

Федеральное агентство по образованию
САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

**Приоритетный национальный проект «Образование»
Инновационная образовательная программа
Санкт-Петербургского государственного политехнического университета**

С. Н. ЛЫКОВ

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

Под редакцией И.П. Ипатовой

*Рекомендовано Учебно-методическим объединением
по университетскому политехническому образованию
в качестве учебного пособия для студентов высших учебных заведений,
обучающихся по направлению подготовки
140400 – Техническая физика*

Санкт-Петербург
Издательство Политехнического университета
2008

УДК 530.145 (075.8)

ББК 22.314я73

Л883

Рецензенты:

Доктор физико-математических наук, профессор СПбГУ

Б. В. Новиков

Доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник

ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН *А. Ю. Маслов*

Лыков С. Н. **Квантовая механика:** учеб. пособие / С. Н. Лыков ; под ред. И.П. Ипатовой. – СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2008. – 236 с.

Изложены физические основы квантовой механики, ее принципы и математический аппарат. Общие положения квантовой теории проиллюстрированы примерами вычислений энергетического спектра и волновых функций частицы. Рассмотрены задачи о квантово-механическом явлении надбарьерного отражения, туннельном эффекте, линейном осцилляторе, водородоподобном атоме и ряд других. Приведена теория момента импульса, рассмотрена связь спина со статистикой. Изложен метод малых возмущений, в рамках которого выводятся формулы поправок к волновым функциям и собственным значениям энергии квантово-механических систем, выражения для вероятности переходов.

Предназначено для студентов высших учебных заведений, обучающихся по направлению подготовки 140400 «Техническая физика». Также может быть использовано для подготовки студентов по направлению «Электроника и микроэлектроника», а также аспирантами, инженерами и научными работниками, специализирующимися в области опто- и наноэлектроники.

Работа выполнена в рамках реализации Инновационной образовательной программы Санкт-Петербургского государственного политехнического университета «Развитие политехнической системы подготовки кадров в инновационной среде науки и высокотехнологических производств Северо-Западного региона России».

Печатается по решению редакционно-издательского совета Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

© С.Н. Лыков, 2008

© Санкт-Петербургский государственный политехнический университет, 2008

ISBN 978-5-7422-2035-0

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение	5
1. Физические основы квантовой механики	8
1.1. Микромир	8
1.1.1. Неприменимость классической механики в микромире ...	8
1.1.2. Связь между квантовой и классической механикой	10
1.1.3. Измерение физических величин	13
1.1.4. Релятивистский микромир	21
1.2. Квантовое поведение частиц	22
1.3. Принцип неопределённости	31
2. Математический аппарат квантовой механики	36
2.1. Амплитуды вероятности	37
2.2. Векторы состояний	43
2.2.1. Базисные векторы состояний	44
2.2.2. Принцип суперпозиции	44
2.2.3. Скалярное произведение векторов состояний	45
2.2.4. Переход к другому базису	48
2.2.5. Нормировка векторов состояния	50
2.2.6. Калибровочные преобразования	51
2.3. Линейные операторы	52
2.3.1. Правила алгебры операторов	53
2.3.2. Представление операторов матрицами	56
2.4. Операторы физических величин	59
2.4.1. Преобразования симметрии	59
2.4.2. Оператор физической величины	66
2.4.3. Эрмитово сопряжение оператора	69
2.4.4. Приведение эрмитовой матрицы к диагональному виду ..	73
2.4.5. Коммутатор операторов физических величин	75
2.4.6. Соотношения неопределённости	76
2.5. Волновая функция частицы	79
2.5.1. Координатное представление	79
2.5.2. Собственные функции	82
2.5.3. Действие операторов на волновую функцию	85
2.6. Импульс частицы	90
2.6.1. Оператор импульса в координатном представлении	90
2.6.2. Состояния с определённым импульсом	93
2.6.3. Распределение вероятности для импульса	97
2.7. Уравнение Шредингера	100

2.7.1. Оператор энергии и эволюция состояний во времени	100
2.7.2. Стационарные состояния	101
2.7.3. Изменение средних значений со временем	103
2.7.4. Представление Гейзенберга	107
2.7.5. Уравнение Шредингера для волновой функции частицы .	108
3. Примеры решений уравнения Шредингера	116
3.1. Свободное движение частицы	116
3.2. Отражение частицы от потенциального барьера	121
3.3. Туннельный эффект	129
3.4. Частица в бесконечной прямоугольной потенциальной яме ...	131
3.5. Гармонический осциллятор	136
3.6. Общие свойства стационарных состояний при одномерном движении частицы	142
4. Момент импульса	145
4.1. Операторы момента импульса	145
4.2. Состояния с определённым моментом	150
4.3. Матрицы операторов момента	157
4.4. Операторы орбитального момента частицы	160
4.5. Частица в сферически симметричном поле	164
4.5.1. Система уравнений для волновой функции	164
4.5.2. Угловая часть волновой функции	166
4.5.3. Радиальная часть волновой функции	169
4.6. Атом водорода	175
4.7. Задача двух частиц	181
5. Спин	185
5.1. Спиновые состояния электрона	185
5.2. Оператор спина	190
5.3. Повороты спиноров	194
5.4. Сложение моментов	196
5.5. Бозоны и фермионы	206
6. Возмущение и переходы	210
6.1. Возмущение, зависящее от времени	210
6.2. Переходы в состояния непрерывного спектра при периодическом возмущении	216
6.3. Соотношение неопределённости для энергии	221
6.4. Возмущение стационарных состояний	222
6.5. Упругое рассеяние частицы в борновском приближении	230
Библиографический список	235

ВВЕДЕНИЕ

Начало квантовой эпохе в физике положил Макс Планк. Обобщив экспериментальные данные о тепловом излучении тел, Планк в 1900 г. открыл формулу спектра теплового излучения, в которой впервые появилась фундаментальная константа h с размерностью «энергия×время». Такую же размерность имеет действие – одна из основных величин, применяемых в теоретической механике для вывода уравнений движения, поэтому Планк назвал открытую им постоянную h элементарным квантом действия (в наше время константу h , а также $\hbar = h/2\pi$, называют постоянной Планка). Идея о кванте действия оказалась несовместимой с принципами классической физики. Планк настойчиво пытался ввести квант действия в существовавшую систему понятий классической теории, стараясь соединить зарождающиеся новые и устоявшиеся старые представления о законах природы, но такой путь не привел к успеху. Вот как об этом написал в своей биографии сам Планк.

«Провал всех попыток перекинуть мост через эту пропасть не оставил вскоре никаких сомнений в том, что квант действия играет фундаментальную роль в атомной физике и что с его появлением началась новая эпоха в физической науке, ибо в нём заложено нечто, до того времени неслыханное, что призвано радикально преобразить наше физическое мышление, построенное на понятии непрерывности всех причинных связей с того времени, как Лейбниц и Ньютон создали исчисление бесконечно малых».

Следующий важный шаг совершил А. Эйнштейн. В 1905 г. Эйнштейн обосновал с помощью формулы Планка гипотезу о существовании квантов света – частиц, переносящих энергию и импульс электромагнитного излучения дискретными порциями (в дальнейшем кванты света были названы фотонами). На основе этой гипотезы Эйнштейн объяснил происхождение законов фотоэлектрического эффекта, открытого еще в 1887 г. А вскоре, в 1907 году, Эйнштейн показал, что представление о квантах энергии колебаний атомов кристаллической решетки (позже названных фононами) позволяет объяснить температурную зависимость теплоемкости твердых тел, также казавшуюся загадочной в рамках классических законов физики.

Еще одной загадкой классической физики долгое время оставалась экспериментально наблюдаемая картина дискретных линий в оптических спектрах атомов. В 1913 г. Нильс Бор сумел с помощью специальных постулатов ввести постоянную Планка в уравнения классической механики таким образом, что из них удалось успешно вычислить частоты всех спектральных линий атома водорода. Для более сложных атомов подобное совмещение квантовой гипотезы с классической теорией не дало количественных результатов и не могло быть принято в качестве основы квантовой теории. Тем не менее, постулаты Бора вскрыли фундаментальную связь между понятием о световых квантах и введенной Бором картиной дискретных уровней энергии атома. Открытия Бора послужили вехой, обозначившей путь к современной квантовой механике.

Для построения последовательной квантовой теории необходимо было придти к принципиально новым представлениям о движении, включающим не только корпускулярный характер излучения, но и волновые аспекты поведения частиц. Предположение о том, что в квантовой теории понятия частицы и волны должны быть некоторым образом объединены, выдвинул в 1924 г. Луи де Бройль. Завершённую математическую форму этой идее придал Эрвин Шредингер – в 1926 г. Шредингер ввел в физику представление о волновой функции частиц (ψ -функция) и построил для неё дифференциальное уравнение, позволяющее проводить последовательные расчеты всех основных свойств атомных систем. Уравнение Шредингера служит основой современной квантовой механики.

Открытая Шредингером волновая механика является не единственно возможной формой математического представления квантовой теории. В 1925 г. В. Гейзенберг, работавший под руководством М. Борна, создал алгебраический метод расчета свойств атомных систем, что в дальнейшем позволило представить квантовую теорию в форме так называемой матричной механики. Примерно в этот же период времени П. Дирак сформулировал принципы квантовой теории в терминах некоммутативной алгебры операторов. Здесь же необходимо отметить основополагающий вклад Дирака в создание квантовой электродинамики: сумев впоследствии объединить принципы квантовой механики и теории относительности, Поль Дирак открыл релятивистское волновое уравнение, обобщающее

уравнение Шредингера, которое позволило выявить релятивистскую природу спина электронов и предсказать существование античастиц. Формулировки квантовой механики Шредингера, Гейзенберга и Дирака в совокупности составляют стройный математический аппарат квантовой теории.

Завершив это грандиозное построение, великие физики начала XX века, однако, не были единодушны в интерпретации созданных ими новых теоретических понятий. Различие во взглядах на физический смысл ψ -функции долгое время порождало острые дискуссии; они сыграли важную роль в становлении глубокого понимания квантовой теории. Так, известная дискуссия между Эйнштейном, критически воспринявшим необходимость отказа от классического взгляда на физическую реальность, и Бором, искусно защищавшим квантово-механическую точку зрения, подняла сложные вопросы о влиянии процесса измерения на состояние атомной системы. В современной научной литературе также можно встретить обсуждение подобных вопросов; оно стимулируется, в основном, постоянным ростом возможностей экспериментальной техники и перспективами нанотехнологии в создании новых квантовых приборов. К настоящему времени преобладает (несмотря на трудность интуитивного восприятия) полностью последовательная трактовка квантового формализма – статистическая интерпретация квантовой механики, предложенная М. Борном в 1927 г. Она не содержит не доступных проверке гипотез, внутренних противоречий и согласуется со всеми известными экспериментальными фактами; в учебном пособии мы придерживаемся только этой интерпретации.

В современном научном мировоззрении законы квантовой механики составляют необходимую основу представлений о строении вещества и о физических процессах на различных уровнях масштабов, от элементарных частиц до сложных биологических молекул. Квантовые эффекты проявляются не только в микромире: сверхтекучесть и сверхпроводимость служат примерами макроскопических квантовых явлений, в которых коллектив огромного числа частиц ведет себя как единый квантовый объект. Сознательное применение квантовых эффектов для решения сложных практических задач позволило создать ядерные реакторы, лазеры, приборы твердотельной микро и наноэлектроники. Развиваются новые

направления квантовой физики, в частности, – связанные с задачами обработки информации (квантовые вычисления, квантовая криптография). Знать основы квантовой механики необходимо при изучении статистической физики, физики твёрдого тела и многих специальных дисциплин, имеющих важные приложения в современной науке и технике.

Предлагаемое учебное пособие содержит материал лекций по нерелятивистской квантовой теории, рассчитанных на один семестр, которые автор читал студентам третьего курса радиофизического факультета Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Автор благодарен В.Э. Гасумянцу и М.В. Елизаровой за помощь в компьютерной обработке текста и рисунков,

1. ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ

1.1. МИКРОМИР

1.1.1. Неприменимость классической механики в микромире

Визуальные наблюдения движущихся тел ведут к наглядному представлению о траектории $\mathbf{r}(t)$ материальной точки. Это понятие лежит в основе обычной, *классической* механики [1]. Так, считая планеты материальными точками можно с помощью классической механики успешно описать их движение вокруг Солнца.

На первый взгляд кажется, что наглядный образ движущейся точки должен быть применим к любой частице вещества, и притом с тем лучшей точностью, чем меньше размер частицы. Например, представляется привлекательной модель атома, в которой электроны движутся вокруг атомного ядра по определенным траекториям аналогично планетам в Солнечной системе. Однако опыт показывает, что такое представление не соответствует действительности, и что невозможно правильно описать свойства атомов, если рассматривать электроны в атоме как классические материальные точки. Напомним один из самых явных доводов о неприменимости классической механики к объяснению атомных явлений.

Из опытов следует, что атомы имеют размер $a \sim 10^{-8}$ см; это масштаб длины, характеризующий движение электронов в пространстве вокруг атомного ядра. Радиус ядра меньше размера атомов примерно в сто тысяч раз. Полагая, как это принято в электродинамике, что электрон является точкой, мы сталкиваемся с необходимостью понять, почему, несмотря на кулоновское притяжение к ядру, электрон в атоме постоянно удерживается на огромных (в сравнении с размером ядра) расстояниях от ядра, находящегося в центре атома.

Классическая теория не может дать ответ на этот вопрос. Она предсказывает, что электрон, вращаясь вокруг ядра и теряя энергию из-за непрерывного излучения электромагнитных волн, должен по истечении короткого времени упасть на ядро. Такой вывод с очевидностью противоречит наблюдаемой стабильности атомов, молекул и состоящего из них вещества.

Неприменимость законов классической физики к микрообъектам подтверждается не только приведенным простым рассуждением, но и множеством детальных данных о поведении частиц в микромире, полученных учеными еще на рубеже XX века при изучении строения вещества, молекул, атомов, субатомных частиц. Эксперименты, потребовавшие выйти за рамки классических представлений о законах природы, подробно рассматриваются в курсе атомной физики и должны быть хорошо известны читателю. Здесь мы подчеркнем лишь, что к важным экспериментальным фактам, не нашедшим объяснения в классической механике, относятся дискретность энергетических спектров атомных систем, способность частиц к интерференции (вспомним о дифракции электронов при прохождении через кристаллы) и существенно вероятностный характер картины движения микрочастиц. Эти аспекты квантового поведения микрообъектов мы подробно рассмотрим ниже.

Согласующиеся с опытом выводы дает *квантовая механика* [2–7]. По ходу ее изучения мы увидим, что эта теория принципиально отличается от механики классической. Квантовыми называют явления, для количественного описания которых необходим «элементарный квант действия» – постоянная Планка \hbar :

$$\hbar = 1,054 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с} = 1,054 \cdot 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{с}. \quad (1.1)$$

Так, к квантовым явлениям можно отнести сам факт существования атомов – радиус атома в квантовой теории оценивается известной формулой Бора, в которую входят постоянная Планка \hbar , масса электрона m и электрический заряд электрона e :

$$a = \frac{\hbar^2}{me^2} = 0,529 \cdot 10^{-8} \text{ см}. \quad (1.2)$$

В качестве еще одного примера фундаментальной роли постоянной Планка в квантовой теории напомним выражения для энергии ε и величины p вектора импульса фотона – кванта электромагнитного излучения:

$$\varepsilon = \hbar\omega = 2\pi\hbar c / \lambda, \quad (1.3)$$

$$p = \varepsilon / c = 2\pi\hbar / \lambda. \quad (1.4)$$

В этих формулах ω – частота излучения, λ – длина волны, связанная с частотой классическим соотношением $\omega = 2\pi c / \lambda$, c – скорость света.

1.1.2. Связь между квантовой и классической механикой

Почему при переходе к микромиру классические представления о движении частиц теряют свою силу? Как определить границу между макромиром и микромиром? Простой ответ на такие вопросы дать нелегко. В этом разделе мы проведем предварительное обсуждение перехода от классической картины к квантовой, исходя из количественного критерия, возникающего в самой квантовой теории, а в следующем разделе выделим принципиальные черты экспериментов над объектами микромира.

Хорошо известно, что классический закон движения механической системы можно представить в форме *принципа наименьшего действия* [1]. Так, чтобы найти траекторию частицы с массой m в поле сил, задаваемом

потенциальной энергией $U(\mathbf{r})$, следует указать положение $\mathbf{r}_1(t_1)$ частицы в начальный момент времени t_1 , конечную точку $\mathbf{r}_2(t_2)$, и затем сравнить между собой значения действия S для всевозможных траекторий $\mathbf{r}(t)$, соединяющих указанные точки:

$$S = \int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{m}{2} \left(\frac{d\mathbf{r}(t)}{dt} \right)^2 - U(\mathbf{r}(t)) \right) dt. \quad (1.5)$$

Принцип наименьшего действия гласит, что частица будет двигаться по такой траектории $\mathbf{r}_{кл}(t)$, для которой действие (1.5) минимально. Это означает, что вариация действия в первом порядке малости по отклонению траекторий $\mathbf{r}(t)$ от $\mathbf{r}_{кл}(t)$ обращается в нуль. В свою очередь это условие оказывается эквивалентным уравнению Ньютона для траектории $\mathbf{r}_{кл}(t)$ частицы в поле сил $\mathbf{F}(\mathbf{r}) = -\nabla U(\mathbf{r})$:

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}_{кл}}{dt^2} = \mathbf{F}(\mathbf{r}_{кл}). \quad (1.6)$$

В квантовой теории этот классический результат теряет применимость, так как в основу квантовой механики закладывается *принцип неопределенности*; он гласит, что частица не имеет строго определенной траектории. Согласно законам квантовой механики, частица может с некоторой *вероятностью* обнаруживаться в любой точке пространства. В точках классической траектории $\mathbf{r}_{кл}(t)$ и в точках «соседних» с ней траекторий $\mathbf{r}(t)$ вероятность обнаружения частицы будет приблизительно одной и той же, если от траектории к траектории действие изменяется мало по сравнению с величиной кванта действия \hbar . Из выражения (1.5) видно, что это условие выполняется для любой частицы сравнительно малой массы, рассматриваемой в достаточно малом участке пространства или на коротких промежутках времени (так что на всех траекториях $S \ll \hbar$). Представление о траектории $\mathbf{r}_{кл}(t)$ становится при

этом бесполезным, поведение частицы описывается распределением вероятности возможных значений ее координат.

При макроскопическом движении частицы все траектории характеризуются неравенством

$$S \gg \hbar . \quad (1.7)$$

Квантовая теория показывает, что в этом случае распределение вероятностей координат частицы, имеющее в начальный момент времени t_1 вид узкого пика в окрестности какой-либо точки \mathbf{r}_1 , способно перемещаться в любую точку \mathbf{r}_2 вдоль соответствующей траектории $\mathbf{r}_{кл}(t)$. Следовательно, если размеры такого «облака» вероятности остаются небольшими по сравнению с длиной его траектории, то частица сможет обнаруживаться только вблизи точек $\mathbf{r}(t) = \mathbf{r}_{кл}(t)$, предсказываемых уравнением Ньютона. В результате, для движения частиц на больших расстояниях квантовая теория дает ту же картину траекторий, что и классическая механика, но само понятие траектории оказывается приближенным. В этом контексте граница между «микромиром» и «макромиром» определяется условием $S \sim \hbar$.

Рассмотренная связь между квантовой и классической механикой во многом аналогична взаимоотношению между волновой и геометрической оптикой. Как известно, в условиях тех задач, где длина волны света сравнительно мала (фаза компонент поля в электромагнитной волне велика), волновая оптика переходит в геометрическую, то есть появляется возможность полагать, что свет распространяется по определенным траекториям – лучам. В квантовой механике роль фазы волны играет величина S/\hbar , а длина волны λ для всех частиц с заданным импульсом p дается тем же соотношением, что и для фотонов:

$$\lambda = 2\pi\hbar / p . \quad (1.8)$$

Предположение о применимости такого соотношения к любым частицам впервые было выдвинуто де Бройлем, поэтому величину (1.8) называют *дебройлевской длиной волны частицы*.

Аналогия между волновой оптикой и квантовой картиной движения частицы требует ввести в квантовую теорию волновую функцию частицы $\psi(\mathbf{r}, t)$. В квантовой механике по определению $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ есть плотность вероятности обнаружения частицы в окрестности точки \mathbf{r} , так что вероятность найти частицу в элементе объема dV равна $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 dV$. Необходимость статистического описания квантового поведения частиц посредством волновой функции мы подробно обсудим в разделе 1.2.

1.1.3. Измерение физических величин

Макроскопические явления, например, движение планет, можно наблюдать непрерывно во времени и притом без заметного вмешательства в ход изучаемых процессов. Однако при переходе к экспериментам с объектами микромира характер постановки опытов существенно изменяется. Человек не способен непосредственно следить за движением, скажем, электронов в атоме. Помимо того, что быстродействие органов зрения относительно невелико, еще и пространственное разрешение визуальных наблюдений оказывается ограниченным – невозможно получить отчетливое оптическое изображение объектов, малых по сравнению с длиной волны видимого света ($\sim 10^{-5}$ см). Отсюда следует очень важный вывод: о поведении микрочастицы приходится судить только по результатам ее взаимодействия с каким-либо непосредственно наблюдаемым объектом, способным выполнять функцию достаточно чувствительного детектора.

В каждом акте взаимодействия с частицей состояние детектора скачкообразно изменяется, и это событие ведет к появлению макроскопического сигнала. Например, фотоны можно обнаруживать специальным прибором – фотоумножителем. В нем фотон поглощается одним из электронов фоточувствительного электрода, отдает всю свою энергию $\hbar\omega$ и тем самым инициирует возникновение лавины вторичных электронов. В итоге макроскопический поток этих электронов регистрируется наблюдателем как кратковременный электрический сигнал (фотоотсчет) в выходной цепи прибора. Счетчик Гейгера способен аналогичным образом регистрировать одиночные электроны: каждой

обнаруженной частице соответствует дискретный сигнал, «щелчок». В камере Вильсона детекторами быстро движущегося электрона служат капельки сконденсировавшегося водяного пара, а в слое чувствительной к электрически заряженным частицам эмульсии – «зёрна», изменяющие свой внешний вид после того, как попавшая в эмульсию частица ионизирует некоторые из молекул вещества. Если энергия частицы велика по сравнению с ее потерями в отдельных актах ионизации, происходит множество таких актов; в результате из зёрен или капелек выстраивается след, в общих чертах напоминающий классическую траекторию материальной точки. Однако следует помнить, что такой след имеет макроскопическую толщину (в противном случае он не будет виден); внутри следа, на микроскопических расстояниях между отдельными зёрнами траектория частицы остается полностью неопределенной.

Эксперименты с детектированием одиночных частиц выявили принципиально важный факт непредсказуемости отдельного события. Например, если постановка опыта допускает распространение фотона по нескольким путям в различные детекторы, то в общем случае мы не можем заранее сказать, каким из имеющихся детекторов (и когда) будет обнаружен очередной фотон. Подобным же образом невозможно предвидеть, в каких именно элементах объема камеры Вильсона (или эмульсионного слоя фотопластинки) регистрируемая частица оставит свой след. В опытах по дифракции частиц на кристаллах непредсказуемым является направление рассеяния каждой отдельно взятой частицы; и так далее. Однако все это не означает отсутствия закономерности в поведении частиц. Если многократно повторять одни и те же испытания, поддерживая неизменными доступные контролю условия опыта, то отношение числа случаев, в которых реализуется какое-либо одно из ожидаемых событий, к полному числу испытаний стремится с ростом числа испытаний к вполне определенной величине. Такая величина, интерпретируется как *вероятность* данного события в условиях рассматриваемого опыта. Значимыми результатами эксперимента над микрочастицами считаются не разрозненные наблюдения, а распределения вероятностей для событий, реализующихся при заданных условиях.

Особый интерес представляют данные о том, как распределения вероятностей изменяются при контролируемом изменении условий опыта

и как соотносятся между собой статистические результаты опытов различного типа. Такие данные показывают, что вероятностный характер квантово-механического поведения частиц обусловлен фундаментальными причинами, новыми по отношению к классическому представлению о происхождении статистических законов в физике. С классической точки зрения непредсказуемость результата одиночного испытания объяснялась бы только невозможностью абсолютно точного контроля над актом взаимодействия микрочастицы с макроскопическим прибором. Такой разброс результатов имел бы неуправляемый характер (например, как при бросании игральной кости). Однако квантово-механическим распределениям вероятностей, наблюдаемым в самых разных экспериментах, свойственен особый, *интерференционный характер*; обычный статистический разброс при этом тоже дает вклад в реально наблюдаемое распределение вероятностей, но этот вклад часто можно считать пренебрежимо малым. В отличие от обычного разброса интерференционная картина распределения вероятностей существенно и контролируемо изменяется даже при небольших изменениях параметров опыта.

