствует конфигурационное пространство $\mathbf{q} = (q_1,\, \ldots,\, q_n)$. Система полностью описывается волновой функцией $\Psi(\mathbf{q},\, t)$ такой, что $|\Psi(\mathbf{q},\, t)|^2 d\mathbf{q}$ есть вероятность обнаружить систему в $d\mathbf{q}$ в момент времени t.

Потребуем для волновой функции (условие нормировки)

$$\int |\Psi(\mathbf{q},\, t)|^2 d\mathbf{q} = 1 \quad \Leftrightarrow \quad \langle \Psi | \Psi \rangle = 1.$$

II постулат. Принцип суперпозиции

а) Если $\Psi_1(\mathbf{q},\, t)$ – волновая функция состояния 1, а $\Psi_2(\mathbf{q},\, t)$ – волновая функция состояния 2, то $c_1 \Psi_1(\mathbf{q},\, t) + c_2 \Psi_2(\mathbf{q},\, t)$ – это волновая функция некоторого нового состояния, где c_1 и c_2 – произвольные (с точностью до условия нормировки) комплексные числа.

б) Если измерение в состоянии 1 дает результат 1, а измерение в состоянии 2 дает результат 2, то измерение в суперпозиции этих состояний дает либо результат 1, либо результат 2.

III постулат. Каждой физической величине F сопоставляется линейный и эрмитовый оператор $\hat{F}$. Измерение величины F дает одно из собственных значений оператора $\hat{F}$. Если состояние системы описывается собственной функцией $\Psi_f(\mathbf{q})$ оператора $\hat{F}$, то измерение F обязательно приводит к собственному значению f.

Замечание. Пусть состояние системы описывается волновой функцией $\Psi_f(\mathbf{q})$ – собственной функцией оператора $\hat{F}$. Тогда собственное значение f называют квантовым числом, характеризующим данное состояние.

Следствие из II и III постулатов:

Пусть Ψ_{f_1} – волновая функция состояния 1, а Ψ_{f_2} – волновая функция состояния 2, где Ψ_{f_2} и Ψ_{f_2} — собственные функции оператора $\hat{F}$, т.е.

$$\hat{F}\Psi_{f_1}(\mathbf{q}) = f_1\Psi_{f_1}(\mathbf{q}),$$

$$\hat{F}\Psi_{f_2}(\mathbf{q}) = f_2\Psi_{f_2}(\mathbf{q}).$$

Тогда измерение величины F в состоянии, которое описывается волновой функцией $c_1\Psi_{f_1}(\mathbf{q},\, t)+c_2\Psi_{f_2}(\mathbf{q},\, t)$, дает значение либо f_1, либо f_2.

Обратно, поскольку измерение F обязательно приводит к одному из собственных значений, то любая волновая функция $\Psi(\mathbf{q})$ представима в виде суперпозиции

$$\Psi(\mathbf{q}) = \sum_n c_n\Psi_n(\mathbf{q}),$$

если спектр $\hat{F}$ дискретен, или

$$\Psi(\mathbf{q}) = \int c(f)\Psi_f(\mathbf{q})df,$$

если спектр $\hat{F}$ непрерывен.

Следовательно, Ψ_f – полный базис, порожденный оператором $\hat{F}$.

В общем случае, когда спектр оператора $\hat{F}$ содержит как дискретную, так и непрерывную части, имеем

$$\Psi(\mathbf{q}) = \sum_n c_n\Psi_n(\mathbf{q}) + \int c(f)\Psi_f(\mathbf{q})df.$$

IV постулат. Пусть $\Psi(\mathbf{q})$ — волновая функция и имеется разложение

$$\Psi(\mathbf{q}) = \sum_n c_n \Psi_n(\mathbf{q}) + \int c(f)\Psi_f(\mathbf{q})df.$$

Тогда:

1^o измерение F дает f_n с вероятностью $|c_n|^2$,

2^o измерение F дает значение в интервале $(f;\ f+df)$ с вероятностью $|c(f)|^2 df$.

Условие нормировки имеет вид

$$\sum_n |c_n|^2 + \int |c(f)|^2 df = 1.$$

Величины c_n и $c(f)$ называют амплитудами вероятности.

Теперь рассмотрим некоторые следствия этих постулатов.

Следствие 1. Явные выражения для амплитуд

Пусть имеется

$$\Psi(\mathbf{q}) = \sum_n c_n \Psi_n(\mathbf{q}) + \int c(f)\Psi_f(\mathbf{q})df,$$

при этом в силу условий нормировки

$$\int |\Psi|^2 d\mathbf{q} = 1 = \sum_n |c_n|^2 + \int |c(f)|^2 df.$$

С другой стороны, подставляя выписанное разложение для $\Psi((q))$ в нормировочный интеграл, получим

$$\int \Psi^* \Psi d\mathbf{q} = \sum_n c_n^* \langle \Psi_n | \Psi \rangle + \int c^*(f) \langle \Psi_f | \Psi \rangle df.$$

Следовательно

$$c_n = \langle \Psi_n | \Psi \rangle,$$

$$c(f) = \langle \Psi_f | \Psi \rangle.$$

Следствие 2. Условия нормировки

Из предыдущего следствия

$$c_n = \langle \Psi_n | \Psi \rangle = \langle \Psi_n | \sum_{n'} c_{n'} \Psi_{n'}(\mathbf{q}) + \int c(f') \Psi_{f'}(\mathbf{q}) df' \rangle =$$

$$= \sum_{n'} c_{n'} \langle \Psi_n | \Psi_{n'} \rangle + \int c(f') \langle \Psi_n | \Psi_{f'} \rangle df',$$

$$c(f) = \langle \Psi_f | \Psi \rangle = \langle \Psi_f | \sum_{n'} c_{n'} \Psi_{n'}(\mathbf{q}) + \int c(f') \Psi_{f'}(\mathbf{q}) df' \rangle =$$

$$= \sum_{n'} c_{n'} \langle \Psi_f | \Psi_{n'} \rangle + \int c(f') \langle \Psi_f | \Psi_{f'} \rangle df'.$$

Следовательно

$$\langle \Psi_n | \Psi_{n'} \rangle = \delta_{nn'},$$

$$\langle \Psi_f | \Psi_{f'} \rangle = \delta(f - f'),$$

$$\langle \Psi_n | \Psi_f \rangle = 0.$$

Следствие 3. Условие полноты

Подставляя в разложение волновой функции $\Psi(\mathbf{q})$ по полному базису явные выражения для амплитуд, находим

$$\Psi(\mathbf{q}) = \sum_n c_n \Psi_n(\mathbf{q}) + \int c(f) \Psi_f(\mathbf{q}) df =$$

$$= \sum_n \langle \Psi_n | \Psi \rangle \Psi_n(\mathbf{q}) + \int \langle \Psi_f | \Psi \rangle \Psi_f(\mathbf{q}) df =$$

$$= \int \left(\sum_n \Psi_n^*(\mathbf{q}') \Psi_n(\mathbf{q}) + \int \Psi_f^*(\mathbf{q}') \Psi_f(\mathbf{q}) df \right) \Psi(\mathbf{q}') d\mathbf{q}'.$$

Отсюда получаем условие полноты базиса

$$\sum_n \Psi_n^*(\mathbf{q}') \Psi_n(\mathbf{q}) + \int \Psi_f^*(\mathbf{q}') \Psi_f(\mathbf{q}) df = \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}').$$

Следствие 4. Средние значения физических величин

Пусть заданы волновая функция $\Psi(\mathbf{q})$ и оператор $\hat{F}$, соответствующий физической величине F. По 1-му следствию $c_n = \langle \Psi_n | \Psi \rangle$ и $c_f = \langle \Psi_f | \Psi \rangle$ – амлитуды вероятности получить f_n и f в измерении F, соответственно. Тогда справедливо

$$\langle F \rangle = \sum_n f_n |c_n|^2 + \int f |c(f)|^2 df.$$

Докажем, что среднее значение $\langle F \rangle$ определяется также диагональным матричным элементом

$$\langle F \rangle = \langle \Psi | \hat{F} \Psi \rangle \equiv \langle \Psi | \hat{F} | \Psi \rangle.$$

Действительно,

$$\langle \Psi | \hat{F} \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{F} \left(\sum_n c_n \Psi_n + \int c(f) \Psi_f df \right) \rangle =$$

$$= \sum_n c_n \langle \Psi | \hat{F} \Psi_n \rangle + \int c(f) \langle \Psi | \hat{F} \Psi_f \rangle df =$$

$$= \sum_n c_n \langle \Psi | f_n \Psi_n \rangle + \int c(f) \langle \Psi | f \Psi_f \rangle df =$$

$$= \sum_n f_n c_n \langle \Psi | \Psi_n \rangle + \int f c(f) \langle \Psi | \Psi_f \rangle df = \sum_n f_n c_n c_n^* + \int f c(f) c^*(f) df,$$

так как

$$\langle \Psi | \Psi_n \rangle \equiv \langle \Psi_n | \Psi \rangle^* = c_n^*,$$

$$\langle \Psi | \Psi_f \rangle \equiv \langle \Psi_f | \Psi \rangle^* = c^*(f).$$

Лекция №4. Одновременная измеримость физических величин

Одновременно измеримые величины

Определение: Физические величины F и G одновременно измеримы, если $\hat{F}$ и $\hat{G}$ обладают общей системой собственных функций. То есть

$$\hat{F}\Psi_n(\mathbf{q}) = f_n\Psi_n(\mathbf{q}), \quad \hat{G}\Psi_n(\mathbf{q}) = g_n\Psi_n(\mathbf{q}).$$

Для простоты будем рассматривать только дискретные спектры.

Определение: Коммутатором двух физических величин называется оператор

$$[\hat{F}, \hat{G}] \equiv \hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F}.$$

Утверждение: Если F и G одновременно измеримы, то $[\hat{F}, \hat{G}] = 0$, то есть $\hat{F}\hat{G} = \hat{G}\hat{F}$, или

$$\hat{F}\hat{G}\Psi(\mathbf{q}) = \hat{G}\hat{F}\Psi(\mathbf{q}), \quad \forall\Psi(\mathbf{q}).$$

Доказательство:

Так как $\Psi_n(\mathbf{q})$ — полный базис, то $\Psi(\mathbf{q}) = \sum\limits_n c_n\Psi_n(\mathbf{q})$. Тогда

$$\hat{F}\hat{G}\Psi = \hat{F}\hat{G}\sum_n c_n\Psi_n = \hat{F}\sum_n c_n g_n\Psi_n = \sum_n c_n g_n f_n, \Psi_n$$

$$\hat{G}\hat{F}\Psi = \hat{G}\hat{F}\sum_n c_n\Psi_n = \hat{G}\sum_n c_n f_n\Psi_n = \sum_n c_n f_n g_n\Psi_n.$$

Следовательно $\hat{F}\hat{G} = \hat{G}\hat{F}$. Утверждение доказано.

Обратное утверждение также верно.

Утверждение: Если $[\hat{F}, \hat{G}] = 0$, то F и G одновременно измеримы.

Доказательство:

Проведем доказательство для частного случая, когда один из операторов, например F, имеет невырожденый спектр, т.е. каждому собственному значению f отвечает только одна собственная функция $\Psi_f(\mathbf{q})$.

Итак, спектр $\hat{F}$ невырожден: $\hat{F}\Psi_n(\mathbf{q}) = f_n\Psi_n(\mathbf{q})$. Пусть

$$\hat{G}\Psi_n(\mathbf{q}) = \Phi_n(\mathbf{q}).$$

Подействуем на $\Phi_n(\mathbf{q})$ оператором $\hat{F}$

$$\hat{F}\Phi_n(\mathbf{q}) = \hat{F}\hat{G}\Psi_n(\mathbf{q}) = \hat{G}\hat{F}\Psi_n(\mathbf{q}) = f_n\hat{G}\Psi_n(\mathbf{q}) = f_n\Phi_n(\mathbf{q}).$$

Таким образом мы получили, что Φ_n – собственная функция $\hat{F}$, отвечающая собственному значению f_n. В силу невырожденности спектра оператора $\hat{F}$ имеем

$$\Phi_n(\mathbf{q}) \sim \Psi_n(\mathbf{q}),$$

то есть

$$\hat{G}\Psi_n(\mathbf{q}) = \Phi_n(\mathbf{q}) \sim \Psi_n(\mathbf{q}) \quad \Leftrightarrow \quad \hat{G}\Psi_n(\mathbf{q}) = g_n\Psi_n(\mathbf{q}).$$

Что и требовалось доказать.

Общий случай оператора $\hat{F}$ будет рассмотрен позже.

Следствие. Если $[\hat{F}, \hat{G}] \neq 0$, то F и G не являются одновременно измеримыми величинами.

Замечание. Пусть спектр оператора $\hat{F}$ вырожден, т.е. одному собственному значению f отвечают сразу несколько собственных функций. Другими словами, квантовое число f не определяет однозначно квантовое состояние системы. В этом случае всегда существуют взаимно коммутирующие операторы $\hat{G}_1, \hat{G}_2 \ldots$ (в частном случае, один оператор $\hat{G}$) , коммутирующие с $\hat{F}$. Любая собственная функция $\Psi_{fg_1g_2\ldots}(\mathbf{q})$ этих операторов характеризуется определенным набором квантовых чисел $f, g_1, g_2 \ldots$, которые однозначно фиксируют квантовое состояние. Набор коммутирующих операторов, собственные значения которых однозначно определяют квантовое состояние системы, называется полным набором.

Соотношение неопределенностей

Пусть $\hat{F}$ и $\hat{G}$ – операторы физических величин F и G (т.е. $\hat{F}^+$ $+ = \hat{F}$ и $\hat{G}^+ = \hat{G}$), и $[\hat{F}, \hat{G}] = i\hat{K}$, где $\hat{K}^+ = \hat{K}$. Докажем, что в любом квантовом состоянии выполняется следующее соотношение (соотношение неопределенностей):

$$\langle (\Delta F)^2 \rangle \langle (\Delta G)^2 \rangle \geqslant \frac{\langle K \rangle^2}{4}.$$

Доказательство:

Разобьем доказательство на три части.

а) Покажем, что $(\hat{F}\hat{G})^+ = \hat{G}^+\hat{F}^+$. Действительно,

$$\langle \Psi | \hat{F}\hat{G}\Phi \rangle = \langle (\hat{F}\hat{G})^+ \Psi | \Phi \rangle,$$

$$\langle \Psi | \hat{F}\hat{G}\Phi \rangle = \langle \hat{F}^+ \Psi | \hat{G}\Phi \rangle = \langle \hat{G}^+ \hat{F}^+ \Psi | \Phi \rangle.$$

Отсюда и следует то, что требовалось показать.

б) Покажем, что коммутатор $[\hat{F}, \hat{G}]$ представим в виде

$$[\hat{F}, \hat{G}] = i\hat{K},$$

где $\hat{K}$ – эрмитовый оператор ($\hat{K}^+ = \hat{K}$).

Легко видеть, что $i^+ = -i$. Это следует из цепочки равенств

$$\langle i^+ \Psi | \Phi \rangle = \langle \Psi | i\Phi \rangle = \langle (-i)\Psi | \Phi \rangle.$$

Тогда из того, что

$$[\hat{F}, \hat{G}]^+ = (\hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F})^+ = (\hat{G}^+\hat{F}^+ - \hat{F}^+\hat{G}^+) =$$

$$= (\hat{G}\hat{F} - \hat{F}\hat{G}) = -(\hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F}) = -[\hat{F}, \hat{G}],$$

следует

$$[\hat{F}, \hat{G}] = i\hat{K},$$

где $\hat{K}^+ = \hat{K}$.

в) Докажем соотношение неопределенностей.

Рассмотрим оператор отклонения от среднего $\Delta\hat{F} = \hat{F} - \langle F \rangle$. Для него имеем

$$\langle \Delta F \rangle = \langle \Psi | (\hat{F} - \langle F \rangle)\Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{F}\Psi \rangle - \langle F \rangle \langle \Psi | \Psi \rangle = \langle F \rangle - \langle F \rangle \times 1 = 0,$$

$$(\Delta\hat{F})^+ = (\hat{F} - \langle F \rangle)^+ = \hat{F} - \langle F \rangle = \Delta\hat{F}.$$

По определению, $\langle(\Delta F)^2\rangle = \langle\Psi|(\Delta\hat{F})^2\Psi\rangle$. Аналогично для оператора $\Delta\hat{G} = \hat{G} - \langle G\rangle$:

$$\langle\Delta G\rangle = \langle\Psi|(\hat{G} - \langle G\rangle)\Psi\rangle = \langle\Psi|\hat{G}\Psi\rangle - \langle G\rangle\langle\Psi|\Psi\rangle = \langle G\rangle - \langle G\rangle \times 1 = 0,$$

$$(\Delta\hat{G})^+ = (\hat{G} - \langle G\rangle)^+ = \hat{G} - \langle G\rangle = \Delta\hat{G},$$

$$\langle(\Delta G)^2\rangle = \langle\Psi|(\Delta\hat{G})^2\Psi\rangle.$$

При этом справедливо

$$[\Delta\hat{F},\, \Delta\hat{G}] = i\hat{K}.$$

Рассмотрим новый оператор $z\Delta\hat{F} + i\Delta\hat{G}$, где z – произвольное действительное число. Тогда

$$\langle(z\Delta\hat{F} + i\Delta\hat{G})\Psi|(z\Delta\hat{F} + i\Delta\hat{G})\Psi\rangle = f(z) \geqslant 0.$$

С другой стороны

$$f(z) = \langle\Psi|(z\Delta\hat{F} + i\Delta\hat{G})^+(z\Delta\hat{F} + i\Delta\hat{G})\Psi\rangle =$$

$$= \langle\Psi|(z\Delta\hat{F} - i\Delta\hat{G})(z\Delta\hat{F} + i\Delta\hat{G})\Psi\rangle =$$

$$= z^2\langle(\Delta F)^2\rangle + \langle(\Delta G)^2\rangle + iz\langle\Psi|(\Delta\hat{F}\Delta\hat{G} - \Delta\hat{G}\Delta\hat{F})\Psi\rangle =$$

$$= z^2\langle(\Delta F)^2\rangle + \langle(\Delta G)^2\rangle + iz\langle\Psi|i\hat{K}\Psi\rangle =$$

$$= z^2\langle(\Delta F)^2\rangle + \langle(\Delta G)^2\rangle - z\langle K\rangle.$$

Но так как

$$f(z) = z^2\langle(\Delta F)^2\rangle - z\langle K\rangle + \langle(\Delta G)^2\rangle \geqslant 0, \quad \forall z,$$

то должно быть выполненно

$$\langle K\rangle^2 - 4\langle(\Delta F)^2\rangle\langle(\Delta G)^2\rangle \leqslant 0,$$

или

$$\langle(\Delta F)^2\rangle\langle(\Delta G)^2\rangle \geqslant \frac{\langle K\rangle^2}{4}.$$

Доказательство закончено.

Пример:

$$\begin{cases} \hat{F} = \hat{x} = x, \\ \\ \hat{G} = \hat{p}_x = -i\hbar \dfrac{\partial}{\partial x}. \end{cases}$$

Вычислим коммутатор:

$$[\hat{x}, \hat{p_x}]\Psi(x) = x\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)\Psi(x) - \left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)x\Psi(x) = i\hbar\Psi(x) \Rightarrow \hat{K} = \hbar.$$

Тогда соотношение неопределенностей имеет вид

$$\langle(\Delta x)^2\rangle\langle(\Delta p_x)^2\rangle \geqslant \frac{\hbar^2}{4}.$$

Определение: Если $\Psi_0(x)$ — волновая функция состояния, в котором

$$\langle(\Delta x)^2\rangle\langle(\Delta p_x)^2\rangle = \frac{\hbar^2}{4},$$

то Ψ_0 – волновая функция когерентного состояния.

Лекция №5. Квантовая динамика

Уравнение Шредингера

Попробуем найти общий вид динамического уравнения для волновой функции $\Psi(\mathbf{q}, t)$. В соответствии с постулатом I система полностью описывается волновой функцией $\Psi(\mathbf{q}, t)$. В частности, волновая функция в момент t определяет состояние системы во все последующие моменты времени. Это означает, что искомое уравнение может содержать производные $\Psi(\mathbf{q}, t)$ по t не старше первой. Следовательно уравнение должно иметь вид

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\mathbf{q}, t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi(\mathbf{q}, t), \quad \frac{\partial\Psi(\mathbf{q}, t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Psi(\mathbf{q}, t).$$

Левая часть линейна, поэтому линейна и правая часть (иначе нарушался бы принцип суперпозиции - постулат II). Следовательно $\hat{H}$ – линейный оператор.

Дифференцируя по t условие нормировки

$$\int \Psi^*(\mathbf{q},\, t)\Psi(\mathbf{q},\, t)dq = 1,$$

получаем серию равенств

$$\int \frac{\partial \Psi^*}{\partial t}\Psi dq + \int \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} dq = 0,$$

$$\int \left(\frac{i}{\hbar}(\hat{H}\Psi)^*\right)\Psi dq - \int \Psi^* \left(\frac{i}{\hbar}(\hat{H}\Psi)\right) dq = 0,$$

$$\frac{i}{\hbar}\langle \hat{H}\Psi|\Psi\rangle - \frac{i}{\hbar}\langle \Psi|\hat{H}\Psi\rangle = 0,$$

$$\langle \hat{H}\Psi|\Psi\rangle = \langle \Psi|\hat{H}\Psi\rangle.$$

Приходим к выводу, что $\hat{H}$ – эрмитовый оператор. Значит $\hat{H}$ – оператор некоторой физической величины.

Установим вид оператора $\hat{H}$. Для этого рассмотрим волну де Бройля

$$\Psi_p(x,\, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, e^{i\frac{px-Et}{\hbar}}.$$

Подставляя ее в левую часть написанного нами общего уравнения, получаем

$$i\hbar\frac{\partial \Psi_p(x,\, t)}{\partial t} = i\hbar\left(-\frac{iE}{\hbar}\right)\Psi_p(x,\, t) = E\Psi_p(x,\, t).$$

С другой стороны, волна де Бройля – это собственная функция оператора $\hat{p} = -i\hbar\dfrac{d}{dx}$, то есть

$$\hat{p}\Psi_p(x,\, t) = p\Psi_p(x,\, t), \quad \hat{p}^2\Psi_p(x,\, t) = p^2\Psi_p(x,\, t), \quad \ldots$$

В нерелятивистском случае $E = \dfrac{p^2}{2m}$. Следовательно,

$$i\hbar\frac{\partial \Psi_p(x,\, t)}{\partial t} = \frac{\hat{p}^2}{2m}\Psi_p(x,\, t),$$

то есть в данном случае $\hat{H} = \dfrac{\hat{p}^2}{2m}$ – оператор кинетической энергии.

Если движение происходит в потенциальном поле $U(x)$, то естественно предположить, что

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

есть оператор полной энергии. В общем случае в классической теории функция Гамильтона $H = H(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t)$ – это полная энергия, выраженая через координаты и импульсы. Оператор

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(\hat{\mathbf{q}})$$

называется оператором полной энергии или оператором Гамильтона (гамильтонианом).

В общем случае динамика квантовой системы полностью определяется уравнением Шредингера с начальным условием:

$$\begin{cases} i\hbar \dfrac{\partial \Psi(\mathbf{q}, t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi(\mathbf{q}, t), \\ \\ \Psi(\mathbf{q}, 0) = \Psi_0(\mathbf{q}). \end{cases}$$

Условие на $\Psi_0(\mathbf{q})$

$$\int |\Psi_0(\mathbf{q})|^2 d\mathbf{q} = 1$$

задает нормировку $\Psi(\mathbf{q}, t)$ для всех t.

Замечание. Уравнение Шредингера можно постулировать (считать пятым постулатом).

Стационарные состояния

Если $\hat{H}$ не зависит явно от t, то можно искать решение в виде

$$\Psi(\mathbf{q}, t) = \psi(\mathbf{q}) A(t).$$

Подстановка в уравнение Шредингера дает

$$i\hbar\, \psi(\mathbf{q}) \frac{dA(t)}{dt} = A(t)\hat{H}\psi(\mathbf{q}).$$

Разделяя переменные, находим

$$\frac{i\hbar\dot{A}(t)}{A(t)} = \frac{\hat{H}\psi(\mathbf{q})}{\psi(\mathbf{q})} = E,$$

где E – некоторая константа. Решение для $A(t)$ имеет вид

$$A(t) = Ce^{-\frac{iEt}{\hbar}}.$$

Задача

$$\hat{H}\psi(\mathbf{q}) = E\psi(\mathbf{q})$$

есть задача на собственные функции оператора $\hat{H}$. Решением являются собственные функции оператора $\hat{H}$. Согласно постулату III измерение энергии в состоянии с волновой функцией $\psi(\mathbf{q})$ с вероятностью 1 дает величину E.

Уравнение Шредингера имеет частные решения

$$\Psi_E(\mathbf{q}, t) = \psi_E(\mathbf{q})e^{-i\frac{Et}{\hbar}}, \quad \hat{H}\psi_E(\mathbf{q}) = E\psi_E(\mathbf{q}).$$

Каждое такое решение Ψ_E – это волновая функция состояния с определенной энергией E. Уравнение

$$\hat{H}\psi(\mathbf{q}) = E\psi(\mathbf{q})$$

называется стационарным уравнением Шредингера. В данном случае плотность вероятности

$$\rho(\mathbf{q}, t) = |\psi(\mathbf{q}, t)|^2 = |\psi(\mathbf{q})|^2$$

не зависит от t. Поэтому $\Psi(\mathbf{q}, t)$ называют волновой функцией стационарного состояния.

Общее решение уравнения Шредингера

В общем случае спектр $\hat{H}$ имеет дискретную и непрерывную части:

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n, \quad \hat{H}\psi_E = E\psi_E.$$

Тогда вид общего решения уравнения Шредингера таков

$$\Psi(\mathbf{q}, t) = \sum_n c_n\psi_n(\mathbf{q})e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} + \int c(E)\psi_E(\mathbf{q})e^{-i\frac{Et}{\hbar}}dE.$$

Докажем это.

Пусть мы ищем $\Psi(\mathbf{q},\, t)$ с начальным условием

$$\Psi(\mathbf{q},\, 0) = \Psi_0(\mathbf{q}).$$

Разложим $\Psi_0(\mathbf{q})$ по полному базису, составленному из собственных функций оператора Гамильтона,

$$\Psi_0(\mathbf{q}) = \sum_n c_n \psi_n(\mathbf{q}) + \int c(E)\psi_E(\mathbf{q})dE,$$

$$c_n = \langle \psi_n | \Psi_0 \rangle, \quad c(E) = \langle \psi_E | \Psi_0 \rangle.$$

Воспользовавшись этими амплитудами, построим решение следующего вида

$$\Psi(\mathbf{q},\, t) = \sum_n c_n \psi_n(\mathbf{q}) e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} + \int c(E)\psi_E(\mathbf{q}) e^{-i\frac{Et}{\hbar}} dE.$$

Это и есть искомое решение, так как

$$\Psi(\mathbf{q},\, 0) = \Psi_0(\mathbf{q}).$$

Замечание. Если оператор $\hat{H}$ вырожден, то следует позаботиться о построении полного набора операторов (включающего в себя $\hat{H}$) данной физической системы. Собственные функции этого набора операторов формируют полный базис. Общее решение уравнения Шредингера, записанное выше, представляет собой разложение по этому базису. То есть индексы n и E, по которым ведется суммирование и интегрирование, нужно понимать как наборы квантовых чисел (включающих в себя энергию), однозначно определяющих квантовые состояния системы.

Пример: одномерное свободное движение. В данном случае

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}, \quad \hat{p} = -i\hbar\frac{d}{dx}.$$

Уравнение Шредингера с начальным условием:

$$\begin{cases} i\hbar\dfrac{\partial\Psi(x,\, t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi(x,\, t), \\[2ex] \Psi(x,\, 0) = \Psi_0(x). \end{cases}$$

Ищем решения стационарного уравнения Шредингера

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x), \quad E = \frac{p^2}{2m}.$$

Так как $\hat{H}$ и $\hat{p}$ коммутируют ($[\hat{H}, \hat{p}] = 0$), то $\hat{H}$ и $\hat{p}$ имеют общую систему собственных функций. Легко проверить, что собственные функции оператора $\hat{p}$

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, e^{i\,\frac{px}{\hbar}}$$

являются собственными функциями оператора $\hat{H}$. Следовательно функции $\psi_p(x)$ являются решениями стационарного уравнения Шредингера. Тогда частные решения уравнения Шредингера – это волновые функции стационарных состояний

$$\Psi_p(x, t) = \psi_p(x)e^{-i\,\frac{Et}{\hbar}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, e^{i\,\frac{px-Et}{\hbar}}.$$

Это и есть волны де Бройля.

Общее решение – суперпозиция частных решений:

$$\Psi(x, t) = \int C(p)\Psi_p(x, t)dp.$$

Таким образом, волновая функция свободной частицы есть не что иное, как волновой пакет.

Зависимость физических величин от времени

В общем случае оператор физической величины может явно зависеть от времени: $\hat{F} = \hat{F}(t)$. Пусть $\dfrac{\partial \hat{F}(t)}{\partial t}$ – производная по явной зависимости оператора от t. Среднее значение физической величины F в общем случае также зависит от t:

$$\langle F \rangle = \langle \Psi(t)|\hat{F}(t)|\Psi(t)\rangle.$$

Найдем производную $\langle F \rangle$ по t, пользуясь тем, что

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

Получаем:

$$\frac{d\langle F\rangle}{dt} = \langle\frac{\partial\Psi}{\partial t}|\hat{F}|\Psi\rangle + \langle\Psi|\frac{\partial\hat{F}}{\partial t}|\Psi\rangle + \langle\Psi|\hat{F}|\frac{\partial\Psi}{\partial t}\rangle =$$

$$= \frac{i}{\hbar}\langle\hat{H}\Psi|\hat{F}\Psi\rangle + \langle\Psi|\frac{\partial\hat{F}}{\partial t}|\Psi\rangle - \frac{i}{\hbar}\langle\Psi|\hat{F}|\hat{H}\Psi\rangle =$$

$$= \langle\Psi|\frac{\partial\hat{F}}{\partial t}|\Psi\rangle + \frac{i}{\hbar}(\langle\Psi|\hat{H}\hat{F}|\Psi\rangle - \frac{i}{\hbar}\langle\Psi|\hat{F}\hat{H}|\Psi\rangle) =$$

$$= \langle\Psi|\frac{\partial\hat{F}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}[\hat{H},\,\hat{F}]|\Psi\rangle \equiv \langle\Psi|\frac{d\hat{F}}{dt}|\Psi\rangle.$$

Здесь введен оператор изменения физической величины во времени

$$\frac{d\hat{F}}{dt} = \frac{\partial\hat{F}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}[\hat{H},\,\hat{F}].$$

Если $\dfrac{d\hat{F}}{dt} = 0$, то $\langle F\rangle = \text{const}$. В таком случае говорят, что F – это сохраняющаяся величина, интеграл движения.

Если

1) $\hat{F}$ не зависит от t явно, то есть $\dfrac{\partial\hat{F}}{\partial t} = 0$,

2) $[\hat{H},\,\hat{F}] = 0$,

то F – интеграл движения.

Примеры:

1. $\hat{F} = \hat{H}$ и $\hat{H}$ не зависит от t (гамильтониан замкнутой системы) – полная энергия замкнутой системы сохраняется.

2. $\hat{p} = -i\hbar\dfrac{d}{dx}$. Если $\hat{H} = \dfrac{\hat{p}^2}{2m}$ (свободное движение), то импульс p сохраняется.

3. $\hat{p} = -i\hbar\dfrac{d}{dx}$, $\hat{H} = \dfrac{\hat{p}^2}{2m} + U(x)$. Оператор $\hat{p}$ не зависит от t. Вычислим коммутатор

$$[\hat{H},\,\hat{p}] = [U(x),\,\hat{p}].$$

Для этого рассмотрим

$$[U(x),\, \hat{p}]f(x) = -i\hbar U(x)f'(x) + i\hbar(U'(x)f(x) + U(x)f'(x)) =$$

$$= i\hbar U'(x)f(x).$$

Следовательно

$$[U(x),\, \hat{p}] = i\hbar U'(x).$$

Мы получаем, что

$$\frac{d\hat{p}}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H},\, \hat{p}] = \frac{i}{\hbar}(i\hbar\frac{dU}{dx}) = -\frac{dU}{dx}.$$

4. Аналогично найдем $\dfrac{d\hat{x}}{dt}$. В данном случае

$$\frac{i}{\hbar}[\hat{H},\, x] = \frac{i}{2m\hbar}[\hat{p}^2,\, x].$$

Вычислим коммутатор $[\hat{p}^2,\, x]$ либо непосредственно

$$[\hat{p}^2,\, x]f(x) = -\hbar^2[\frac{d^2}{dx^2},\, x]f(x) = -\hbar^2(2f'(x) + xf''(x) - xf''(x)) =$$

$$= -2\hbar^2 f'(x) = -2i\hbar\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)f(x) = -2i\hbar\hat{p}f(x),$$

либо через вспомогательное соотношение

$$[\hat{p}^2,\, x] = \hat{p}[\hat{p},\, x] + [\hat{p},\, x]\hat{p} = -2i\hbar\hat{p}.$$

Тогда для искомой производной получаем

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

то есть

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = \frac{\hat{p}}{m}.$$

Лекция №6. Связь квантовой механики с классической. Линейный осциллятор

Теорема Эренфеста

Операторы $\dfrac{d\hat{x}}{dt}$ и $\dfrac{d\hat{p}}{dt}$ определяют скорости изменения средних значений координаты $\langle x\rangle$ и импульса $\langle p\rangle$, соответственно. Воспользовавшись соотношениями, полученными на прошлой лекции, получаем

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt} = \langle\Psi|\frac{d\hat{x}}{dt}|\Psi\rangle = \langle\Psi|\frac{\hat{p}}{m}|\Psi\rangle = \frac{\langle p\rangle}{m},$$

$$\frac{d\langle p\rangle}{dt} = \langle\Psi|\frac{d\hat{p}}{dt}|\Psi\rangle = -\langle\Psi|\frac{dU}{dx}|\Psi\rangle \equiv -\int\frac{dU}{dx}|\Psi|^2dx = -\langle\frac{dU}{dx}\rangle.$$

Следовательно

$$m\frac{d^2\langle x\rangle}{dt^2} = -\langle\frac{dU}{dx}\rangle.$$

Пусть Δx – размер области локализации частицы (размер области, где плотность вероятности $|\Psi|^2$ существенно отлична от нуля). Если $\dfrac{dU}{dx}$ слабо меняется в этой области (т.е. $\Delta x \ll L$, где L – размер области существенного изменения $\dfrac{dU}{dx}$), то

$$\langle\frac{dU}{dx}\rangle \simeq \left.\frac{dU}{dx}\right|_{x\simeq\langle x\rangle}.$$

В этом случае движение области локализации частицы определяется вторым законом Ньютона

$$m\frac{d^2\langle x\rangle}{dt^2} \simeq -\left.\frac{dU}{dx}\right|_{x\simeq\langle x\rangle}.$$

Мы показали, что в пределе $\Delta x \ll L$ классическая динамика выводится из квантовой динамики. Это утверждение называется теоремой Эренфеста.

Замечание. Пусть L – масштаб неоднородности потенциала $U(x)$ (и его производной); частица движется в области размера $\sim L$, т.е. $\langle x \rangle \sim L$. Если в каждый момент времени неопределенность координаты Δx мала по сравнению со средним значением $\langle x \rangle$, т.е.

$$\Delta x \ll \langle x \rangle \sim L,$$

то координата частицы, фактически, определена и равна $\langle x \rangle$. Естественно ожидать, что в этом пределе изменение $\langle x \rangle$ во времени определяется классическим законом движения – вторым законом Ньютона. Именно это и утверждает доказанная нами теорема Эренфеста.

Замечание. Теорема Эренфеста позволяет понять, почему движение электрона в электронно-лучевой трубке описывается классическими уравнениями, тогда как движение этого же электрона в атоме – квантовыми уравнениями.

Скобка Пуассона и коммутатор

Обобщая, можно сказать, что всюду там, где неопределенность ΔF физической величины F мала по сравнению с $\langle F \rangle$, среднее значение $\langle F \rangle$ должно меняться по классическим законам. Напомним, что в классической механике мы имеем дело с обобщенными координатами $\mathbf{q} = (q_1,\, q_2,\, \ldots)$, обобщенными импульсами $\mathbf{p} = (p_1,\, p_2,\, \ldots)$, а также с функциями обобщенных координат и импульсов $F = F(\mathbf{p},\, \mathbf{q},\, t)$. Полная производная по времени величины F определяется соотношением

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \{H,\, F\},$$

где $\{H,\, F\}$ – это скобка Пуассона:

$$\{H,\, F\} = \sum_i \left(\frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial F}{\partial q_i} - \frac{\partial H}{\partial q_i} \frac{\partial F}{\partial p_i} \right).$$

Если неопределенность ΔF мала, то среднее значение $\langle F \rangle$ должно меняться по тому же закону, что и классическое значение F. Следовательно должны существовать соответствия:

$$
\begin{aligned}
F \qquad &\leftrightarrow \qquad \langle F\rangle,\\
\frac{\partial F}{\partial t} \qquad &\leftrightarrow \qquad \langle\Psi|\frac{\partial\hat F}{\partial t}|\Psi\rangle,\\
\{H,\, F\} \qquad &\leftrightarrow \qquad \frac{i}{\hbar}\langle\Psi|[\hat H,\, \hat F]|\Psi\rangle.
\end{aligned}
$$

По этой причине коммутатор $[\hat H,\, \hat F]$ иногда называют квантовой скобкой Пуассона. Указанное соответствие между коммутатором и скобкой Пуассона может быть использовано для определения явного вида операторов физических величин.

Рассмотрим в качестве примера одномерное движение, где $q \to \hat x = x$ и $p \to \hat p =?$ В классической теории скобка Пуассона $\{p, x\}$ легко вычисляется:

$$\{p,\, x\} = 1.$$

Для коммутатора операторов $\hat p$ и $\hat x$, следовательно, получаем:

$$\frac{i}{\hbar}[\hat p,\, \hat x] = 1 \quad \Rightarrow \quad [\hat p,\, \hat x] = -i\hbar.$$

Это верно, если оператор импульса выглядит следующим образом:

$$\hat p = -i\hbar\frac{d}{dx}.$$

В случае n-мерного конфигурационного пространства имеем

$$\{p_i,\, q_j\} = \delta_{ij}.$$

Следовательно

$$\frac{i}{\hbar}[\hat p_i,\, \hat q_j] = \delta_{ij} \quad \Rightarrow \quad [\hat p_i,\, \hat q_j] = -i\hbar\delta_{ij}.$$

В частности, оператор импульса частицы, движущейся в трехмерном пространстве, есть

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla.$$

Плотность тока вероятности

Найдем теперь явный вид плотности тока вероятности в трехмерном координатном пространстве. Оператор Гамильтона имеет вид

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\mathbf{r}).$$

Уравнение Шредингера (для волновой функции Ψ) и комплексно сопряженное уравнение Шредингера (для функции Ψ^*) выглядят следующим образом:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\mathbf{r},\, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(\mathbf{r},\, t) + U(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r},\, t),$$

$$-i\hbar\frac{\partial\Psi^*(\mathbf{r},\, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi^*(\mathbf{r},\, t) + U(\mathbf{r})\Psi^*(\mathbf{r},\, t).$$

Домножим первое уравнение на Ψ^*, а второе – на Ψ. Тогда, вычитая из первого уравнения второе, находим:

$$i\hbar\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{dt} + \Psi\frac{\partial\Psi^*}{dt}\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}(\Psi^*\Delta\Psi - \Psi\Delta\Psi^*),$$

или

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(\mathbf{r},\, t)|^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla(\Psi^*\nabla\Psi - \Psi\nabla\Psi^*).$$

Пусть $\rho(\mathbf{r},\, t) = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ – плотность вероятности. Тогда полученное соотношение принимает вид уравнения непрерывности

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \mathrm{div}\mathbf{j} = 0,$$

где

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2mi}(\Psi^*\nabla\Psi - \Psi\nabla\Psi^*)$$

есть плотность тока вероятности.