Для примера вспомним суть опыта по упругому рассеянию частиц (скажем, электронов) на атомах кристаллической решетки. В этом эксперименте исходный пучок частиц с заданным вектором импульса \mathbf{p} расщепляется кристаллической решеткой на несколько пучков, в полной аналогии с картиной дифракции волны, характеризующейся длиной волны (1.8). Интенсивность возникших пучков дает нам информацию о вероятности рассеяния частицы на различные углы. Опыт показывает, что направление и интенсивность этих пучков существенно изменяются при поворотах кристаллического образца относительно направления падающего на кристалл пучка частиц (или при изменении энергии частиц в пучке), как и следовало бы ожидать, если представлять себе частицу в виде протяженной волны, которая расщепляется сразу всеми атомами кристаллической решетки на несколько волн. Однако утверждение, что частица действительно является волной, никак не может быть верным, поскольку такой же опыт с одиночными частицами (то есть при очень низкой интенсивности исходного пучка) показывает, что рассеянная кристаллом частица не расщепляется на части. Каждая частица дает в

каком-нибудь месте регистрирующей фотопластинки лишь одно маленькое пятнышко – «точку»; дифракционная картина возникает только в результате накопления таких следов от большого числа частиц. В то же время для частицы не подходит и образ обычной материальной точки, связанный с представлением о движении частицы по непрерывной траектории $\mathbf{r}(t)$, потому что при классическом понимании процесса движения точечной частицы внутри кристаллической решетки невозможно объяснить возникновение наблюдаемой на практике статистической картины дифракции частиц.

Поскольку дифракция обнаруживается для всех типов частиц (фотонов, электронов, нейтронов, атомов и даже молекул), интерференционный характер вероятностей следует рассматривать как фундаментальную закономерность физики микромира. Эта закономерность не находит объяснения в терминах классической физики, и мы можем сказать лишь, что она обусловлена принципиальным отличием поведения микрообъектов от того, что в классической физике подразумевается под процессами распространения волны и движения материальной точки.

Эти отличительные черты поведения микрообъектов требуют также отказа от классического представления о процедуре измерения физических величин, характеризующих движение частиц. Для пояснения отвлечемся от практических деталей реальных экспериментов и рассмотрим упрощенную схему опыта, к которой с той или иной степенью идеализации сводится представление о процессе любого измерения в квантовой механике.

Под опытом мы подразумеваем серию специально организованных испытаний, многократно повторяемых при одних и тех же условиях. Ту часть экспериментальной установки, которая обеспечивает постоянство условий опыта (либо их контролируемое изменение), назовем источником. Источник pripravливает изучаемый микрообъект (например, частицу) в определенном состоянии. Другими элементами установки являются анализатор значений измеряемой физической величины f и детекторы микрообъекта. В каждом акте испытания очередной экземпляр изучаемого объекта поступает на «вход» анализатора и после взаимодействия с ним

регистрируется одним из детекторов, расположенных на «выходах» анализатора.

Условимся для простоты считать, что измеряемая физическая величина f принимает конечное число N различных значений: f_1, \dots, f_N . Анализатор «обнаруживает» у изучаемого объекта одно из возможных значений $f = f_k$, где $k = 1, \dots, N$, и направляет объект на выход с соответствующим номером k ; там объект регистрируется детектором с таким же номером k , в результате чего наблюдатель заключает, что в данном акте измерения получено конкретное значение $f = f_k$.

Это описание акта измерения еще нельзя признать вполне строгим – оно содержит классическое представление о последовательно развивающихся стадиях приготовления объекта, прохождения через анализатор и поглощения в детекторе. На самом деле регистрируется только результат (сигнал одного из N детекторов), а всем невидимым стадиям акта измерения может сопутствовать свойственная квантовым процессам неопределенность. Поэтому в более точной формулировке весь акт измерения следует рассматривать как единое *событие*.

При идеальной постановке опыта набор регистрируемых событий *полон* – он охватывает все возможные исходы испытаний. События в таком наборе *альтернативны*, то есть в одном в акте измерения регистрируется только одно из N возможных событий. Подсчет наблюдавшихся в многократных испытаниях событий дает нам распределение вероятности W_k для событий данного набора, которое в то же время является распределением вероятности значений f_k измеряемой в данном опыте физической величины f .

Квантовая теория включает также представление об измерении различных физических величин в одном и том же состоянии микрообъекта. В терминах рассмотренной выше схематической картины переход от измерения какой-либо физической величины f к измерению другой физической величины, скажем g , означает проведение испытаний в новой постановке опыта – с заменой анализатора ожидаемых значений f анализатором ожидаемых значений g .

Предположим, что при специальном выборе начальных условий (параметров опыта) мы можем приготовить квантовый объект *в состоянии с определенным значением физической величины f* , например $f = f_1$. Этот термин означает, что в указанных условиях каждый акт измерения величины f дает с достоверностью значение f_1 , а вероятность значений $f_k \neq f_1$ равна нулю. Подчеркнем: в общепринятой интерпретации квантовой теории термин *состояние* объекта *всегда понимается в статистическом смысле* – как информация о поведении одинаково приготовленных объектов в многократно повторяемых испытаниях. Способ приготовления состояния с определенным значением f можно представить себе следующим образом. Пусть выход одного из каналов « f -анализатора» (в нашем примере – канала, соответствующего значению $f = f_1$) не блокируется детектором, а используется в дальнейших экспериментах как источник. Тогда, подсоединив этот источник к входу еще одного f -анализатора, мы будем обнаруживать на выходе последнего $f = f_1$ с вероятностью, равной единице.

Аналогичным образом, в опыте по измерению величины g у объекта в состоянии с определенным значением $f = f_1$ указанный источник должен быть соединен со входом g -анализатора. Что покажут такие измерения?

Одна из возможностей состоит в том, что в состоянии с определенным значением $f = f_1$ величина g также имеет определенное значение, например, $g = g_1$. Такой результат может быть справедлив для всех значений f и g , то есть для всех $k = 1, \dots, N$ в состоянии с $f = f_k$ с достоверностью будет обнаруживаться $g = g_k$, и наоборот. В этом случае принято говорить, что величины f и g измеримы одновременно.

Если же в состоянии с определенным значением f от испытания к испытанию обнаруживаются различные значения g , то о физических величинах f и g говорят как о не измеримых одновременно. Действительно, в этом случае измерения величин f и g как бы «мешают» друг другу – состояние с определенным значением одной из этих величин утрачивает данное свойство определенности после измерения другой из них. Подобная ситуация свойственна именно квантовой физике. В классической

механике состояние движения частицы описывается траекторией $\mathbf{r}(t)$, которая для любого момента времени с достоверностью определяет сразу все физические характеристики движения – скорость $\mathbf{v} = d\mathbf{r}/dt$, импульс $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$, момент импульса $\mathbf{r} \times \mathbf{p}$ и так далее.

Простым примером, иллюстрирующим реальные измерения, служит опыт по наблюдению спектрального состава света. Здесь роль анализатора выполняет призма (или дифракционная решетка), разлагающая исходный пучок света, не обладающего свойством монохроматичности, на монохроматические пучки – с определенными значениями частоты ω . Акт обнаружения фотона в одном из таких пучков можно рассматривать как событие, в результате которого нам становится известным значение энергии $\varepsilon = \hbar\omega$ этого фотона.

Если источником света являются возбужденные атомы, то измерение энергии фотона $\hbar\omega$ можно интерпретировать как измерение разности энергии $\varepsilon_{n'}$ начального состояния и энергии ε_n конечного состояния излучившего атома:

$$\hbar\omega = \varepsilon_{n'} - \varepsilon_n . \quad (1.9)$$

В формуле (1.9) индексы n и n' нумеруют различные состояния атома с определенной энергией. Отметим, что формулу (1.9) открыл Н.Бор. Наблюдаемая дискретность спектра излучения атомов позволила Бору уже на раннем этапе становления квантовой теории сделать вывод, что состояния атома с определенными значениями внутренней энергии образуют дискретную последовательность.

Для измерения импульса частиц и для приготовления состояний с определенным импульсом нередко используется явление дифракции частиц на кристаллах. Анализатором при этом является кристаллическая решетка. Проекции p_x, p_y, p_z вектора импульса \mathbf{p} служат здесь примером одновременно измеримых физических величин. Наряду с импульсом важную роль в квантовой механике играет момент импульса, однако его проекции, как выяснится в разделе 4.1, не измеримы одновременно.

Измерение координат частицы сводится к ее обнаружению детектором достаточно малых размеров. Весь рабочий объем камеры

Вильсона (или эмульсионной пластинки) мы можем рассматривать как «анализатор», а возникновение капельки сконденсировавшегося пара (или изменение вида зерна в эмульсии) – как событие, сигнализирующее о детектировании частицы в малом элементе объема. Результатом акта измерения являются координаты x , y , z этого элемента объема в произвольно выбранной системе отсчета. Очевидно, говоря об одиночной частице, мы подразумеваем объект, который ведет себя как нечто неделимое (хотя бы в течение некоторого временного интервала) – в один и тот же момент времени частица не может быть обнаружена несколькими детекторами. Представление об измерении координат частицы тесно связано с указанной неделимостью.

На практике точность измерения координат частицы ограничена размерами детектирующего «зерна». Однако теория всегда основывается на идеализированных представлениях. В частности, в нерелятивистской квантовой механике принимается, что измерение координат частицы можно произвести с любой точностью. Идеализированное измерение координат состоит в обнаружении частицы в каком-либо элементе объема бесконечно малой величины dV с определенным радиус-вектором \mathbf{r} . С этой точки зрения координаты частицы x , y , z (компоненты радиус-вектора) являются непрерывными физическими величинами.

В разделе 2 для краткости изложения все виды физических величин мы будем рассматривать в рамках одной и той же схемы процесса измерения – как величину с дискретным спектром значений f_k . Применительно к измерению координат частицы обозначение f_k будет иметь смысл одного из дискретных значений \mathbf{r} (значений x , y , z). Число N различных значений \mathbf{r} можно понимать как $N = V/dV$, где V – величина объема, с достоверностью содержащего рассматриваемую частицу, dV – малый, но конечный элемент объема, соответствующий «зернистости» воображаемого детектора.

Аналогичным образом в квантовой теории вводится представление о системе многих частиц: в случае системы n частиц становится возможным появление в один и тот же момент времени сигналов от n детекторов в различных точках $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n$. Состояние системы n частиц в квантовой механике описывается волновой функцией $\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n, t)$, зависящей от

$3n$ координатных переменных. Совокупность координат $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n$ часто называют точкой q конфигурационного пространства системы, а произведение дифференциалов всех $3n$ координатных переменных – элементом объема dq конфигурационного пространства. По определению волновой функции, $|\psi(q,t)|^2 dq$ есть вероятность того, что произведенное над системой измерение координат обнаружит значения $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n$ в элементе dq , находящемся в точке q . Это распределение вероятностей относится к моменту времени t .

1.1.4. Релятивистский микромир

Опыт показывает, что представление о частице как о неизменном объекте справедливо лишь до тех пор, пока изменение ее энергии в актах взаимодействия с другими частицами невелико по сравнению с энергией покоя mc^2 данной частицы. В области же больших энергий, то есть в релятивистской области, взаимодействие частиц сопровождается процессами превращения одних частиц в другие, рождением новых частиц и распадом тех из них, которые оказываются нестабильными. Эти процессы относятся к категории релятивистских квантовых явлений, поскольку их количественное описание требует привлечения скорости света и постоянной Планка.

Релятивистская квантовая теория приводит к заключению о принципиальном ограничении точности измерения координат частицы величиной \hbar/mc , где m – масса рассматриваемой частицы (для фотона подобную роль играет длина волны λ). Величина \hbar/mc , имеющая размерность длины и называемая комптоновской длиной волны, связана с представлением о процессах рождения и аннигиляции пар «частица–античастица» [8]. Это можно пояснить следующим образом. Попытаемся точно измерить координаты одиночного электрона по результатам рассеяния на этом электроне узкого пучка фотонов. Для того чтобы повысить разрешение, следует использовать фотоны с малой длиной волны λ , но тогда, согласно (1.3), возрастет энергия каждого фотона. При длине волны, меньшей $\hbar/mc \sim 10^{-11}$ см, энергия фотона превысит $2mc^2$ и

будет достаточной для рождения электрон-позитронных пар. Вместо одного электрона мы обнаружим многочастичную систему, так и не получив желаемой информации о координатах исходного электрона.

Этот пример показывает, что на достаточно малых расстояниях квантовые явления неизбежно приобретают релятивистский характер. Для частиц с малой дебройлевской длиной волны, $\lambda \ll \hbar/mc$, фундаментальные постоянные \hbar и c связывают шкалы энергии и длины: $\varepsilon \sim \hbar c/\lambda$. Отсюда видно, что микромир в области очень малых расстояний – это мир физики высоких энергий; в нем основную роль играют квантовые релятивистские процессы взаимопревращения и рождения новых частиц.

В дальнейшем изложении мы ограничиваемся рассмотрением нерелятивистской квантовой механики.

1.2. КВАНТОВОЕ ПОВЕДЕНИЕ ЧАСТИЦ

Цель этого раздела заключается в том, чтобы на очень простом примере пояснить читателю, впервые приступающему к изучению квантовой механики, каким образом главные черты квантового поведения микрообъектов будут отражены в математическом аппарате теории. Все существенные признаки квантового поведения мы уже перечислили в предшествующем обсуждении. Теперь, следуя [9], обратимся к примеру, понимание которого не требует глубоких познаний в области атомной физики и который может быть легко воспринят, если только задаться вопросом: как с помощью представления о фотонах объясняются повседневно наблюдаемые свойства света?

Рассмотрим распространение света с определённой частотой ω через прозрачную (на данной частоте) стеклянную пластинку. Примером квантовой частицы в рассматриваемом опыте нам будет служить фотон; конечно, свет имеет релятивистскую природу, но в квантовом поведении фотонов и нерелятивистских частиц есть много общего.

Яркий свет представляет собой совокупность чрезвычайно большого числа фотонов. При распространении через прозрачное стекло основная часть света проходит насквозь, но некоторая доля светового потока отражается. Действительно, нередко можно одновременно видеть и то, что

находится за стеклом, и отражение предметов, расположенных перед ним. Кроме того, иногда наблюдается интерференция света. При белом свете и относительно большой толщине пластинки это явление трудно заметить, однако интерференция отчетливо проявляется в случае достаточно тонких пленок – они кажутся окрашенными или переливаются всеми цветами радуги (вспомним, например, как выглядят пятна масла на поверхности воды). Если же освещать пленку светом одной частоты ω , то будут видны светлые полосы только одного цвета, чередующиеся с черными полосами; там, где полосы черные, свет не отражается. Эти факты мы и хотим обсудить в терминах фотонной картины света.

Схема предполагаемого опыта показана на рис. 1.1, *а*. Два детектора фотонов изображены как черные тела с номерами 1 и 2, они поглощают свет и тем самым регистрируют падающий на них поток световой энергии.

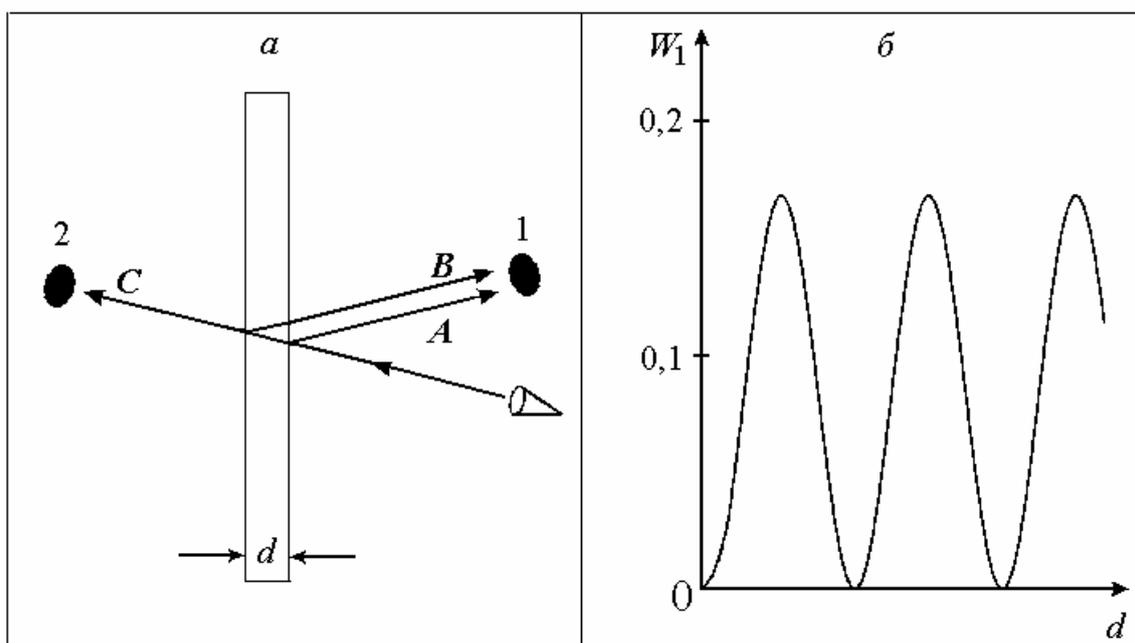


Рис. 1.1, *а* – отражение и прохождение фотонов при распространении пучка света сквозь стеклянную пластинку; *б* – примерный график вероятности отражения фотонов $W_1(d)$ как функции толщины пластинки d .

Интенсивный стационарный поток света, поступающего от достаточно яркого источника, непрерывно делится пластинкой на два пучка, одновременно регистрируемые фотоприёмниками 1 и 2. Так как

пластинка не поглощает свет, потоки энергии в отражённом пучке (J_1), прошедшем (J_2) и падающем на пластинку (J) должны быть связаны соотношением

$$J_1 + J_2 = J . \quad (1.10)$$

Теперь будем снижать яркость источника; для этого достаточно заслонить источник света слоем какого-либо поглощающего вещества и наращивать его толщину. Сначала станут более заметными флуктуации потоков световой энергии, а затем процесс регистрации света детекторами вообще утратит непрерывный характер.

В случае очень слабого источника, излучающего фотон за фотоном поодиночке, должны наблюдаться дискретные события – одиночные фотоотсчёты в одном или другом приёмнике, но не одновременно в обоих. Действительно, если соответствующая отдельному фотону порция энергии $\hbar\omega$ не делится на части с другими значениями частоты, то каждый фотон или полностью отражается, попадая при этом в детектор 1, или полностью проходит сквозь пластинку в детектор 2. Подчеркнем, что опыт не дает возможности вести непрерывное во времени наблюдение за перемещением фотона в пространстве, и мы при всем желании не можем видеть, как фотон «решает», пройти ли ему сквозь стекло или отразиться назад.

Подобная дискретность наблюдаемых событий, отсутствие возможности проследить за непрерывным развитием предполагаемого процесса движения частицы, является важнейшей чертой поведения всех квантовых объектов. Эти черты характерны для любых частиц, а не только для фотонов. В частности, явлению отражения света от границы раздела двух прозрачных сред, различающихся значением показателя преломления, в квантовой механике аналогичен так называемый эффект надбарьерного отражения электрона от потенциального барьера (см. раздел 3.2). Электрон, обладающий достаточным запасом кинетической энергии, с некоторой вероятностью может отразиться от границы областей с различающимися значениями электрического потенциала, тогда как по законам классической механики он должен непрерывно перемещаться из одной области в другую.

Последовательность, в которой реализуются различные события при проведении многократных испытаний, оказывается непредсказуемой. Поэтому результаты наблюдений приходится формулировать на языке статистики – *любое состояние квантового объекта характеризуется распределением вероятности событий*, ожидаемых при той или иной постановке опыта.

В рассматриваемом опыте с одиночными фотонами результатом многократных испытаний являются числа n_1 и n_2 фотонов, обнаруженных за достаточно большое время детекторами 1 и 2 соответственно. Акты излучения фотонов никаким прибором не подсчитываются, но, поскольку поглощение света на пути к детекторам отсутствует, число n интересующих нас фотонов, которые были испущены источником во время опыта, должно совпадать с суммой чисел n_1 и n_2 :

$$n_1 + n_2 = n. \quad (1.11)$$

Если n достаточно велико, то отношение $W_1 = n_1 / n$ служит найденной экспериментально оценкой для вероятности отражения фотона, а $W_2 = n_2 / n$ – для вероятности прохождения. Из (1.11) следует, что

$$W_1 + W_2 = 1. \quad (1.12)$$

Так же и в любом другом эксперименте полному набору N альтернативных событий сопоставляется распределение вероятности – совокупность значений $W_k = n_k / n$, где индекс k нумерует события в данном наборе, n_k – число реализаций k -го события, n – число испытаний ($n \gg 1$). Сумма всех N значений W_k равна единице.

Отметим, что рассматриваемый опыт со светом не служит примером «измерения физической величины», обсуждавшегося в разделе 1.1.3. Здесь прошедший и отраженный пучки света не приобретают в результате взаимодействия со стеклянной пластинкой сохраняющихся свойств – эти пучки снова будут расщепляться при прохождении через еще одну пластинку.

Выясним, как вероятность отражения фотона W_1 должна изменяться при увеличении толщины пластинки d . Считая, что отношение слагаемых в (1.10) и (1.11) имеет одну и ту же величину, получаем равенство $W_1 = J_1/J$. В свою очередь, отношение интенсивностей света J_1/J можно рассчитать с помощью классической волновой теории (основанной на уравнениях Максвелла), описывая стационарный пучок монохроматического света как электромагнитную волну с определённой амплитудой и фазой.

В пренебрежении многократным отражением света внутри пластинки результат волновой теории сводится к картине волн A , B и C , схематично показанных на рис. 1.1, *а*. Согласно классической волновой теории эти волны одновременно регистрируются фотоприёмниками 1 и 2, причем фотоприемник 1 реагирует на интенсивность суммы волн A и B . Амплитуды волн A и B , отражаемых двумя поверхностями пластинки, практически одинаковы, но их фазы различаются – разность фаз линейно зависит от толщины пластинки d . Следовательно, волны A и B с увеличением d могут стать противофазными и в сумме обратиться в нуль; с дальнейшим увеличением d эта ситуация будет периодически повторяться. Другими словами, вследствие интерференции волн A и B свет при некоторых значениях d не отражается от пластинки, а полностью проходит насквозь. В терминах фотонов состояние, при котором свет не отражается, соответствует значениям вероятности $W_1 = 0$ и $W_2 = 1$.

Таким образом, классическая картина интерференции волн помогает нам предвидеть, что как интенсивность J_1 , так и вероятность W_1 зависят от толщины пластинки немонотонно, периодически; характер этой зависимости поясняется графиком на рис. 1.1, *б*.

Этот факт не оставляет нам надежды составить наглядное (основанное на привычных понятиях классической физики) представление о фотоне. Действительно, фотон заведомо не является какой-либо волной. Если бы он был волной, то при распространении одиночного фотона отражённые волны A , B и прошедшая волна C возникали и регистрировались бы одновременно по обе стороны пластинки. Однако мы знаем, что на самом деле в каждом испытании фотон обнаруживается только одним из двух детекторов – квант энергии $\hbar\omega$ не делится на части,

и частота света в нашем опыте не изменяется. Классической материальной точкой фотон также быть не может. Встречая преграду (совокупность атомов, из которых состоит стеклянная пластинка), материальные точки рассеивались бы с тем большей вероятностью, чем толще пластинка. В действительности же для фотонов наблюдается немонотонная, интерференционная зависимость вероятности отражения $W_1(d)$, показанная на рис. 1.1, б. Вдумываясь еще и в тот факт, что при значениях толщины пластинки, отвечающих нулевой вероятности отражения, результат каждого отдельного испытания становится полностью *предсказуемым*, мы приходим к выводу, что природа квантовой вероятности в принципе не сводится к обычной «игре случая» в актах столкновения фотона с атомами вещества.