Линейный осциллятор

Гамильтониан линейного осциллятора имеет вид

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2x^2}{2} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2x^2}{2}.$$

Решаем стационарное уравнение Шредингера

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + \frac{m\omega^2 x^2}{2}\psi = E\psi.$$

Обезразмериваем уравнение, домножая левую и правую части на $2/\hbar\omega$,

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

Теперь вводим безразмерную координату и безразмерную энергию:

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x,$$

$$\varepsilon = \frac{E}{\hbar\omega}.$$

В новых переменных стационарное уравнение Шредингера принимает вид

$$-\psi''(\xi) + \xi^2\psi(\xi) = 2\varepsilon\psi(\xi).$$

Для начала исследуем асимптотику решений при $\xi \to \pm\infty$. Пренебрегая $2\varepsilon\psi(\xi)$, имеющим второй порядок малости по отношению к $\xi^2\psi$ при больших $|\xi|$, получаем упрощенное уравнение

$$\psi''(\xi) \simeq \xi^2\psi(\xi).$$

Решением этого асимптотического уравнения является следующая функция

$$\psi(\xi) = C\xi^n e^{-\alpha\xi^2},$$

где $\alpha > 0$, чтобы выполнялось условие $\psi(\xi) \to 0$ при $|\xi| \to \infty$. Действительно, ограничиваясь учетом слагаемых, доминирующих при $|\xi| \to \infty$, получаем:

$$\psi'(\xi) \simeq -2\alpha C\xi^{n+1}e^{-\alpha\xi^2},$$

$$\psi''(\xi) \simeq 4\alpha^2 C\xi^{n+2}e^{-\alpha\xi^2} = 4\alpha^2\xi^2\psi.$$

Подставляя ψ'' в асимптотическое уравнение, находим: $4\alpha^2 = 1$ или $\alpha = \dfrac{1}{2}$. Следовательно в асимптотике волновая функция выглядит так:

$$\psi(\xi) = C\xi^n e^{-\xi^2/2}.$$

Теперь возвращаемся к обезразмеренному уравнению. Ищем его решение в виде

$$\psi(\xi) = f(\xi)e^{-\xi^2/2}.$$

Тогда

$$\psi' = f'e^{-\xi^2/2} - \xi f e^{-\xi^2/2},$$

$$\psi'' = f''e^{-\xi^2/2} - 2\xi f'e^{-\xi^2/2} - fe^{-\xi^2/2} + \xi^2 fe^{-\xi^2/2}.$$

Подставляя эти функции в уравнение и сокращая $e^{-\xi^2/2}$, получаем

$$-f'' + 2\xi f' + f - \xi^2 f + \xi^2 f = 2\varepsilon f,$$

$$f''(\xi) - 2\xi f'(\xi) + (2\varepsilon - 1)f(\xi) = 0.$$

Предположим, что $f(\xi)$ представляет собой ряд: $f(\xi) = \sum\limits_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k$.

Тогда

$$f' = \sum_{k=0} a_k k \xi^{k-1}, \quad \xi f' = \sum_{k=0} a_k k \xi^k,$$

$$f'' = \sum_{k=0} a_k (k-1)k\, \xi^{k-2} = \sum_{k=0} a_{k+2}(k+1)(k+2)\xi^k.$$

Подстановка этих производных в уравнение дает:

$$\sum_{k=0} a_{k+2}(k+1)(k+2)\xi^k - 2\sum_{k=0} a_k k \xi^k + (2\varepsilon - 1)\sum_{k=0} a_k \xi^k = 0,$$

или

$$\sum_{k=0} \left((k+1)(k+2)a_{k+2} - 2ka_k + (2\varepsilon - 1)a_k\right) \xi^k = 0.$$

Следовательно в левой части коэффициент при каждой степени ξ есть ноль. Отсюда получаем рекурентные соотношения для коэффициентов a_k:

$$a_{k+2} = a_k \frac{2k - (2\varepsilon - 1)}{(k+1)(k+2)}.$$

Задавая a_0 и a_1, из рекурентных соотношений однозначно определяем все остальные члены ряда. Этот ряд должен обрываться, так как функция $f(\xi)$ должна быть полиномом конечной степени. Тогда при $|\xi| \to \infty$ выживает только старшая степень полинома и $\psi(\xi)$ принимает асимптотическую форму. Обрыв возникает, если выполняется одно из следующих условий:

1) $a_1 = 0$ и $\varepsilon = n + \dfrac{1}{2}$, $n = 0, 2, 4 \ldots$;

в этом случае $f_n(\xi) = \sum\limits_{k=0,2\ldots}^{n} a_k \xi^k$ представляет собой четный полином n-й степени;

2) $a_0 = 0$ и $\varepsilon = n + \dfrac{1}{2}$, $n = 1, 3, 5 \ldots$;

в этом случае $f_n(\xi) = \sum\limits_{k=1,3\ldots}^{n} a_k \xi^k$ представляет собой нечетный полином n-й степени.

Замечание. Функции $f_n(\xi)$ пропорциональны полиномам Эрмита $H_n(\xi)$.

Окончательно, в случае линейного осциллятора стационарное уравнение Шредингера имеет следующие решения:

$$\psi_n(x) = C_n H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}, \quad E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0, 1, 2 \ldots,$$

где $\xi = \sqrt{\dfrac{m\omega}{\hbar}}x$. Общее решение уравнения Шредингера имеет вид

$$\Psi(x,\, t) = \sum_n c_n \psi_n(x) e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} = \sum_n c_n \psi_n(x) e^{-i\frac{\hbar\omega(n+1/2)t}{\hbar}} =$$

$$= e^{-i\frac{\omega t}{2}} \sum_n c_n \psi_n(x) e^{-i\omega n t}.$$

Замечание. Из вида общего решения следует ,что

$$|\Psi(x,\, t)| = |\Psi(x,\, t + T)|,$$

где $T = \dfrac{2\pi}{\omega}$. То есть, каким бы ни было начальное условие, волновая функция линейного осциллятора возвращается к своему первоначальному виду через отрезок времени $T = \dfrac{2\pi}{\omega}$.

Лекция №7. Частица в центральном поле

Операторы орбитального момента

В центральном поле потенциальная энергия частицы зависит только от ее расстояния от центра, т.е.

$$U(\mathbf{r}) = U(|\mathbf{r}|) \equiv U(r), \qquad |\mathbf{r}| \equiv r.$$

Силы, действующие на частицу в центральном поле, разумеется, являются центральными, поскольку

$$\mathbf{F} = -\nabla U = -U'(r)\frac{\mathbf{r}}{r}.$$

Пример: электрон в поле ядра. Потенциальная энергия электрона $U(\mathbf{r}) = -\dfrac{Ze^2}{r}$.

Рассмотрим потенциал центрального поля самого общего вида $U(r)$. Оператор Гамильтона имеет вид

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(r).$$

Ищем решение стационарного уравнения Шредингера

$$\hat{H}\psi_n = E\psi_n, \qquad \psi_n = \psi_n(\mathbf{r}).$$

Для решения введем оператор орбитального (углового) момента

$$\hat{\mathbf{L}} = [\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}] = -i\hbar[\mathbf{r} \times \nabla].$$

По определению

$$\hat{\mathbf{l}} = \frac{\hat{\mathbf{L}}}{\hbar} = -i[\mathbf{r} \times \nabla] = -i \begin{vmatrix} \mathbf{e}_x & \mathbf{e}_y & \mathbf{e}_z \\ x & y & z \\ \dfrac{\partial}{\partial x} & \dfrac{\partial}{\partial y} & \dfrac{\partial}{\partial z} \end{vmatrix}$$

есть безразмерный оператор орбитального момента.

Оператор $\hat{\mathbf{l}}$ коммутирует с оператором $\hat{H}$, то есть

$$[\hat{H},\, \hat{l}_\alpha] = 0, \qquad \alpha = 1,\, 2,\, 3,$$

где

$$\hat{l}_1 \equiv \hat{l}_x = -i\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right),$$
$$\hat{l}_2 \equiv \hat{l}_y = -i\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right),$$
$$\hat{l}_3 \equiv \hat{l}_z = -i\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right),$$

или

$$\hat{l}_\alpha = -ie_{\alpha\beta\gamma}r_\beta\nabla_\gamma = \frac{1}{\hbar}\, e_{\alpha\beta\gamma}r_\beta\hat{p}_\gamma.$$

Действительно, воспользовавшись тем, что

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_\lambda\hat{p}_\lambda}{2m} + U(r)$$

и

$$[\hat{p}_\alpha,\, r_\beta] = -i\hbar\delta_{\alpha\beta},$$

нетрудно показать, что

$$[\hat{p}_\lambda\hat{p}_\lambda,\, \hat{l}_\alpha] = 0,$$

и

$$[U(r),\, \hat{l}_\alpha] = 0.$$

Далее, вычисляя коммутаторы опрераторов $\hat{l}_\alpha$, находим

$$\left[\hat{l}_x,\, \hat{l}_y\right] = i\hat{l}_z,$$

$$\left[\hat{l}_y,\, \hat{l}_z\right] = i\hat{l}_x,$$

$$\left[\hat{l}_z,\, \hat{l}_x\right] = i\hat{l}_y,$$

или

$$[\hat{l}_\alpha,\, \hat{l}_\beta] = ie_{\alpha\beta\gamma}\hat{l}_\gamma.$$

Так как операторы проекций вектора орбитального момента на оси декартовой системы координат не коммутируют друг с другом, то только одна компонента вектора $\mathbf{l}$ может быть точно определена. Введем оператор квадрата орбитального момента:

$$\hat{\mathbf{l}}^2 \equiv \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2.$$

Нетрудно показать, что он коммутирует с операторами проекций орбитального момента, т.е.

$$[\hat{\mathbf{l}}^2,\, \hat{l}_\alpha] = 0.$$

Следовательно квадрат длины и одна из компонент вектора $\mathbf{l}$ одновременно измеримы. То есть операторы $\hat{H}$, $\hat{\mathbf{l}}^2$ и $\hat{l}_\alpha$ коммутируют друг с другом. А это означает, что они имеют общую систему собственных функций.

Перейдем от декартовых координат $(x,\, y,\, z)$ к сферическим координатам $(r,\, \theta,\, \varphi)$:

$$x = r\sin\theta\cos\varphi, \quad y = r\sin\theta\sin\varphi, \quad z = r\cos\theta.$$

В сферических координатах операторы $\hat{l}_\alpha$ имеют вид

$$\hat{l}_x = -i\left(-\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cos\varphi\,\mathrm{ctg}\,\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right),$$

$$\hat{l}_y = -i\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \sin\varphi\,\mathrm{ctg}\,\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right),$$

$$\hat{l}_z = -i\frac{\partial}{\partial\varphi}.$$

Для оператора квадрата орбитального момента получаем:

$$\hat{\mathbf{l}}^2 = -\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) - \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \equiv -\Delta_{\theta,\,\varphi}.$$

Легко видеть, что наиболее просто выглядит тройка коммутирующих операторов $\hat{H}$, $\hat{\mathbf{l}}^2$ и $\hat{l}_z$.

Рассмотрим вид оператора Гамильтона в сферических координатах:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(r) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{r,\,\theta,\,\varphi} + U(r).$$

Лапласиан в сферических координатах выглядит следующим образом

$$\Delta_{r,\,\theta,\,\varphi} = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\Delta_{\theta,\,\varphi}}{r^2},$$

поэтому оператор Гамильтона можно записать так:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{\hat{\mathbf{l}}^2}{r^2}\right) + U(r).$$

Сферические гармоники

Собственными функциями операторов $\hat{\mathbf{l}}^2$ и $\hat{l}_z$ являются сферические гармоники $Y_{lm}(\theta,\,\varphi)$:

$$\hat{\mathbf{l}}^2 Y_{lm}(\theta,\,\varphi) = \lambda(l) Y_{lm}(\theta,\,\varphi),$$

$$\hat{l}_z Y_{lm}(\theta,\,\varphi) = m Y_{lm}(\theta,\,\varphi).$$

Подставим в эти уравнения явные выражения для операторов в сферических координатах:

$$\begin{cases} \left(-\dfrac{1}{\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\dfrac{\partial}{\partial\theta}\right) - \dfrac{1}{\sin^2\theta}\dfrac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right) Y_{lm}(\theta,\,\varphi) = \lambda(l) Y_{lm}(\theta,\,\varphi), \\ -i\dfrac{\partial}{\partial\varphi} Y_{lm}(\theta,\,\varphi) = m Y_{lm}(\theta,\,\varphi). \end{cases}$$

Решим эту систему дифференциальных уравнений методом разделения переменных:

$$Y(\theta,\,\varphi) = A(\theta)B(\varphi).$$

Из второго уравнения получаем

$$-i\frac{dB(\varphi)}{d\varphi} = mB(\varphi) \quad \Rightarrow \quad B(\varphi) = e^{im\varphi}.$$

При изменении угла φ на 2π мы возвращаемся в исходную точку пространства. Поскольку волновая функция должна быть однозначной, то

$$B(\varphi + 2\pi) = B(\varphi),$$

то есть
$$e^{i2\pi m} = 1.$$
Следовательно $m \in \mathbb{Z}$.

Подставляя
$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = A(\theta) e^{im\varphi}$$
в первое уравнение системы и сокращая $e^{im\varphi}$, получаем уравнение на $A(\theta)$:
$$\left(-\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{d}{d\theta} \right) + \frac{m^2}{\sin^2\theta} \right) A(\theta) = \lambda(l) A(\theta).$$
Выполним замену переменной:
$$\xi = \cos\theta, \qquad -1 \leqslant \xi \leqslant 1,$$
$$\frac{d}{d\theta} = \frac{d\cos\theta}{d\theta} \frac{d}{d\xi} = -\sin\theta \frac{d}{d\xi}.$$
Тогда
$$-\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{d}{d\theta} \right) = \frac{d}{d\xi} \left((\xi^2 - 1) \frac{d}{d\xi} \right) = (\xi^2 - 1) \frac{d^2}{d\xi^2} + 2\xi \frac{d}{d\xi},$$
и уравнение для $A(\xi)$ принимает вид:
$$\left((\xi^2 - 1) \frac{d^2}{d\xi^2} + 2\xi \frac{d}{d\xi} + \frac{m^2}{1 - \xi^2} \right) A(\xi) = \lambda(l) A(\xi).$$

Замечание. В общем случае решение $A(\xi)$ расходится в точках $\xi = \pm 1$, то есть при $\theta = \pm\pi$ или на оси Oz в декартовых координатах. С физической точки зрения расходимостей быть не должно. Кроме того, выбор оси (в нашем случае – оси Oz) не должен отражаться на решении уравнения Шредингера.

Из теории уравнений математической физики следует, что расходимостей (особенностей) при $\xi = \pm 1$ нет, только если
$$\lambda(l) = l(l+1),$$

где $l = |m|, |m|+1, \ldots$ ($l \geqslant |m|$). То есть при любом $l = 0, 1, 2\ldots$ получаем уравнение

$$\left((\xi^2-1)\frac{d^2}{d\xi^2} + 2\xi\frac{d}{d\xi} + \frac{m^2}{1-\xi^2} - l(l+1)\right)A(\xi) = 0,$$

где $m = 0, \pm 1, \pm 2 \ldots \pm l$. В таком случае $A_{lm}(\xi)$ – это функция без особенностей при $-1 \leqslant \xi \leqslant 1$. Поскольку уравнение содержит m^2, то функции $A_{lm}(\xi)$ и $A_{l\,-m}(\xi)$ отличаются только постоянным множителем.

Рассмотрим два случая

а) $m = 0$,

$$\left((\xi^2-1)\frac{d^2}{d\xi^2} + 2\xi\frac{d}{d\xi} - l(l+1)\right)A(\xi) = 0.$$

Тогда решением является $A(\xi) = P_l(\xi)$ – полином Лежандра степени l. Его явный вид задается формулой Родрига:

$$P_l(\xi) = \frac{1}{2^l l!}\frac{d^l}{d\xi^l}(\xi^2-1)^l.$$

б) $m > 0$. Тогда $A(\xi) = P_l^m(\xi)$ – присоединенный полином Лежандра. Для него имеем:

$$P_l^m(\xi) = (1-\xi^2)^{m/2}\frac{d^m}{d\xi^m}P_l(\xi).$$

Полиномы Лежандра обладают свойством ортогональности:

$$\int\limits_{-1}^{1} P_l^m(\xi)P_{l'}^m(\xi)d\xi \sim \delta_{ll'}.$$

Итак, сферические гармоники имеют вид (для неотрицательных m):

$$Y_{lm}(\theta,\,\varphi) = C_{lm}P_l^m(\theta)e^{im\varphi}, \quad l = 0, 1, 2\ldots, \quad m = 0,\,1,\,2\ldots l.$$

Константы C_{lm} находятся из условия нормировки

$$\int\!\!\int \left|Y_{lm}(\theta,\,\varphi)\right|^2 d\Omega = 1.$$

Можно показать, что

$$C_{lm} = \left(\frac{2l+1}{4\pi}\,\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\right)^{1/2}.$$

Сферические гармоники с отрицательными $m = -1, -2 \ldots -l$ по определению принимают равными

$$Y_{lm}(\theta,\,\varphi) = (-1)^m Y^*_{l\,-m}(\theta,\,\varphi).$$

Сферические гармоники образуют полный ортонормированный базис на сфере ($0 \leqslant \theta \leqslant \pi$, $0 \leqslant \varphi \leqslant 2\pi$):

$$\int\!\!\int Y^*_{lm}(\theta,\varphi)Y_{l'm'}(\theta,\varphi)d\Omega = \delta_{ll'}\delta_{mm'}.$$

Радиальное уравнение Шредингера

Вернемся теперь к задаче о нахождении ψ-функции частицы в центральном поле. Ищем решение стационарного уравнения Шредингера в виде

$$\psi(\mathbf{r}) = R(r)Y_{lm}(\theta,\,\varphi).$$

Подставляя его в уравнение, получаем

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{\hat{\mathbf{l}}^2}{r^2}\right)R(r)Y_{lm}(\theta,\,\varphi) +$$

$$+\,U(r)R(r)Y_{lm}(\theta,\,\varphi) = ER(r)Y_{lm}(\theta,\,\varphi).$$

Поскольку

$$\hat{\mathbf{l}}^2 Y_{lm}(\theta,\,\varphi) = l(l+1)Y_{lm}(\theta,\,\varphi),$$

то, сокращая $Y_{lm}(\theta,\,\varphi)$, находим уравнение для радиальной функции:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)R(r) + U(r)R(r) = ER(r).$$

Небольшая перегруппировка дает:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right)R(r) + U_{\text{эфф}}(r)R(r) = ER(r),$$

где введено:
$$U_{\text{эфф}}(r) = U(r) + \frac{h^2 l(l+1)}{2mr^2}.$$
Далее примем $R(r) = \dfrac{u(r)}{r}$, и, пользуясь тем, что
$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right)\frac{u(r)}{r} = \frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}r^2\left(\frac{u'(r)}{r} - \frac{u(r)}{r^2}\right) =$$
$$= \frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}(ru'(r) - u(r)) = \frac{u''}{r},$$
получим
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{u''(r)}{r} + U_{\text{эфф}}(r)\frac{u(r)}{r} = E\frac{u(r)}{r}.$$
Домножая на r, приходим к окончательному виду уравнения на радиальную функцию $u(r)$:
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u(r)}{dr^2} + U_{\text{эфф}}(r)u(r) = Eu(r).$$
Этот результат называют радиальным уравнением Шредингера.

Условие нормировки
$$\int |\psi(\mathbf{r})|^2 d^3r = 1, \qquad d^3r = r^2 dr d\Omega$$
с учетом подстановки
$$\psi(r,\,\theta,\varphi) = \frac{u(r)}{r}Y_{lm}(\theta,\,\varphi)$$
и нормировки функций $Y_{lm}(\theta,\,\varphi)$, переходит в условие нормировки функций $u(r)$:
$$\left(\int\limits_0^\infty \frac{|u(r)|^2}{r^2}r^2dr\right)\left(\int\!\!\int |Y_{lm}(\theta,\,\varphi)|^2 d\Omega\right) = \int\limits_0^\infty |u(r)|^2 dr = 1.$$

Лекция №8. Водородоподобный атом

Уравнение для радиальных функций

Рассмотрим подробнее одну из важнейших задач, связанных с центральным полем, а именно – кулоновское поле водородоподобного атома. Потенциальная энергия электрона в этом поле имеет вид:

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{r}.$$

На прошлой лекции было показано, что волновая функция частицы в таком поле представима в виде

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{u(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \varphi).$$

При этом $u(r)$ – это решение радиального уравнения Шредингера,

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}u''(r) + \left(-\frac{Ze^2}{r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e r^2}\right)u(r) = Eu(r),$$

нормированное условием

$$\int\limits_0^\infty |u(r)|^2 dr = 1.$$

Домножая обе части уравнения на $\dfrac{2\hbar^2}{m_e e^4}$

$$-\frac{\hbar^4}{m_e^2 e^4}u''(r) + \left(-\frac{2Z\hbar^2}{m_e e^2 r} + \frac{\hbar^4 l(l+1)}{m_e^2 e^4 r^2}\right)u(r) = \frac{2E\hbar^2}{m_e e^4}u(r),$$

и вводя следующие величины

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} \simeq 0,5 \cdot 10^{-8} \text{ см},$$

$$E_a = \frac{e^2}{a_0} = \frac{m_e e^4}{\hbar^2} \simeq 27 \text{ эВ},$$

находим

$$-a_0^2 u''(r) + \left(-\frac{2Za_0}{r} + \frac{a_0^2 l(l+1)}{r^2}\right) u(r) = \frac{2E}{E_a} u(r).$$

В новых безразмерных переменных

$$\rho = \frac{r}{a_0}, \quad \varepsilon = \frac{E}{E_a},$$

получаем уравнение

$$-u''(\rho) - \frac{2Z}{\rho} u(\rho) + \frac{l(l+1)}{\rho^2} u(\rho) = 2\varepsilon u(\rho).$$

Явный вид радиальных функций

Будем рассматривать только связанные состояния, такие что

$$E < 0, \qquad \varepsilon < 0, \qquad -\varepsilon \equiv \frac{\alpha^2}{2} > 0.$$

Тогда

$$-u''(\rho) - \frac{2Z}{\rho} u(\rho) + \frac{l(l+1)}{\rho^2} u(\rho) + \alpha^2 u(\rho) = 0.$$

Искать решение, как в задаче о линейном осцилляторе, будем поэтапно.

Для начала найдем асимптотику решения при $\rho \to \infty$. Пренебрегая членами младших порядков, находим

$$u''(\rho) - \alpha^2 u(\rho) \simeq 0.$$

Решением, как легко показать, является функция

$$u(\rho) = C\rho^n e^{-\alpha\rho}.$$

Действительно, удерживая только ведущие при $\rho \to \infty$ слагаемые, получаем

$$u'(\rho) \simeq -\alpha C \rho^n e^{-\alpha\rho},$$

$$u''(\rho) \simeq \alpha^2 C \rho^n e^{-\alpha\rho} = \alpha^2 u(\rho).$$

Найдем также асимптотику $u(\rho)$ при $\rho \to 0$. В этом пределе уравнение принимает форму

$$u''(\rho) - \frac{l(l+1)}{\rho^2} u(\rho) \simeq 0.$$

Этому уравнению удовлетворяет степенная функция

$$u(\rho) = C\rho^k,$$

причем k определяется условием

$$k(k-1) = l(l+1).$$

То есть, $k = l+1$ или $k = -l$. При отрицательном k функция $u(\rho)$ не определена в нуле, а нормировочный интеграл расходится. Следовательно в пределе $\rho \to 0$ имеем $u(\rho) \sim \rho^{l+1}$.

Подытоживая результаты, получаем

$$u(\rho) \sim \rho^n e^{-\alpha\rho}, \quad \text{при} \quad \rho \to \infty,$$

$$u(\rho) \sim \rho^{l+1}, \quad \text{при} \quad \rho \to 0.$$

Решение $u(\rho)$ ищем в виде

$$u(\rho) = F(\rho) e^{-\alpha\rho},$$

тогда

$$u' = F' e^{-\alpha\rho} - \alpha F e^{-\alpha\rho};$$

$$u'' = F'' e^{-\alpha\rho} - 2\alpha F' e^{-\alpha\rho} + \alpha^2 F e^{-\alpha\rho}.$$

Подставляя эти выражения в обезразмеренное уравнение и сокращая $e^{-\alpha\rho}$, получаем

$$-F'' + 2\alpha F' - \alpha^2 F - \frac{2Z}{\rho} F + \frac{l(l+1)}{\rho^2} F + \alpha^2 F = 0,$$

или

$$-F'' + 2\alpha F' - \frac{2Z}{\rho} F + \frac{l(l+1)}{\rho^2} F = 0.$$

Ищем теперь $F(\rho)$ в виде ряда

$$F(\rho) = \rho^{l+1} \sum_{\nu=0} \beta_\nu \rho^\nu = \sum_{\nu=0} \beta_\nu \rho^{\nu+l+1}, \quad \beta_0 \neq 0.$$

Тогда, почленно дифференцируя, находим

$$F'(\rho) = \sum_{\nu=0} (\nu + l + 1)\beta_\nu \rho^{\nu+l},$$

$$F''(\rho) = \sum_{\nu=0} (\nu + l)(\nu + l + 1)\beta_\nu \rho^{\nu+l-1}.$$

Подставляя ряды в уравнение и вынося ρ^{l-1} из под знака сумм, получаем

$$\rho^{l-1} \sum_{\nu=0} \beta_\nu (\nu + l)(\nu + l + 1)\rho^\nu - 2\alpha\rho^{l-1} \sum_{\nu=0} \beta_\nu (\nu + l + 1)\rho^{\nu+1} +$$

$$+2Z\rho^{l-1} \sum_{\nu=0} \beta_\nu \rho^{\nu+1} - l(l+1)\rho^{l-1} \sum_{\nu=0} \beta_\nu \rho^\nu = 0.$$

Общий множитель ρ^{l-1}, конечно, сокращается.

В левой части получившегося уравнения стоят четыре ряда. Заметим, что первый и четвертый ряды начинаются со слагаемого $\sim \rho^0$, тогда как второй и третий – со слагаемого $\sim \rho^1$. Выделяя в первом и четвертом рядах "нулевые"слагаемые, находим:

$$l(l+1)\beta_0 + \sum_{\nu=1} \beta_\nu (\nu + l)(\nu + l + 1)\rho^\nu - 2\alpha \sum_{\nu=0} \beta_\nu (\nu + l + 1)\rho^{\nu+1} +$$

$$+2Z \sum_{\nu=0} \beta_\nu \rho^{\nu+1} - l(l+1)\beta_0 - l(l+1) \sum_{\nu=1} \beta_\nu \rho^\nu = 0.$$

Сокращая слагаемые $l(l+1)\beta_0$ и меняя индексы суммирования в первом и последнем рядах так, чтобы суммирования вновь начинались с нулевого индекса, получаем

$$\sum_{\nu=0} [\, \beta_{\nu+1}(\nu + l + 1)(\nu + l + 2) - 2\alpha\beta_\nu(\nu + l + 1) +$$

$$+ 2Z\beta_\nu - l(l+1)\beta_{\nu+1}]\, \rho^{\nu+1} = 0.$$

Следовательно в левой части коэффициент при каждой степени равен нулю. Отсюда получаем рекурентные соотношения для коэффицентов β_ν:

$$\beta_{\nu+1} = \beta_\nu \frac{2\alpha(\nu + l + 1) - 2Z}{(\nu + l + 1)(\nu + l + 2) - l(l+1)}, \qquad \nu = 0, 1, 2 \ldots$$

Задавая β_0, однозначно определяем все остальные члены ряда. Так как асимптотика функции $u(\rho)$ при $\rho \to \infty$ описывается произведением конечной степени ρ и $e^{-\alpha\rho}$, то ряд $F(\rho)$ должен обрываться. Пусть старшая степень ряда есть n_r (т.е. $\beta_{n_r} \neq 0$, тогда как $\beta_{n_r+1} = \beta_{n_r+2} = \ldots = 0$). Тогда условие обрыва принимает вид:

$$\alpha = \frac{Z}{n_r + l + 1}.$$

Следовательно

$$F(\rho) = \rho^{l+1} \sum_{\nu=0}^{n_r} \beta_\nu \rho^\nu.$$

Этот полином называется полиномом Лагера (при подходящем выборе β_0); n_r – это число узлов радиальной функции. Таким образом

$$\varepsilon = -\frac{\alpha^2}{2} = -\frac{Z^2}{2(n_r + l + 1)^2}.$$

В то же время волновая функция состояния с такой энергией определяется формулой

$$\psi_{n_r lm}(\rho,\, \theta,\, \varphi) = \frac{u(r)}{r} Y_{lm}(\theta,\, \varphi) = C_{n_r l}\, \rho^l \left(\sum_{\nu=0}^{n_r} \beta_\nu \rho^\nu \right) e^{-\alpha\rho} Y_{lm}(\theta,\, \varphi).$$

Тройка $(n_r,\, l,\, m)$ – это квантовые числа, задающие состояние.

Спектр водородоподобного атома

Передем к другой тройке квантовых чисел $(n,\, l,\, m)$, где $n \equiv n_r + l + 1$ – главное квантовое число. Тогда

$$\psi_{nlm}(\rho,\, \theta,\, \varphi) = C_{nl}\, \rho^l \left(\sum_{\nu=0}^{n-l-1} (\frac{\beta_\nu}{\beta_0}) \rho^\nu \right) e^{-\frac{Z\rho}{n}} Y_{lm}(\theta,\, \varphi).$$

В этом случае энергии состояний определяются только главным квантовым числом n:

$$E_n = E_a \varepsilon_n = -\frac{Z^2 e^4}{2 a_0 n^2} = -\frac{Z^2 m_e e^4}{2\hbar^2 n^2}.$$

Уровень с энергией E_n вырожден по квантовым числам l и m. Кратность вырождения n-го уровня, как легко сосчитать, равна n^2. Отметим также, что в спектроскопии используются специальные обозначения для орбитального квантового числа l:

$$\begin{array}{rccccc} l = & 0, & 1, & 2, & 3, & \dots \\ & s, & p, & d, & f, & \dots \end{array}$$

Лекция №9. Теория представлений. Формализм Дирака

Волновая функция в f-представлении

В соответствии с постулатом I $\psi(\mathbf{r})$ – это функция, дающая полное описание квантового состояния частицы. В частности, это амплитуда вероятности найти частицу в точке $\mathbf{r}$.

Теперь рассмотрим некоторую физическую величину F и соответствующий ей оператор $\hat{F}$. Задача на собственные функции этого оператора имеет вид

$$\hat{F}\psi_f(\mathbf{r}) = f\psi_f(\mathbf{r}).$$

Амплитуда вероятности получить величину f при измерении F в состоянии, которое описывается волновой функцией $\psi(\mathbf{r})$, есть

$$c(f) = \langle\psi_f|\psi\rangle \equiv \int \psi_f^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})d^3r.$$

Напомним, что собственное значение f часто называют квантовым числом, которое однозначно фиксирует собственную функцию. Поэтому удобно пользоваться следующим обозначением:

$$c(f) = \langle\psi_f|\psi\rangle \equiv \langle f|\psi\rangle.$$

Заметим, что разложение $\psi(\mathbf{r})$ по $\psi_f(\mathbf{r})$ имеет вид

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_n c_n\psi_n(\mathbf{r}) + \int c(f)\psi_f df, \quad \psi_n \equiv \psi_{f_n}, \quad c_n \equiv c(f_n).$$

Ясно, что набор коэффициентов $c(f)$ столь же информативен, как и сама исходная волновая функция $\psi(\mathbf{r})$.

Итак, если $c(f) = \langle f|\psi\rangle$ есть амплитуда вероятности получить f при измерении F, то амплитуду вероятности $\psi(\mathbf{r})$ получить $\mathbf{r}$ при измерении координаты естественно записать в виде

$$\psi(\mathbf{r}) \equiv \langle \mathbf{r}|\psi\rangle.$$

С другой стороны, если волновая функция $\psi(\mathbf{r})$ имеет смысл амплитуды $\langle \mathbf{r}|\psi\rangle$, то набор амплитуд $c(f)$, несущих всю полноту информации о квантовом состоянии системы, естественно назвать волновой функцией, альтернативной $\psi(\mathbf{r})$. Соответственно вводят обозначение:

$$c(f) = \langle f|\psi\rangle \equiv \psi(f).$$

Таким образом считают, что
$\langle \mathbf{r}|\psi\rangle = \psi(\mathbf{r})$ – это волновая функция в $\mathbf{r}$-представлении,
$\langle f|\psi\rangle = \psi(f)$ – это волновая функция в f-представлении.

Замечание. Дирак высказал предположение, что любая волновая функция – это набор проекций вектора состояния на собственные векторы какого-либо эрмитового оператора. С этим предположением связан особый формализм, который называется формализмом Дирака.

Постулаты квантовой механики в формализме Дирака

I постулат. Квантовое состояние системы полностью определяется вектором состояния $|\psi\rangle$. Векторы $|\psi\rangle$ и $c|\psi\rangle$ $(c \neq 0)$ определяют одно и то же состояние.

Каждому вектору состояния $|\psi\rangle$ можно сопоставить сопряженный вектор состояния $\langle\psi|$. Любой паре векторов $|\psi\rangle$ и $\langle\varphi|$ можно поставить в соответствие комплексное число, проекцию $|\psi\rangle$ на $\langle\varphi|$: $\langle\varphi|\psi\rangle$. Проекции $\langle\varphi|\psi\rangle$ и $\langle\psi|\varphi\rangle$ связаны соотношением:

$$\langle\varphi|\psi\rangle \equiv \langle\psi|\varphi\rangle^*.$$

Проекция вектора на собственный сопряженный вектор есть величина неотрицательная: $\langle\psi|\psi\rangle \geqslant 0$.

Замечание. Следуя Дираку, векторы $\langle\psi|$ иногда называют bra-векторами, а сопряженные векторы $|\psi\rangle$ – ket-векторами. Эти наименования Дирак построил из английского слова "bracket"("скобка") для $\langle\varphi|\psi\rangle$.

II постулат. Пространство состояний линейно.

Пусть $|\psi_1\rangle$ и $|\psi_2\rangle$ принадлежат пространству состояний, тогда вектор

$$|\psi\rangle = c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle \qquad \forall c_1,\, c_2 \in \mathbb{C}$$

также принадлежит пространству состояний.

III постулат. Любой физической величине F соответствует линейный эрмитовый оператор $\hat{F}$, действующий в пространстве состояний. Собственные векторы $|f\rangle$ и соответствующие им собственные значения f определяются уравнением

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

Измерение физической величины F приводит к одному из собственных значений f. Если $|\psi\rangle = |f\rangle$, то измерение F в состоянии $|\psi\rangle$ обязательно дает f.

Собственные векторы могут быть выбраны так, что условия нормировки имеют вид:

а) в случае дискретного спектра: $\quad \langle f|f'\rangle = \delta_{ff'},$

б) в случае непрерывного спектра: $\quad \langle f|f'\rangle = \delta(f - f').$

Если f относится к дискретному спектру, а f' – к непрерывному, то $|f\rangle$ и $|f'\rangle$ ортогональны.

Совокупность всех собственных векторов $|f\rangle$ образует полный базис. Разложение произвольного вектора $|\psi\rangle$ по этому базису имеет вид

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n|f_n\rangle + \int c(f)|f\rangle df,$$

где

$$c_n = \langle f_n|\psi\rangle \equiv \langle n|\psi\rangle, \quad c(f) = \langle f|\psi\rangle.$$

Выведем условие полноты базиса. Для этого подставим $c_n = \langle n|\psi\rangle$ и $c(f) = \langle f|\psi\rangle$ в разложение $|\psi\rangle$:

$$|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\psi\rangle + \int |f\rangle\langle f|\psi\rangle df =$$

$$= \left(\sum_n |n\rangle\langle n| + \int |f\rangle\langle f| df\right)|\psi\rangle \equiv |\psi\rangle.$$

Таким образом условие полноты базиса выглядит следующим образом:

$$\sum_n |n\rangle\langle n| + \int |f\rangle\langle f|df = 1.$$

Домножая слева на $\langle\psi|$ и справа на $|\psi\rangle$, получаем

$$\sum_n \langle\psi|n\rangle\langle n|\psi\rangle + \int\langle\psi|f\rangle\langle f|\psi\rangle df = \langle\psi|\psi\rangle,$$

или

$$\sum_n |c_n|^2 + \int |c(f)|^2 df = \langle\psi|\psi\rangle.$$

IV постулат. Если состояние системы описывается вектором ψ, нормированным на единицу,

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

то c_n и $c(f)$ – это амплитуды вероятности получить f_n и f, соответственно, при измерении F в состоянии $|\psi\rangle$.

Набор амплитуд $\langle n|\psi\rangle \equiv \langle f_n|\psi\rangle = \psi(n)$ и $\langle f|\psi\rangle = \psi(f)$ называется волновой функцией в f-представлении.

Теорема. Пусть физической величине F соответствует оператор $\hat{F}$ ($\hat{F}^+ = \hat{F}$) и пусть

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n|n\rangle + \int c(f)|f\rangle df,$$

где амплитуды

$$c_n = \langle n|\psi\rangle, \quad c(f) = \langle f|\psi\rangle$$

представляют собой волновую функцию в f-представлении. Тогда

$$\langle f|\hat{F}\psi\rangle = f\langle f|\psi\rangle,$$

т.е. в f-представлении результат действия оператора $\hat{F}$ на произвольный вектор $|\psi\rangle$ сводится к умножению вектора $|\psi\rangle$ в f-представлении на f.

Доказательство:

$$\langle f|\hat{F}\psi\rangle = \langle\psi|\hat{F}^+f\rangle^* = \langle\psi|\hat{F}f\rangle^* = f\langle\psi|f\rangle^* = f\langle f|\psi\rangle.$$

Собственные векторы и собственные значения оператора координаты

Рассмотрим задачу о собственных векторах и собственных значениях оператора координаты $\hat{\mathbf{r}}$:

$$\hat{\mathbf{r}}|\mathbf{r}_0\rangle = \mathbf{r}_0|\mathbf{r}_0\rangle,$$

где $\mathbf{r}_0$ – действительный радиус-вектор, а $|\mathbf{r}_0\rangle$ – собственный вектор, отвечающий собственному значению $\mathbf{r}_0$. Домножая справа на $\langle\mathbf{r}|$, получаем

$$\langle\mathbf{r}|\hat{\mathbf{r}}|\mathbf{r}_0\rangle = \mathbf{r}_0\langle\mathbf{r}|\mathbf{r}_0\rangle.$$

В силу только что доказанной теоремы

$$\mathbf{r}\langle\mathbf{r}|\mathbf{r}_0\rangle = \mathbf{r}_0\langle\mathbf{r}|\mathbf{r}_0\rangle,$$

или, иначе,

$$\mathbf{r}\psi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r}) = \mathbf{r}_0\psi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r}).$$

Здесь $\mathbf{r}$ – произвольный радиус-вектор, а $\mathbf{r}_0$ – фиксированный радиус-вектор (собственное значение). Легко видеть, что функция

$$\psi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$$

является искомой собственной функцией оператора координаты $\hat{\mathbf{r}}$ в координатном представлении. Эта функция не может быть нормирована на единицу, поэтому состояние, описывающееся такой волновой функцией, не может быть осуществлено.

Условие полноты собственных векторов оператора координаты имеет вид:

$$\int |\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}|\, d^3r = 1.$$

Домножая слева на $\langle\varphi|$, а справа – на $|\psi\rangle$, получаем

$$\int \langle\varphi|\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}|\psi\rangle\, d^3r = \langle\varphi|\psi\rangle,$$

то есть

$$\int \varphi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) d^3r = \langle\varphi|\psi\rangle.$$

Лекция №10. Матричные представления. Еще раз о линейном осцилляторе

Операторы-матрицы и векторы-столбцы

В случае, когда спектр оператора является дискретным, возникают матричные представления. Пусть

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle, \quad |n\rangle \equiv |\psi_n\rangle,$$

где $n = 0, 1, 2\ldots$ – индекс состояний дискретного спектра. Из условия полноты

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$$

следует, что произвольный вектор состояния $|\psi\rangle$ может быть разложен по собственым векторам $|n\rangle$ следующим образом

$$|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\psi\rangle.$$

Волновая функция $\langle n|\psi\rangle$ в данном n-представлении является столбцом

$$\langle n|\psi\rangle = \begin{Vmatrix} \langle 1|\psi\rangle \\ \langle 2|\psi\rangle \\ \ldots \end{Vmatrix}$$

Операторы в n-представлении являются матрицами

$$\langle n|\hat{A}|\psi\rangle = \sum_{n'}\langle n|\hat{A}|n'\rangle\langle n'|\psi\rangle =$$

$$= \sum_{n'} A_{nn'}\langle n'|\psi\rangle = \begin{Vmatrix} A_{11} & A_{12} & \ldots \\ A_{21} & A_{22} & \ldots \\ \ldots & \ldots & \ldots \end{Vmatrix}\begin{Vmatrix} \langle 1|\psi\rangle \\ \langle 2|\psi\rangle \\ \ldots \end{Vmatrix}.$$

Рассмотрим условие эрмитовости оператора $\hat{F}$. По определению,

$$\langle n|\hat{F}|n'\rangle = \langle \hat{F}^{+}n|n'\rangle = \langle n'|\hat{F}^{+}|n\rangle^{*}.$$

В матричных обозначениях это переписывается так:

$$F_{nn'} = \left(F^{+}\right)^{*}_{n'n},$$

или

$$\left(F^{+}\right)_{nn'} = (F^{*})_{n'n} = \left(\left(F^{T}\right)^{*}\right)_{nn'}.$$

Таким образом, если оператор эрмитов, то есть если $\hat{F} = \hat{F}^{+}$, то

$$F = \left(F^{T}\right)^{*} \equiv F^{+}.$$

Следовательно эрмитовому оператору соответствует эрмитовая матрица.

Найдем результат последовательного действия операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$:

$$\langle n|\hat{A}\hat{B}|n'\rangle = \sum_{n''}\langle n|\hat{A}|n''\rangle\langle n''|\hat{B}|n'\rangle = \sum_{n''} A_{nn''}B_{n''n'}.$$

Таким образом матрица оператора, равного произведению операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$, равна произведению матриц, соответствующих этим операторам.

Унитарные преобразования

Посмотрим теперь, как изменяются матричные представления при переходе от одного дискретного базиса к другому.