Разобранный пример ясно показывает, что при наличии интерференции обычное правило сложения вероятностей не действует: величина W_1 не есть сумма вероятностей отражения фотона отдельными атомами или, в упрощённом описании, – первой и второй поверхностями пластинки. Следовательно, исчисление вероятностей в квантовой теории должно содержать величины, подобные разностям фаз классических волн. В основу такого исчисления закладывается новое понятие, которого не знала классическая теория, – комплексная *амплитуда вероятности* [5,10]. Поясним роль амплитуды вероятности с помощью прежнего примера.

Введём в рассмотрение комплексные величины A и B :

$$A = |A| e^{i\alpha}, \quad B = |B| e^{i\beta}. \quad (1.13)$$

На рис. 1.2 для удобства читателя приведён необходимый минимум сведений о комплексных величинах.

Пусть α и β в (1.13) равны фазам соответствующих классических волн, а квадраты модулей $|A|^2$ и $|B|^2$ пропорциональны их интенсивностям; в нашем частном примере $|A|^2 = |B|^2$. Коэффициент пропорциональности можно нормировать так, чтобы эти квадраты модулей равнялись вероятностям отражения фотона первой и второй поверхностью пластинки соответственно. Введённые так комплексные величины A и B

называются амплитудами вероятности – в квантовой теории по определению *вероятность события равна квадрату модуля амплитуды вероятности, сопоставленной данному событию.*

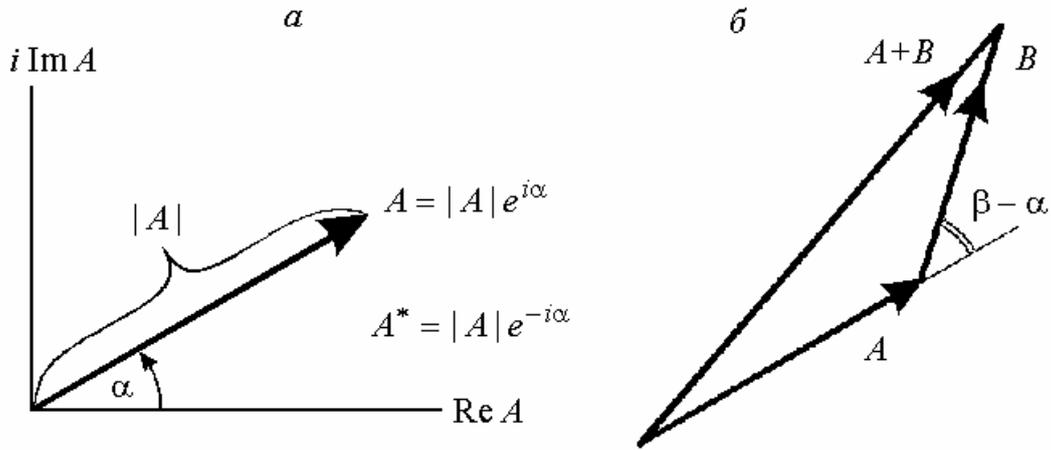


Рис. 1.2, *a* – представление комплексного числа A на плоскости с координатами $\text{Re } A$ (действительная часть A) и $\text{Im } A$ (мнимая часть A). Любое число A определяется своим *модулем* $|A|$ и *фазой* α ; *b* – величина $|A+B|$ зависит от разности фаз чисел A и B , а также от величины их модулей

Для измерения указанных вероятностей на практике следовало бы наблюдать отражение фотонов только одной поверхностью пластинки. Однако рассматриваемый опыт, как видно из показанной на рис. 1.1, *a* картины распространения света, не дает возможности узнать, каким из двух альтернативных путей отраженный фотон прибывает в детектор 1. Классическая картина интерференции волн нам подсказывает, что в квантовом описании этой ситуации амплитудой вероятности отражения должна служить сумма амплитуд вероятности $A+B$, зависящая от разности фаз $\alpha-\beta$. Тогда вероятность отражения, определяемая как квадрат модуля указанной амплитуды вероятности, есть

$$\begin{aligned}
 W_1 &= |A+B|^2 = A^*A + B^*B + A^*B + B^*A = \\
 &= |A|^2 + |B|^2 + 2|AB|\cos(\beta-\alpha).
 \end{aligned}
 \tag{1.14}$$

Здесь вклад $|A|^2 + |B|^2$ отвечает классической теореме сложения вероятностей, но наряду с ним присутствует и интерференционное слагаемое, содержащее $\cos(\beta - \alpha)$. Интерференционное слагаемое не является вероятностью (поскольку оно может быть отрицательным), так что в рамках классической теории вероятностей выражение (1.14) интерпретации не имеет. Однако оно делает свое дело – описывает периодическую зависимость вероятности W_1 от разности фаз $\alpha - \beta$ и, соответственно, от толщины пластинки d .

Таким образом, в квантовой теории волновые аспекты квантового поведения частиц учитываются следующим правилом сложения комплексных амплитуд: *амплитуда вероятности события, реализующегося несколькими неразличимыми путями, равна сумме амплитуд вероятности каждого из этих путей.*

Ещё одно правило мы выведем из того, что при распространении классической волны на расстояние r её фаза испытывает линейное по r приращение $2\pi r/\lambda$. Ввиду аналогии между классической волной и квантовой амплитудой вероятности такое же выражение может быть применимо для фаз α в фазовых множителях $e^{i\alpha}$ квантово-механических амплитуд. Если представить себе, что путь r преодолевается в два этапа ($r = r_1 + r_2$), то фаза α разбивается на два слагаемых, а фазовый множитель $e^{i\alpha}$ – на два сомножителя. Поэтому мы можем считать, что итог последовательно реализующихся событий описывается произведением амплитуд вероятности каждого из событий (что ведет к обычной теореме умножения вероятностей). Таким образом, *амплитуда вероятности события, реализующегося в несколько этапов, равна произведению амплитуд, отвечающих отдельным этапам.*

Принимая, что амплитуда вероятности является первичным, фундаментальным понятием квантовой теории, мы приходим к необходимости описания квантового поведения частиц с помощью волновой функции: волновая функция $\psi(\mathbf{r})$ – это амплитуда вероятности обнаружения частицы в окрестности точки \mathbf{r} . Распределение вероятности по всем точкам пространства определяется квадратом модуля волновой функции. В число аргументов волновой функции $\psi(\mathbf{r}, t)$ мы включаем также время, поскольку в общем случае распределение вероятности для

координат частицы может быть нестационарным, то есть «облако» вероятности $|\psi|^2$ с течением времени может перемещаться или изменять свою форму.

О наличии волновых аспектов в поведении частиц иногда говорят как о дуализме «волна-частица». Приступая к изучению квантовой теории, важно с самого начала осознать, что речь здесь не идет о слиянии классических понятий протяженной волны и маленькой частицы в единый (и с очевидностью противоречивый) образ. Волновой аспект дуализма волна-частица относится только к характеру зависимости волновой функции от ее аргументов; в реально наблюдаемых событиях, при поглощении детекторами частица всегда проявляет себя именно как частица, то есть как компактный объект, характеристики которого (масса, заряд, спин) не могут быть поделены одновременно между несколькими детекторами, разнесенными в пространстве. Придерживаясь общепринятой интерпретации формализма квантовой механики, мы не приписываем волновой функции смысла какого-то реально существующего в природе поля. Волновая функция ψ не измеряется в экспериментах, она лишь служит средством теоретического расчета распределений вероятности $|\psi|^2$.

Методы определения амплитуд вероятности в квантовой теории допускают различные формулировки. В качестве, может быть, самой убедительной иллюстрации фундаментальной роли представления об интерференции амплитуд вероятности кратко опишем формулировку, найденную в 1948 г. Р. Фейнманом, – метод квантования с помощью интеграла по траекториям [11]. Зададимся вопросом: если в момент времени t_1 частица с достоверностью находится в окрестности точки \mathbf{r}_1 , то чему равна амплитуда вероятности к моменту времени t_2 обнаружить частицу в окрестности точки \mathbf{r}_2 ? Фейнман показал, что ответ можно выразить через сумму (точнее – континуальный интеграл) амплитуд вероятности вида $e^{iS/\hbar}$ по всевозможным траекториям частицы $\mathbf{r}(t)$, соединяющим заданные точки $\mathbf{r}_1(t_1)$ и $\mathbf{r}_2(t_2)$, где S – действие, определяемое классической формулой (1.5). Можно сказать, что все

траектории по отдельности равновероятны, так как $|e^{iS/\hbar}|=1$. Заметим теперь, что на макроскопических расстояниях, когда для всех траекторий $S/\hbar \gg 1$, величина $e^{iS/\hbar} \equiv \cos(S/\hbar) + i \sin(S/\hbar)$ быстро осциллирует от траектории к траектории. Поэтому в сумме по траекториям вклады почти всех траекторий взаимно погашаются. Только на траекториях, близких к той, для которой действие S минимально (или, в общем случае, экстремально) величина $e^{iS/\hbar}$ в первом приближении не изменяется и, значит, именно этот узкий пучок траекторий дает основной вклад в рассматриваемую сумму по траекториям. Другими словами, на макроскопических масштабах основной вклад в амплитуду вероятности перехода частицы из одной точки в другую дает классическая траектория $\mathbf{r}_{кл}(t)$ и близкие к ней траектории, для которых значение действия отличается от экстремального мало в сравнении с \hbar . Таким образом, квантово-механическая картина интерференции амплитуд вероятности объясняет происхождение принципа наименьшего действия в классической механике и при этом выявляет приближенный характер представления о классической траектории.

1.3. ПРИНЦИП НЕОПРЕДЕЛЁННОСТИ

Статистическое описание состояний квантовых объектов вводится в теорию не потому, что у нас нет желания вдаваться в сложную картину запутанных траекторий микрочастиц, а потому что картина точных траекторий, как мы уже убедились, в принципе не может быть согласована с результатами экспериментов. В основу квантовой механики заложен принцип неопределенности, который гласит, что *частица не имеет определенной траектории $\mathbf{r}(t)$* .

Следствием этого принципа является тот факт, что в квантово-механических задачах утрачивают смысл обычные определения механических величин (скорости, ускорения и так далее), которые в классической механике связаны с функцией $\mathbf{r}(t)$ и ее производными по времени. Для описания физических величин в квантовой механике с

необходимостью должен быть применен совершенно иной математический аппарат. Обсудим в общих чертах схему его построения.

На макроскопических расстояниях предсказания квантовой механики должны согласовываться с классическими представлениями о движении частиц, поэтому методы введения механических величин в классической и квантовой теориях должны иметь некоторое сходство. Как известно, в классической механике для любой системы частиц понятие импульса вводится при рассмотрении параллельных переносов траекторий частиц, понятие момента импульса – при рассмотрении поворотов этих траекторий, а понятие энергии – при рассмотрении переносов траекторий во времени. Перечисленные преобразования характеризуют однородность и изотропию пространства, а также однородность времени; благодаря указанным свойствам симметрии пространства и времени в классической механике выполняются законы сохранения импульса, момента импульса и энергии [1]. Поскольку и в квантовой физике эти законы сохранения служат основой анализа любого наблюдаемого процесса, то в математическом аппарате квантовой механики следует применить аналогичный подход к построению механических величин.

Принцип неопределенности не позволяет иметь дело с траекторией частицы, но зато, изучая характеристики того или иного квантового состояния, можно применить указанные выше преобразования (переносы, повороты) к волновой функции $\psi(\mathbf{r}, t)$. Поясним это следующим образом. Сопоставим волновой функции картину «облака вероятности» $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ и предположим для удобства рассуждения, что данное облако создается некоторым классическим прибором – источником, который от испытания к испытанию приготавливает частицу в заданном квантовом состоянии, описываемом функцией $\psi(\mathbf{r}, t)$. Распределение вероятности координат (или еще какой-либо физической величины) измеряется другой классической частью прибора – системой соответствующих детекторов. Тогда действие параллельного переноса на волновую функцию можно рассматривать просто как результат параллельного переноса указанного источника относительно неподвижных детекторов; детекторы неподвижны относительно системы отсчета, с которой следует связывать измеряемые физические величины. Подобным же образом мы будем представлять себе

и остальные преобразования – при повороте волновая функция должна принять такой вид, что ей будет отвечать облако вероятности, порождаемое повернутым источником, а переносу во времени соответствует сдвиг начального момента времени в каждом из испытаний.

Отметим, что для корректности этого рассуждения существенна классичность источников и детекторов. Действительно, именно классические приборы имеют достаточно точно определённые траектории, так что представление об их перемещении друг относительно друга не требует особых разъяснений. Для системы, состоящей только из квантовых объектов, было бы невозможно ввести представление о какой-либо механике.

На практике нет необходимости вводить в математический аппарат квантовой механики явное описание источников и детекторов частиц, поскольку все необходимые преобразования волновой функции можно описывать так называемыми *операторами*. Как мы увидим в разделе 2.4, из операторов непрерывных преобразований выделяются более простые операторы – «генераторы» преобразований симметрии, которые не содержат параметров (таких как вектор параллельного переноса или угол поворота). Генераторы преобразований выступают в математическом аппарате квантовой механики под названием *операторов физических величин*; к ним относятся оператор импульса, оператор момента импульса, оператор энергии.

Математические свойства операторов таковы, что знание оператора физической величины f дает возможность вычислить спектр допустимых значений f_k этой величины, найти для любого состояния среднее значение $\langle f \rangle$, а также подсчитать неопределенность δf – меру квантового разброса результатов измерения f в данном состоянии. Понятие оператора оказывается настолько полезным, что некоторые операторы вводятся в квантовую теорию безотносительно к классическим преобразованиям симметрии пространства и времени; пример – операторы координат частицы. Важным свойством операторов является то, что в общем случае результат их действия может зависеть от последовательности, в которой эти операторы применяются к волновой функции; такие операторы называют некоммутирующими друг с другом, они соответствуют

не измеримым одновременно величинам f , g . Из некоммутативности операторов выводятся неравенства для неопределённостей δf и δg , показывающие, что неопределенности не измеримых одновременно величин не могут быть одновременно сколь угодно малы. Часто подобные неравенства для неопределенностей ведут к очень полезным оценкам, позволяющим составить представление о квантовых эффектах, не прибегая к сложным расчетам волновых функций. Приведем существенный пример.

Легко понять, что параллельный перенос «облака» вероятности вдоль оси x влияет на результат измерений координаты x – результаты измерений до и после переноса окажутся различными. В математическом аппарате квантовой механики этот факт влечет за собой некоммутативность операторов координаты x и проекции импульса p_x . То же верно для пар y , p_y и z , p_z . В разделе 2.6 мы увидим, что указанная некоммутативность операторов ведет к *соотношениям Гейзенберга* для минимальных значений неопределенностей координат и импульса частицы:

$$\delta p_x \delta x \sim \hbar, \quad \delta p_y \delta y \sim \hbar, \quad \delta p_z \delta z \sim \hbar. \quad (1.15)$$

В этих соотношениях, связывающих флуктуации координат и импульса, находит свое количественное выражение квантово-механический принцип неопределенности траектории.

Покажем, как соотношения неопределенностей (1.15) позволяют оценить размер облака вероятности, характеризующего состояние электрона в атоме с наименьшей энергией (то есть в основном состоянии атома – наиболее энергетически выгодном). В классической механике частица имеет наименьшую энергию, когда она покоится в точке \mathbf{r} , отвечающей минимуму потенциальной энергии $U(\mathbf{r})$; при этом импульс \mathbf{p} и кинетическая энергия $p^2/2m$ равны нулю. Однако для квантовой частицы, как видно из (1.15), состояние с точно определёнными \mathbf{p} и \mathbf{r} не существует. Если неопределенность координат частицы оценивается некоторой величиной a , то неопределённость импульса согласно (1.15) имеет порядок $p \sim \hbar/a$ и, значит, среднее значение кинетической энергии

частицы составляет величину порядка $\hbar^2/2ma^2$, возрастающую при уменьшении a . Следовательно, стремясь иметь минимальную энергию, частица не будет покоиться в одной точке. Облако вероятности расплывется по области некоторого размера $a \neq 0$, который можно оценить из условия минимума суммы кинетической и потенциальной энергии; последняя имеет порядок $U(a)$. Дифференцируя по a приближённое выражение для полной энергии $(\hbar^2/2ma^2 + U)$ и приравнивая производную нулю, получаем уравнение, позволяющее найти оценку для a :

$$-\hbar^2 / ma^3 + U'(a) = 0. \quad (1.16)$$

В частности, взяв для энергии электростатического притяжения электрона к ядру (протону) в атоме водорода оценку $U(a) = -e^2/a$, мы получим из (1.16) не что иное, как согласующееся с опытом выражение Бора (1.2) для атомного «радиуса»:

$$a = \frac{\hbar^2}{me^2}.$$

Таким образом, на вопрос о размерах атома, упоминавшийся в самом начале раздела 1, квантовая теория даёт следующий ответ. Электрон не падает к ядру потому, что подобное уменьшение неопределённости координат электрона оказалось бы энергетически невыгодным – оно вело бы к увеличению вклада в энергию \hbar^2/ma^2 и тем самым к росту, а не снижению полной энергии атома.

Для того чтобы в разнообразных задачах находить детальный вид электронного «облака», следует решать уравнение для волновой функции ψ , открытое Э. Шредингером. Это уравнение мы рассмотрим в разделе 2, вслед за систематическим построением математического аппарата квантовой механики.

2. МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Квантовая теория допускает различные формы математического представления. Так, в матричной формулировке квантовой механики, основы которой были заложены Гейзенбергом, состояния квантового объекта задаются числовыми последовательностями – векторами бесконечномерного линейного пространства, а операторы имеют вид матриц бесконечного порядка. В математическом аппарате квантовой механики, разработанном Шредингером, каждому состоянию квантового объекта сопоставлена волновая функция (вектор в пространстве функций); при этом операторы реализуются в форме операций дифференцирования и умножения на координатные переменные. В формализме Дирака состояния и операторы изображаются абстрактными символами с определенными алгебраическими свойствами.

В период создания квантовой механики возможность разных ее формулировок казалась удивительной, но затем была установлена их взаимная эквивалентность. Подходы, появившиеся позднее, такие как интеграл по траекториям Фейнмана [11] и алгебра символов измерения Швингера [12], по физическому содержанию оказались равноценными предшествующим представлениям квантовой механики. Во всех случаях математика выполняет функцию необходимого языка квантовой физики.

Целью этого раздела является краткое описание основных соотношений между квантово-механическими величинами вместе с их физической интерпретацией. Вычислительные возможности теории иллюстрируются в следующих разделах. Наше изложение ориентировано на читателя, еще не изучившего курс математической физики и не владеющего, например, таким важным понятием, как полная ортонормированная система функций. На начальном этапе предполагается только знание линейной алгебры. Стремясь к изложению, не связанному с анализом сходимости бесконечных рядов, мы описываем структуру квантовой теории при упрощающем предположении, что для любой физической величины измерение может дать лишь конечное число

значений N . В разделе 2.5 результаты такого рассмотрения мы обобщим (без доказательств) на случай бесконечного N .

2.1. АМПЛИТУДЫ ВЕРОЯТНОСТИ

Приступим к математическому описанию схемы измерения физической величины, обсуждавшейся в разделе 1.1.3. Формулируя общие понятия, мы не будем конкретизировать природу рассматриваемого квантового объекта (это может быть частица или система частиц) и предположим только, что в любом опыте, связанном с измерением физических величин, рассматриваемый объект характеризуется конечным числом событий N .

Пусть индекс k , принимающий значения $k = 1, \dots, N$, нумерует альтернативные события в полном их наборе, соответствующем постановке опыта по измерению физической величины f . Чтобы хотя бы немного возместить отсутствие наглядности, неизбежное при построении формализма квантовой теории, на рис. 2.1, *a* изображена условная схема опыта; чёрными кружками показаны «детекторы» событий, а «источник» символизирует набор исходных параметров, влияющих на вероятности событий W_k .

Основное утверждение состоит в том, что событиям можно сопоставить комплексные величины A_k , называемые *амплитудами вероятности*,

$$A_k = |A_k| \exp(i\alpha_k) \quad , \quad (2.1)$$

причём, по определению, вероятность W_k события k равна квадрату модуля амплитуды вероятности A_k :

$$W_k = |A_k|^2 \quad . \quad (2.2)$$

С течением времени t распределение вероятностей (2.2) может изменяться, так что амплитуды вероятности в общем случае являются функциями времени. Однако мы будем пока полагать, что все

рассматриваемые амплитуды вероятности относятся к заданному моменту времени, например, $t = 0$; к вопросу о временной зависимости квантовомеханических величин мы обратимся в разделе 2.7.

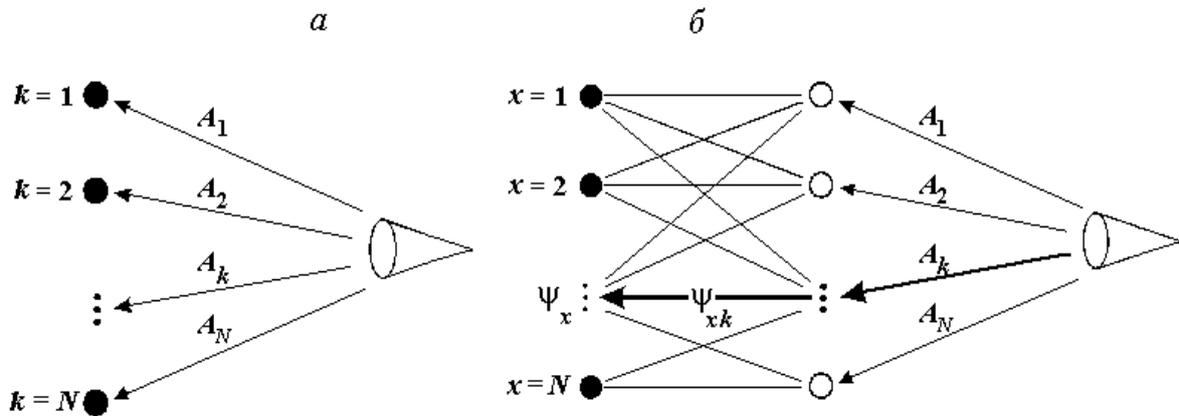


Рис. 2.1, *a* – схематическое изображение набора N альтернативных событий, пронумерованных индексом k . Событиям сопоставляются амплитуды вероятности A_k . *б* – схема возможных связей между двумя наборами событий. Связям сопоставляются амплитуды вероятности Ψ_{xk} . Событиям x соответствуют амплитуды Ψ_x , событиям k сопоставлены те же амплитуды A_k , что и на рис. 2.1, *a*

Математический аппарат необходимо построить так, чтобы он отражал все существенные аспекты квантового поведения микрочастиц. В частности, чтобы учесть возможность контролируемого изменения распределения вероятности W_k при изменении условий опыта, надо рассматривать амплитуды вероятности (2.1) как произвольные переменные величины; в общем случае они подчиняются лишь условию нормировки

$$\sum_k |A_k|^2 = 1, \quad (2.3)$$

которое означает, что сумма вероятностей всех N событий равна единице.

Представим себе, что мы перешли к измерениям другой физической величины. Новому процессу измерения отвечает и новый полный набор событий: теперь детекторы реагируют на значения некоторой физической

величины, скажем g , отличающейся по своему смыслу от величины f . Пронумеруем эти события индексом $x=1, \dots, N$. На протяжении всего раздела 2 мы условимся отличать разные наборы событий с помощью различных буквенных индексов (в литературе такое соглашение не является общепринятым). При необходимости отметить разные значения индекса, относящиеся к одному набору, будем применять индекс со штрихами.

Взаимосвязь двух наборов событий, соответствующих разным постановкам опыта, пояснена схемой на рис. 2.1, б. События с индексом k (говоря кратко, k -события) показаны на этой схеме светлыми кружками; при регистрации x -событий они уже не детектируются, а выступают в роли воображаемых промежуточных этапов на пути к тому или иному событию x . Другими словами, предполагается, что квантовый объект способен приобретать физические признаки состояния, которое в прежнем опыте вело бы к событию k , и при этом он обнаруживается одним из детекторов, избирательно реагирующих на другие физические свойства – соответствующие x -событиям. Вот один из примеров: индекс k может нумеровать различные значения \mathbf{p} в опыте по измерению импульса частицы, а индекс x – значения \mathbf{r} при измерении координат.