Пусть спектры операторов $\hat{L}$ и $\hat{M}$ дискретны:

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

$$\hat{M}|\mu\rangle = \mu|\mu\rangle.$$

Вектор состояния $|\psi\rangle$ может быть разложен как по базисным векторам $|\lambda\rangle$, так и по базисным векторам $|\mu\rangle$, то есть

$$|\psi\rangle = \sum_{\lambda} |\lambda\rangle\langle\lambda|\psi\rangle = \sum_{\mu} |\mu\rangle\langle\mu|\psi\rangle.$$

Обозначим

$$\langle\lambda|\psi\rangle = \psi_{\lambda}, \qquad \langle\mu|\psi\rangle = \psi'_{\mu}.$$

Тогда

$$\psi'_{\mu} = \langle\mu|\psi\rangle = \sum_{\lambda}\langle\mu|\lambda\rangle\langle\lambda|\psi\rangle = \sum_{\lambda} U_{\mu\lambda}\psi_{\lambda},$$

где $U_{\mu\lambda} \equiv \langle\mu|\lambda\rangle$ есть матрица перехода от волновой функции ψ_λ в λ-представлении к волновой функции ψ'_μ в μ-представлении. Эта же матрица связывает друг с другом базисные векторы:

$$\langle\mu| = \sum_\lambda \langle\mu|\lambda\rangle\langle\lambda| \equiv \sum_\lambda U_{\mu\lambda}\langle\lambda|,$$

$$|\mu\rangle = \sum_\lambda |\lambda\rangle\langle\lambda|\mu\rangle \equiv \sum_\lambda |\lambda\rangle U^*_{\mu\lambda}.$$

Из условий нормировки имеем:

$$\langle\mu|\mu'\rangle = \delta_{\mu\mu'},$$

$$\langle\lambda|\lambda'\rangle = \delta_{\lambda\lambda'}.$$

Поэтому

$$\delta_{\mu\mu'} = \langle\mu|\mu'\rangle = \left(\sum_\lambda U_{\mu_\lambda}\langle\lambda|\right)\left(\sum_{\lambda'} U^*_{\mu'\lambda'}|\lambda'\rangle\right) =$$

$$= \sum_\lambda\sum_{\lambda'} U_{\mu\lambda}U^*_{\mu'\lambda'}\langle\lambda|\lambda'\rangle = \sum_\lambda U_{\mu\lambda}(U^*)_{\mu'\lambda} = \sum_\lambda U_{\mu\lambda}(U^+)_{\lambda\mu'}.$$

Определение: Оператор $\hat{U}$ называется унитарным, если $\hat{U}^+ = \hat{U}^{-1}$, т.е. если $\hat{U}\hat{U}^+ = \hat{U}^+\hat{U} = 1$.

Почти очевидно, что унитарному оператору соответствует унитарная матрица. Действительно, если $\hat{U}\hat{U}^+ = 1$, то

$$\sum_{n'} U_{nn'}\left(U^+\right)_{n'n''} = \delta_{nn''},$$

таким образом $U^+ = U^{-1}$.

Итак, мы доказали, что матрица (оператор) преобразования волновой функции из одного представления в другое представление является унитарной. Подчеркнем, что унитарность есть следствие сохранения нормы. В самом деле, пусть $\langle\psi|\psi\rangle = 1$, тогда

$$\sum_\lambda \langle\psi|\lambda\rangle\langle\lambda|\psi\rangle = 1,$$

так что
$$\sum_{\lambda}\langle\lambda|\psi\rangle^*\langle\lambda|\psi\rangle=\sum_{\lambda}\psi^*_\lambda\psi_\lambda=1,$$
есть условие нормировки волновой функции в λ-представлении. Опуская индексы, мы можем записать это так:
$$\psi^+\psi=1.$$
Аналогично
$$\psi'^+\psi'=1$$
есть условие нормировки волновой функции в μ-представлении. Подставляя в это равенство разложения
$$\psi'=U\psi,$$
$$\psi'^+=\psi^+U^+,$$
получаем
$$(\psi^+U^+)(U\psi)=1.$$
Это и означает, что $U^+U=1$, то есть что матрица U – унитарная.

Среднее значение $\langle A\rangle$, получаемое при измерении физической величины A, определяется матричным элементом:
$$\langle A\rangle=\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle=\sum_{\lambda,\lambda'}\langle\psi|\lambda\rangle\langle\lambda|\hat{A}|\lambda'\rangle\langle\lambda'|\psi\rangle=\sum_{\lambda,\lambda'}\psi^*_\lambda A_{\lambda\lambda'}\psi_{\lambda'}=\psi^+A\psi,$$
где $A_{\lambda\lambda'}$ (A) – матрица оператора $\hat{A}$ в λ-представлении. Аналогично
$$\langle A\rangle=\sum_{\mu,\mu'}\psi'^*_\mu A_{\mu\mu'}\psi'_{\mu'}=\psi'^+A'\psi',$$
где $A_{\mu\mu'}$ (A') – матрица оператора $\hat{A}$ в μ-представлении. Но так как среднее значение физической величины не зависит от выбора базисных векторов, то
$$\langle A\rangle=\psi^+A\psi=\psi'^+A'\psi'.$$
Поскольку
$$\psi'^+=\psi^+U^+,\quad \psi'=U\psi,$$
то
$$\langle A\rangle=\psi^+A\psi=\psi^+U^+A'U\psi.$$

Следовательно матрицы A и A' одного и того же оператора $\hat{A}$ в λ- и μ-представлениях связаны друг с другом следующим образом:

$$A = U^+ A' U, \quad A' = U A U^+.$$

Исследуем свойства коммутатора при унитарном преобразовании всех входящих в него операторов. Пусть $[\hat{A},\, \hat{B}] = \hat{C}$, или в некотором матричном представлении:

$$[A,\, B] = C \quad \Rightarrow \quad AB - BA = C.$$

Тогда, домножая слева на U и справа на U^+, а также используя $U^+ U = 1$, получаем:

$$(UAU^+)(UBU^+) - (UBU^+)(UAU^+) = UCU^+.$$

Но это есть не что иное, как запись коммутатора для операторов в новом базисе:

$$A'B' - B'A' = C' \quad \Rightarrow \quad [A',\, B'] = C'.$$

Таким образом, унитарные преобразования сохраняют коммутаторы неизменными.

Возьмем теперь задачу на собственные векторы и собственные значения некоторого оператора $\hat{F}$:

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

В некотором матричном n-представлении эта задача приобретает следующий вид:

$$\sum_{n'} F_{nn'} \langle n'|f\rangle = f\langle n|f\rangle.$$

Условие разрешимости этой системы линейных алгебраических уравнений выглядит так:

$$\det \|F_{nn'} - \delta_{nn'} f\| = 0.$$

Это есть не что иное, как алгебраическое уравнение на собственные значения f.

Одновременная измеримость величин

Вернемся к теореме об одновременной измеримости величин (лекция 4).

Теорема. Если $[\hat{F}, \hat{G}] = 0$, то F и G одновременно измеримы. То есть существует общая система собственных векторов операторов $\hat{F}$ и $\hat{G}$:

$$\hat{F}|n\rangle = F_n|n\rangle,$$

$$\hat{G}|n\rangle = G_n|n\rangle.$$

Доказательство. Пусть $|n\rangle$ – собственные векторы оператора $\hat{F}$, отвечающие собственным значениям f_n, то есть

$$\hat{F}|n\rangle = f_n|n\rangle.$$

Условие коммутативности операторов $\hat{F}$ и $\hat{G}$

$$\hat{F}\hat{G} = \hat{G}\hat{F}$$

в n-представлении принимает вид:

$$f_n G_{nn'} = G_{nn'} f_{n'} \quad \Leftrightarrow \quad (f_n - f_{n'})G_{nn'} = 0.$$

Если спектр оператора $\hat{F}$ невырожден, то $f_n \neq f_{n'}$ при $n \neq n'$, т.е. $G_{nn'} = 0$ при $n \neq n'$ и, следовательно,

$$G_{nn'} = g_n \delta_{nn'} \quad \Leftrightarrow \quad \hat{G}|n\rangle = g_n|n\rangle$$

в соответствии с утверждением теоремы. Именно этот случай невырожденности спектра оператора $\hat{F}$ и был рассмотрен ранее.

Пусть спектр оператора $\hat{F}$ вырожден, т.е. среди собственных значений имеются k совпадающих:

$$f_{n_1} = f_{n_2} = \ldots = f_{n_k} \equiv f,$$

отвечающих различным векторам $|n_1\rangle$, $|n_2\rangle$ $\ldots|n_k\rangle$. Но тогда любая линейная комбинация векторов $|n_1\rangle$, $|n_2\rangle$ $\ldots|n_k\rangle$ также является собственным вектором оператора $\hat{F}$, отвечающим собственному значению f.

Пусть унитарная матрица U есть матрица перехода от одного ортонормированного набора векторов $|n_1\rangle$, $|n_2\rangle$ $\ldots |n_k\rangle$ к другому $|n'_1\rangle$, $|n'_2\rangle$ $\ldots |n'_k\rangle$, т.е.

$$\langle n'_i| = \sum_j U_{ij}\langle n_j|, \quad |n'_i\rangle = \sum_j U^*_{ij}|n_j\rangle.$$

Тогда в представлении векторов $|n'_i\rangle$ оператор $\hat{G}$ имеет вид

$$G' = UGU^+.$$

Но любая эрмитовая матрица может быть приведена к диагональному виду таким преобразованием (с помощью правильно подобранной унитарной матрицы). После такого приведения имеем:

$$G'_{ij} = g_i\delta_{ij} \quad \Leftrightarrow \quad \hat{G}|n'_i\rangle = g_i|n'_i\rangle.$$

Таким образом, векторы $|n'_1\rangle$, $|n'_2\rangle$ $\ldots |n'_k\rangle$ являются искомыми собственными векторами как для оператора $\hat{F}$, так и для оператора $\hat{G}$. Теорема доказана.

Линейный осциллятор

Стационарное уравнение Шредингера для линейного осциллятора выглядит следующим образом:

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2}\right)|n\rangle = E_n|n\rangle, \quad [\hat{p},\, \hat{x}] = -i\hbar.$$

Собственные векторы нормированы на единицу:

$$\langle n|n\rangle = 1.$$

Обезразмерим уравнение, домножая его левую и правую части на $\dfrac{2}{\hbar\omega}$:

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{m\hbar\omega} + \frac{m\omega\hat{x}^2}{\hbar}\right)|n\rangle = \frac{2E_n}{\hbar\omega}|n\rangle.$$

Выполняем замену переменных:

$$\hat{\xi} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x}, \quad \hat{p}_\xi = \frac{\hat{p}}{\sqrt{m\hbar\omega}}, \quad \varepsilon_n = \frac{E_n}{\hbar\omega},$$

при этом
$$[\hat{p}_\xi,\, \hat{\xi}] = -i.$$
Стационарное уравнение Шредингера имеет вид:
$$\left(\hat{p}_\xi^2 + \hat{\xi}^2\right)|n\rangle = 2\varepsilon_n|n\rangle.$$

Введем новые операторы
$$\begin{cases} \hat{a} = \dfrac{\hat{\xi} + i\hat{p}_\xi}{\sqrt{2}}, \\[2ex] \hat{a}^+ = \dfrac{\hat{\xi} - i\hat{p}_\xi}{\sqrt{2}}. \end{cases}$$
Обезразмеренные операторы координаты $\hat{\xi}$ и импульса $\hat{p}_\xi$ выражаются через эти новые операторы следующим образом
$$\begin{cases} \hat{\xi} = \dfrac{\hat{a} + \hat{a}^+}{\sqrt{2}}, \\[2ex] \hat{p}_\xi = \dfrac{\hat{a} - \hat{a}^+}{i\sqrt{2}}. \end{cases}$$
Вычислим коммутатор $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$:
$$[\hat{a},\, \hat{a}^+] = \frac{1}{2}[\hat{\xi} + i\hat{p}_\xi,\, \hat{\xi} - i\hat{p}_\xi] = \frac{1}{2}(i(-i) - i(i)) = 1,$$
то есть
$$\hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{a} = 1 \quad \text{или} \quad \hat{a}\hat{a}^+ = \hat{a}^+\hat{a} + 1.$$
Перепишем теперь стационарное уравнение Шредингера через операторы $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$:
$$\frac{1}{2}(-(\hat{a} - \hat{a}^+)^2 + (\hat{a} + \hat{a}^+)^2)|n\rangle = 2\varepsilon_n|n\rangle,$$
$$(\hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a})|n\rangle = 2\varepsilon_n|n\rangle,$$
$$(\hat{a}^+\hat{a} + 1 + \hat{a}^+\hat{a})|n\rangle = 2\varepsilon_n|n\rangle,$$
$$(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2})|n\rangle = \varepsilon_n|n\rangle,$$
$$\hat{h}|n\rangle = \varepsilon_n|n\rangle,$$

где оператор $\hat{h} = \hat{a}^+\hat{a} + \dfrac{1}{2}$ есть, по существу, обезразмеренный оператор Гамильтона.

Вычислим коммутаторы операторов $\hat{a}^+$ и $\hat{a}$ с оператором $\hat{h}$. Имеем:

$$[\hat{a}^+,\, \hat{h}] = [\hat{a}^+,\, \hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2}] = \hat{a}^+[\hat{a}^+,\, \hat{a}] = -\hat{a}^+,$$

то есть $\hat{a}^+\hat{h} - \hat{h}\hat{a}^+ = -\hat{a}^+$, или

$$\hat{a}^+\hat{h} = \hat{h}\hat{a}^+ - \hat{a}^+.$$

Аналогично $[\hat{a},\, \hat{h}] = \hat{a}$, или

$$\hat{a}\hat{h} = \hat{h}\hat{a} + \hat{a}.$$

Действуя на обезразмеренное стационарное уравнение Шредингера слева оператором $\hat{a}^+$, получаем:

$$\hat{a}^+\hat{h}|n\rangle = \varepsilon_n\hat{a}^+|n\rangle,$$

или

$$\hat{h}\hat{a}^+|n\rangle - \hat{a}^+|n\rangle = \varepsilon_n\hat{a}^+|n\rangle,$$

$$\hat{h}(\hat{a}^+|n\rangle) = (\varepsilon_n + 1)(\hat{a}^+|n\rangle).$$

Предположим, что

$$\varepsilon_{n+1} = \varepsilon_n + 1, \qquad \hat{a}^+|n\rangle = c|n+1\rangle,$$

при этом

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

$$= \langle n|\hat{a}\hat{a}^+|n\rangle = \langle n|\hat{h} + \frac{1}{2}|n\rangle = \varepsilon_n + \frac{1}{2}.$$

Аналогичным образом, действуя на то же уравнение слева оператором $\hat{a}$, получаем

$$\hat{a}\hat{h}|n\rangle = \varepsilon_n\hat{a}|n\rangle,$$

или

$$\hat{h}\hat{a}|n\rangle + \hat{a}|n\rangle = \varepsilon_n\hat{a}|n\rangle,$$

$$\hat{h}(\hat{a}|n\rangle) = (\varepsilon_n - 1)(\hat{a}|n\rangle).$$

Следовательно

$$\varepsilon_{n-1} = \varepsilon_n - 1, \qquad \hat{a}|n\rangle = c'|n-1\rangle,$$

при этом

$$|c'|^2 = \langle c'(n-1)|c'(n-1)\rangle = \langle \hat{a}n|\hat{a}n\rangle = \langle n|\hat{a}^+\hat{a}|n\rangle = \langle n|\hat{h}-\frac{1}{2}|n\rangle = \varepsilon_n - \frac{1}{2}.$$

Но $|c'|^2 \geqslant 0$, поэтому $\varepsilon_n \geqslant \dfrac{1}{2}$ или

$$\min_n \varepsilon_n = \frac{1}{2}.$$

Полагаем $\varepsilon_0 = \dfrac{1}{2}$, тогда $\varepsilon_n = \dfrac{1}{2} + n$. Переходя к E_n, находим спектр оператора Гамильтона:

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

Кроме того, считая c и c' действительными неотрицательными числами, получаем:

$$\hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle,$$

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle.$$

Покажем теперь, как найти волновые функции основного и возбужденных состояний в координатном представлении. Вектор $|\psi_0\rangle \equiv |0\rangle$ основного состояния, т.е. состояния с минимальной энергией ε_0, удовлетворяет соотношению:

$$\hat{a}|0\rangle = 0.$$

В ξ-представлении получаем:

$$\frac{\hat{\xi} + i\hat{p}_\xi}{\sqrt{2}}\psi_0(\xi) = 0,$$

или

$$(\xi + \frac{d}{d\xi})\psi_0(\xi) = 0.$$

Решением, нормированным на единицу, является функция

$$\psi_0(\xi) = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-\xi^2/2}.$$

Волновые функции возбужденых состояний можно найти, воспользовавшись соотношениями:

$$\hat{a}^+|0\rangle = 1|1\rangle, \qquad |1\rangle = \hat{a}^+|0\rangle,$$

$$\hat{a}^+|1\rangle = \sqrt{2}|2\rangle, \quad |2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{a}^+|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}^+)^2|0\rangle,$$

$$\hat{a}^+|2\rangle = \sqrt{3}|3\rangle, \quad |3\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\hat{a}^+|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3!}}(\hat{a}^+)^3|0\rangle, \ldots$$

Легко видеть, что

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^+)^n|0\rangle.$$

В координатном представлении

$$\psi_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^n \left(\xi - i\left(-i\frac{d}{d\xi}\right)\right)^n \psi_0(\xi)$$

или

$$\psi_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!\sqrt{\pi}}}\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)^n e^{-\xi^2/2} = \frac{1}{\sqrt{2^n n!\sqrt{\pi}}} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2},$$

где

$$H_n(\xi) = e^{\xi^2/2}\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)^n e^{-\xi^2/2}$$

есть полином Эрмита n-й степени.

Лекция №11. Квантование свободного электромагнитного поля

Свободное электромагнитное поле

Электромагнитное поле в любой точке $\mathbf{r}$ в любой момент t задается напряженностями $\mathbf{E}(\mathbf{r},\, t)$ и $\mathbf{H}(\mathbf{r},\, t)$. Динамика поля определяется уравнениями Максвелла. Первая пара уравнений Максвелла имеет вид:

$$\begin{cases} \operatorname{div} \mathbf{H} = 0, \\ \\ \operatorname{rot} \mathbf{E} = -\dfrac{1}{c}\dfrac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}. \end{cases}$$

Сегодня мы обсуждаем свободное электромагнитное поле, т.е. зарядов и токов нет. Поэтому вторая пара уравнений Максвелла выглядит так:

$$\begin{cases} \operatorname{div} \mathbf{E} = 0, \\ \\ \operatorname{rot} \mathbf{H} = \dfrac{1}{c}\dfrac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}. \end{cases}$$

Существует более экономный способ задания электромагнитного поля – с помощью скалярного $\varphi(\mathbf{r},\, t)$ и векторного $\mathbf{A}(\mathbf{r},\, t)$ потенциалов:

$$\mathbf{E} = -\nabla\varphi - \frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}\,,$$

$$\mathbf{H} = \operatorname{rot} \mathbf{A}.$$

Напряженности $\mathbf{E}$ и $\mathbf{H}$, взятые в такой форме, тождественно удовлетворяют первой паре уравнений Максвелла. Калибровочной инвариантностью называют тот факт, что преобразование

$$\varphi \to \varphi' = \varphi - \frac{1}{c}\frac{\partial f(\mathbf{r},\, t)}{\partial t}\,,$$

$$\mathbf{A} \to \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla f(\mathbf{r},\, t),$$

где $f(\mathbf{r},\, t)$ – произвольная функция, не меняет напряженностей $\mathbf{E}$ и $\mathbf{H}$.

Выберем $f(\mathbf{r},\, t)$ так, чтобы

$$\frac{1}{c}\frac{\partial\varphi}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{A} = 0.$$

Это калибровка Лоренца. Тогда вторая пара уравнений Максвелла приводится к форме:

$$\begin{cases} \Box\,\varphi = 0, \\ \\ \Box\,\mathbf{A} = \mathbf{0}, \end{cases}$$

где
$$\Box = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2.$$
Примем $\varphi = 0$ (дополнительное калибровочное условие). Тогда свободное электромагнитное поле описывается системой уравнений:
$$\begin{cases} \varphi = 0, \\ \operatorname{div}\mathbf{A} = 0, \\ \Box\,\mathbf{A} = \mathbf{0}. \end{cases}$$

Частным решением этой системы является векторный потенциал, взятый в виде плоской волны:
$$\mathbf{A}(\mathbf{r},\, t) = b\,\mathbf{e}\,e^{i\mathbf{kr}-i\omega t} + k.c.$$
Здесь введены следующие обозначения:

b – комплексная амплитуда,

$\mathbf{e}$ – единичный вектор поляризации ($\mathbf{ee}^* = 1$),

$k.c.$ – комплексно сопряженная величина.

Частота ω и волновой вектор $\mathbf{k}$ связаны условием:
$$\frac{\omega^2}{c^2} - k^2 = 0 \quad \Rightarrow \quad \omega = |\mathbf{k}|c,$$
причем
$$\mathbf{ek} = 0 \quad \Rightarrow \quad \mathbf{e}\perp\mathbf{k}.$$
Таким образом ортогональный базис в пространстве векторов поляризации, перпендикулярных $\mathbf{k}$, состоит из двух векторов $\mathbf{e}_1$ и $\mathbf{e}_2$:
$$\mathbf{e}_1\perp\mathbf{k}, \quad \mathbf{e}_2\perp\mathbf{k}, \quad \mathbf{e}_1\mathbf{e}_2^* = 0.$$
Совокупность значений $(\mathbf{k},\, \mathbf{e}_\alpha) \equiv \lambda$ задает моду электромагнитного поля, а λ называется индексом моды.

Пусть поле заключено в ящик с размерами $(L_x,\, L_y,\, L_z)$. Если ящик велик, то электромагнитное поле внутри него не отличимо от свободного поля. С другой стороны, граничные условия приводят к дискретизации мод. В самом деле, запишем условие периодичности по направлению Ox:

$$\mathbf{A}(x=0,\,y,\,z,\,t)=\mathbf{A}(x=L_x,\,y,\,z,\,t)\quad\Leftrightarrow\quad 1=e^{ik_xL_x},$$

т.е. $k_xL_x=2\pi n_x$. Проделывая то же самое для других направлений, получаем:

$$k_x=\frac{2\pi n_x}{L_x},\qquad n_x\in\mathbb{Z},$$

$$k_y=\frac{2\pi n_y}{L_y},\qquad n_y\in\mathbb{Z},$$

$$k_z=\frac{2\pi n_z}{L_z},\qquad n_z\in\mathbb{Z}.$$

Тогда индекс моды $\lambda=(k_x,\,k_y,\,k_z,\,\mathbf{e}_\alpha)$ – это дискретный индекс.

Общее решение – суперпозиция частных решений, отвечающих всем модам:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r},\,t)=\sum_\lambda\left(b_\lambda\mathbf{e}_\alpha e^{i\mathbf{kr}-i\omega t}+k.c.\right)=\sum_\lambda\left(b_\lambda(t)\mathbf{e}_\alpha e^{i\mathbf{kr}}+k.c.\right),$$

где $b_\lambda(t)=b_\lambda e^{-i\omega t}$. Подставляя $\mathbf{A}$ в выражения для $\mathbf{E}$ и $\mathbf{H}$, получаем:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r},\,t)=-\frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}=\sum_\lambda(ikb_\lambda(t)\mathbf{e}_\alpha e^{i\mathbf{kr}}+k.c.)\equiv\sum_\lambda\mathbf{E}_\lambda(\mathbf{r},\,t),$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{r},\,t)=\mathrm{rot}\,\mathbf{A}=\sum_\lambda(ib_\lambda(t)[\mathbf{k}\times\mathbf{e}_\alpha]e^{i\mathbf{kr}}+k.c.)\equiv\sum_\lambda\mathbf{H}_\lambda(\mathbf{r},\,t).$$

Энергия поля определяется интегралом по объему ящика:

$$\varepsilon_f=\int\frac{(\mathbf{E}^2+\mathbf{H}^2)}{8\pi}dV.$$

Учитывая, что

$$\mathbf{e}_\alpha\mathbf{e}^*_{\alpha'}=\delta_{\alpha\alpha'},$$

и

$$\int\limits_V e^{i\mathbf{kr}}e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}}dV=V\delta_{\mathbf{k}\,\mathbf{k}'},$$

находим:

$$\varepsilon_f = \sum_\lambda \varepsilon_{f\lambda},$$

где

$$\varepsilon_{f\lambda} = \int\limits_V \frac{\mathbf{E}_\lambda^2 + \mathbf{H}_\lambda^2}{8\pi} dV = \frac{1}{8\pi}\, 4k^2 |b_\lambda(t)|^2 V = \frac{Vk^2}{2\pi} |b_\lambda|^2.$$

Переход от классических величин к операторам

Примем за обобщенную координату действительную величину

$$Q_\lambda = \aleph(b_\lambda(t) + b_\lambda^*(t)).$$

Предположим, что обобщенный импульс, отвечающий координате Q_λ, это производная Q_λ по времени:

$$P_\lambda = \dot{Q}_\lambda = -i\omega\aleph(b_\lambda(t) - b_\lambda^*(t)).$$

Выполняя вычисления, нетрудно убедиться в том, что

$$P_\lambda^2 + \omega^2 Q_\lambda^2 = -\omega^2\aleph^2(b_\lambda - b_\lambda^*)^2 + \omega^2\aleph^2(b_\lambda + b_\lambda^*)^2 =$$

$$= 4\omega^2\aleph^2 b_\lambda b_\lambda^* = 4\omega^2\aleph^2 |b_\lambda|^2 \sim \varepsilon_{f\lambda} = \frac{Vk^2}{2\pi}|b_\lambda|^2.$$

Если коэффициент $\aleph$ выбрать так, что

$$\aleph^2 = \frac{V}{4\pi c^2},$$

то

$$\varepsilon_{f\lambda} = \frac{P_\lambda^2 + \omega^2 Q_\lambda^2}{2} = H_{f\lambda}.$$

Здесь $H_{f\lambda}$ – это функция Гамильтона моды λ свободного электромагнитного поля (энергия, выраженная через обобщенные координаты и импульсы).

В самом деле, в классической теории функция Гамильтона H системы с одной степенью свободы, обобщенная координата q этой системы и обобщенный импульс p связаны уравнениями Гамильтона:

$$\frac{\partial H}{\partial p} = \dot{q}, \quad \frac{\partial H}{\partial q} = -\dot{p}.$$

В случае $H = H_{f\lambda}$, $q = Q_\lambda$ и $p = P_\lambda$ первое уравнение принимает вид:

$$P_\lambda = \dot{Q}_\lambda.$$

Это верно, поскольку именно так был определен импульс P_λ. Второе уравнение (с учетом первого) может быть записано так:

$$\omega^2 Q_\lambda = -\frac{\partial^2 Q_\lambda}{\partial t^2}.$$

Легко проверить, что введенная нами обобщенная координата Q_λ удовлетворяет этому уравнению.

Далее переходим от классических величин к линейным эрмитовым операторам:

$$\begin{aligned} P_\lambda &\quad \to \quad \hat{P}_\lambda, \\ Q_\lambda &\quad \to \quad \hat{Q}_\lambda, \\ H_{f\lambda} &\quad \to \quad \hat{H}_{f\lambda} = \frac{\hat{P}_\lambda^2 + \omega^2 \hat{Q}_\lambda^2}{2}. \end{aligned}$$

Воспользовавшись ранее установленным соответствием между скобкой Пуассона и коммутатором, находим:

$$\{P_\lambda, Q_\lambda\} = 1 \quad \Rightarrow \quad [\hat{P}_\lambda, \hat{Q}_\lambda] = -i\hbar.$$

Состояние поля с определенной энергией в моде λ определяется стационарным уравнением Шредингера:

$$\hat{H}_{f\lambda}|\psi_\lambda\rangle = E_{f\lambda}|\psi_\lambda\rangle,$$

или

$$\left(\frac{\hat{P}_\lambda^2 + \omega^2 \hat{Q}_\lambda^2}{2}\right)|\psi_\lambda\rangle = E_{f\lambda}|\psi_\lambda\rangle.$$

Поскольку $[\hat{P}_\lambda, \hat{Q}_\lambda] = -i\hbar$, то мы получили задачу на нахождение энергетических уровней и векторов состояний линейного осциллятора.

Ранее мы установили, что энергетические уровни линейного осциллятора отстоят друг от друга на одну и ту же величину $\hbar\omega$ (спектр эквидистантен), т.е.

$$E_{f\lambda} = \hbar\omega\left(n_\lambda + \frac{1}{2}\right), \quad n_\lambda = 0, 1, 2 \ldots$$

Для решения задачи о линейном осцилляторе вводят обезразмеренные операторы

$$\begin{cases} \hat{\xi}_\lambda = \sqrt{\dfrac{\omega}{\hbar}}\,\hat{Q}_\lambda, \\ \\ \hat{p}_{\xi\lambda} = \sqrt{\dfrac{1}{\hbar\omega}}\,\hat{P}_\lambda, \end{cases}$$

и, затем, операторы повышения и понижения

$$\begin{cases} \hat{a}_\lambda = \dfrac{\hat{\xi}_\lambda + i\hat{p}_{\xi\lambda}}{\sqrt{2}}, \\ \\ \hat{a}^+_\lambda = \dfrac{\hat{\xi}_\lambda - i\hat{p}_{\xi\lambda}}{\sqrt{2}}. \end{cases}$$

Напомним теперь, что обобщенная координата и обобщенный импульс для моды λ были определены так:

$$\begin{cases} Q_\lambda = \aleph(b_\lambda + b^*_\lambda), \\ \\ P_\lambda = -i\omega\aleph(b_\lambda - b^*_\lambda). \end{cases}$$

Отсюда для b_λ получаем:

$$b_\lambda = \frac{Q_\lambda + \frac{i}{\omega}P_\lambda}{2\aleph}$$

Таким образом

$$b_\lambda \to \hat{b}_\lambda = \frac{\hat{Q}_\lambda + \frac{i}{\omega}\hat{P}_\lambda}{2\aleph} = \frac{\sqrt{\frac{\hbar}{\omega}}\hat{\xi}_\lambda + \sqrt{\hbar\omega}\,\frac{i}{\omega}\hat{p}_{\xi\lambda}}{2\aleph} =$$

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{\omega}}\,\frac{1}{2\aleph}(\hat{\xi}_\lambda + i\hat{p}_{\xi\lambda}) = \frac{1}{\aleph}\sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}}\,\hat{a}_\lambda.$$

То есть

$$b_\lambda \quad \to \quad \hat{b}_\lambda = \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega V}}\,\hat{a}_\lambda,$$

$$b^*_\lambda \quad \to \quad \hat{b}^+{}_\lambda = \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega V}}\,\hat{a}^+_\lambda.$$

Итак, мы показали, что в случае свободного электромагнитного поля переход от действительных классических величин к линейным эрмитовым операторам происходит следующим образом:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r},\,t)\to\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r})=\sum_{\lambda}\sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega V}}\left(\hat{a}_\lambda\mathbf{e}_\alpha e^{i\mathbf{kr}}+\hat{a}_\lambda^+\mathbf{e}_\alpha^* e^{-i\mathbf{kr}}\right),$$

$$\mathbf{E}(\mathbf{r},\,t)\to\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r})=\sum_{\lambda}\sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega V}}\left(ik\,\hat{a}_\lambda\mathbf{e}_\alpha e^{i\mathbf{kr}}-ik\,\hat{a}_\lambda^+\mathbf{e}_\alpha^* e^{-i\mathbf{kr}}\right),$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{r},\,t)\to\hat{\mathbf{H}}(\mathbf{r})=\sum_{\lambda}\sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega V}}\left(i[\mathbf{k}\times\mathbf{e}_\alpha]\hat{a}_\lambda e^{i\mathbf{kr}}-i[\mathbf{k}\times\mathbf{e}_\alpha^*]\hat{a}_\lambda^+ e^{-i\mathbf{kr}}\right).$$

Гамильтонианом поля является оператор

$$\hat{H}_f=\sum_\lambda\hat{H}_{f\lambda}=\sum_\lambda\hbar\omega\left(\hat{a}_\lambda^+\hat{a}_\lambda+\frac{1}{2}\right).$$

Пусть $|n_\lambda\rangle$ – собственный вектор гамильтониана $\hat{H}_{f\lambda}$ моды λ. Легко видеть, что собственным вектором $|\psi_f\rangle$ гамильтониана $\hat{H}_f$ является произведение

$$|\psi_f\rangle=\prod_\lambda|n_\lambda\rangle\equiv|\{n_\lambda\}\rangle.$$

Этому собственному вектору отвечает собственное значение (энергия поля)

$$E_f=\sum_\lambda\hbar\omega\left(n_\lambda+\frac{1}{2}\right).$$

Иными словами, состояние свободного электромагнитного поля с определенной энергией полностью определяется числами n_λ в каждой моде λ. Эти числа n_λ называют числами заполнения. Ясно, что n_λ можно интерпретировать как число фотонов в моде λ.

Любопытно, что в состоянии $|\psi_f\rangle$ с определенной энергией средняя величина $\mathbf{E}$ в любой точке $\mathbf{r}$ равна нулю

$$\langle\mathbf{E}(\mathbf{r})\rangle=\langle\psi_f|\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r})|\psi_f\rangle=0.$$

В то же время

$$\langle\mathbf{E}^2(\mathbf{r})\rangle=\langle\psi_f|\hat{\mathbf{E}}^2(\mathbf{r})|\psi_f\rangle\neq 0.$$

Последнее справедливо даже в том случае, когда $|\psi_f\rangle$ есть вакуумное состояние (все числа n_λ равны нулю).

Лекция №12. Симметрии и законы сохранения

Общие замечания

В классической механике законы сохранения связаны с симметриями пространства и времени. Естественно ожидать, что и в квантовой механике существует подобная связь.

Более того, ранее мы доказали, что энергия в квантовой механике является интегралом движения, если гамильтониан системы не зависит от времени. Но независимость оператора энергии от времени – это следствие однородности времени. Таким образом в квантовой механике, так же как в классической механике, сохранение энергии связано с однородностью времени.

Чуть позже в этой лекции мы исследуем связь однородности пространства с законом сохранения импульса, а также связь изотропии пространства с законом сохранения углового момента. Но сначала введем оператор сдвига во времени (оператор эволюции) и обсудим связанные с ним понятия.

Представления Шредингера и Гайзенберга

1. **Представление Шредингера**

а) Сопоставляем величине A оператор $\hat{A}$ (как правило, не зависящий от t).

б) Вектор состояния $|\Psi(t)\rangle$, зависящий от t, описывает изменение состояния системы во времени.

в) Зависимость вектора состояния от времени определяется уравнением Шредингера:

$$i\hbar\frac{\partial|\Psi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H}|\Psi(t)\rangle.$$

Пусть по определению

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\Psi(0)\rangle,$$

где $\hat{U}(t)$ – оператор эволюции (сдвига по времени). Из условия нормировки

$$\langle\Psi(t)|\Psi(t)\rangle = \langle\Psi(0)|\hat{U}^+\hat{U}|\Psi(0)\rangle = 1$$

следует, что $\hat{U}^+\hat{U} = 1$, то есть оператор эволюции – унитарный.

Если $\hat{H}$ не зависит от t, то

$$\hat{U}(t) = e^{-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}}.$$

Действительно, покажем, что $|\Psi(t)\rangle = e^{-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}}|\Psi(0)\rangle$ удовлетворяет уравнению Шредингера:

$$i\hbar\frac{\partial|\Psi(t)\rangle}{\partial t} = i\hbar\left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}\,e^{-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}}|\Psi(0)\rangle\right) = \hat{H}e^{-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}}|\Psi(0)\rangle = \hat{H}|\Psi(t)\rangle.$$

Заметим, что если $\hat{U}$ – унитарный оператор, то всегда существует эрмитовый оператор $\hat{R}$ такой, что

$$\hat{U} = e^{i\hat{R}}.$$

В частности, если $\hat{U}$ – оператор эволюции, то $\hat{R} = -\hat{H}t/\hbar$.

Среднее значение $\langle A\rangle$, зависящее от времени, определяется матричными элементами:

$$\langle A\rangle(t) = \langle\Psi(t)|\hat{A}|\Psi(t)\rangle = \langle\Psi(0)|\hat{U}^+(t)\hat{A}\hat{U}(t)|\Psi(0)\rangle.$$

Назовем оператором физической величины A в представлении Гайзенберга оператор следующего вида:

$$\hat{A}_\Gamma(t) \equiv \hat{U}^+(t)\hat{A}\hat{U}(t) = e^{i\frac{\hat{H}t}{\hbar}}\hat{A}e^{-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}}.$$

Вычисляя производную этого оператора, получаем:

$$\frac{d\hat{A}_\Gamma(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{A}_\Gamma(t)].$$

Итак, в представлении Шредингера

$$\langle A\rangle(t) = \langle\Psi(t)|\hat{A}|\Psi(t)\rangle.$$

Если же зависимость среднего значения физической величины от времени вычисляется по формуле

$$\langle A\rangle(t) = \langle\Psi(0)|\hat{A}_\Gamma(t)|\Psi(0)\rangle,$$

то говорят об использовании представления Гайзенберга.

2. **Представление Гайзенберга**

а) Вектор состояния $|\Psi(0)\rangle$ системы не зависит от t.

б) Сопоставляем величине A зависящий от t оператор в представлении Гайзенберга:

$$\hat{A}_\Gamma(t) = e^{i\frac{\hat{H}t}{\hbar}}\hat{A}e^{-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}}.$$

в) Зависимость оператора от времени определяется уравнением Гайзенберга:

$$\frac{d\hat{A}_\Gamma(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{A}_\Gamma(t)].$$

Однородность пространства и сохранение импульса

Если пространство однородно, то сдвиг физической лаборатории на произвольный вектор $\mathbf{a}$ не меняет результаты проводимых в ней измерений. Пусть состояние системы в исходной лаборатории описывается вектором $|\Psi;1\rangle$, а состояние системы, сдвинутой на $\mathbf{a}$ вместе с лабораторией, описывается вектором $|\Psi;2\rangle$. Если вектор $\mathbf{r}$ отсчитывается от некоторого фиксированного в пространстве начала координат, то должно быть справедливым соотношение

$$\langle\mathbf{r}|\Psi;1\rangle = \langle\mathbf{r}+\mathbf{a}|\Psi;2\rangle$$

или

$$\langle\mathbf{r}-\mathbf{a}|\Psi;1\rangle = \langle\mathbf{r}|\Psi;2\rangle.$$

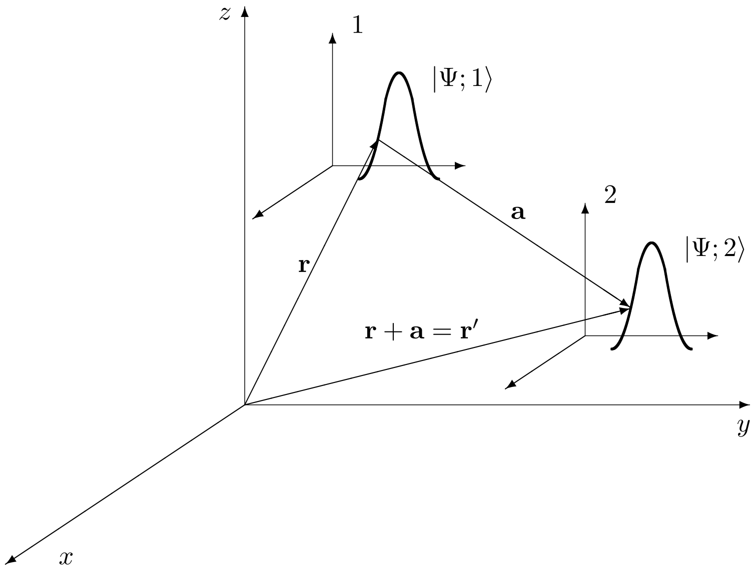
Если принять, что

$$|\Psi;2\rangle = \hat{T}(\mathbf{a})|\Psi;1\rangle,$$

то $\hat{T}(\mathbf{a})$ – оператор сдвига на вектор $\mathbf{a}$. Ясно, что $\hat{T}(\mathbf{a})$ – унитарный оператор. По аналогии с оператором сдвига во времени представим $\hat{T}(\mathbf{a})$ в виде:

$$\hat{T}(\mathbf{a}) = e^{-i\frac{\hat{\mathbf{p}}\mathbf{a}}{\hbar}},$$

где $\hat{\mathbf{p}}$ – некоторый векторный эрмитовый оператор, не зависящий от времени.



Теперь покажем, что

$$[\hat{H},\, \hat{T}(\mathbf{a})] = 0.$$

Действительно, если пространство однородно, то соотношение

$$|\Psi;2\rangle = \hat{T}(\mathbf{a})|\Psi;1\rangle$$

справедливо не только в начальный момент $t = 0$, но также и в любой последующий момент t. Поэтому

$$i\hbar\frac{\partial|\Psi;2\rangle}{\partial t} = i\hbar\frac{\hat{T}(\mathbf{a})\partial|\Psi;1\rangle}{\partial t} = \hat{T}(\mathbf{a})\hat{H}|\Psi;1\rangle.$$

С другой стороны

$$i\hbar\frac{\partial|\Psi;2\rangle}{\partial t} = \hat{H}|\Psi;2\rangle = \hat{H}\hat{T}(\mathbf{a})|\Psi;1\rangle.$$

То есть сформулированное утверждение доказано.