Мы будем далее считать, что в обеих постановках опыта соблюдаются одни и те же начальные условия, так что измеряемые распределения вероятности W_k и W_x характеризуют одно и то же состояние квантового объекта. В таком случае между амплитудами вероятности k -событий и x -событий существует определенная связь, и ее надо выразить в явной математической форме. С этой целью введем в рассмотрение совокупность амплитуд с двумя индексами: пусть ψ_{xk} означает *амплитуду вероятности события x при условии, что на промежуточном этапе реализовалось состояние, отвечающее событию k* . Соответствующая условная вероятность, определяемая аналогично (2.2), есть $W_{xk} = |\psi_{xk}|^2$. Поскольку сумма вероятностей всех N событий x должна быть равна единице, амплитуды ψ_{xk} при любом k подчинены условию нормировки:

$$\sum_x |\psi_{xk}|^2 = 1. \quad (2.4)$$

К любому событию x на рис. 2.1, б ведут N путей, каждый из которых разбивается на два этапа в соответствующей «точке» k . Исходя из правил, сформулированных в разделе 1.2, разумно предположить, что один такой путь описывается произведением амплитуд вероятности, отвечающих этапам: $\psi_{xk} A_k$. При этом полная амплитуда вероятности ψ_x события x должна быть равна сумме амплитуд каждого из путей. Таким образом, связь между амплитудами вероятности ψ_x и A_k , характеризующими два разных опыта с квантовым объектом в одном и том же заданном состоянии, имеет вид линейного соотношения:

$$\psi_x = \sum_k \psi_{xk} A_k. \quad (2.5)$$

Отметим, что рис. 2.1 и правила из раздела 1.2 здесь играют роль наводящих соображений, они поясняют, но не доказывают формулу (2.5). Правила работы с амплитудами вероятности не выводятся из ранее известных законов физики; в их справедливости можно убедиться только после тщательного сравнения всех следствий теории с экспериментом.

Рассмотрим связь между распределениями вероятностей x -событий и k -событий. Вероятность события x есть $W_x = |\psi_x|^2$. Выпишем выражение для W_x , подставив в формулу $|\psi_x|^2 = \psi_x^* \psi_x$ правую часть равенства (2.5); при этом в одной из сумм индекс k следует снабдить штрихом:

$$W_x = \left(\sum_{k'} \psi_{xk'}^* A_{k'}^* \right) \left(\sum_k \psi_{xk} A_k \right) = \sum_{k'} \sum_k \psi_{xk'}^* \psi_{xk} A_{k'}^* A_k.$$

Чтобы пояснить структуру получившегося выражения, выделим члены с $k' = k$:

$$W_x = \sum_k |\psi_{xk}|^2 |A_k|^2 + \sum_{k' \neq k} \psi_{xk'}^* \psi_{xk} A_{k'}^* A_k.$$

Эти члены, образующие однократную сумму, можно представить в форме $\sum_k W_{xk} W_k$, отвечающей правилам умножения и сложения вероятностей в классической теории; например, такой вид имела бы вероятность W_x для классической частицы в «бильярде» со схемой, подобной рис. 2.1, б. Двойная же сумма, присутствующая в рассматриваемом выражении наравне с однократной суммой, содержит квантово-механические интерференционные члены и не имеет классической интерпретации.

Покажем теперь, что для непротиворечивости квантово-механического исчисления вероятностей, основанного на соотношении (2.5), величины ψ_{xk} должны удовлетворять специальным требованиям. Подставляя в соотношение нормировки вероятностей x -событий

$$\sum_x |\psi_x|^2 = \sum_x W_x = 1$$

указанное выше выражение для W_x и меняя порядок суммирования по k и x , получаем следующее равенство

$$\sum_k \sum_x |\psi_{xk}|^2 |A_k|^2 + \sum_{k' \neq k} \sum_x \left(\sum_x \psi_{xk'}^* \psi_{xk} \right) A_{k'}^* A_k = 1.$$

Здесь первое слагаемое, имеющее вид двойной суммы, равно единице в силу соотношений нормировки (2.4) и (2.3). Следовательно, второе слагаемое (тройная сумма) обязано обратиться в нуль, причём – при произвольных A_k . Для этого достаточно потребовать обращения в нуль при $k' \neq k$ выражения, которое в рассматриваемом равенстве заключено в скобки. Вместе с (2.4) данное требование записывается в виде

$$\sum_x \psi_{xk'}^* \psi_{xk} = \delta_{k'k}. \quad (2.6)$$

В этой записи мы воспользовались общепринятым обозначением (символом Кронекера):

$$\delta_{k'k} = \begin{cases} 0 & \text{при } k' \neq k, \\ 1 & \text{при } k' = k. \end{cases}$$

Если рассматривать совокупность величин ψ_{xk} как квадратную матрицу \hat{U} с элементами $U_{xk} = \psi_{xk}$ и ввести в рассмотрение транспонированную и комплексно сопряжённую матрицу \hat{U}^+ , образованную элементами $(\hat{U}^+)_{kx} = \psi_{xk}^*$, то условие (2.6) можно записать в форме матричного равенства

$$\hat{U}^+ \hat{U} = \hat{1},$$

где $\hat{1}$ – единичная матрица (её элементы равны $\delta_{k'k}$). Если это равенство выполняется, то матрица \hat{U} с очевидностью имеет обратную матрицу: $\hat{U}^{-1} = \hat{U}^+$. Тогда обратной матрицей для \hat{U}^+ является \hat{U} , и поэтому выполняется также равенство

$$\hat{U} \hat{U}^+ = \hat{1},$$

которое в подробной записи имеет вид

$$\sum_k \psi_{x'k} \psi_{xk}^* = \delta_{x'x}. \quad (2.7)$$

Матрица \hat{U} , характеризующаяся свойством $\hat{U}^{-1} = \hat{U}^+$, называется унитарной. Требования (2.6) и (2.7) можно назвать условиями унитарности матрицы $U_{xk} \equiv \psi_{xk}$.

Элементы ψ_{xk} матрицы \hat{U} в линейных соотношениях (2.5) служат коэффициентами, которые связывают амплитуды вероятности ψ_x с A_k .

Значит, из равенства $\hat{U}^{-1} = \hat{U}^+$ следует существование обратных соотношений, позволяющих выразить A_k через ψ_x :

$$A_k = \sum_x \psi_{xk}^* \psi_x. \quad (2.8)$$

Итак, мы видим, что совокупности амплитуд A_k и ψ_x равноправно описывают заданное состояние квантового объекта. Зная величины ψ_{xk} , можно переходить от одного описания к другому с помощью линейных соотношений (2.5) или (2.8). При этом требуется, чтобы величины ψ_{xk} удовлетворяли условиям (2.6)–(2.7).

2.2. ВЕКТОРЫ СОСТОЯНИЙ

Для дальнейшего формулирования общих положений квантовой теории целесообразно перейти к записи совокупностей амплитуд вероятности в форме так называемых векторов состояний и воспользоваться очень удобной системой символов, разработанной Дираком [10].

Согласно (2.2) для вычисления вероятностей W_k , характеризующих заданное состояние квантового объекта, достаточно знать амплитуды вероятности A_k . Поэтому совокупность амплитуд вероятности

$$(A_1, A_2, \dots, A_N) = |\psi\rangle \quad (2.9)$$

называют *вектором состояния*; этот N -компонентный математический объект здесь обозначен как $|\psi\rangle$.

Для экономии места мы записали компоненты A_k вектора $|\psi\rangle$ в виде строки, но лучше представлять их сгруппированными в столбец. Обозначение вектора состояния состоит из скобок $|\dots\rangle$, в которые помещается «имя» вектора – буква, цифра или любые подходящие по смыслу символы.

2.2.1. Базисные векторы состояний

Различным условиям опыта соответствуют разные распределения вероятности W_k и, следовательно, различные векторы состояний квантового объекта. Векторы специального вида

$$(1,0,\dots,0)=|1\rangle, \quad (0,1,0,\dots,0)=|2\rangle, \quad \dots, \quad (0,\dots,0,1)=|N\rangle$$

называются *базисными*. Мы обозначили каждый базисный вектор символом $|k\rangle$, где k – индекс, нумерующий события в полном наборе событий, возможных в рассматриваемой постановке опыта: $k=1,\dots,N$.

Таким образом, по определению, базисное состояние $|k\rangle$ есть такое состояние, в котором k -ое событие из k -набора становится достоверным (его вероятность равна единице), а остальные события из этого набора не реализуются.

2.2.2. Принцип суперпозиции

Если принять, что к векторам состояний применимы известные из курса линейной алгебры операции умножения вектора на число и сложения векторов, то произвольный вектор состояния (2.9) запишется в виде линейной комбинации N базисных векторов $|k\rangle$ с коэффициентами A_k :

$$|\psi\rangle = \sum_k A_k |k\rangle. \quad (2.10)$$

Такое равенство называется разложением вектора $|\psi\rangle$ по базису $|k\rangle$; о сумме в правой стороне равенства (2.10) говорят как о линейной *суперпозиции* векторов состояния $|k\rangle$ с коэффициентами A_k .

Равенство (2.10) служит выражением квантово-механического *принципа суперпозиции*, смысл которого можно пояснить так: если квантовый объект способен находиться в состояниях $|k\rangle$, характеризующихся достоверностью событий k , то допустимы также

всевозможные состояния вида (2.10), в которых k -события реализуются с вероятностями $|A_k|^2$.

С точки зрения математики множество векторов (2.10) с произвольными коэффициентами A_k образует N -мерное комплексное линейное пространство. В квантовой теории оно называется пространством состояний рассматриваемого квантового объекта.

2.2.3. Скалярное произведение векторов состояний

По аналогии со скалярным произведением пары векторов в обычной векторной алгебре введем в рассмотрение скалярное произведение для любых векторов состояния $|\psi\rangle$ и $|\phi\rangle$. Скалярное произведение обозначается символом $\langle\phi|\psi\rangle$ и представляет собой некоторое комплексное число. Свойства скалярного произведения следовало бы задать с помощью некоторых аксиом, однако для краткости мы просто опишем рецепт вычисления $\langle\phi|\psi\rangle$; из него будут видны и алгебраические свойства скалярного произведения векторов состояния.

Пусть вектор $|\psi\rangle$ задается компонентами A_k , а вектор $|\phi\rangle$ – компонентами B_k :

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_k A_k |k\rangle, \\ |\phi\rangle &= \sum_k B_k |k\rangle. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Напишем выражение для первого сомножителя в $\langle\phi|\psi\rangle$ так, что оно будет содержать комплексно сопряжённые компоненты вектора $|\phi\rangle$:

$$\langle\phi| = \sum_{k'} B_{k'}^* \langle k'|.$$

И теперь перемножим эту сумму со всеми членами разложения (2.10), представляя результат в виде суммы символов $\langle k'|k\rangle$ с коэффициентами $B_{k'}^* A_k$:

$$\langle \phi | \psi \rangle = \sum_{k'} \sum_k B_{k'}^* A_k \langle k' | k \rangle.$$

Видно, что эта формула позволит вычислять $\langle \phi | \psi \rangle$ для любых векторов $|\phi\rangle$ и $|\psi\rangle$, если мы дадим определение скалярному произведению $\langle k' | k \rangle$ базисных векторов.

Положим, что по определению $\langle k' | k \rangle$ есть амплитуда вероятности события k' в состоянии $|k\rangle$. Поскольку в состоянии $|k\rangle$ отлична от нуля (и равна единице) только амплитуда с номером $k' = k$, имеем:

$$\langle k' | k \rangle = \delta_{k'k}. \quad (2.12)$$

Поэтому окончательное правило для вычисления скалярного произведения вектора $|\psi\rangle$ на вектор $|\phi\rangle$ принимает вид

$$\langle \phi | \psi \rangle = \sum_k B_k^* A_k = B_1^* A_1 + B_2^* A_2 + \dots + B_N^* A_N. \quad (2.13)$$

Из формулы (2.13) видно, в частности, что величина $\langle \psi | \phi \rangle$ комплексно сопряжена величине $\langle \phi | \psi \rangle$:

$$\langle \psi | \phi \rangle = \langle \phi | \psi \rangle^*. \quad (2.14)$$

Видно также, что скалярное произведение $\langle \phi | \psi \rangle$ обладает свойством линейности по отношению к правому сомножителю:

$$\langle \phi | \psi \rangle = c_1 \langle \phi | \psi_1 \rangle + c_2 \langle \phi | \psi_2 \rangle, \text{ если } |\psi\rangle = c_1 |\psi_1\rangle + c_2 |\psi_2\rangle.$$

Но по отношению к левому сомножителю аналогичное равенство имеет другой вид — оно включает комплексное сопряжение числовых коэффициентов, входящих в левый сомножитель:

$$\langle \phi | \psi \rangle = c_1^* \langle \phi_1 | \psi \rangle + c_2^* \langle \phi_2 | \psi \rangle, \text{ если } |\phi\rangle = c_1 |\phi_1\rangle + c_2 |\phi_2\rangle.$$

Если $\langle \psi | \phi \rangle = 0$, то векторы $|\psi\rangle$ и $|\phi\rangle$ называются *взаимно ортогональными*. Скалярное произведение $\langle \psi | \psi \rangle$ вектора самого на себя есть неотрицательное число; оно называется квадратом нормы этого вектора. Если $\langle \psi | \psi \rangle = 1$, то говорят, что вектор $|\psi\rangle$ *нормирован*.

Как видно из (2.12), базисные векторы $|k\rangle$ нормированы и взаимно ортогональны; такой базис называют *ортонормированным*.

Покажем, что каждая амплитуда вероятности может быть «извлечена» из вектора состояния с помощью скалярного произведения вектора состояния на соответствующий базисный вектор. Скалярно умножим на $|k'\rangle$ левую и правую стороны равенства (2.10). Учитывая условия ортонормировки (2.12) базиса $|k\rangle$, получим

$$\langle k' | \psi \rangle = \sum_k A_k \langle k' | k \rangle = \sum_k A_k \delta_{k'k} = A_{k'}.$$

Отсюда видно, что разложение вектора состояния $|\psi\rangle$ по базису $|k\rangle$ можно записывать в виде

$$|\psi\rangle = \sum_k |k\rangle \langle k | \psi \rangle, \quad (2.15)$$

причем скалярное произведение

$$\langle k | \psi \rangle = A_k \quad (2.16)$$

представляет собой амплитуду вероятности события k в состоянии $|\psi\rangle$.

Принято также называть $\langle k | \psi \rangle$ амплитудой вероятности обнаружения состояния $|k\rangle$ у системы, находящейся в состоянии $|\psi\rangle$. Дело в том, что в процессах измерения, к которым относится данный формализм, на базисное состояние $|k\rangle$ реагирует только детектор с

номером k , то есть его сигнал в любом случае можно воспринимать как результат обнаружения состояния $|k\rangle$.

2.2.4. Переход к другому базису

Совокупность амплитуд вероятности A_k определяет вектор состояния $|\psi\rangle$ по отношению к k -событиям, наблюдаемым при измерении некоторой физической величины f (рис. 2.1, а). Если при тех же начальных условиях опыта интересоваться результатами измерения другой физической величины (рис. 2.1, б), то состояние квантового объекта будет описываться совокупностью амплитуд вероятности ψ_x для нового набора событий (x -набор), но амплитуды ψ_x и амплитуды A_k окажутся связанными друг с другом соотношениями (2.5). Поэтому можно сказать, что оба набора амплитуд вероятности определяют один и тот же вектор состояния $|\psi\rangle$. Оба описания вектора состояния, как отмечалось в разделе 2.1, равноправны, и мы могли бы с самого начала ввести понятие векторов состояния по отношению к x -событиям или по отношению к ещё каким-либо полным наборам событий, возможным для рассматриваемого квантового объекта.

Набору x -событий соответствует новый базис – N базисных векторов, обозначаемых как $|x\rangle$. По определению, $|x\rangle$ есть состояние, в котором событие с номером x из данного набора является достоверным (его амплитуда вероятности равна единице), а остальные события из этого набора не реализуются – их амплитуды вероятности в состоянии $|x\rangle$ равны нулю. Согласно уже сформировавшемуся у нас правилу прочтения символов скалярных произведений, $\langle x'|x\rangle$ есть амплитуда вероятности события x' в состоянии $|x\rangle$, так что:

$$\langle x'|x\rangle = \delta_{x'x}, \quad x', x = 1, \dots, N. \quad (2.17)$$

Эти равенства означают, что базис $|x\rangle$ ортонормирован.

Подобным же образом ортонормированный базис сопоставляется и любому другому набору альтернативных событий. Базисы не обладающие свойством ортонормированности нам не встретятся.

Разложение произвольного вектора состояния $|\psi\rangle$ по базису $|x\rangle$ записывается аналогично (2.10)

$$|\psi\rangle = \sum_x \psi_x |x\rangle, \quad (2.18)$$

или аналогично (2.15)

$$|\psi\rangle = \sum_x |x\rangle \langle x|\psi\rangle, \quad (2.19)$$

где скалярное произведение

$$\langle x|\psi\rangle = \psi_x \quad (2.20)$$

представляет собой амплитуду вероятности события x в состоянии $|\psi\rangle$.

Возможность перехода от одного базиса к другому выражается равенством

$$|\psi\rangle = \sum_k A_k |k\rangle = \sum_x \psi_x |x\rangle.$$

Скалярное произведение $\langle x|k\rangle$, как видно из его обозначения, есть амплитуда вероятности события x в состоянии $|k\rangle$. Эта величина по смыслу тождественна амплитуде ψ_{xk} , введённой в разделе 2.1:

$$\langle x|k\rangle = \psi_{xk}. \quad (2.21)$$

В силу соотношения (2.14) комплексно сопряжённая величина является амплитудой вероятности события k в состоянии $|x\rangle$:

$$\langle k|x\rangle = \langle x|k\rangle^* = \psi_{xk}^*. \quad (2.22)$$

Покажем теперь, что соотношения (2.5) – (2.8), постулированные для

амплитуд вероятности в разделе 2.1, при использовании формализма векторов состояний оказываются учтёнными автоматически (с этим и связаны преимущества такого формализма).

Скалярно умножив левую и правую стороны равенства (2.15) на $|x\rangle$, получим:

$$\langle x|\psi\rangle = \sum_k \langle x|k\rangle \langle k|\psi\rangle. \quad (2.23)$$

Перейдя к буквенным обозначениям амплитуд вероятности (2.20), (2.21) и (2.16), убеждаемся, что соотношение (2.23) совпадает с (2.5). Аналогично, умножив скалярно (2.19) на $|k\rangle$, получим равенство

$$\langle k|\psi\rangle = \sum_x \langle k|x\rangle \langle x|\psi\rangle, \quad (2.24)$$

которое с учётом обозначений (2.16), (2.22) и (2.20) совпадает с (2.8). При выборе $|\psi\rangle = |k'\rangle$ формула (2.24) в силу (2.12) принимает вид соотношений унитарности (2.6), которыми характеризуется совокупность величин $\langle x|k\rangle$. Выбирая же $|\psi\rangle = |x'\rangle$, получаем из (2.23) с учётом (2.17) соотношение унитарности в форме (2.7).

Таким образом, квантово-механическое исчисление вероятностей, основанное на концепции комплексных амплитуд, находит свое выражение в математическом понятии линейного пространства комплексных векторов состояния. В таком пространстве определено скалярное произведение векторов состояния, позволяющее пользоваться разложениями векторов состояния по полному ортонормированному базису и переходами от одного ортонормированного базиса к другому. В математической литературе векторное пространство с подобными свойствами называется пространством Гильберта.

2.2.5. Нормировка векторов состояния

Если в формуле скалярного произведения (2.13) выразить k -компоненты векторов A_k и B_k через x -компоненты ψ_x и ϕ_x по правилу

(2.8) и учесть соотношение унитарности (2.7), то можно убедиться, что *величина скалярного произведения не зависит от выбора базиса*:

$$\langle \phi | \psi \rangle = \sum_k B_k^* A_k = \sum_x \phi_x^* \psi_x.$$

Это верно, в частности, для квадрата нормы произвольного вектора:

$$\langle \psi | \psi \rangle = \sum_k |A_k|^2 = \sum_x |\psi_x|^2. \quad (2.25)$$

Следовательно, если компоненты вектора состояния в некотором базисе были подчинены условию нормировки (2.3), то такой вектор остается нормированным и после перехода к любому другому базису:

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1. \quad (2.26)$$

По ходу вычислений – при сложении векторов или действии операторов – могут появляться ненормированные векторы, и тогда, по мере необходимости, их подвергают процедуре нормировки. Нельзя нормировать только *нулевой вектор*: $|\psi\rangle - |\psi\rangle = 0$; у него в любом базисе все компоненты равны нулю, поэтому равен нулю и квадрат нормы. Нулевой вектор не описывает физических состояний, так как ему соответствуют равные нулю вероятности всех событий. Любой вектор $|\psi\rangle$, отличный от нулевого, имеет положительный квадрат нормы (2.25) и может быть нормирован посредством умножения на число $1/\sqrt{\langle \psi | \psi \rangle}$, называемое нормировочным множителем.

2.2.6. Калибровочные преобразования

Нормировочные множители определены с точностью до произвольного фазового множителя $\exp(i\gamma)$, поскольку фаза амплитуд вероятности не существенна в формуле для вероятности (2.2). В частности,

всегда имеется произвол в выборе фазы базисных векторов. Например, перейдём от базиса $|x\rangle$ к новому ортонормированному базису $|\tilde{x}\rangle$ следующим образом:

$$|x\rangle = e^{i\gamma_x} |\tilde{x}\rangle,$$

где γ_x – произвольные действительные числа. Тогда разложение (2.18) какого-либо вектора состояния $|\psi\rangle$ по x -базису примет вид

$$\sum_x \psi_x |x\rangle = \sum_x \tilde{\psi}_x |\tilde{x}\rangle,$$

где

$$\tilde{\psi}_x = e^{i\gamma_x} \psi_x. \quad (2.27)$$

Переход от ψ_x к новым амплитудам $\tilde{\psi}_x$ по формуле (2.27) иногда называют *калибровочным преобразованием*. Важно, что новым амплитудам соответствует прежнее распределение вероятностей

$$W_x = |\psi_x|^2 = |\tilde{\psi}_x|^2,$$

то есть калибровочные преобразования не связаны с переходом к другой постановке опыта, а отражают допустимый произвол в математическом описании одной и той же физической ситуации.

2.3. ЛИНЕЙНЫЕ ОПЕРАТОРЫ

Преобразование векторов по определённому закону описывается с помощью понятия *оператор*. Обычно операторы обозначаются буквами со шляпкой. Запись

$$|\phi\rangle = \hat{L} |\psi\rangle \quad (2.28)$$

читается так: вектор $|\phi\rangle$ есть результат действия оператора \hat{L} на вектор

$|\psi\rangle$.

Мы будем иметь дело только с линейными операторами. По определению, действие линейного оператора на любую суперпозицию векторов состояния сводится к его действию на каждое векторное слагаемое, причём коэффициенты суперпозиции можно выносить за знак линейного оператора:

$$\hat{L}\left(\sum_k A_k |k\rangle\right) = \sum_k A_k \hat{L}|k\rangle. \quad (2.29)$$

2.3.1. Правила алгебры операторов

Перечислим ряд определений, показывающих, что с символами операторов можно обращаться почти как с обычными алгебраическими величинами; надо лишь следить за порядком операторных сомножителей и удерживать символ оператора слева от символа вектора, как в (2.28).

Равенство каких-либо операторов, $\hat{L} = \hat{M}$, означает, что для *любого* вектора $|\psi\rangle$ из рассматриваемого пространства состояний справедливо соотношение

$$\hat{L}|\psi\rangle = \hat{M}|\psi\rangle. \quad (2.30)$$

В приведённых ниже определениях также считается, что в роли $|\psi\rangle$ может выступать любой вектор из заданного пространства состояний.

Произведение операторов $\hat{K}\hat{L}$ есть оператор, действующий следующим образом:

$$\hat{K}\hat{L}|\psi\rangle = \hat{K}(\hat{L}|\psi\rangle). \quad (2.31)$$

В общем случае произведение операторов не коммутативно: $\hat{K}\hat{L} \neq \hat{L}\hat{K}$. Если же равенство $\hat{K}\hat{L} = \hat{L}\hat{K}$ выполняется, то говорят, что операторы \hat{K} и \hat{L} коммутативны друг с другом (взаимно коммутирующие операторы).