Далее заметим, что $\hat{T}(\mathbf{a})$ представляет собой ряд по степеням оператора $\hat{\mathbf{p}}$. Поэтому из $[\hat{H}, \hat{T}(\mathbf{a})] = 0$ следует, что

$$[\hat{H}, \hat{\mathbf{p}}] = 0.$$

Напомним теперь, что если физической величине A сопоставляется эрмитовый оператор $\hat{A}$ такой, что

а) $\hat{A}$ не зависит от t,

б) $[\hat{H}, \hat{A}] = 0$,

то A – интеграл движения.

Итак, мы показали, что из условия однородности пространства следует существование такого эрмитового оператора $\hat{\mathbf{p}}$, что

а) $\hat{\mathbf{p}}$ не зависит от t,

б) $[\hat{H}, \hat{\mathbf{p}}] = 0$.

Таким образом физическая величина $\mathbf{p}$, отвечающая оператору $\hat{\mathbf{p}}$, должна быть величиной, сохраняющейся вследствие однородности пространства. В классической механике такой величиной, сохраняющейся вследствие однородности пространства, является импульс. Поэтому естественно принять, что $\hat{\mathbf{p}}$ есть оператор импульса.

Рассмотрим вид оператора сдвига при малом $\mathbf{a} \to \delta\mathbf{a}$:

$$\hat{T}(\delta\mathbf{a}) = e^{-i\frac{\hat{\mathbf{p}}\delta\mathbf{a}}{\hbar}} \approx 1 - i\frac{\delta\mathbf{a}}{\hbar}\hat{\mathbf{p}}.$$

Оператор $\hat{\mathbf{p}}$ часто называют генератором сдвига. Возьмем соотношение

$$\langle \mathbf{r} - \delta\mathbf{a}|\Psi; 1\rangle = \langle \mathbf{r}|\Psi; 2\rangle$$

и подставим в него

$$|\Psi; 2\rangle = e^{-i\frac{\hat{\mathbf{p}}\delta\mathbf{a}}{\hbar}}|\Psi; 1\rangle = \left(1 - i\frac{\delta\mathbf{a}}{\hbar}\hat{\mathbf{p}}\right)|\Psi; 1\rangle.$$

Получаем:

$$\langle \mathbf{r} - \delta\mathbf{a}|\Psi; 1\rangle = \langle \mathbf{r}|\left(1 - i\frac{\delta\mathbf{a}}{\hbar}\hat{\mathbf{p}}\right)|\Psi; 1\rangle$$

или

$$\langle \mathbf{r}|\Psi; 1\rangle - \delta\mathbf{a}\nabla\langle \mathbf{r}|\Psi; 1\rangle = \langle \mathbf{r}|\Psi; 1\rangle - i\frac{\delta\mathbf{a}}{\hbar}\langle \mathbf{r}|\hat{\mathbf{p}}|\Psi; 1\rangle.$$

Сравнивая левую и правую части, находим явный вид оператора импульса в координатном представлении:

$$\langle \mathbf{r}|\hat{\mathbf{p}}|\Psi\rangle = -i\hbar\nabla\langle \mathbf{r}|\Psi\rangle.$$

Изотропия пространства и сохранение углового момента

Переход от одной (1) декартовой системы осей к другой (2), повернутой декартовой системе осей всегда может быть осуществлен вращением вокруг специально подобранного единичного вектора **n** на специально подобранный угол χ. Пусть

$$\vec{\chi} = \chi \mathbf{n}$$

есть вектор поворота.

Так же как и для сдвига, связь векторов состояний, описывающих одинаковые по своим свойствам состояния системы в лабораториях 1 и 2, соответственно, можно задать соотношением:

$$|\Psi; 2\rangle = \hat{R}(\vec{\chi})|\Psi; 1\rangle,$$

где $\hat{R}(\vec{\chi})$ – оператор поворота. Ясно, что $\hat{R}(\vec{\chi})$ – унитарный оператор. По аналогии с операторами сдвига (как во времени, так и в пространстве) запишем его в виде:

$$\hat{R}(\vec{\chi}) = e^{-i\frac{\hat{\mathbf{J}}\vec{\chi}}{\hbar}},$$

где $\hat{\mathbf{J}}$ – некоторый векторный эрмитовый оператор, не зависящий от времени.

Следуя точно той же логике, что и в случае сдвига в пространстве, нетрудно доказать, что

$$[\hat{H},\, \hat{R}(\vec{\chi})] = 0,$$

и, соответственно,

$$[\hat{H},\, \hat{\mathbf{J}}] = 0.$$

Таким образом, условие изотропии пространства приводит нас к сохраняющейся векторной величине $\mathbf{J}$, отвечающей оператору $\hat{\mathbf{J}}$. В классической механике величиной, сохраняющейся вследствие изотропии пространства, является угловой момент. Поэтому естественно принять, что $\hat{\mathbf{J}}$ есть оператор углового момента.

Найдем явный вид оператора углового момента движущейся частицы. При вращении на малый угол $\delta\vec{\chi}$ имеем:

$$\langle \mathbf{r} - [\delta\vec{\chi} \times \mathbf{r}]|\Psi; 1\rangle = \langle \mathbf{r}|\Psi; 2\rangle.$$

Подставляя в это соотношение

$$|\Psi;2\rangle = e^{-i\frac{\hat{\mathbf{J}}\delta\vec{\chi}}{\hbar}}|\Psi;1\rangle = \left(1 - i\frac{\delta\vec{\chi}}{\hbar}\hat{\mathbf{J}}\right)|\Psi;1\rangle,$$

получаем

$$\langle\mathbf{r}|\Psi;1\rangle - [\delta\vec{\chi}\times\mathbf{r}]\nabla\langle\mathbf{r}|\Psi;1\rangle = \langle\mathbf{r}|\Psi;1\rangle - i\frac{\delta\vec{\chi}}{\hbar}\langle\mathbf{r}|\hat{\mathbf{J}}|\Psi;1\rangle$$

или

$$-\delta\vec{\chi}[\mathbf{r}\times\nabla]\langle\mathbf{r}|\Psi\rangle = -i\frac{\delta\vec{\chi}}{\hbar}\langle\mathbf{r}|\hat{\mathbf{J}}|\Psi\rangle.$$

Отсюда оператор углового момента в координатном представлении имеет вид:

$$\langle\mathbf{r}|\hat{\mathbf{J}}|\Psi\rangle = -i\hbar[\mathbf{r}\times\nabla]\langle\mathbf{r}|\Psi\rangle.$$

Оператор

$$\hat{\mathbf{L}} = -i\hbar[\mathbf{r}\times\nabla] = [\mathbf{r}\times\hat{\mathbf{p}}].$$

называется оператором орбитального момента частицы.

Декартовые составляющие безразмерного оператора орбитального момента

$$\hat{\mathbf{l}} = \frac{\hat{\mathbf{L}}}{\hbar}$$

связаны друг с другом коммутационными соотношениями

$$[\hat{l}_\alpha, \hat{l}_\beta] = ie_{\alpha\beta\gamma}\hat{l}_\gamma.$$

Напомним, что коммутационные соотношения между операторами не зависят от того, в каком представлении берутся эти операторы.

Лекция №13. Угловой момент. Спин

Свойства операторов углового момента

Оператор поворота, введенный на прошлой лекции, имеет вид:

$$\hat{R}(\vec{\chi}) = e^{-i\frac{\hat{\mathbf{J}}\vec{\chi}}{\hbar}}.$$

Мы показали, что $\hat{\mathbf{J}}$ – это оператор углового момента. Безразмерный оператор углового момента вводится формулой:

$$\hat{\mathbf{j}} = \frac{\hat{\mathbf{J}}}{\hbar}.$$

Оператор квадрата углового момента связан с операторами проекций на координатные оси следующим образом:

$$\hat{\mathbf{j}} = \hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2 + \hat{j}_z^2.$$

Операторы проекций на координатные оси связаны между собой коммутационными соотношениями:

$$[\hat{j}_\alpha, \hat{j}_\beta] = ie_{\alpha\beta\gamma}\hat{j}_\gamma.$$

Пользуясь этими коммутационными соотношениями, нетрудно доказать, что

$$[\hat{\mathbf{j}}^2, \hat{j}_\alpha] = 0.$$

Пусть $|jm\rangle$ – это собственные векторы операторов $\hat{\mathbf{j}}^2$ и $\hat{j}_z$:

$$\begin{cases} \hat{\mathbf{j}}^2|jm\rangle = \lambda(j)|jm\rangle, \\ \hat{j}_z|jm\rangle = m|jm\rangle. \end{cases}$$

Эти собственные векторы ортонормированы:

$$\langle jm|j'm'\rangle = \delta_{jj'}\delta_{mm'}.$$

По физическому смыслу m – это проекция вектора $\mathbf{j}$ на ось Oz, $\lambda(j)$ – квадрат длины углового момента. Попробуем разобраться, какие значения могут принимать $\lambda(j)$ и m, пользуясь только коммутационными соотношениями. Разобьем исследование на пункты.

1) Покажем, что $\lambda(j) \geqslant 0$ и $m^2 \leqslant \lambda(j)$. Имеем:

$$\lambda(j) = \langle jm|\hat{\mathbf{j}}^2|jm\rangle = \sum_{\alpha=1}^{3}\langle jm|\hat{j}_\alpha^2|jm\rangle = \sum_{\alpha=1}^{3}\langle \hat{j}_\alpha jm|\hat{j}_\alpha jm\rangle \geqslant 0,$$

в силу того, что $\langle\Psi|\Psi\rangle \geqslant 0$ при любом Ψ. Аналогичным образом:

$$\lambda(j) - m^2 = \langle jm|\hat{\mathbf{j}}^2 - \hat{j}_z^2|jm\rangle = \sum_{\alpha=1}^{2}\langle jm|\hat{j}_\alpha^2|jm\rangle = \sum_{\alpha=1}^{2}\langle \hat{j}_\alpha jm|\hat{j}_\alpha jm\rangle \geqslant 0.$$

Утверждения доказаны.

2) Введем операторы:

$$\begin{cases} \hat{j}_+ = \dfrac{\hat{j}_x + i\hat{j}_y}{\sqrt{2}}, \\ \\ \hat{j}_- = \dfrac{\hat{j}_x - i\hat{j}_y}{\sqrt{2}} = (\hat{j}_+)^+. \end{cases}$$

Тогда операторы $\hat{j}_x$ и $\hat{j}_y$ выражаются через $\hat{j}_+$ и $\hat{j}_-$ следующим образом:

$$\begin{cases} \hat{j}_x = \dfrac{\hat{j}_+ + \hat{j}_-}{\sqrt{2}}, \\ \\ \hat{j}_y = \dfrac{\hat{j}_+ - \hat{j}_-}{i\sqrt{2}}. \end{cases}$$

Вычисляя, находим:

$$\hat{j}_+\hat{j}_- = \frac{1}{2}(\hat{j}_x + i\hat{j}_y)(\hat{j}_x - i\hat{j}_y) =$$

$$= \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{j}}^2 - \hat{j}_z^2 - i[\hat{j}_x, \hat{j}_y]) = \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{j}}^2 - \hat{j}_z^2 + \hat{j}_z),$$

$$\hat{j}_-\hat{j}_+ = \frac{1}{2}(\hat{j}_x - i\hat{j}_y)(\hat{j}_x + i\hat{j}_y) =$$

$$= \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{j}}^2 - \hat{j}_z^2 + i[\hat{j}_x, \hat{j}_y]) = \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{j}}^2 - \hat{j}_z^2 - \hat{j}_z).$$

Поэтому

$$\hat{j}_+\hat{j}_- + \hat{j}_-\hat{j}_+ = \hat{\mathbf{j}}^2 - \hat{j}_z^2 = \hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2,$$

$$\hat{j}_+\hat{j}_- - \hat{j}_-\hat{j}_+ = \hat{j}_z \quad \Leftrightarrow \quad [\hat{j}_+, \hat{j}_-] = \hat{j}_z.$$

3) Вычислим коммутаторы $[\hat{j}_z, \hat{j}_+]$ и $[\hat{j}_z, \hat{j}_-]$:

$$[\hat{j}_z, \hat{j}_\pm] = \frac{1}{\sqrt{2}}([\hat{j}_z, \hat{j}_x] \pm i[\hat{j}_z, \hat{j}_y]) =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}(i\hat{j}_y \pm i(-i\hat{j}_x)) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\pm\hat{j}_x + i\hat{j}_y) = \pm\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{j}_x \pm i\hat{j}_y) = \pm\hat{j}_\pm.$$

То есть
$$\hat{j}_z\hat{j}_\pm - \hat{j}_\pm\hat{j}_z = \pm\hat{j}_\pm,$$
или
$$\hat{j}_z\hat{j}_\pm = \hat{j}_\pm(\hat{j}_z \pm 1).$$
Окончательно получаем:
$$\begin{cases} \hat{j}_z\hat{j}_+ = \hat{j}_+(\hat{j}_z + 1), \\ \\ \hat{j}_z\hat{j}_- = \hat{j}_-(\hat{j}_z - 1). \end{cases}$$

Сделаем промежуточные выводы по первым трем пунктам.

а)Если $m^2 \leqslant \lambda(j)$, то существуют m_{min} и m_{max}. Очевидно, что $m_{min} = -m_{max}$. Пусть
$$m_{max} \equiv j, \quad m_{min} = -j.$$

б) $\hat{j}_+$ и $\hat{j}_-$ – операторы повышения и понижения. Действительно,
$$\hat{j}_z(\hat{j}_\pm|jm\rangle) = \hat{j}_\pm(\hat{j}_z \pm 1)|jm\rangle = (m \pm 1)\left(\hat{j}_\pm|jm\rangle\right).$$
Поэтому:
$$\hat{j}_+|j(m-1)\rangle = \alpha_m|jm\rangle,$$
$$\hat{j}_-|jm\rangle = \beta_m|j(m-1)\rangle.$$
Однако, поскольку $\hat{j}_+|jj\rangle = 0$, то $\alpha_{j+1} = 0$. Аналогично $\beta_{-j} = 0$.

4) Воспользовавшись оператором понижения $\hat{j}_-$, запишем:
$$\hat{j}_-|jj\rangle \sim |j(j-1)\rangle,$$
$$(\hat{j}_-)^2|jj\rangle \sim |j(j-2)\rangle,$$
$$\dots$$
$$(\hat{j}_-)^N|jj\rangle \sim |j(j-N)\rangle, \qquad N \in \mathbb{Z}.$$
Предположим, что таким образом мы осуществляем переход от состояния с максимальной проекцией $|jj\rangle$ к состоянию с минимальной проекцией $|j\ -j\rangle$. Тогда
$$j - N = -j,$$

то есть
$$j = \frac{N}{2}.$$
Следовательно j может принимать либо целые, либо полуцелые значения.

Замечание. Ранее было показано, что проекции m орбитального момента на ось z принимают только целые значения. Орбитальный момент – это угловой момент, связанный с движением частицы в пространстве. Если же речь идет о собственном (внутреннем) угловом моменте частицы (классический аналог - вращение тела вокруг собственной оси), то нет причин отказываться от полуцелых значений углового момента. Собственный угловой момент частицы обычно называют спином (от английского "to spin" – "вращаться").

Число j называют угловым моментом. Для любого j существуют следующие проекции углового момента:
$$m = -j, \quad -j+1, \quad \dots \quad j,$$
то есть всего $2j+1$ состояний $|jm\rangle$ при определенном угловом моменте j.

5) Найдем $\lambda(j)$. Для этого запишем:
$$\hat{\mathbf{j}}^2|jm\rangle = \lambda(j)|jm\rangle.$$
Поскольку $\lambda(j)$ не зависит от m, то положим $m = m_{max} \equiv j$. Тогда:
$$\hat{\mathbf{j}}^2|jj\rangle = \lambda(j)|jj\rangle.$$
Но
$$\hat{\mathbf{j}}^2|jm\rangle = (\hat{j}_+\hat{j}_- + \hat{j}_-\hat{j}_+ + \hat{j}_z^2)|jj\rangle = (2\hat{j}_-\hat{j}_+ + \hat{j}_z + \hat{j}_z^2)|jj\rangle =$$
$$= |\text{так как } \hat{j}_+|jj\rangle = 0| = (\hat{j}_z(\hat{j}_z+1))|jj\rangle = j(j+1)|jj\rangle.$$
Поэтому $\lambda(j) = j(j+1)$.

6) Вычислим α_m и β_m. Заметим, что
$$\alpha_m = \langle jm|\hat{j}_+|j(m-1)\rangle = \langle \hat{j}_- jm|j(m-1)\rangle = \langle j(m-1)|\hat{j}_-|jm\rangle^* = \beta_m^*.$$

Поэтому требуется определить следующие ненулевые коэффициенты:

$$\beta_{-j+1}, \quad \beta_{-j+2}, \quad \ldots \quad \beta_j.$$

Имеем, с одной стороны,

$$\hat{j}_+\hat{j}_-|jm\rangle = \beta_m\hat{j}_+|j(m-1) = |\beta_m|^2|jm\rangle,$$

с другой стороны,

$$\hat{j}_+\hat{j}_-|jm\rangle = \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{j}}^2 - \hat{j}_z^2 + \hat{j}_z)|jm\rangle = \frac{1}{2}(j(j+1) - m^2 + m)|jm\rangle.$$

Выберем фазы векторов состояний $|jm\rangle$ так, чтобы $\alpha_m = \beta_m$ были действительными неотрицательными числами. Тогда

$$\beta_m = \sqrt{\frac{j^2 + j - m^2 + m}{2}} = \sqrt{\frac{(j+m)(j-m+1)}{2}} = \alpha_m.$$

То есть

$$\hat{j}_-|jm\rangle = \sqrt{\frac{(j+m)(j-m+1)}{2}}|j(m-1)\rangle,$$

$$\hat{j}_+|jm\rangle = \sqrt{\frac{(j-m)(j+m+1)}{2}}|j(m+1)\rangle,$$

или

$$(\hat{j}_x \pm i\hat{j}_y)|jm\rangle = \sqrt{(j \mp m)(j \pm m+1)}|j(m \pm 1)\rangle.$$

Спиновый момент

Собственный угловой момент частицы называют спиновым моментом или, просто, спином. Спин обычно обозначают буквой s, тогда $\hat{s}$ – оператор спина.