Сумма операторов $\hat{K} + \hat{L}$ есть оператор, действующий по формуле

$$(\hat{K} + \hat{L})|\psi\rangle = \hat{K}|\psi\rangle + \hat{L}|\psi\rangle. \quad (2.32)$$

Обратный оператор \hat{L}^{-1} (существующий, однако, не для каждого \hat{L}) по определению удовлетворяет равенству

$$\hat{L}^{-1}\hat{L} = \hat{1}, \quad (2.33)$$

где $\hat{1}$ – *единичный оператор*, называемый также оператором тождественного преобразования. Действие оператора $\hat{1}$ на любой вектор $|\psi\rangle$ эквивалентно умножению $|\psi\rangle$ на число 1, поэтому единичный оператор можно обозначать просто как 1, без шляпки:

$$\hat{1}|\psi\rangle = 1|\psi\rangle = |\psi\rangle. \quad (2.34)$$

Попросту говоря, под действием единичного оператора векторы не изменяются.

Операторная функция $F(\hat{L})$ представляется своим степенным рядом. Существенный для дальнейшего пример – экспоненциальная функция с операторным аргументом:

$$e^{\hat{L}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \hat{L}^n = 1 + \hat{L} + \frac{1}{2!} \hat{L}^2 + \frac{1}{3!} \hat{L}^3 + \dots, \quad (2.35)$$

где \hat{L}^n означает n -кратное произведение $\hat{L}\hat{L}\dots\hat{L}$. Читатель легко проверит в качестве упражнения, что при $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$ экспонента утрачивает свое характерное свойство мультипликативности:

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} \neq e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}.$$

Каждому из базисных векторов $|k\rangle$ можно сопоставить *оператор проецирования*, обозначаемый символом $|k\rangle\langle k|$. Расположив такой символ

слева от символа вектора $|\psi\rangle$ и убрав одну черту, что отвечает взятию скалярного произведения $\langle k|\psi\rangle$, имеем результат действия оператора проецирования $|k\rangle\langle k|$ на вектор $|\psi\rangle$:

$$|k\rangle\langle k|\psi\rangle.$$

Это выражение представляет собой проекцию вектора $|\psi\rangle$ на орт $|k\rangle$, то есть – одно из векторных слагаемых в разложении (2.15) вектора $|\psi\rangle$ по базису $|k\rangle$.

Очевидно, что сумма всех таких проекций (сумма по всем N значениям индекса k) должна совпасть с самим вектором $|\psi\rangle$:

$$\sum_k |k\rangle\langle k|\psi\rangle = |\psi\rangle.$$

Поскольку такое равенство будет верным для любого вектора в заданном пространстве состояний, его можно представить в форме операторного равенства. Действительно, «сократив» в левой и правой стороне символ $|\psi\rangle$, находим, что полная сумма операторов проецирования равна единичному оператору:

$$\sum_k |k\rangle\langle k| = \hat{1}. \quad (2.36)$$

Это справедливо, конечно, для операторов проецирования, связанных с любым полным ортонормированным базисом в заданном N -мерном пространстве состояний; так, для x -базиса имеем:

$$\sum_x |x\rangle\langle x| = \hat{1}. \quad (2.37)$$

Такое равенство называют условием полноты системы базисных векторов; оно нарушится, если исключить хотя бы один базисный вектор (но при

этом оно останется справедливым в подпространстве меньшей размерности, порождённом оставшимися ортами).

Соотношения типа (2.36)–(2.37) позволяют достичь автоматизма в ходе формальных вычислений, поскольку единичные операторы, представленные в виде полных сумм проекционных операторов, можно, не нарушая никакого равенства, помещать перед символом любого вектора (или изымать такие суммы). Например, действуя на правую часть тождества $|\psi\rangle = |\psi\rangle$ единичным оператором (2.36), немедленно приходим к разложению (2.15). Формула (2.19) аналогично получается с помощью (2.37). Помещая единичный оператор перед символом $|\psi\rangle$ в $\langle\psi|\psi\rangle$ либо в форме (2.36), либо в форме (2.37), имеем равенство

$$\langle\psi|\psi\rangle = \sum_k \langle\psi|k\rangle\langle k|\psi\rangle = \sum_x \langle\psi|x\rangle\langle x|\psi\rangle,$$

эквивалентное (2.25). В дальнейшем мы будем часто пользоваться этой техникой формальных вычислений.

2.3.2. Представление операторов матрицами

Для проведения операций с векторами и операторами в количественной форме следует разложить все векторы по некоторому базису. Так, разложив произвольный вектор $|\psi\rangle$ по базису $|k\rangle$, можем записать правую часть (2.28) в форме (2.29):

$$|\phi\rangle = \sum_{k'} \hat{L} |k'\rangle A_{k'}.$$

Скалярно умножим обе стороны этого равенства на какой-нибудь из базисных ортов $|k\rangle$:

$$\langle k|\phi\rangle = \sum_{k'} \langle k|\hat{L}|k'\rangle A_{k'}.$$

Левая часть возникшего соотношения представляет собой компоненту

$\langle k|\phi\rangle = B_k$ вектора $|\phi\rangle$. В правой части появились числовые величины

$$L_{kk'} = \langle k|\hat{L}|k'\rangle, \quad (2.38)$$

называемые *матричными элементами оператора \hat{L}* ; это скалярные произведения векторов $\hat{L}|k'\rangle$ на векторы $|k\rangle$. В итоге, формальное равенство (2.28) приняло у нас вид системы числовых равенств

$$B_k = \sum_{k'} L_{kk'} A_{k'}. \quad (2.39)$$

Эту систему можно записать в матричной форме:

$$\begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \\ \dots \\ B_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_{11} & L_{12} & \dots & L_{1N} \\ L_{21} & L_{22} & \dots & L_{2N} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ L_{N1} & L_{N2} & \dots & L_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ \dots \\ A_N \end{pmatrix}. \quad (2.40)$$

Таким образом, линейный оператор \hat{L} , действующий в конечномерном пространстве, описывается квадратной матрицей, составленной из матричных элементов (2.38).

Несложно убедиться, что алгебраические действия с операторами представляются соответствующими действиями с матрицами. Например, применяя согласно (2.30) операторное равенство $\hat{L} = \hat{M}$ к базисным векторам $|k'\rangle$ и скалярно умножая результат на $|k\rangle$, получаем совокупность числовых равенств

$$\langle k|\hat{L}|k'\rangle = \langle k|\hat{M}|k'\rangle, \quad (2.41)$$

означающую, что равным операторам соответствуют одинаковые матрицы (в одном и том же базисе). Верно и обратное: если соотношение (2.41) выполняется при всех значениях k и k' , то $\hat{L} = \hat{M}$. В качестве ещё одного

примера покажем, что произведению операторов отвечает произведение матриц, определённое формулой, известной из курса линейной алгебры. В символе $\langle k|\hat{K}\hat{L}|k'\rangle$ между \hat{K} и \hat{L} поместим разложение единичного оператора (2.36), снабдив в нём индекс k двумя штрихами; тем самым мы приходим к искомой формуле умножения матриц:

$$\langle k|\hat{K}\hat{L}|k'\rangle = \sum_{k''} \langle k|\hat{K}|k''\rangle \langle k''|\hat{L}|k'\rangle. \quad (2.42)$$

Отметим также, что в силу ортонормированности базиса оператор $\hat{1}$ представляется единичной матрицей; действительно:

$$\langle k|\hat{1}|k'\rangle = \langle k|k'\rangle = \delta_{kk'}. \quad (2.43)$$

Численные значения (2.43) матричных элементов единичного оператора не изменяются при переходе к другому ортонормированному базису. Неизменными останутся и матричные элементы $\lambda\delta_{kk'}$ оператора $\lambda\hat{1}$, где λ – заданное число. Однако для других операторов в общем случае *вид матрицы оператора зависит от выбора базиса*. Формулу преобразования матричных элементов любого оператора \hat{L} при переходе к другому базису легко получить, поместив в символе $\langle x|\hat{L}|x'\rangle$ единичный оператор в форме (2.36) перед \hat{L} и в такой же форме, но с индексом k' – перед $|x'\rangle$:

$$\langle x|\hat{L}|x'\rangle = \sum_k \sum_{k'} \langle x|k\rangle \langle k|\hat{L}|k'\rangle \langle k'|x'\rangle. \quad (2.44)$$

Обозначим преобразованную матрицу символом \hat{L}' , а также воспользуемся введенными в разделе 2.1 обозначениями: \hat{U} – для унитарной матрицы с элементами (2.21), \hat{U}^+ – для матрицы с элементами (2.22). Тогда закон преобразования (2.44) запишется в форме произведения матриц:

$$\hat{L}' = \hat{U} \hat{L} \hat{U}^+. \quad (2.45)$$

Формула (2.44) непосредственно следует также из операторного равенства

$$\hat{L} = \sum_k \sum_{k'} L_{kk'} |k\rangle \langle k'|,$$

показывающего, что любой оператор \hat{L} может быть разложен по операторному базису вида $|k\rangle \langle k'|$. Частный пример такого разложения – равенство (2.36); оно соответствует оператору $\hat{L} = \hat{1}$ с матричными элементами $L_{kk'} = \delta_{kk'}$.

Во многих вычислениях существенную роль играет величина, называемая *следом* оператора. След оператора \hat{L} представляет собой сумму его диагональных матричных элементов и обозначается символом $\text{Sp} \hat{L}$ или $\text{Tr} \hat{L}$. В качестве упражнения читатель может убедиться, что величина следа произведения операторов не изменяется при циклической перестановке сомножителей и поэтому след оператора не меняется переходе от одного базиса к другому: $\text{Sp} \hat{L}' = \text{Sp} \hat{L}$.

2.4. ОПЕРАТОРЫ ФИЗИЧЕСКИХ ВЕЛИЧИН

Понятие физической величины в квантовой механике вводится так, чтобы оно по своему смыслу соответствовало аналогичной величине в классической механике. Это требование называется *принципом соответствия*.

2.4.1. Преобразования симметрии

Для анализа конкретных задач большую роль играют такие величины как энергия, импульс и момент импульса, поскольку в случае замкнутой физической системы они удовлетворяют законам сохранения, связанным с симметриями времени и пространства – с однородностью и изотропией [1]. Математически указанная симметрия проявляется в

наличии преобразований, которые превращают любое решение уравнений движения физической системы снова в одно из решений этих же уравнений.

Чтобы исходя из этих соображений дойти до практического «конструирования» квантово-механических операторов, мы начнём с перечисления преобразований симметрии, рассматривая их поочерёдно в применении к классической материальной точке и к квантовому объекту.

Переносы во времени. Пусть $\mathbf{r}(t)$ есть решение классического уравнения движения (уравнения Ньютона) для частицы в не зависящем от времени силовом поле. В этом случае полная энергия ε частицы сохраняется с течением времени. Однородность времени проявляется в том, что перенесённая во времени траектория $\mathbf{r}(t + \tau)$ будет решением того же самого уравнения движения, причем – с прежним значением энергии ε . Здесь τ – произвольный интервал времени, выступающий в роли непрерывного параметра рассматриваемого преобразования. Такой «перенос во времени» не имеет отношения к фантастике и соответствует в эксперименте созданию желаемых начальных условий на время τ раньше (если $\tau > 0$), чем при изучении первоначальной траектории $\mathbf{r}(t)$. Действительно, траектория $\mathbf{r}(t + \tau)$ к любому моменту t описывает просто более позднюю стадию того же самого движения, что и $\mathbf{r}(t)$. Случай $\tau < 0$ отвечает перенесению начала испытания на более поздний срок.

Применительно к квантовому объекту, движущемуся в отсутствие переменного внешнего поля, перенос во времени, очевидно, следует описывать некоторым зависящим от единственного параметра τ оператором $\hat{T}(\tau)$, который следующим образом действует на вектор состояния квантового объекта:

$$|\psi(t + \tau)\rangle = \hat{T}(\tau) |\psi(t)\rangle. \quad (2.46)$$

Присутствие аргумента t обусловлено здесь возможностью изменения вектора состояния с течением времени.

Рассмотрим действие переноса во времени на базисные состояния в опыте по измерению энергии ε_n квантового объекта. Здесь и далее мы

будем обозначать эти состояния как $|\varepsilon_n\rangle$ или, проще, $|n\rangle$, где индекс n нумерует данные базисные векторы. По определению базисного вектора $|n\rangle$, в состоянии $|n\rangle$ значение энергии ε_n обнаруживается с вероятностью $W_n = 1$, поэтому $|n\rangle$ есть *состояние с определённой энергией* (напомним, что понятие о квантовом состоянии с определенным значением какой-либо физической величины подробно рассматривалось в разделе 1.1.3.). Обращаясь теперь к принципу соответствия и учитывая смысловое сходство между классическим представлением о движении с сохраняющейся энергией и квантовым состоянием $|n\rangle$ с определённой энергией, мы постулируем, что результатом действия $\hat{T}(\tau)$ на $|n\rangle$ должен быть некоторый вектор состояния, характеризующийся прежним определенным значением энергии ε_n .

Если все значения ε_n различны (то есть, как принято говорить, рассматриваемый квантовый объект имеет невырожденный энергетический спектр), то каждому значению ε_n принадлежит ровно один базисный вектор $|n\rangle$. В этом случае указанное выше требование с необходимостью означает, что при каждом $n = 1, \dots, N$ преобразованный оператором $\hat{T}(\tau)$ базисный вектор может отличаться от исходного $|n\rangle$ лишь некоторым фазовым множителем $\lambda_n(\tau)$:

$$\hat{T}(\tau)|n\rangle = \lambda_n(\tau)|n\rangle, \quad |\lambda_n(\tau)| = 1. \quad (2.47)$$

Появление $\lambda_n(\tau)$ допускается здесь потому, что фазовый множитель, как пояснялось в разделе 2.2.6, не меняет физической интерпретации вектора состояния; в результате произвольного изменения фазовых множителей у базисных векторов возникает базис, физически эквивалентный исходному базису.

Прежде чем продолжить обсуждение условия (2.47), сформулируем аналогичные уравнения, связанные с однородностью и изотропией \mathbf{r} -пространства.

Параллельные переносы. Пусть $\mathbf{r}(t)$ есть решение уравнения Ньютона для свободно движущейся частицы; другими словами, $\mathbf{r}(t)$ – траектория равномерного прямолинейного движения с сохраняющимся импульсом $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$. Однородность пространства проявляется в том, что параллельно перенесённая траектория $\mathbf{r}(t) + \mathbf{a}$, где \mathbf{a} – произвольный вектор, также описывает возможное движение свободной частицы, причем – с прежним импульсом \mathbf{p} (ни одна из трех проекций импульса p_x, p_y, p_z не изменяется при параллельном переносе). Здесь \mathbf{a} – векторный параметр преобразования, содержащий три непрерывные компоненты a_x, a_y, a_z , которыми задаются параллельные переносы вдоль каждой из декартовых координатных осей. Такой перенос траектории легко себе представить: он возникнет, если перед началом испытаний мы параллельно перенесем на вектор \mathbf{a} источник, который затем испустит частицу с заданной скоростью \mathbf{v} .

В квантово-механической аналогии для этой картины параллельному переносу следует сопоставить некоторый оператор $\hat{T}(\mathbf{a})$, действующий на векторы $|\psi\rangle$ пространства состояний квантового объекта. Такой оператор можно записать в виде трёх коммутирующих сомножителей, которые соответствуют параллельным переносам вдоль ортов $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$ декартовых координат:

$$\hat{T}(\mathbf{a}) = \hat{T}(a_x \mathbf{e}_x) \hat{T}(a_y \mathbf{e}_y) \hat{T}(a_z \mathbf{e}_z). \quad (2.48)$$

Движение частицы с заданным \mathbf{p} будет описываться квантово-механическим вектором состояния $|\mathbf{p}\rangle$ – это вектор *состояния с определённым импульсом*; в описании опыта по измерению импульса совокупность состояний $|\mathbf{p}\rangle$ со всевозможными значениями p_x, p_y, p_z служит базисом. Обращаясь к принципу соответствия и учитывая смысловое сходство между классическим представлением о движении с постоянным импульсом и квантовым состоянием с определенным импульсом, мы постулируем, что результатом действия $\hat{T}(\mathbf{a})$ на $|\mathbf{p}\rangle$ должно быть состояние с прежним \mathbf{p} . Это означает, что допустимое

изменение базисных векторов $|\mathbf{p}\rangle$ при параллельных переносах сводится только к умножению на некоторый фазовый множитель $\lambda_{\mathbf{p}}(\mathbf{a})$:

$$\hat{T}(\mathbf{a})|\mathbf{p}\rangle = \lambda_{\mathbf{p}}(\mathbf{a})|\mathbf{p}\rangle. \quad (2.49)$$

Повороты. Наконец, пусть $\mathbf{r}(t)$ – радиус-вектор классической частицы, движущейся в сферически симметричном силовом поле с центром симметрии в начале координат. В этом случае траектория $\mathbf{r}(t)$ характеризуется сохраняющимся вектором момента импульса $\mathbf{I} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$, где \times – знак векторного произведения. Вектор \mathbf{I} перпендикулярен к плоскости орбиты. Изотропия пространства проявляется в эквивалентности всех направлений, исходящих из центра симметрии. Если мы повернем плоскость орбиты вокруг любого такого направления, то вновь получим допустимую траекторию – решение уравнения Ньютона для частицы в том же поле, но с новыми начальными условиями (как будто частица испускается повернутым источником).

Это преобразование можно задать безразмерным векторным параметром \mathbf{a} , указывающим направление оси поворота и величину α угла поворота (в радианах). Важное отличие поворотов от параллельных переносов состоит в том, что повороты вокруг различных направлений в общем случае не коммутативны. Кроме того, если мы поворачиваем плоскость орбиты, то вместе с ней поворачивается и вектор момента импульса \mathbf{I} , так что нельзя сказать, что все три проекции l_x, l_y, l_z остаются неизменными.

Рассмотрим поворот вокруг оси z . Вектор момента импульса \mathbf{I} вместе с плоскостью орбиты принимает новое положение, но его величина l и проекция l_z на ось поворота z , очевидно, остаются неизменными. Следовательно, исходя из принципа соответствия, можно ожидать, что существуют квантовые *состояния* $|l, l_z\rangle$ с *определёнными значениями* l и l_z , причём для этих векторов состояния действие оператора поворота $\hat{R}(\alpha \mathbf{e}_z)$ вокруг оси z сводится лишь к умножению на некоторый фазовый множитель $\lambda(\alpha)$:

$$\hat{R}(\alpha \mathbf{e}_z) |l, l_z\rangle = \lambda(\alpha) |l, l_z\rangle. \quad (2.50)$$

Теперь займемся определением явного вида фазовых множителей в уравнениях (2.50), (2.49) и (2.47). То общее, что есть в каждом из этих трех примеров, можно сформулировать следующим образом.

Пусть базисные векторы $|k\rangle$ описывают состояния с определёнными значениями f_k некоторой физической величины f , связанной с семейством преобразований $\hat{T}(a)$, где a – непрерывный вещественный параметр. Шкала для отсчета значений a пусть выбрана так, что

$$\hat{T}(a') \hat{T}(a) = \hat{T}(a' + a), \quad \hat{T}(0) = \hat{1}, \quad (2.51)$$

а действие оператора $\hat{T}(a)$ на $|k\rangle$ пусть сводится к умножению $|k\rangle$ на некоторый фазовый множитель $\lambda_k(a)$:

$$\hat{T}(a) |k\rangle = \lambda_k(a) |k\rangle. \quad (2.52)$$

Тогда, применяя к обеим сторонам уравнения (2.52) оператор $\hat{T}(a')$ и учитывая (2.51), мы получим соотношения:

$$\lambda_k(a') \lambda_k(a) = \lambda_k(a' + a), \quad \lambda_k(0) = 1. \quad (2.53)$$

Из них следует, что фаза множителя $\lambda_k(a)$ должна быть пропорциональна a с коэффициентом пропорциональности, зависящим от k . Вполне допустимо считать, что этот коэффициент пропорциональности включает величину f_k по ее определению, так как до сих пор в этом теоретическом построении не делалось никаких предположений о том, чем именно определяются значения f_1, \dots, f_N . Конкретизируя теперь определение физической величины f , мы примем, что выражение для фазы множителя $\lambda_k(a)$ имеет вид

$$-a f_k / \hbar.$$

Таким образом, значения f_k по определению связываются с фазовыми множителями в (2.52) формулой:

$$\lambda_k(a) = e^{-i a f_k / \hbar}. \quad (2.54)$$

Возможно, на данном этапе такое определение связи между понятием физической величины f и преобразованиями симметрии $\hat{T}(a)$ читатель посчитает произвольным; полная обоснованность рассмотренного построения станет очевидной только в дальнейшем, по мере решения конкретных задач. Пока что мы отметим еще, что минус в показателе выражения (2.54) не играет существенной роли – его можно устранить, если вместо $\hat{T}(a)$ рассматривать обратные преобразования, для которых в силу (2.51) справедливо равенство

$$\hat{T}^{-1}(a) = \hat{T}(-a). \quad (2.55)$$

Что же касается постоянной Планка в (2.54), то она совершенно необходима, если требовать, чтобы физические величины в квантовой механике измерялись в тех же единицах, что и в классической физике. *Постоянная Планка в (2.54) обеспечивает физическим величинам их классическую размерность.* Действительно, показатель экспоненциальной функции может быть лишь безразмерной величиной, поэтому если параметром a в (2.54) является время τ , то f_k с необходимостью имеет размерность энергии, если a – длина, то величина f_k должна быть импульсом, если a – безразмерный угол, то f_k приобретает размерность момента импульса. Таким образом, формула (2.54) указывает на возможность применения в квантовой теории тех же единиц измерения физических величин, что и в классической механике, и этот факт говорит о ее согласованности с принципом соответствия.

Возвращаясь к уравнениям (2.47) и (2.50), можно теперь записать имеющиеся в них фазовые множители в виде $\exp(-i \tau \varepsilon_n / \hbar)$ и

$\exp(-i\alpha l_z/\hbar)$, соответственно. В уравнении (2.49) фазовый множитель в силу (2.48) будет равен

$$e^{-ia_x p_x/\hbar} e^{-ia_y p_y/\hbar} e^{-ia_z p_z/\hbar} = e^{-i\mathbf{a}\cdot\mathbf{p}/\hbar}. \quad (2.56)$$

В дальнейшем, на основе детального рассмотрения параллельных переносов и поворотов в применении к волновой функции мы найдем операторы $\hat{T}(a)$ этих преобразований в явном виде. Если оператор $\hat{T}(a)$ известен в явном виде, то соотношение (2.52) приобретает смысл уравнения для стандартной задачи, хорошо известной из курса линейной алгебры – речь идет о так называемой «задаче на собственные значения λ и собственные векторы» линейного оператора \hat{T} . Другими словами, уравнение вида (2.52) с заданным оператором $\hat{T}(a)$ позволяет, в принципе, найти векторы состояний $|k\rangle$ и множители $\lambda_k(a) = e^{-ia f_k/\hbar}$ и тем самым получить количественную информацию о возможных значениях физической величины f .

2.4.2. Оператор физической величины

Однако, указанную выше задачу можно поставить и в более простой форме. Вместо того, чтобы решать уравнение (2.52), сопоставим непосредственно физической величине f линейный оператор \hat{f} , позволяющий находить состояния $|k\rangle$ и допустимые значения f_k с помощью уравнения, аналогичного (2.52):

$$\hat{f}|k\rangle = f_k|k\rangle. \quad (2.57)$$

Такой оператор \hat{f} называют оператором физической величины f .

Легко заметить, что среди решений уравнения (2.57) всегда имеется тривиальное, не представляющее интереса решение – нулевой вектор 0 . Задача заключается в отыскании нетривиальных (отличных от 0) решений $|k\rangle$. Значения f_k , при которых существуют нетривиальные решения уравнения (2.57), называются *собственными значениями*, а

соответствующие им решения $|k\rangle$ – собственными векторами оператора \hat{f} . Совокупность этих значений f_k называют *спектром* собственных значений физической величины f .

В разделе 2.4.3 мы убедимся, что из собственных векторов оператора физической величины всегда можно составить полный ортонормированный базис. Именно так в квантовой теории и появляются разные базисы – они представляют собой совокупности собственных векторов для операторов различных физических величин. Польза понятия об операторе физической величины этим не исчерпывается.

Покажем, что знание явного вида оператора \hat{f} дает возможность вычислять *среднее значение* физической величины $\langle f \rangle$ в произвольном состоянии, описываемом нормированным вектором $|\psi\rangle$. С этой целью воспользуемся разложением (2.10) вектора $|\psi\rangle$ по ортонормированному базису $|k\rangle$, образованному собственными векторами оператора \hat{f} . При таком выборе базиса применение оператора \hat{f} к обеим сторонам равенства (2.10) с учетом (2.57) дает:

$$\hat{f}|\psi\rangle = \sum_k A_k \hat{f}|k\rangle = \sum_k A_k f_k |k\rangle.$$

Здесь компонентами вектора $\hat{f}|\psi\rangle$ являются числа $A_k f_k$. Поэтому скалярное произведение вектора $\hat{f}|\psi\rangle$ на исходный вектор $|\psi\rangle$ с компонентами A_k есть

$$\langle \psi | \hat{f} | \psi \rangle = \sum_k f_k |A_k|^2. \quad (2.58)$$

Выражение в правой части (2.58) соответствует обычному определению «математического ожидания» – среднего значения $\langle f \rangle$ флуктуирующей величины, принимающей случайные значения $f = f_k$ с вероятностями $W_k = |A_k|^2$. Таким образом, в квантовой теории среднее значение $\langle f \rangle$ можно вычислять по формуле

$$\langle f \rangle = \langle \Psi | \hat{f} | \Psi \rangle. \quad (2.59)$$

Уравнение (2.57) имеет смысл безотносительно к преобразованиям симметрии $\hat{T}(a)$. Если же физическая величина f связана с преобразованиями симметрии, то соответствующие операторы преобразований $\hat{T}(a)$ должны быть связаны некоторым равенством с оператором \hat{f} . Чтобы вывести формулу этой связи, заметим, что n -кратное применение \hat{f} к $|k\rangle$ с учетом (2.57) даёт

$$\hat{f}^n |k\rangle = (f_k)^n |k\rangle. \quad (2.60)$$

Если умножать подобные равенства с различными значениями n на коэффициенты степенного ряда какой-либо функции $F(x)$ и суммировать их по n , то придем к следующей формуле, справедливой при любом выборе функции $F(\hat{f})$ (важно лишь, что $|k\rangle$ – собственные векторы для оператора \hat{f} , а f_k – его собственные значения):

$$F(\hat{f}) |k\rangle = F(f_k) |k\rangle. \quad (2.61)$$

Частным случаем равенства (2.61) является соотношение

$$e^{-ia\hat{f}/\hbar} |k\rangle = e^{-iaf_k/\hbar} |k\rangle. \quad (2.62)$$

Его правая часть в силу (2.54) и (2.52) совпадает с $\hat{T}(a) |k\rangle$, следовательно,

$$e^{-ia\hat{f}/\hbar} |k\rangle = \hat{T}(a) |k\rangle.$$

Умножая подобные равенства (с различными k) на произвольные коэффициенты A_k и суммируя по k , получим с учетом предполагаемой линейности всех наших операторов:

$$e^{-ia\hat{f}/\hbar}|\psi\rangle = \hat{T}(a)|\psi\rangle,$$

где $|\psi\rangle = \sum_k A_k |k\rangle$ – произвольный вектор состояния. Отсюда видно, что имеет место искомое операторное равенство:

$$\hat{T}(a) = e^{-ia\hat{f}/\hbar}. \quad (2.63)$$

При произвольно малых значениях параметра a в степенном ряду для экспоненты (2.63) можно оставить только два первых члена, что ведёт к более простой формуле, справедливой в линейном приближении по a :

$$\hat{T}(a) = 1 - ia\hat{f}/\hbar, \quad a \rightarrow 0. \quad (2.64)$$

Равенство (2.64) позволит нам непосредственно найти оператор физической величины \hat{f} , если оператор $\hat{T}(a)$ будет известен в явном виде.

2.4.3. Эрмитово сопряжение оператора

Нередко в вычислениях возникает необходимость перенести действие какого-либо оператора \hat{L} в скалярном произведении с одного векторного сомножителя на другой. С этой целью вводится оператор \hat{L}^+ :

$$\langle\phi|\hat{L}|\psi\rangle = \langle\hat{L}^+\phi|\psi\rangle. \quad (2.65)$$

Здесь $|\psi\rangle$ и $|\phi\rangle$ – любые векторы состояний, а символ вида $|\hat{M}\psi\rangle$ означает то же, что и $\hat{M}|\psi\rangle$; с учётом этого соглашения, а также равенства (2.14), формула (2.65) эквивалентна равенству

$$\langle\phi|\hat{L}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{L}^+|\phi\rangle^*. \quad (2.66)$$

Оператор \hat{L}^+ , который сопоставляется оператору \hat{L} с помощью соотношения (2.65) или (2.66), называют *эрмитово сопряжённым* по отношению к \hat{L} .

Отметим некоторые свойства операции эрмитова сопряжения. Перенеся по правилу (2.65) действие оператора в правой части (2.66) с вектора $|\phi\rangle$ на вектор $|\psi\rangle$ и снова пользуясь равенством (2.14), убеждаемся, что

$$(\hat{L}^+)^+ = \hat{L}. \quad (2.67)$$

Нетрудно показать также, что при эрмитовом сопряжении произведения операторов их последовательность заменяется противоположной. Действительно, например, в выражении $\langle\psi|\hat{A}\hat{B}|\phi\rangle$ можно перенести к левому векторному сомножителю целиком $\hat{A}\hat{B}$, либо сначала перенести \hat{A} , затем \hat{B} ; сравнение результатов даёт:

$$(\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{B}^+\hat{A}^+. \quad (2.68)$$

Равенство (2.66) с базисными векторами (например, $|k\rangle$) в качестве векторов состояния $|\phi\rangle$ и $|\psi\rangle$ принимает вид:

$$\langle k'|\hat{L}|k\rangle = \langle k|\hat{L}^+|k'\rangle^*. \quad (2.69)$$

Отсюда следует, что матрица \hat{L}^+ равна транспонированной и комплексно сопряжённой матрице \hat{L} , то есть $\hat{L}^+ = (\hat{L}^T)^*$. Это соотношение сохраняется при переходе к любому другому базису по правилу (2.45).

Оператор \hat{L} , удовлетворяющий условию $\hat{L}^+ = \hat{L}$, называется *эрмитовым* или *самосопряжённым*. Для эрмитова оператора из (2.66) следует соотношение

$$\langle\psi|\hat{L}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{L}|\psi\rangle^*,$$

означающее, что среднее значение $\langle L \rangle$, определённое по формуле (2.59), является вещественным. Поскольку средние значения физических величин должны быть заведомо вещественными, мы приходим к заключению, что операторы \hat{f} физических величин должны быть эрмитовыми:

$$\hat{f}^+ = \hat{f}. \quad (2.70)$$

Утверждение (2.70) влечет за собой ряд важных следствий. Покажем, что те собственные векторы эрмитова оператора, которые принадлежат различным собственным значениям, с необходимостью взаимно ортогональны (это предложение не отрицает возможности быть ортогональными и другим собственным векторам). Попутно мы убедимся, что все собственные значения эрмитова оператора вещественны.

Пусть все f_k и $|k\rangle$, определяемые для эрмитова оператора \hat{f} из «задачи на собственные значения» (2.57), найдены, так что (2.57) можно считать равенством, выполняющимся при каждом k . Скалярно умножив обе стороны этого равенства на $|k'\rangle$, имеем

$$\langle k' | \hat{f} | k \rangle = f_k \langle k' | k \rangle. \quad (2.71)$$

Применим здесь формулу эрмитова сопряжения (2.66), а также учтём условие эрмитовости (2.70) и тот факт, что $\hat{f} | k' \rangle = f_{k'} | k' \rangle$; получим:

$$\langle k' | \hat{f} | k \rangle = \langle k | \hat{f} | k' \rangle^* = f_{k'}^* \langle k | k' \rangle^* = f_{k'}^* \langle k' | k \rangle.$$

Сравнивая этот результат с (2.71), имеем следующее равенство, справедливое при всех значениях номеров k и k' :

$$f_{k'}^* \langle k' | k \rangle = f_k \langle k' | k \rangle. \quad (2.72)$$

При $k' = k$ число $\langle k' | k \rangle = \langle k | k \rangle > 0$ (это квадрат нормы вектора $|k\rangle \neq 0$), и тогда из (2.72) следует, что

$$f_k^* = f_k. \quad (2.73)$$

С учётом этого соотношения, означающего вещественность всех f_k , можно (2.72) записать так: $(f_{k'} - f_k)\langle k'|k\rangle = 0$. Отсюда и видно, что при $f_{k'} \neq f_k$ имеет место искомое свойство ортогональности: $\langle k'|k\rangle = 0$.

Отметим, что в случае эрмитова оператора \hat{f} оператор $i\hat{f}$ антиэрмитов, то есть при эрмитовом сопряжении изменяется его знак: $(i\hat{f})^+ = -i\hat{f}$. Верно и обратное: оператор, изменяющий свой знак при эрмитовом сопряжении, можно записать в виде $i\hat{K}$, где \hat{K} – некоторый эрмитов оператор.

С учётом эрмитовости \hat{f} оператор, эрмитово сопряжённый по отношению к оператору преобразования (2.63), имеет вид

$$\hat{T}(a)^+ = e^{ia\hat{f}/\hbar} = \hat{T}(-a),$$

и, в силу (2.55), обладает свойством:

$$\hat{T}(a)^+ = \hat{T}(a)^{-1}. \quad (2.74)$$

Операторы, удовлетворяющие условию (2.74), называются *унитарными*. Таким образом, в квантовой механике преобразования симметрии (2.63), связанные с эрмитовым оператором физической величины, описываются унитарными операторами.

Унитарные операторы примечательны тем, что при их действии на векторы состояний скалярные произведения остаются неизменными; действительно:

$$\langle \hat{T}\phi | \hat{T}\psi \rangle = \langle \phi | \hat{T}^+ \hat{T} | \psi \rangle = \langle \phi | \hat{T}^{-1} \hat{T} | \psi \rangle = \langle \phi | \psi \rangle.$$

В частности, при действии унитарного оператора на ортонормированные векторы получается вновь система ортонормированных векторов. Поэтому переход от одного

ортонормированного базиса к другому всегда можно рассматривать как результат действия на базисные векторы некоторого унитарного оператора. Например, любая перестановка «имён» базисных векторов (изменение нумерации) не нарушает их ортонормированность и, следовательно, представляет собой унитарное преобразование.

2.4.4. Приведение эрмитовой матрицы к диагональному виду

Рассмотрим, как решается задача на собственные значения f_k и собственные векторы $|k\rangle$ эрмитова оператора \hat{f} , который задан в виде матрицы с элементами $f_{x'x}$ по отношению к некоторому ортонормированному базису $|x\rangle$. Числа $f_{x'x}$ и базисные векторы $|x\rangle$ здесь считаются известными.

Уравнение (2.57) запишем в форме

$$\hat{f}|k\rangle = f|k\rangle,$$

или

$$(\hat{f} - f\hat{1})|k\rangle = 0, \quad (2.75)$$

где значения f пока не определены. Скалярно умножив (2.75) на $\langle x'|$ и поместив перед $|k\rangle$ единичный оператор (2.37), что эквивалентно разложению искомого вектора $|k\rangle$ по базису $|x\rangle$, получаем

$$\sum_x \langle x'|(\hat{f} - f\hat{1})|x\rangle \langle x|k\rangle = 0.$$

Это есть система N однородных алгебраических уравнений первой степени с неизвестными $\langle x|k\rangle = \psi_{xk}$, являющимися x -компонентами искомого вектора $|k\rangle$:

$$\sum_x (f_{x'x} - f\delta_{x'x})\psi_{xk} = 0. \quad (2.76)$$

Как известно из курса линейной алгебры, такая система имеет отличные от нуля решения только при условии обращения в нуль определителя, составленного из коэффициентов при неизвестных,

$$\det(\hat{f} - f\hat{1}) = 0. \quad (2.77)$$

Это условие представляет собой алгебраическое уравнение степени N для f . Известная теорема алгебры гласит, что такое уравнение должно иметь N корней (не обязательно различных): f_1, f_2, \dots, f_N .

Итак, процесс решения задачи (2.57) начинается с отыскания всех решений уравнения (2.77). Его корни f_1, f_2, \dots, f_N и представляют собой допустимые значения f_k величины f . Если все они *не вырождены*, то есть среди них нет равных друг другу, то подставляя найденные значения f_k в систему (2.76) и решая её по очереди для каждого $f = f_k$, мы найдём N совокупностей ψ_{xk} , то есть N собственных векторов $|k\rangle$:

$$|k\rangle = \sum_x |x\rangle \psi_{xk}.$$

Поскольку уравнения (2.76) однородны, величины ψ_{xk} при каждом k будут найдены лишь с точностью до произвольного множителя C_k . Такие множители затем выбираются с помощью условия нормировки (2.4), означающего, что $\langle k|k\rangle = 1$. Фаза нормировочных множителей C_k остаётся произвольной.

В разделе 2.4.3 было показано, что в отсутствие вырождения собственные векторы эрмитова оператора взаимно ортогональны. В этом случае найденные указанным образом N векторов $|k\rangle$ автоматически образуют полный ортонормированный базис.

Если оператор физической величины имеет *вырожденные* собственные значения (то есть некоторые из f_k равны друг другу), то выбор полного ортонормированного базиса, состоящего из собственных векторов этого оператора, по-прежнему возможен, но уже неоднозначен. Это легко понять на предельно простом примере с оператором вида

$\hat{f} = \lambda \hat{1}$, где λ – заданное число. Очевидно, что здесь λ является N -кратно вырожденным собственным значением такого оператора \hat{f} , и для него любой не равный нулю вектор $|\psi\rangle$ – собственный. В этом случае о любом базисе можно сказать, что он составлен из собственных векторов оператора \hat{f} . Подобным же образом в случае оператора с M -кратно вырожденным (где $M < N$) собственным значением λ произвольной оказывается часть полного ортонормированного базиса, относящаяся к M -мерному подпространству, в котором \hat{f} действует как $\lambda \hat{1}$.

При использовании собственных векторов эрмитова оператора \hat{f} в качестве полного ортонормированного базиса $|k\rangle$ равенство (2.71) принимает вид:

$$\langle k' | \hat{f} | k \rangle = f_k \delta_{k'k}, \quad k, k' = 1, \dots, N \quad (2.78)$$

Отсюда мы видим, что в указанном базисе матрица \hat{f} будет диагональной, причём диагональные элементы равны собственным значениям оператора \hat{f} . О переходе к такому базису говорят как о приведении матрицы \hat{f} к диагональному виду. Отметим, что все матрицы вида $F(\hat{f})$, включая $\hat{T}(a) = e^{-i a \hat{f} / \hbar}$, при этом тоже становятся диагональными: $F(\hat{f})_{k'k} = F(f_k) \delta_{k'k}$.

2.4.5. Коммутатор операторов физических величин

Если в одном и том же базисе к диагональному виду приведены матрицы двух операторов физических величин \hat{f} и \hat{g} , то их произведение, очевидно, тоже является диагональной матрицей, причём $\hat{f} \hat{g} = \hat{g} \hat{f}$. Это означает, что такие операторы коммутативны друг с другом.

Следовательно, если операторы \hat{f} и \hat{g} не коммутативны ($\hat{f} \hat{g} \neq \hat{g} \hat{f}$), то не существует базиса, в котором эти операторы были бы одновременно приводимы к диагональному виду. Другими словами, *в этом случае не существует полного набора базисных состояний, в которых величины f и*

g одновременно имеют определённые значения: состояния с определёнными значениями f или g относятся к различным базисам и, следовательно, к разным постановкам опыта. Кратко о таких величинах f и g говорят, что они *одновременно не измеримы*.

Для выявления подобных ситуаций удобно рассматривать оператор $\hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f}$, используя обозначение

$$[\hat{f}, \hat{g}] = \hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f}. \quad (2.79)$$

Оператор $[\hat{f}, \hat{g}]$ называется *коммутатором* операторов \hat{f} и \hat{g} . Коммутатор эрмитовых операторов всегда может быть записан в виде $[\hat{f}, \hat{g}] = i\hat{K}$, где \hat{K} – некоторый эрмитов оператор. Если \hat{f} и \hat{g} коммутативны, то $\hat{K} = 0$. В случае некоммутирующих \hat{f} и \hat{g} эрмитов оператор $\hat{K} = -i[\hat{f}, \hat{g}]$ не равен нулю, он определяет некоторую физическую величину K .

Итак, в случае одновременно измеримых величин $[\hat{f}, \hat{g}] = 0$. Если $[\hat{f}, \hat{g}] \neq 0$, то величины f и g одновременно не измеримы.

Отметим также следующий факт, относящийся к трём физическим величинам, скажем, f , g и H . Пусть $[\hat{f}, \hat{H}] = 0$, $[\hat{g}, \hat{H}] = 0$ и наряду с этим $[\hat{f}, \hat{g}] \neq 0$. Тогда одновременно измеримы f и H , а также g и H , но f и g одновременно не измеримы. При этом в спектре величины H имеется вырождение, так как оператор этой величины приводится к диагональному виду более чем в одном базисе – в базисе, собственном для \hat{f} , и в базисе, собственном для \hat{g} .

2.4.6. Соотношения неопределённости

Неопределённость δf физической величины f в произвольном состоянии $|\psi\rangle$ характеризуют средним квадратичным отклонением от среднего значения (2.59):

$$(\delta f)^2 = \langle \psi | \hat{F}^2 | \psi \rangle, \quad (2.80)$$

где

$$\hat{F} = \hat{f} - \langle \psi | \hat{f} | \psi \rangle \hat{1}. \quad (2.81)$$

Покажем, что зная коммутатор операторов каких-либо физических величин f, g

$$[\hat{f}, \hat{g}] = [\hat{F}, \hat{G}] = i\hat{K}, \quad (2.82)$$

можно оценить наименьшее возможное значение произведения неопределённостей $\delta f \delta g$. Неопределённость δg вычисляется аналогично δf :

$$(\delta g)^2 = \langle \psi | \hat{G}^2 | \psi \rangle, \quad (2.83)$$

где

$$\hat{G} = \hat{g} - \langle \psi | \hat{g} | \psi \rangle \hat{1}. \quad (2.84)$$

Пусть α – произвольный вещественный параметр, \hat{A} – оператор, имеющий вид

$$\hat{A} = \alpha \hat{F} - i \hat{G}.$$

Поскольку $\hat{F}^+ = \hat{F}$ и $\hat{G}^+ = \hat{G}$ в силу эрмитовости операторов физических величин, имеем

$$\hat{A}^+ = \alpha \hat{F} + i \hat{G},$$

$$\hat{A}^+ \hat{A} = \alpha^2 \hat{F}^2 - \alpha i (\hat{F} \hat{G} - \hat{G} \hat{F}) + \hat{G}^2 = \alpha^2 \hat{F}^2 + \alpha \hat{K} + \hat{G}^2. \quad (2.85)$$

Заметим, что для любого $|\psi\rangle$ квадрат нормы вектора $\hat{A}|\psi\rangle$, как и квадрат нормы вообще любого вектора, неотрицателен:

$$\langle \hat{A}\psi | \hat{A}\psi \rangle \geq 0. \quad (2.86)$$

Преобразуем это скалярное произведение с помощью выражения (2.85):

$$\begin{aligned} \langle \hat{A}\psi | \hat{A}\psi \rangle &= \langle \psi | \hat{A}^+ \hat{A} | \psi \rangle = \\ &= \alpha^2 \langle \psi | \hat{F}^2 | \psi \rangle + \alpha \langle \psi | \hat{K} | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{G}^2 | \psi \rangle. \end{aligned}$$

Пользуясь формулой среднего значения (2.59) в применении к оператору \hat{K} , и учитывая выражения для неопределенностей (2.80), (2.83), найдем, что неравенство (2.86) принимает вид

$$\alpha^2 (\delta f)^2 + \alpha \langle K \rangle + (\delta g)^2 \geq 0.$$

Осталось заметить, что квадратичный по вещественной переменной α трёхчлен принимает положительные значения при любых α только тогда, когда его дискриминант отрицателен

$$\langle K \rangle^2 - 4(\delta f)^2(\delta g)^2 \leq 0.$$

Отсюда следует неравенство

$$\delta f \delta g \geq \frac{1}{2} |\langle K \rangle|, \quad (2.87)$$

называемое *соотношением неопределённостей* для величин f и g .

Это соотношение показывает, что при $\langle K \rangle \neq 0$ неопределённости величин f и g не могут быть одновременно сколь угодно малы: чем меньше одна из неопределённостей δf и δg , тем больше другая.

2.5. ВОЛНОВАЯ ФУНКЦИЯ ЧАСТИЦЫ

До сих пор мы формулировали принципы квантовой механики в общей форме. Теперь же будем придавать им вид математического аппарата, пригодного для решения задач о конкретном квантовом объекте – нерелятивистской частице без спина. На практике такой аппарат находит применение во многих задачах о движении электрона в заданном силовом поле, так как часто релятивистские поправки и спин электрона не играют первоочередной роли и могут в дальнейшем учитываться отдельно.

2.5.1. Координатное представление

При квантово-механическом описании частицы определяющим типом событий является акт её обнаружения в одном из элементов объёма dV . Можно считать, что такие события и элементы объёма «пронумерованы» с помощью радиус-вектора \mathbf{r} (рис. 2.2), который аналогичен индексу x в излагавшемся выше формальном аппарате.

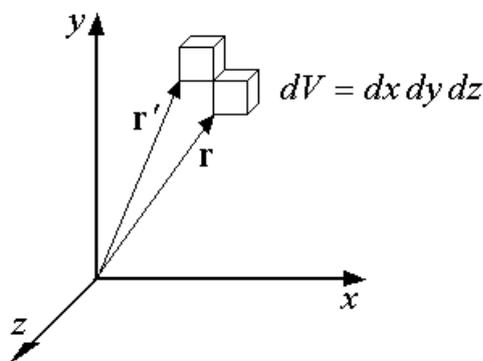


Рис. 2.2. Нумерация бесконечно малых элементов объёма с помощью радиус-вектора

Базисный вектор состояния $|\mathbf{r}\rangle \equiv |x, y, z\rangle$ описывает воображаемую ситуацию, при которой частица в каждом акте измерения ее координат с достоверностью обнаруживается в одной и той же точке \mathbf{r} ; здесь любую точку мы представляем себе в виде элемента объёма с достаточно малыми размерами dx , dy и dz . Частица по определению не делится детекторами

на части, и поэтому в состоянии $|\mathbf{r}\rangle$ амплитуда вероятности $\langle \mathbf{r}'|\mathbf{r}\rangle$ обнаружения частицы в точке $\mathbf{r}' \neq \mathbf{r}$ должна быть равна нулю; при $\mathbf{r}' = \mathbf{r}$ можно положить амплитуду $\langle \mathbf{r}'|\mathbf{r}\rangle$ равной единице. В таком случае совокупность векторов состояния $|\mathbf{r}\rangle$ образует ортонормированный базис:

$$\langle \mathbf{r}'|\mathbf{r}\rangle = \delta_{\mathbf{r}'\mathbf{r}} = \delta_{x'x} \delta_{y'y} \delta_{z'z}. \quad (2.88)$$

На практике реализуются состояния $|\psi\rangle$, в которых распределение вероятностей для координат частицы оказывается «размазанным» по множеству элементов объема. Следовательно, в общем случае любое состояние частицы описывается в форме суперпозиции многих базисных состояний $|\mathbf{r}\rangle$:

$$|\psi\rangle = \sum_{\mathbf{r}} \psi_{\mathbf{r}} |\mathbf{r}\rangle. \quad (2.89)$$

Величина

$$\psi_{\mathbf{r}} = \langle \mathbf{r}|\psi\rangle \quad (2.90)$$

представляет собой амплитуду вероятности обнаружения частицы, находящейся в состоянии $|\psi\rangle$, в элементе объема dV с координатами \mathbf{r} .

Поскольку при достаточно малом значении dV число N рассматриваемых точек \mathbf{r} -пространства огромно, а зависящие от \mathbf{r} величины в соседних точках различаются мало, разумно суммирование по \mathbf{r} свести к интегрированию по непрерывным координатам x , y и z ; это соответствует предельному переходу $dV \rightarrow 0$, $N \rightarrow \infty$. При таком переходе вероятность

$$W_{\mathbf{r}} = |\psi_{\mathbf{r}}|^2$$

становится малой в меру малости dV , поэтому удобнее иметь дело с плотностью вероятности. Выделим из амплитуды вероятности (2.90) множитель \sqrt{dV} , считая его произвольно малой постоянной, одной и той же для всех векторов состояния, а остающийся сомножитель обозначим как $\psi(\mathbf{r})$:

$$\langle \mathbf{r} | \psi \rangle = \sqrt{dV} \psi(\mathbf{r}). \quad (2.91)$$

Тогда вероятность обнаружения частицы в элементе объёма dV с координатами \mathbf{r} примет вид

$$W_{\mathbf{r}} = dV |\psi(\mathbf{r})|^2. \quad (2.92)$$

Величина $|\psi(\mathbf{r})|^2$, следовательно, имеет смысл плотности вероятности.