Рассмотрим частицу с $s = \dfrac{1}{2}$. Проекция спина σ на выделенную ось может принимать значение либо $-\dfrac{1}{2}$, либо $+\dfrac{1}{2}$. Векторы $|\dfrac{1}{2}\,\dfrac{1}{2}\rangle$ и $|\dfrac{1}{2}\ -\dfrac{1}{2}\rangle$ образуют полный базис в пространстве спиновых состояний частицы. Соответственно произвольное спиновое состояние частицы представимо в виде суперпозиции

$$|\Psi\rangle = \sum_{\sigma=\pm\frac{1}{2}} |\frac{1}{2}\sigma\rangle\langle\frac{1}{2}\sigma|\Psi\rangle.$$

По общему правилу коэффициент разложения $\langle\frac{1}{2}\sigma|\Psi\rangle$ – это амплитуда вероятности того, что измерение проекции спина на ось z в состоянии $|\Psi\rangle$ даст значение σ. Набор таких амплитуд (в данном случае – набор из двух амплитуд) – это спиновая волновая функция или, иначе, спинор:

$$\Psi(\sigma) \equiv \langle\frac{1}{2}\sigma|\Psi\rangle = \left\| \begin{array}{c} \langle\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}|\Psi\rangle \\ \\ \langle\frac{1}{2}\ -\frac{1}{2}|\Psi\rangle \end{array} \right\| = \left\| \begin{array}{c} \alpha \\ \beta \end{array} \right\|, \quad \Psi^+(\sigma) = \|\alpha^*\,\beta^*\|.$$

Условие нормировки имеет вид:

$$\Psi^+\Psi = |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1.$$

Найдем вид спиновых операторов в пространстве базисных векторов $|\frac{1}{2}\sigma\rangle$. По общему правилу операторы принимают вид матриц:

$$\hat{s}_x \to (\hat{s}_x)_{\sigma\sigma'} = \langle\frac{1}{2}\sigma|\hat{s}_x|\frac{1}{2}\sigma'\rangle,$$

$$\hat{s}_y \to (\hat{s}_y)_{\sigma\sigma'} = \langle\frac{1}{2}\sigma|\hat{s}_y|\frac{1}{2}\sigma'\rangle,$$

$$\hat{s}_z \to (\hat{s}_z)_{\sigma\sigma'} = \langle\frac{1}{2}\sigma|\hat{s}_z|\frac{1}{2}\sigma'\rangle.$$

Напомним, что базисные векторы $|s\sigma\rangle$, где $s = \frac{1}{2}$, являются собственными векторами операторов $\hat{\mathbf{s}}^2$ и $\hat{s}_z$:

$$\begin{cases} \hat{\mathbf{s}}^2|s\sigma\rangle = s(s+1)|s\sigma\rangle, \\ \\ \hat{s}_z|s\sigma\rangle = \sigma|s\sigma\rangle. \end{cases}$$

Тогда для матричного оператора $\hat{s}_z$ получаем:

$$\hat{s}_z = \langle\frac{1}{2}\sigma|\hat{s}_z|\frac{1}{2}\sigma'\rangle = \frac{1}{2}\left\| \begin{array}{cc} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{array} \right\| \equiv \frac{1}{2}\hat{\sigma}_z.$$

Аналогичным образом, пользуясь полученными выше соотношениями для операторов повышения $\hat{s}_+$ и понижения $\hat{s}_-$, для матричных операторов $\hat{s}_x$ и $\hat{s}_y$ находим:

$$\hat{s}_x = \langle\frac{1}{2}\sigma|\hat{s}_x|\frac{1}{2}\sigma'\rangle = \langle\frac{1}{2}\sigma|\frac{\hat{s}_+ + \hat{s}_-}{\sqrt{2}}|\frac{1}{2}\sigma'\rangle =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\langle\frac{1}{2}\sigma|\hat{s}_+|\frac{1}{2}\sigma'\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\langle\frac{1}{2}\sigma|\hat{s}_-|\frac{1}{2}\sigma'\rangle = \frac{1}{2}\left\| \begin{array}{cc} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{array} \right\| \equiv \frac{1}{2}\hat{\sigma}_x,$$

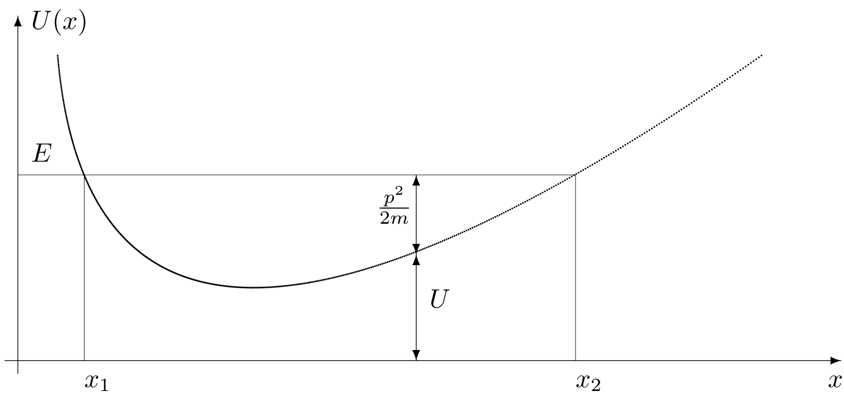
$$\hat{s}_y = \langle\frac{1}{2}\sigma|\hat{s}_y|\frac{1}{2}\sigma'\rangle = \langle\frac{1}{2}\sigma|\frac{\hat{s}_+ - \hat{s}_-}{i\sqrt{2}}|\frac{1}{2}\sigma'\rangle =$$

$$= \frac{1}{i\sqrt{2}}\langle\frac{1}{2}\sigma|\hat{s}_+|\frac{1}{2}\sigma'\rangle - \frac{1}{i\sqrt{2}}\langle\frac{1}{2}\sigma|\hat{s}_-|\frac{1}{2}\sigma'\rangle = \frac{1}{2}\left\| \begin{array}{cc} 0 & -i \\ i & 0 \end{array} \right\| \equiv \frac{1}{2}\hat{\sigma}_y.$$

Матрицы $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$, $\hat{\sigma}_z$ называются матрицами Паули.

Лекция №14. Квазиклассическое приближение

Описание движения в классической механике



Рассмотрим одномерное движение частицы с полной энергией E в потенциальной яме $U(x)$. Имеем:

$$E = \frac{p^2}{2m} + U(x),$$

поэтому для зависимости импульса от координаты получаем:

$$p(x) = \pm\sqrt{2m(E - U(x))}, \quad U(x) \leqslant E.$$

Знаки "$\pm$" соответствуют движению вдоль и против оси Ox между точками поворота x_1 и x_2 ($x_1 \leqslant x \leqslant x_2$). Точки поворота определяются условием:

$$U(x_1) = U(x_2) = E.$$

Описание движения в квантовой механике

Стационарное уравнение Шредингера имеет вид:

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

$$\psi''(x) + \frac{p(x)^2}{\hbar^2}\psi(x) = 0,$$

где

$$p(x) \equiv \sqrt{2m(E - U(x))}.$$

Пусть $U = \text{const}$, тогда $p = \text{const}$, а волновая функция выглядит следующим образом:

$$\psi(x) \sim e^{\pm i\frac{px}{\hbar}}, \quad \text{если} \quad U < E,$$

и

$$\psi(x) \sim e^{\pm\frac{|p|x}{\hbar}}, \quad \text{если} \quad U > E.$$

Описание движения в квантовой механике в квазиклассическом приближении

Наблюдение: чем больше E, тем больше имеется осцилляций $\psi(x)$. Рассмотрим характерную длину осцилляции (если $p = \text{const}$, то λ – длина волны де Бройля):

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}, \quad \text{или} \quad \lambdabar \equiv \frac{\lambda}{2\pi} = \frac{\hbar}{p}.$$

Условие применимости квазиклассического приближения: $\lambdabar \ll a$, где a – характерная длина изменения потенциала $U(x)$. Если это условие выполненно, то потенциал слабо меняется на расстояниях порядка $\lambdabar$ и его можно считать постоянным. Если записать волновую функцию в форме

$$\psi(x) \sim e^{i\sigma(x)},$$

то
$$\sigma(x) \sim \frac{px}{\hbar} \sim \frac{pa}{\hbar} = \frac{a}{\lambda} \gg 1.$$

Рассмотрим три этапа построения решения в квазиклассическом приближении.

1) Ищем $\psi(x)$ в виде $\psi = Ce^{i\sigma(x)}$. Тогда

$$\psi' = i\sigma' Ce^{i\sigma},$$

$$\psi'' = -(\sigma')^2 Ce^{i\sigma} + i\sigma'' Ce^{i\sigma(x)}.$$

Подставляя ψ'' в уравнение Шредингера и сокращая $Ce^{i\sigma(x)}$, получаем уравнение на $\sigma(x)$:

$$-(\sigma')^2 + i\sigma'' + \frac{p^2}{\hbar^2} = 0,$$

или
$$i\sigma''(x) - (\sigma'(x))^2 = -\frac{p(x)^2}{\hbar^2}.$$

2) Выше уже было замечено, что в пределе $\lambda \ll a$ имеем: $\sigma \sim \dfrac{a}{\lambda} \gg 1$. Тогда

$$\sigma' \sim \frac{\sigma}{a} \sim \frac{1}{a}\frac{a}{\lambda},$$

$$\sigma'' \sim \frac{\sigma}{a^2} \sim \frac{1}{a^2}\frac{a}{\lambda}.$$

Поэтому, в силу того что $\dfrac{a}{\lambda} \gg 1$, имеем:

$$(\sigma'(x))^2 \sim \frac{1}{a^2}\left(\frac{a}{\lambda}\right)^2 \gg \frac{1}{a^2}\frac{a}{\lambda} \sim \sigma''(x).$$

Следовательно в пределе $\lambda \ll a$ в точном уравнении для $\sigma(x)$ в левой части доминирует второе слагаемое.

3) Ищем решение уравнения для $\sigma(x)$ методом разложения в ряд по малому параметру $\dfrac{\lambda}{a} \ll 1$:

$$\sigma(x) = \sigma_0(x) + \sigma_1(x) + \sigma_2(x) + \ldots,$$

где
$$\sigma_0(x) \sim \frac{a}{\lambda},$$

$$\sigma_1(x) \sim 1\,,$$
$$\sigma_2(x) \sim \frac{\lambda\!\!\!^{-}}{a} \ll 1\,,$$
$$\ldots$$

Подставляя это разложение в уравнение, находим:

$$i\sigma_0''(x) + i\sigma_1''(x) + i\sigma_2''(x) + \ldots -$$
$$-\left(\sigma_0'(x) + \sigma_1'(x) + \sigma_2'(x) + \ldots\right)^2 = -\frac{p(x)^2}{\hbar^2}.$$

Заменяя слагаемые этого уравнения порядковыми оценками, получаем:

$$\left(\sim \frac{1}{a^2}\frac{a}{\lambda\!\!\!^{-}}\right) + \left(\sim \frac{1}{a^2}\right) + \left(\sim \frac{1}{a^2}\frac{\lambda\!\!\!^{-}}{a}\right) + \ldots -$$
$$-\left[\left(\sim \frac{1}{a}\frac{a}{\lambda\!\!\!^{-}}\right) + \left(\sim \frac{1}{a}\right) + \left(\sim \frac{1}{a}\frac{\lambda\!\!\!^{-}}{a}\right)\ldots\right]^2 \sim -\frac{p^2}{\hbar^2}.$$

Возводя выражение в квадратных скобках в квадрат и собирая члены одинакового порядка малости, находим:

$$\begin{cases} \left(\dfrac{a}{\lambda\!\!\!^{-}}\right)^2: & -(\sigma_0'(x))^2 = -\left(\dfrac{p(x)}{\hbar}\right)^2, \quad \text{уравнение на } \sigma_0(x), \\ \left(\dfrac{a}{\lambda\!\!\!^{-}}\right): & i\sigma_0''(x) - 2\sigma_0'(x)\sigma_1'(x) = 0, \quad \text{уравнение на } \sigma_1(x), \\ \ldots \end{cases}$$

а) решаем уравнение на $\sigma_0(x)$:

$$\sigma_0'(x) = \pm\frac{p(x)}{\hbar},$$

$$\sigma_0(x) = \pm\int\limits_{x_0}^{x} \frac{p(x')}{\hbar}dx' + C_1;$$

б) решаем уравнение на $\sigma_1(x)$:

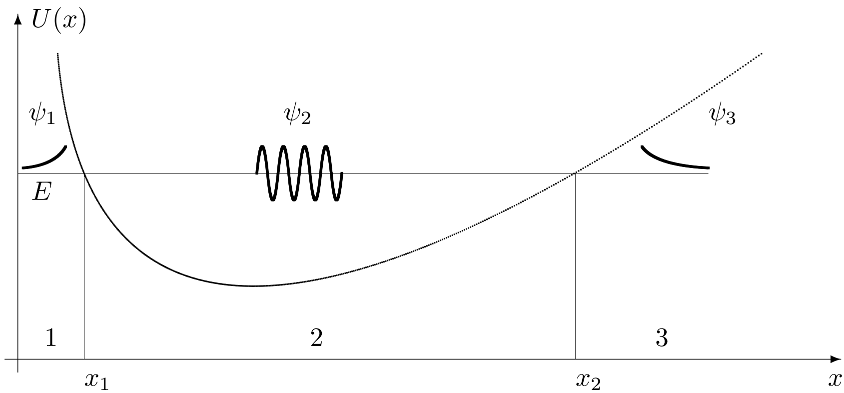
$$2\sigma_0'(x)\sigma_1'(x) = i\sigma_0'',$$

$$\sigma_1'(x) = \frac{i\sigma_0''(x)}{2\sigma_0'(x)} = \frac{i}{2}\left(\ln|\sigma_0'(x)|\right)' = i\left(\ln\sqrt{|\sigma_0'(x)|}\right)',$$

$$\sigma_1(x) = i\ln\sqrt{\frac{|p(x)|}{\hbar}} + C_2.$$

Получаем, что с точностью до малых поправок $\sigma_2 \sim \dfrac{\lambda}{a} \ll 1$ волновая функция имеет вид:

$$\psi(x) \simeq Ce^{i\sigma_0(x)+i\sigma_1(x)} = Ce^{\pm i\int\limits_{x_0}^{x}\frac{p(x')}{\hbar}dx'+C_1}e^{-\ln\sqrt{\frac{|p(x)|}{\hbar}}+C_2}.$$



Окончательно в квазиклассическом приближении получаем:

$$\psi(x) = \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}}e^{\pm i\int\limits_{x_0}^{x}\frac{p(x')}{\hbar}dx'}.$$

Пусть имеется произвольная потенциальная яма $U(x)$. Рассмотрим процедуру построения в квазиклассическом приближении волновой функции $\psi(x)$ состояния с энергией E. В классически запрещенной области $x < x_1$ (левее левой точки поворота) имеем:

$$\psi_1(x) = \frac{A}{\sqrt{|p(x)|}}e^{-\int\limits_{x}^{x_1}\frac{|p(x')|}{\hbar}dx'},$$

в классически разрешенной области $x_1 < x < x_2$ имеем:

$$\psi_2(x) = \frac{B}{\sqrt{p(x)}} e^{-i\int\limits_{x_1}^{x} \frac{p(x')}{\hbar} dx'} + \frac{C}{\sqrt{p(x)}} e^{i\int\limits_{x_1}^{x} \frac{p(x')}{\hbar} dx'},$$

наконец, в классически запрещенной области $x > x_2$ (правее правой точки поворота) имеем:

$$\psi_3(x) = \frac{D}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\int\limits_{x_2}^{x} \frac{|p(x')|}{\hbar} dx'}.$$

Ясно, что в области $x_1 < x < x_2$ амплитуды слагаемых волновой функции, отвечающих движению вдоль и против оси Ox, по модулю одинаковы, т.е. $|B| = |C|$. Поэтому $\psi_2(x)$ может быть записана и в такой форме:

$$\psi_2(x) = \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(\int\limits_{x_1}^{x} \frac{p(x')}{\hbar} dx' + \gamma\right)$$

или

$$\psi_2(x) = \frac{C'}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(\int\limits_{x}^{x_2} \frac{p(x')}{\hbar} dx' + \gamma'\right).$$

Точки поворота

Далее неизбежно возникает проблема: в окрестностях точек поворота x_1 и x_2

$$p(x) \to 0 \quad \Rightarrow \quad \lambda = \frac{\hbar}{p} \to \infty,$$

то есть условие $\dfrac{\lambda}{a} \ll 1$ нарушается. Таким образом в окрестности точек поворота квазиклассическое приближение заведомо не применимо. Следовательно невозможно непосредственным образом связать друг с другом функции ψ_1 и ψ_2 в окрестности x_1, так же как ψ_2 и ψ_3 в окрестности x_2.

Для решения этой проблемы воспользуемся линейной апроксимацией $U(x)$ в окрестностях точек x_1 и x_2. Например, в окрестности x_2 имеем:

$$U(x) \simeq U(x_2) + (x - x_2)U'(x_2) = E + (x - x_2)F,$$

где $F = U'(x_2) > 0$. Тогда

$$p = \sqrt{2m(E-U)} = \sqrt{-2mF(x-x_2)} = \sqrt{-2mFy},$$

где $y = x - x_2$. Уравнение Шредингера принимает вид:

$$\psi'' + \frac{p^2}{\hbar}\psi = 0,$$

$$\frac{d^2\psi}{dy^2} - \frac{2mF}{\hbar^2} y\psi(y) = 0,$$

$$\psi''(\xi) - \xi\psi(\xi) = 0,$$

где $\xi = \left(\dfrac{2mF}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}} y$ – безразмерная координата. Решением данного уравнения, затухающим при $\xi \to \infty$, является функция Эйри.

Из условия $\lambda = \dfrac{\hbar}{p} \ll a$ и оценки $p' \sim \dfrac{p}{a}$ получаем формальное определение квазиклассического предела:

$$\left|\frac{\hbar p'}{p^2}\right| \ll 1.$$

Подставляя $p(y) = \sqrt{-2mFy}$ в это определение, находим:

$$\left|\frac{\hbar}{-2mFy}\sqrt{-2mF}\frac{1}{2\sqrt{y}}\right| \ll 1,$$

$$\left|\frac{\hbar}{2\sqrt{2mF}}\frac{1}{y^{3/2}}\right| \ll 1,$$

$$\left|\frac{1}{2\xi^{3/2}}\right| \ll 1,$$

или

$$|\xi| \gg 1.$$

Таким образом в области, где становится справедливым квазиклассическое приближение, можно воспользоваться асимптотикой функции Эйри.

Методом перевала (стационарной фазы) получаются следующие результаты для асимптотик функции Эйри:

$$\psi(\xi) \to \begin{cases} \dfrac{1}{2\xi^{1/4}} e^{-\frac{2}{3}\xi^{3/2}}, & \xi \to +\infty, \\ \\ \dfrac{1}{|\xi|^{1/4}} \sin\left(\dfrac{2}{3}|\xi|^{3/2} + \dfrac{\pi}{4}\right), & \xi \to -\infty. \end{cases}$$

Исследуем поведение $\psi_2(x)$ при $x \sim x_2$ (но $x < x_2$):

$$\int\limits_x^{x_2} \frac{p(x')}{\hbar} dx' \simeq \int\limits_x^{x_2} \frac{\sqrt{2mF(x_2 - x')}}{\hbar} dx' = \sqrt{\frac{2mF}{\hbar^2}} \int\limits_x^{x_2} \sqrt{x_2 - x'} dx' =$$

$$= - \sqrt{\frac{2mF}{\hbar^2}} \, \frac{2}{3} (x_2 - x')^{3/2} \Bigg|_x^{x_2} = \frac{2}{3} \sqrt{\frac{2mF}{\hbar^2}} (x_2 - x)^{3/2} \equiv \frac{2}{3} |\xi|^{3/2}.$$

Таким образом, сравнивая

$$\psi_2(x) = \frac{C'}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(\int\limits_x^{x_2} \frac{p(x')}{\hbar} dx' + \gamma'\right)$$

в области, где x приближается к x_2 (но $x < x_2$), с асимптотикой функции Эйри ($\xi \to -\infty$), получаем

$$\gamma' = \frac{\pi}{4},$$

т.е.

$$\psi_2(x) = \frac{C'}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(\int\limits_x^{x_2} \frac{p(x')}{\hbar} dx' + \frac{\pi}{4}\right).$$

Выполняя точно такой же анализ для области $x \sim x_1$ (но $x > x_1$), находим:

$$\psi_2(x) = \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(\int\limits_{x_1}^{x} \frac{p(x')}{\hbar} dx' + \frac{\pi}{4}\right).$$

Энергии дискретных уровней

Понятно, что заданной энергии E должна соответствовать единственная функция $\psi(x)$, т.е. обе построенные нами функции $\psi_2(x)$ должны тождественно совпадать на интервале от x_1 до x_2. Запишем цепочку равенств:

$$\psi_2 \sim \sin\left(\int\limits_x^{x_2} \frac{p(x')}{\hbar}dx' + \frac{\pi}{4}\right) \equiv$$

$$\equiv \sin\left(\int\limits_{x_1}^{x_2} \frac{p(x')}{\hbar}dx' - \int\limits_{x_1}^{x} \frac{p(x')}{\hbar}dx' + \frac{\pi}{4}\right) =$$

$$= -\sin\left(\int\limits_{x_1}^{x} \frac{p(x')}{\hbar}dx' - \int\limits_{x_1}^{x_2} \frac{p(x')}{\hbar}dx' - \frac{\pi}{4}\right) =$$

$$= -\sin\left(\int\limits_{x_1}^{x} \frac{p(x')}{\hbar}dx' + \frac{\pi}{4} - \left(\int\limits_{x_1}^{x_2} \frac{p(x)}{\hbar}dx + \frac{\pi}{2}\right)\right).$$

Отсюда видно, что обе построенные нами функции $\psi_2(x)$ совпадают, если

$$\int\limits_{x_1}^{x_2} \frac{p(x)}{\hbar}dx + \frac{\pi}{2} = \pi(n+1), \quad n = 0,\, 1,\, \ldots$$

или

$$\int\limits_{x_1}^{x_2} p(x)dx = \pi\hbar\left(n + \frac{1}{2}\right), \qquad n = 0,\, 1,\, \ldots$$

Этот результат обычно называют условием Бора-Зоммерфельда; его также принято записывать в форме:

$$\oint_{x_1}^{x_2} p(x)dx = 2\pi\hbar\left(n + \frac{1}{2}\right).$$

Условие Бора-Зоммерфельда определяет уровни энергии E в потенциальной яме $U(x)$. Подчеркнем, что оно получено в квазиклассическом приближении (т.е. при условии $\lambda \ll a$). Таким образом, строго говоря, условие Бора-Зоммерфельда определяет энергии состояний, отвечающих $n \gg 1$.

Проницаемость барьера

Используя квазиклассическое приближение, можно также получить формулу для вероятности прохождения сквозь потенциальный барьер произвольной формы $U(x)$ частицы с энергией E ($E \leqslant U(x)$ при $a \leqslant x \leqslant b$):

$$T \simeq e^{-\frac{2}{\hbar}\int\limits_a^b |p(x)|dx\Bigg)},$$

где

$$|p(x)| = \sqrt{2m(U(x) - E)}.$$

ОГЛАВЛЕНИЕ