Таким образом, математический аппарат квантовой механики можно в дальнейшем строить на основе утверждения, что *состояние частицы описывается функцией координат $\psi(\mathbf{r})$* , которая определяет вероятность значений \mathbf{r} согласно формуле (2.92). Функция $\psi(\mathbf{r})$ называется *волновой функцией* частицы. Она задаёт вектор состояния частицы в так называемом координатном представлении (\mathbf{r} -представление).

Это описание относится к заданному моменту времени, например, $t = 0$. Для учета изменения вероятности (2.92) с течением времени, волновую функцию ψ следует рассматривать как величину, зависящую не только от координатных переменных x, y, z , но и от времени t .

В координатном представлении всем векторам состояния частицы сопоставляются волновые функции – с помощью формул, аналогичных (2.89) – (2.91). Выясним, как по волновым функциям найти скалярное произведение векторов состояния. Пусть компонентами вектора состояния $|\phi\rangle$ являются амплитуды вероятности $\phi_{\mathbf{r}}$, заданные посредством волновой функции $\phi(\mathbf{r})$ этого состояния:

$$\phi_{\mathbf{r}} = \langle \mathbf{r} | \phi \rangle = \sqrt{dV} \phi(\mathbf{r}). \quad (2.93)$$

Для вычисления скалярного произведения $\langle \phi | \psi \rangle$ следует произведения $\phi_{\mathbf{r}}^* \psi_{\mathbf{r}}$ просуммировать по всем значениям \mathbf{r} . С учётом (2.91) и (2.93) получим

$$\langle \phi | \psi \rangle = \sum_{\mathbf{r}} \phi_{\mathbf{r}}^* \psi_{\mathbf{r}} = \sum_{\mathbf{r}} dV \phi(\mathbf{r})^* \psi(\mathbf{r}).$$

Перейдем здесь к пределу $dV \rightarrow 0$, заменяя суммирование по \mathbf{r} интегрированием по x , y и z ; при этом элемент объема dV мы будем обозначать как $d^3\mathbf{r}$:

$$\sum_{\mathbf{r}} dV \dots \rightarrow \int d^3\mathbf{r} \dots \quad (2.94)$$

Таким образом, скалярное произведение векторов состояния частицы вычисляется по формуле

$$\langle \phi | \psi \rangle = \int d^3\mathbf{r} \phi(\mathbf{r})^* \psi(\mathbf{r}), \quad (2.95)$$

где $\phi(\mathbf{r})$ и $\psi(\mathbf{r})$ – волновые функции соответственно состояний $|\phi\rangle$ и $|\psi\rangle$. В частности, условие нормировки (2.26) принимает вид

$$\int d^3\mathbf{r} |\psi(\mathbf{r})|^2 = 1. \quad (2.96)$$

2.5.2. Собственные функции

Пусть $|k\rangle$ – базисные векторы, собственные для оператора какой-либо физической величины f . В состоянии $|k\rangle$ величина f имеет определённое значение $f = f_k$. Обозначим волновую функцию состояния $|k\rangle$ как $\psi_k(\mathbf{r})$. Волновые функции $\psi_k(\mathbf{r})$ называются *собственными функциями данной физической величины f* .

Покажем, что набор собственных функций какой-либо физической величины может играть роль базиса для разложения волновых функций частицы. Квантово-механический принцип суперпозиции гласит, что для произвольного вектора состояния $|\psi\rangle$ справедливо разложение (2.10) по какому-либо базису $|k\rangle$:

$$|\Psi\rangle = \sum_k A_k |k\rangle.$$

Умножив обе стороны этого равенства на $|\mathbf{r}\rangle$, получим:

$$\langle \mathbf{r} | \Psi \rangle = \sum_k A_k \langle \mathbf{r} | k \rangle.$$

Появившиеся здесь амплитуды вероятности $\langle \mathbf{r} | k \rangle$ связаны с функциями $\psi_k(\mathbf{r})$ формулой, аналогичной (2.91):

$$\langle \mathbf{r} | k \rangle = \sqrt{dV} \psi_k(\mathbf{r}). \quad (2.97)$$

С учётом (2.91) и (2.97) полученное выше равенство принимает вид:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_k A_k \psi_k(\mathbf{r}). \quad (2.98)$$

Таким образом, волновая функция ψ может быть разложена по собственным функциям ψ_k любой физической величины. Квадрат модуля $|A_k|^2$ каждого из коэффициентов разложения (2.98) равен вероятности значения f_k величины f у частицы в состоянии, описываемом волновой функцией $\psi(\mathbf{r})$. Коэффициенты разложения A_k , согласно (2.16) и (2.95), определяются формулой

$$A_k = \langle k | \Psi \rangle = \int d^3\mathbf{r} \psi_k(\mathbf{r})^* \psi(\mathbf{r}). \quad (2.99)$$

Условие ортонормированности (2.12) базисных векторов $|k\rangle$ означает, в силу (2.95), что собственные функции ψ_k должны быть нормированными и взаимно ортогональными, то есть:

$$\int d^3\mathbf{r} \psi_{k'}(\mathbf{r})^* \psi_k(\mathbf{r}) = \delta_{k'k}. \quad (2.100)$$

Установим ещё одно свойство собственных функций. Разложение единичного оператора (2.36), которое можно интерпретировать как условие полноты ортонормированного базиса $|k\rangle$, поместим перед $|\mathbf{r}\rangle$ в формуле (2.88); получим:

$$\sum_k \langle \mathbf{r}' | k \rangle \langle k | \mathbf{r} \rangle = \delta_{\mathbf{r}'\mathbf{r}}.$$

Учитывая формулу (2.97) и равенство $\langle k | \mathbf{r} \rangle = \langle \mathbf{r} | k \rangle^*$, приходим к соотношению

$$\sum_k \psi_k(\mathbf{r}') \psi_k(\mathbf{r})^* = \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}). \quad (2.101)$$

Функция $\delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r})$ при нашем способе «вывода» равенства (2.101) возникает как отношение

$$\delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) = \delta_{\mathbf{r}'\mathbf{r}} / dV, \quad (2.102)$$

которое при $dV \rightarrow 0$ имеет хорошо известные свойства трёхмерной *дельта-функции* Дирака. Действительно, достаточно очевидное соотношение

$$\sum_{\mathbf{r}} \delta_{\mathbf{r}'\mathbf{r}} \phi(\mathbf{r}) = \phi(\mathbf{r}')$$

с помощью (2.102) и (2.94) принимает вид формулы, определяющей основное свойство трёхмерной δ -функции:

$$\int d^3\mathbf{r} \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}) = \phi(\mathbf{r}'), \quad (2.103)$$

где $\phi(\mathbf{r})$ – произвольная функция. Кроме того, при масштабном преобразовании координат, $\mathbf{r} \rightarrow \alpha \mathbf{r}$, где α – любая вещественная постоянная, элемент объёма dV заменяется на $|\alpha|^3 dV$, так что с учётом

равенства $\delta_{\alpha\mathbf{r}',\alpha\mathbf{r}} = \delta_{\mathbf{r}'\mathbf{r}}$ из (2.102) следует ещё одно характерное свойство δ -функции:

$$\delta(\alpha\mathbf{r}) = |\alpha|^{-3} \delta(\mathbf{r}).$$

Наконец, подставив в (2.102) выражения $\delta_{\mathbf{r}'\mathbf{r}} = \delta_{x'x} \delta_{y'y} \delta_{z'z}$ и $dV = dx dy dz$, находим, что трёхмерная δ -функция связана с тремя обычными (одномерными) δ -функциями:

$$\delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) = \delta(x' - x) \delta(y' - y) \delta(z' - z).$$

Эти пояснения, конечно, не имеют характера строгого вывода; они лишь иллюстрируют возможность перехода от дискретных переменных к непрерывным примененным нами простым способом.

Таким образом, волновые функции частицы подчиняются соотношениям (2.98)–(2.101), которые необходимы в качестве гарантии того, что статистическая интерпретация волновых функций не ведет к каким-либо противоречиям. Действительно, эти соотношения по своему смыслу и по форме полностью аналогичны соотношениям (2.5), (2.8), (2.6), (2.7) для амплитуд вероятности, постулированным в разделе 2.1.

2.5.3. Действие операторов на волновую функцию

Базисные векторы $|\mathbf{r}\rangle$ описывают состояния частицы с определёнными координатами и могут в соответствии с (2.57) рассматриваться как собственные векторы оператора координат $\hat{\mathbf{r}}$, определяемого равенством

$$\hat{\mathbf{r}} |\mathbf{r}\rangle = \mathbf{r} |\mathbf{r}\rangle. \quad (2.104)$$

Символ $\hat{\mathbf{r}}$ объединяет три линейных оператора декартовых координат \hat{x} , \hat{y} и \hat{z} , коммутативных друг с другом. С помощью ортов \mathbf{e}_k декартовой системы координат (в \mathbf{r} -пространстве), не являющихся операторами, векторный оператор $\hat{\mathbf{r}}$ представляется в виде

$$\hat{\mathbf{r}} = e_x \hat{x} + e_y \hat{y} + e_z \hat{z}. \quad (2.105)$$

Выясним, как преобразуется волновая функция произвольного состояния $|\psi\rangle$ под действием оператора координат. Применив $\hat{\mathbf{r}}$ к обеим сторонам равенства (2.89) и учитывая (2.104), получим:

$$\hat{\mathbf{r}} |\psi\rangle = \sum_{\mathbf{r}} \psi_{\mathbf{r}} \hat{\mathbf{r}} |\mathbf{r}\rangle = \sum_{\mathbf{r}} \psi_{\mathbf{r}} \mathbf{r} |\mathbf{r}\rangle.$$

Видно, что действие оператора $\hat{\mathbf{r}}$ сводится к замене функций $\psi_{\mathbf{r}}$ функциями $\mathbf{r}\psi_{\mathbf{r}}$. Переходя к волновым функциям согласно (2.90) и (2.91), заключаем, что в координатном представлении оператор $\hat{\mathbf{r}}$ действует на произвольную волновую функцию $\psi(\mathbf{r})$ просто как оператор умножения на \mathbf{r} , то есть

$$\hat{\mathbf{r}} \psi(\mathbf{r}) = \mathbf{r} \psi(\mathbf{r}). \quad (2.106)$$

Возьмем теперь любое операторное выражение $U(\hat{\mathbf{r}})$, содержащее только операторы координат $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$, и представим себе, что мы разложили его в ряд по степеням $\hat{\mathbf{r}}$ (то есть по степеням $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$). Тогда, с учетом (2.106) легко убедиться, что оператор $U(\hat{\mathbf{r}})$ умножает волновую функцию на функцию $U(\mathbf{r})$:

$$U(\hat{\mathbf{r}}) \psi(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}). \quad (2.107)$$

Попутно подчеркнём, что *времени t не сопоставляется какой-либо оператор*. Это связано с тем, что понятие состояния «с определённым значением времени» (а также и с неопределённым) не имеет физического смысла, так как оно не соответствует какой-либо постановке опыта.

Если \hat{f} – произвольный линейный оператор, а $|\psi\rangle$ – вектор состояния, описываемый волновой функцией $\psi(\mathbf{r})$, то волновую функцию для $\hat{f} |\psi\rangle$ обозначают символом $\hat{f} \psi(\mathbf{r})$ – как результат действия на $\psi(\mathbf{r})$ оператора \hat{f} , заданного в координатном представлении. Зная, как именно

оператор физической величины \hat{f} преобразует волновые функции, можно находить средние значения физической величины f по формуле

$$\langle f \rangle = \langle \psi | \hat{f} | \psi \rangle = \int d^3\mathbf{r} \psi(\mathbf{r})^* \hat{f} \psi(\mathbf{r}), \quad (2.108)$$

следующей из (2.59) и (2.95).

Важной задачей квантовой теории является также определение спектра f_k и собственных функций $\psi_k(\mathbf{r})$ той или иной физической величины f . С этой целью следует решать уравнение (2.57); в координатном представлении оно принимает вид:

$$\hat{f} \psi_k(\mathbf{r}) = f_k \psi_k(\mathbf{r}). \quad (2.109)$$

Для того чтобы перейти к нахождению явного вида операторов импульса, момента импульса и связанных с ними физических величин, выясним теперь, как действует на волновые функции оператор $\hat{T}(\delta\mathbf{r})$ перемещения на произвольное бесконечно малое расстояние $\delta\mathbf{r}$. Наглядно такое преобразование можно представлять себе как параллельный перенос или поворот всего «облака» вероятности $|\psi(\mathbf{r})|^2$.

Действие оператора $\hat{T}(\delta\mathbf{r})$ на базисные векторы $|\mathbf{r}\rangle$ определяется тем, что в состоянии $|\mathbf{r}\rangle$ частица должна обнаруживаться просто как классическая материальная точка с координатами \mathbf{r} , и, следовательно, после перемещения на $\delta\mathbf{r}$ она должна оказаться в состоянии $|\mathbf{r} + \delta\mathbf{r}\rangle$:

$$\hat{T}(\delta\mathbf{r}) |\mathbf{r}\rangle = |\mathbf{r} + \delta\mathbf{r}\rangle. \quad (2.110)$$

Оператор обратного преобразования при $\delta\mathbf{r} \rightarrow 0$ описывает бесконечно малое перемещение в противоположном направлении:

$$\hat{T}(\delta\mathbf{r})^{-1} = \hat{T}(-\delta\mathbf{r}). \quad (2.111)$$

Мы считаем, что рассматриваемые операторы \hat{T} сопоставляют каждому вектору из полного набора ортонормированных базисных векторов $|\mathbf{r}\rangle$ векторы $|\mathbf{r} + \delta\mathbf{r}\rangle$ из того же самого набора. Это эквивалентно некоторым перестановкам «имён» точек \mathbf{r} -пространства. Согласно пояснениям в разделе 2.4.3 такие операторы унитарны:

$$\hat{T}(\delta\mathbf{r})^+ = \hat{T}(\delta\mathbf{r})^{-1}. \quad (2.112)$$

Из (2.91) ясно, что волновая функция вектора состояния $\hat{T}|\psi\rangle$ определяется его скалярным произведением с вектором $|\mathbf{r}\rangle$. Запишем это скалярное произведение, а затем воспользуемся равенствами (2.112) и (2.111):

$$\langle \mathbf{r} | \hat{T} | \psi \rangle = \langle \hat{T}^+ \mathbf{r} | \psi \rangle = \langle \hat{T}^{-1} \mathbf{r} | \psi \rangle = \langle \mathbf{r} - \delta\mathbf{r} | \psi \rangle.$$

Правой части получившегося равенства соответствует, очевидно, функция $\psi(\mathbf{r} - \delta\mathbf{r})$. Таким образом,

$$\hat{T}(\delta\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} - \delta\mathbf{r}). \quad (2.113)$$

Разлагая функцию (2.113) в ряд по степеням $\delta\mathbf{r}$ и удерживая слагаемые только нулевой и первой степени, имеем следующее равенство, справедливое в линейном приближении по $\delta\mathbf{r}$

$$\begin{aligned} \hat{T}(\delta\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) &= \psi(\mathbf{r}) - \left(\delta x \frac{\partial \psi}{\partial x} + \delta y \frac{\partial \psi}{\partial y} + \delta z \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) = \\ &= \psi(\mathbf{r}) - \delta\mathbf{r} \cdot \nabla \psi = (1 - \delta\mathbf{r} \cdot \nabla) \psi(\mathbf{r}). \end{aligned}$$

Отсюда видно, что в линейном по $\delta\mathbf{r}$ приближении оператор перемещения $\hat{T}(\delta\mathbf{r})$, действующий на волновые функции, имеет вид:

$$\hat{T}(\delta\mathbf{r}) = 1 - \delta\mathbf{r} \cdot \nabla, \quad \delta\mathbf{r} \rightarrow 0. \quad (2.114)$$

Кратко затронем вопросы обоснованности полученных в этом разделе формул.

Мы предполагали для простоты, что все соотношения, связанные с понятием конечномерного пространства состояний, должны остаться в силе и при $dV \rightarrow 0$, $N \rightarrow \infty$. Это требование физически естественно, так как в любом эксперименте принимаются во внимание лишь конечные наборы событий; предел $dV \rightarrow 0$, $N \rightarrow \infty$ является абстракцией. Введение непрерывных функций $\psi(\mathbf{r})$ вместо дискретных амплитуд $\psi_{\mathbf{r}}$ напоминает интерполяцию, которая всегда сопутствует, например, построению графика (непрерывной кривой) по экспериментальным точкам. Формальный характер перехода к пределу $dV \rightarrow 0$ очевиден также из того, что при таком переходе в нерелятивистской теории по-прежнему не учитываются физические явления, возникающие на расстояниях, меньших комптоновской длины (см. раздел 1.1.4).

С математической же точки зрения дело обстоит значительно сложнее, так как при $N \rightarrow \infty$ разложения типа (2.98) представляют собой не просто суммы, а бесконечные ряды, сходимость которых требует исследования. Кроме того, понятие оператора, действующего на непрерывные волновые функции, строго говоря, не эквивалентно представлению о конечных матрицах и должно включать отчетливое описание класса рассматриваемых функций (например, для применения формулы (2.114) требуется существование градиента $\nabla\psi$). Тем не менее, как выясняется в курсе математической физики, на случай $N \rightarrow \infty$ определённым образом обобщаются все существенные понятия, характеризующие конечномерное пространство состояний.

Строгий анализ затронутых вопросов выходит за рамки нашего изложения. Отметим лишь одно обстоятельство, существенное в практических вычислениях. Часто в задачах квантовой механики удобно считать, что движение частиц ограничено областью \mathbf{r} -пространства с конечным, хотя и макроскопическим, объемом V . Учитывая точки \mathbf{r} только внутри такой области (например, внутри куба объемом V), мы имеем ситуацию, подобную конечномерному случаю, так как при конечной величине dV число $N = V/dV$ конечно. При этом для обеспечения унитарности операторов $\hat{T}(\delta\mathbf{r})$ в случае, когда речь идёт о

параллельных переносах, приходится считать, что точки \mathbf{r} , «уходящие» при таких переносах за пределы рассматриваемого куба, «возвращаются» в него с противоположной стороны. В практических расчетах дело сводится к применению так называемых *периодических граничных условий* для волновых функций.

Однако, подобные условия бывают и нежелательными. От любых граничных условий, связанных со стенками куба, можно освободиться, если перейти к пределу с $V \rightarrow \infty$ и подчинить волновые функции физически естественному требованию ограниченности при $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$. Но тогда возникают существенные отличия от конечномерного случая. Как будет видно в конкретных примерах, при $V \rightarrow \infty$ спектр значений некоторых физических величин становится частично или полностью *непрерывным* (в отличие от всегда дискретного спектра собственных значений любой конечной матрицы), причем нормировочный интеграл (2.96) для волновых функций состояний с определенным значением непрерывной физической величины расходится. В таких случаях, в зависимости от характера физической задачи, можно выбирать различные нормировочные условия.

2.6. ИМПУЛЬС ЧАСТИЦЫ

2.6.1. Оператор импульса в координатном представлении

Введём в рассмотрение оператор импульса $\hat{\mathbf{p}}$, основываясь на формуле, аналогичной (2.64):

$$\hat{T}(\mathbf{a}) = 1 - i \mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{p}} / \hbar, \quad \mathbf{a} \rightarrow 0. \quad (2.115)$$

Здесь $\hat{T}(\mathbf{a})$ – оператор бесконечно малого параллельного переноса. В координатном представлении он, очевидно, должен совпадать с оператором перемещения (2.114) при $\delta \mathbf{r} = \mathbf{a}$:

$$\hat{T}(\mathbf{a}) = 1 - \mathbf{a} \cdot \nabla.$$

Сравнивая обе формулы для $\hat{T}(\mathbf{a})$ и учитывая, что они верны при произвольном бесконечно малом \mathbf{a} , находим явное выражение для оператора импульса $\hat{\mathbf{p}}$ частицы в координатном представлении

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla. \quad (2.116)$$

В декартовой системе координат оператор набла ∇ имеет вид

$$\nabla = \mathbf{e}_x \frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{e}_y \frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{e}_z \frac{\partial}{\partial z}. \quad (2.117)$$

Таким образом, декартовы проекции оператора импульса $\hat{\mathbf{p}}$ есть

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}. \quad (2.118)$$

Выведем коммутационные соотношения для компонент операторов $\hat{\mathbf{p}}$ и $\hat{\mathbf{r}}$. Учитывая (2.104) и (2.110) с $\delta\mathbf{r} = \mathbf{a}$, замечаем, что имеют место следующие равенства

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{r}} \hat{T}(\mathbf{a}) |\mathbf{r}\rangle &= \hat{\mathbf{r}} |\mathbf{r} + \mathbf{a}\rangle = (\mathbf{r} + \mathbf{a}) |\mathbf{r} + \mathbf{a}\rangle, \\ \hat{T}(\mathbf{a}) \hat{\mathbf{r}} |\mathbf{r}\rangle &= \mathbf{r} \hat{T}(\mathbf{a}) |\mathbf{r}\rangle = \mathbf{r} |\mathbf{r} + \mathbf{a}\rangle. \end{aligned}$$

Составив разность этих выражений, получим

$$(\hat{\mathbf{r}} \hat{T}(\mathbf{a}) - \hat{T}(\mathbf{a}) \hat{\mathbf{r}}) |\mathbf{r}\rangle = \mathbf{a} |\mathbf{r} + \mathbf{a}\rangle.$$

В левую часть подставим формулу (2.115), справедливую для $\hat{T}(\mathbf{a})$ в линейном приближении по \mathbf{a} . При этом, разумеется, выражение в правой части необходимо записать также лишь в линейном приближении по бесконечно малому параметру \mathbf{a} , то есть следует считать, что $\mathbf{a} |\mathbf{r} + \mathbf{a}\rangle \approx \mathbf{a} |\mathbf{r}\rangle$. Пользуясь обозначением коммутатора (2.79), получим

$$[\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{a}} \cdot \hat{\mathbf{p}}] |\mathbf{r}\rangle = i\hbar \mathbf{a} |\mathbf{r}\rangle.$$

Поскольку это равенство справедливо для каждого базисного вектора $|\mathbf{r}\rangle$, оно должно быть верным и для любой их линейной комбинации (2.89), то есть – для любого вектора состояния. Следовательно, имеет место операторное равенство

$$[\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{a}} \cdot \hat{\mathbf{p}}] = (i\hbar \mathbf{a}) \hat{1}.$$

Применяя для компонент операторов $\hat{\mathbf{r}}$ и $\hat{\mathbf{p}}$ обозначения \hat{x}_k и \hat{p}_l , где $k, l = x, y, z$, представим полученное операторное равенство в виде

$$\sum_l [\hat{x}_k, \hat{p}_l] a_l = \sum_l i\hbar \delta_{kl} a_l \hat{1}.$$

Поскольку здесь компоненты a_l бесконечно малого вектора \mathbf{a} являются независимыми переменными, то стоящие при них выражения в левой и правой части должны быть равны друг другу. Таким образом, имеем *коммутационные соотношения для операторов координат и импульса*:

$$[\hat{x}_k, \hat{p}_l] = i\hbar \delta_{kl}, \quad k, l = x, y, z. \quad (2.119)$$

Параллельные переносы в любых направлениях, в том числе вдоль направлений \mathbf{e}_x , \mathbf{e}_y и \mathbf{e}_z , коммутативны друг с другом. Из этого следует коммутативность операторов \hat{p}_x , \hat{p}_y и \hat{p}_z :

$$[\hat{p}_k, \hat{p}_l] = 0. \quad (2.120)$$

Коммутативность \hat{x}_k и \hat{p}_l при $k \neq l$, как можно видеть из приведённого выше вывода формулы (2.119), связана с тем, что параллельный перенос вдоль одной из координатных осей не сказывается на значениях координат по двум другим осям. Коммутационные соотношения (2.119) и (2.120) можно получить также другим путём – применяя операторы дифференцирования (2.118) к волновым функциям и

учитывая, что в координатном представлении действие операторов \hat{x}_k сводится к умножению волновых функций на x_k (где x_k означает x, y, z).

При $k = l$ коммутаторы (2.119) отличны от нуля

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar, \quad [\hat{y}, \hat{p}_y] = i\hbar, \quad [\hat{z}, \hat{p}_z] = i\hbar, \quad (2.121)$$

и соответствуют формуле (2.82) с $\hat{K} = \hbar\hat{1}$. Для любого нормированного вектора состояния справедливо равенство $\langle K \rangle = \hbar \langle \psi | \hat{1} | \psi \rangle = \hbar$. Следовательно, соотношения неопределённости (2.87) для координат и импульса имеют вид

$$\delta x \delta p_x \geq \hbar/2, \quad \delta y \delta p_y \geq \hbar/2, \quad \delta z \delta p_z \geq \hbar/2. \quad (2.122)$$

Часто эти соотношения применяют в форме (1.15), обсуждавшейся в разделе 1.3.

2.6.2. Состояния с определённым импульсом

Вследствие некоммутативности (2.121) операторов координат и импульса не существуют состояния $|\mathbf{r}, \mathbf{p}\rangle$, в которых частица имела бы одновременно определённые значения \mathbf{r} и \mathbf{p} (см. раздел 2.4.5). Состояния же $|\mathbf{p}\rangle \equiv |p_x, p_y, p_z\rangle$, характеризующиеся только определёнными значениями всех трёх компонент импульса, теоретически допустимы, поскольку коммутаторы (2.120) операторов проекций импульса равны нулю. Такие состояния следует найти как решения задачи (2.57) с оператором импульса $\hat{\mathbf{p}}$ в роли оператора физической величины \hat{f} :

$$\hat{\mathbf{p}} |\mathbf{p}\rangle = \mathbf{p} |\mathbf{p}\rangle. \quad (2.123)$$

Волновая функция $\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$ состояния $|\mathbf{p}\rangle$ должна удовлетворять уравнению (2.123), записанному в координатном представлении аналогично (2.109):

$$-i\hbar\nabla\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \mathbf{p}\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}). \quad (2.124)$$

Легко проверить, что решение этого дифференциального уравнения имеет вид

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = C e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}, \quad (2.125)$$

где C – нормировочная постоянная. Отметим, что при замене в (2.125) \mathbf{r} на $(\mathbf{r} - \mathbf{a})$, соответствующей воздействию оператора параллельного переноса по формуле (2.113) с $\delta\mathbf{r} = \mathbf{a}$, волновая функция $\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$ приобретает фазовый множитель вида (2.56). Это, конечно, согласуется с соображениями, рассмотренными в разделе 2.4.1.

Фазу экспоненты (2.125) часто записывают в виде $\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}$, где $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$ – так называемый *волновой вектор* частицы. Поверхностями постоянной фазы ($\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} = \text{const}$) являются плоскости, перпендикулярные вектору \mathbf{k} , поэтому функцию $\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$ называют *плоской волной*. Длина волны λ определяется как расстояние между поверхностями постоянной фазы, соответствующими разности фаз 2π . Найдя λ указанным путем, получим: $\lambda = 2\pi/|\mathbf{k}| = 2\pi\hbar/|\mathbf{p}|$. Таким образом, в состоянии с определённым импульсом частица характеризуется дебройлевской длиной волны (1.8). Здесь этот результат, к которому впервые пришел Луи де Бройль, уже не является предположением, а имеет статус строгого следствия принципов квантовой теории.

Поскольку $|\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})|^2 = |C|^2$ есть постоянная, то частица в состоянии с определённым импульсом \mathbf{p} должна обнаруживаться в любой точке \mathbf{r} с одной и той же вероятностью. Будем интересоваться значениями волновых функций только внутри куба конечного объёма $V = L^3$ (с центром в начале координат), размер которого L много больше любого физически существенного масштаба длины в той или иной задаче. Тогда вне куба значения волновых функций нам не важны, так что, в частности, их можно считать периодически повторяющимися. Нормировочный интеграл (2.96) по объёму куба для функций (2.125) имеет вид

$$\langle \mathbf{p} | \mathbf{p} \rangle = \int d^3 \mathbf{r} |\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})|^2 = V |C|^2. \quad (2.126)$$

Приравняв это выражение единице, находим нормировочный множитель в (2.125):

$$C = 1/\sqrt{V}. \quad (2.127)$$

Условие периодичности функции $\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$ по x есть

$$\psi_{\mathbf{p}}(x+L, y, z) = \psi_{\mathbf{p}}(x, y, z). \quad (2.128)$$

Из него следует, что

$$e^{i p_x L / \hbar} = 1.$$

Такие же уравнения для p_y и p_z следуют из аналогичных условий периодичности $\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$ по y и z . Решения этих уравнений дают нам спектр значений импульса \mathbf{p} для частицы, движущейся в конечном объеме $V = L^3$:

$$p_x = \frac{2\pi\hbar}{L} n_x, \quad p_y = \frac{2\pi\hbar}{L} n_y, \quad p_z = \frac{2\pi\hbar}{L} n_z, \quad (2.129)$$

где числа n_x, n_y и n_z независимо друг от друга принимают значения $0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$. Интервалы между соседними значениями проекций импульса составляют

$$\Delta p_x = \Delta p_y = \Delta p_z = 2\pi\hbar / L. \quad (2.130)$$

Они стремятся к нулю при $L \rightarrow \infty$.

Таким образом, при конечном нормировочном объёме $V = L^3$ импульс \mathbf{p} дискретен, но эта дискретность часто не существенна, поскольку интервалы (2.130) становятся сколь угодно малыми при выборе достаточно большого L . В пределе $V \rightarrow \infty$ собственные значения p_x, p_y и p_z образуют *непрерывный спектр*, простирающийся от $-\infty$ до $+\infty$.

На практике невозможно провести абсолютно точное измерение непрерывной физической величины. Обозначим как $d^3\mathbf{p}$ физически малый элемент объёма в \mathbf{p} -пространстве (можно считать, что он связан с разрешающей способностью детекторов при измерениях импульса). Элемент $d^3\mathbf{p}$ при выборе достаточно большого нормировочного объёма V содержит большое число значений импульса \mathbf{p} , равное с учётом (2.130) величине

$$\frac{d^3\mathbf{p}}{\Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z} = \frac{V d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (2.131)$$

Плоские волны (2.125) с нормировочным множителем (2.127) образуют систему ортонормированных функций. Чтобы убедиться в этом, надо вычислить интеграл (2.100) по объёму нормировочного куба $V = L^3$:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p}' | \mathbf{p} \rangle &= \frac{1}{L^3} \int d^3\mathbf{r} e^{-i\mathbf{p}'\cdot\mathbf{r}/\hbar} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} = \\ &= \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} dx e^{i(p_x - p'_x)x/\hbar} \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} dy e^{i(p_y - p'_y)y/\hbar} \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} dz e^{i(p_z - p'_z)z/\hbar}. \end{aligned}$$

Рассмотрим входящий в это выражение интеграл по x . При $p'_x = p_x$ подынтегральное выражение равно единице, и величина интеграла, умноженная на $1/L$, также равна единице. При $p'_x \neq p_x$, с учетом спектра значений импульса (2.129), получим

$$\frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} dx e^{i(p_x - p'_x)x/\hbar} = \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} dx e^{i\frac{2\pi}{L}(n_x - n'_x)x} = \frac{e^{i\pi(n_x - n'_x)} - e^{-i\pi(n_x - n'_x)}}{2\pi i(n_x - n'_x)} = 0,$$

так что:

$$\frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} dx e^{i(p_x - p'_x)x/\hbar} = \delta_{n'_x, n_x} = \delta_{p'_x, p_x}.$$

Аналогично вычисляются интегралы по y и z . Таким образом, мы убеждаемся, что состояния $|\mathbf{p}\rangle$ обладают свойством

$$\langle \mathbf{p}' | \mathbf{p} \rangle = \delta_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}, \quad (2.132)$$

позволяющим рассматривать их как ортонормированный базис, равноправный с базисом координатного представления $|\mathbf{r}\rangle$.

2.6.3. Распределение вероятности для импульса

В состоянии $|\mathbf{p}\rangle$ частица должна обнаруживаться в каждом элементе dV произвольно большого объёма V с одной и той же вероятностью, равной

$$|\langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle|^2 = dV |\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})|^2 = dV / V. \quad (2.133)$$

Поскольку $\langle \mathbf{p} | \mathbf{r} \rangle = \langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle^*$, вероятность $|\langle \mathbf{p} | \mathbf{r} \rangle|^2$ обнаружения каждого значения \mathbf{p} в состоянии $|\mathbf{r}\rangle$ совпадает с величиной (2.133). Другими словами, в состоянии $|\mathbf{r}\rangle$, описывающем частицу, достоверно локализованную в сколь угодно малом объёме dV , все значения импульса \mathbf{p} равновероятны.

Состояния $|\mathbf{p}\rangle$ и $|\mathbf{r}\rangle$ дают, очевидно, идеализированное описание. В физически реализуемых состояниях $|\psi\rangle$ вероятность обнаружения частицы заметно отличается от нуля в какой-то протяжённой и при этом не бесконечной области \mathbf{r} -пространства. Такую область всегда можно представлять себе как расположенную внутри достаточно большого нормировочного куба. Вне куба картина физически не существенна, поэтому допустимо полагать, что все рассматриваемые волновые функции $\psi(\mathbf{r})$ периодичны, как и функции $\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$. В таком случае любая функция $\psi(\mathbf{r})$ может быть разложена по периодическим функциям $\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$ в соответствии с формулами (2.98), (2.99):

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{p}} A_{\mathbf{p}} \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{p}} A_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}, \quad (2.134)$$

$$A_{\mathbf{p}} = \frac{1}{\sqrt{V}} \int d^3\mathbf{r} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \psi(\mathbf{r}). \quad (2.135)$$

Обозначим интеграл в (2.135) как $a(\mathbf{p})$:

$$a(\mathbf{p}) = \int d^3\mathbf{r} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \psi(\mathbf{r}). \quad (2.136)$$

Здесь интегрирование ведётся по объёму V нормировочного куба. В математике величина $a(\mathbf{p})$, определенная формулой (2.136), называется компонентой Фурье функции $\psi(\mathbf{r})$. Суммирование в (2.134) ведётся по дискретным значениям импульса (2.129). С математической точки зрения (2.134) есть разложение волновой функции в ряд Фурье.

В символической форме этот ряд представляет собой разложение вектора состояния $|\psi\rangle$ по базису $|\mathbf{p}\rangle$:

$$|\psi\rangle = \sum_{\mathbf{p}} A_{\mathbf{p}} |\mathbf{p}\rangle. \quad (2.137)$$

Поскольку коэффициенты разложения имеют смысл амплитуд вероятности, мы заключаем, что в состоянии $|\psi\rangle$ вероятность обнаружить у частицы определённое значение импульса \mathbf{p} равна величине:

$$|A_{\mathbf{p}}|^2 = |a(\mathbf{p})|^2 / V. \quad (2.138)$$

Физически предпочтительнее рассматривать вероятность $dw_{\mathbf{p}}$ обнаружения любого из возможных значений \mathbf{p} в интервале $d^3\mathbf{p}$. Умножив (2.138) на число (2.131) значений импульса в указанном интервале, получаем выражение, которое уже не содержит произвольный

нормировочный объём V и в пределе с $V \rightarrow \infty$ становится точным даже при сколь угодно малом $d^3\mathbf{p}$:

$$dw_{\mathbf{p}} = \frac{|a(\mathbf{p})|^2}{(2\pi\hbar)^3} d^3\mathbf{p}. \quad (2.139)$$

Множитель при $d^3\mathbf{p}$ в (2.139) имеет смысл плотности вероятности для значений \mathbf{p} , поэтому величину $a(\mathbf{p})/(2\pi\hbar)^{3/2}$ называют волновой функцией в импульсном представлении (\mathbf{p} -представление).

Если функция $a(\mathbf{p})$ задана, то можно восстановить вид $\psi(\mathbf{r})$. Действительно, в силу (2.134) – (2.136) имеем:

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}} a(\mathbf{p}) e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}. \quad (2.140)$$

В практических расчётах указанное здесь суммирование по \mathbf{p} сводится к интегрированию по p_x , p_y и p_z с учётом числа (2.131) состояний в элементе $d^3\mathbf{p}$:

$$\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}} \dots \rightarrow \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \dots \quad (2.141)$$

Формула (2.141) соответствует переходу к пределу с бесконечно большим нормировочным объёмом, $V \rightarrow \infty$; при этом (2.140) принимает вид

$$\psi(\mathbf{r}) = \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} a(\mathbf{p}) e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}, \quad (2.142)$$

где для $a(\mathbf{p})$ справедливо выражение (2.136) с бесконечными пределами интегрирования по x , y и z . Равенство (2.142) называют разложением функции $\psi(\mathbf{r})$ в интеграл Фурье по плоским волнам.

2.7. УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

2.7.1. Оператор энергии и эволюция состояний во времени

Введём в рассмотрение *оператор энергии* \hat{H} , основываясь на соображениях, изложенных в разделе 2.4. Эрмитов линейный оператор \hat{H} в случае квантового объекта, не подверженного переменному внешнему полю, не зависит от времени t и связан с унитарным оператором $\hat{T}(t)$ переноса во времени формулой, аналогичной (2.63):

$$\hat{T}(t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar}. \quad (2.143)$$

Смысл оператора (2.143) заключается в том, что под действием такого оператора произвольно заданный в момент времени $t=0$ (начальный) вектор состояния $|\psi(0)\rangle$ преобразуется, согласно определению (2.46), в вектор состояния $|\psi(t)\rangle$, относящийся к моменту времени t :

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar} |\psi(0)\rangle. \quad (2.144)$$

Это соотношение представляет собой закон изменения состояния со временем, применимый к любой замкнутой квантовой системе (или к системе, находящейся в постоянном внешнем поле). Дифференцируя (2.144) по параметру t , получим

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \frac{-i}{\hbar} \hat{H} e^{-i\hat{H}t/\hbar} |\psi(0)\rangle = \frac{-i}{\hbar} \hat{H} |\psi(t)\rangle.$$

Следовательно, в дифференциальной форме закон эволюции вектора состояния во времени (квантово-механическое уравнение движения) имеет следующий вид

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle. \quad (2.145)$$

Оператор энергии \hat{H} , таким образом, определяет скорость изменения состояний со временем и поэтому играет фундаментальную роль при описании квантового объекта. Разным объектам соответствуют различные явные выражения этого оператора. Если вид оператора \hat{H} известен, то с помощью уравнения (2.145) можно найти векторы состояний рассматриваемой физической системы. Дифференциальное уравнение (2.145) выражает более общий закон, чем результат его интегрирования (2.144) с не зависящим от времени оператором \hat{H} ; уравнение (2.145) применимо также к системам, находящимся в переменном внешнем поле (в таких случаях \hat{H} зависит от времени t , и формула (2.144) становится неприменимой); мы, однако, их не будем рассматривать вплоть до раздела 6.1.

Уравнение (2.145) – основное в квантовой механике. В более частной форме, относящейся к нерелятивистской частице (см. ниже), оно было установлено Э. Шредингером и поэтому называется *уравнением Шредингера*. Это уравнение называют также *волновым уравнением* квантовой механики.

В классической механике физическая система характеризуется функцией Гамильтона H , представляющей энергию системы, выраженную через координаты и импульсы частиц. В связи с этим квантово-механический оператор энергии \hat{H} принято называть *оператором Гамильтона* или *гамильтонианом* системы.

2.7.2. Стационарные состояния

Собственные векторы $|n\rangle$ оператора Гамильтона \hat{H} описывают состояния, в которых энергия системы имеет определённые значения ε_n . Эти векторы, а также сами собственные значения энергии ε_n определяются уравнением

$$\hat{H}|n\rangle = \varepsilon_n |n\rangle. \quad (2.146)$$

Состояния с определённой энергией принято называть также *стационарными состояниями*. О стационарном состоянии с наименьшим возможным значением энергии говорят как об *основном* состоянии системы, отличая его тем самым от остальных (возбуждённых) состояний. Номер n в общем случае состоит из нескольких индексов, называемых *квантовыми числами* стационарного состояния.

При действии оператора переноса во времени (2.143) на $|n\rangle$ символ оператора \hat{H} заменяется согласно (2.146) его собственным значением ε_n . Поэтому формула (2.144) в применении к стационарному состоянию $|n\rangle$, рассматриваемому как начальное состояние $|\psi(0)\rangle$, записывается в виде

$$|\psi_n(t)\rangle = e^{-i\varepsilon_n t/\hbar} |n\rangle. \quad (2.147)$$

Таким образом, зависимость вектора стационарного состояния $|\psi_n(t)\rangle$ от времени сводится лишь к фазовому множителю, что, конечно, согласуется с рассмотрением в разделе 2.4.1.

Из стационарных состояний системы всегда можно образовать полный ортонормированный базис для разложения любых состояний данной системы. Такой базис выбирается как совокупность векторов состояния $|n\rangle$, собственных одновременно для \hat{H} и для всех тех операторов, которые коммутируют с \hat{H} и друг с другом. Подобный набор операторов называют *полным* набором. Отметим, что выбор полного набора операторов (и, соответственно, базиса стационарных состояний) может быть не единственным, если среди операторов, коммутирующих с гамильтонианом, найдутся не коммутативные друг с другом операторы.

Пусть произвольное начальное состояние $|\psi(0)\rangle$ задано с помощью коэффициентов A_n разложения по ортонормированному базису стационарных состояний $|n\rangle$:

$$|\psi(0)\rangle = \sum_n A_n |n\rangle.$$

Подставляя это разложение в (2.144) и учитывая, что под действием линейного оператора (2.143) векторы состояния $|n\rangle$ приобретают вид (2.147), получаем

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n A_n e^{-i\varepsilon_n t/\hbar} |n\rangle. \quad (2.148)$$

Таким образом, общее решение уравнения Шредингера (2.145) с не зависящим от t оператором \hat{H} имеет вид суперпозиции (2.148) стационарных состояний (2.147). Входящие в такое решение собственные значения ε_n и собственные векторы $|n\rangle$ гамильтониана \hat{H} определяются не содержащим время t уравнением (2.146); оно называется *уравнением Шредингера для стационарных состояний*.

2.7.3. Изменение средних значений со временем

Пусть \hat{f} – оператор какой-либо физической величины. Среднее значение $\langle f \rangle$ в стационарном состоянии (2.147) согласно определению (2.59) равно

$$\langle \psi_n(t) | \hat{f} | \psi_n(t) \rangle = e^{i\varepsilon_n t/\hbar} \langle n | \hat{f} | n \rangle e^{-i\varepsilon_n t/\hbar} = f_{nn},$$

где f_{nn} – диагональный матричный элемент оператора \hat{f} в базисе $|n\rangle$, образованном собственными векторами гамильтониана. Если \hat{f} не содержит время t , то величины f_{nn} и, следовательно, $\langle f \rangle$ не зависят от времени; с этим обстоятельством и связан термин «стационарное состояние».

Для состояний $|\psi(t)\rangle$, не являющихся стационарными, среднее значение

$$\langle f \rangle = \langle \psi(t) | \hat{f} | \psi(t) \rangle, \quad (2.149)$$

вообще говоря, зависит от времени. Это видно, например, из выражения, получающегося при подстановке в (2.149) разложения (2.148):

$$\langle \psi(t) | \hat{f} | \psi(t) \rangle = \sum_{n'} \sum_n A_{n'}^* A_n e^{i(\varepsilon_{n'} - \varepsilon_n)t/\hbar} f_{n'n}. \quad (2.150)$$

Выведем формулу для скорости изменения средних значений физических величин со временем. С этой целью продифференцируем (2.149) по t , применяя оператор $\partial/\partial t$ к $\langle \psi(t) |$, \hat{f} и $|\psi(t)\rangle$ поочерёдно. В символической форме получим

$$\frac{d\langle f \rangle}{dt} = \langle \partial\psi/\partial t | \hat{f} | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{f} | \partial\psi/\partial t \rangle + \langle \psi | \frac{\partial \hat{f}}{\partial t} | \psi \rangle. \quad (2.151)$$

Обычно интерес представляют только те состояния $|\psi(t)\rangle$, которые удовлетворяют уравнению движения (2.145); для них

$$\begin{aligned} |\partial\psi/\partial t\rangle &= (-i/\hbar) \hat{H}\psi, \\ \langle \partial\psi/\partial t | &= (i/\hbar) \langle \hat{H}\psi | = (i/\hbar) \langle \psi | \hat{H}^+. \end{aligned}$$

Учитывая эти соотношения и принимая во внимание эрмитовость гамильтониана ($\hat{H}^+ = \hat{H}$), формулу (2.151) можно записать в виде

$$\frac{d\langle f \rangle}{dt} = \langle \psi | \left(\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{f}] + \frac{\partial \hat{f}}{\partial t} \right) | \psi \rangle. \quad (2.152)$$

По определению приняв за *производную оператора \hat{f} по времени* выражение

$$\frac{d\hat{f}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{f}] + \frac{\partial \hat{f}}{\partial t}, \quad (2.153)$$

приходим к сокращённой записи формулы (2.152)

$$\frac{d\langle f \rangle}{dt} = \langle \psi | \frac{d\hat{f}}{dt} | \psi \rangle = \left\langle \frac{df}{dt} \right\rangle. \quad (2.154)$$

Операторы многих физических величин не содержат время явно; для них $\partial\hat{f}/\partial t = 0$. Примерами таких операторов служат $\hat{\mathbf{r}}$, $\hat{\mathbf{p}}$, операторы момента импульса (рассматриваемые в разделе 4), гамильтониан \hat{H} замкнутой системы, а также гамильтониан системы в постоянном внешнем поле.

Из (2.152) видно, что если оператор \hat{f} коммутативен с оператором Гамильтона \hat{H} ,

$$[\hat{f}, \hat{H}] = 0, \quad (2.155)$$

и $\partial\hat{f}/\partial t = 0$, то среднее значение $\langle f \rangle$ не изменяется с течением времени для любого состояния, удовлетворяющего уравнению движения (2.145). Этот результат следует также из (2.150), поскольку при условии (2.155) оператор \hat{f} приводится к диагональному виду в том же базисе $|n\rangle$, что и гамильтониан \hat{H} . Такую величину f называют *сохраняющейся* величиной или *интегралом движения*, а об условии (2.155) говорят как о *законе сохранения* величины, описываемой не зависящим от времени оператором \hat{f} .

Всякий оператор коммутативен сам с собой; в частности, $[\hat{H}, \hat{H}] = 0$. Отсюда видно, что в квантовой механике, как и в классической, энергия замкнутой системы (или системы, находящейся в постоянном внешнем поле) сохраняется.

Покажем, что коммутативность (2.155) обусловливается свойствами симметрии квантово-механической системы. В разделе 2.4.1 мы ввели представление о преобразованиях симметрии на основе аналогии с классической картиной. Теперь, имея квантово-механическое уравнение движения (2.145), можно дать преобразованиям симметрии непосредственное определение.

Подействуем на обе стороны уравнения Шредингера (2.145) каким-либо не зависящим от t унитарным оператором \hat{T} и поместим в правой

части перед $|\psi\rangle$ единичный оператор в форме $\hat{1} = \hat{T}^{-1} \hat{T}$. Приходим к уравнению

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{T} |\psi\rangle = \hat{T} \hat{H} \hat{T}^{-1} \hat{T} |\psi\rangle,$$

в котором $\hat{T}|\psi\rangle$ есть результат преобразования оператором \hat{T} решения $|\psi(t)\rangle$ уравнения Шредингера. Если каждое преобразованное так решение $|\psi(t)\rangle$ удовлетворяет исходному уравнению движения с гамильтонианом \hat{H} , то есть

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{T} |\psi\rangle = \hat{H} \hat{T} |\psi\rangle,$$

то описываемое оператором \hat{T} преобразование называется преобразованием симметрии. Сравнивая выписанные два уравнения, заключаем, что оператор преобразования симметрии удовлетворяет соотношению

$$\hat{T} \hat{H} \hat{T}^{-1} = \hat{H}. \quad (2.156)$$

Отсюда следует условие коммутативности \hat{T} и \hat{H} . Действительно, умножив обе части равенства (2.156) справа на \hat{T} , имеем $\hat{T}\hat{H} = \hat{H}\hat{T}$ или

$$[\hat{T}, \hat{H}] = 0. \quad (2.157)$$

Преобразованием симметрии может быть, в частности, какая-либо дискретная операция, не связанная с непрерывными параметрами; например – отражение относительно некоторой плоскости в \mathbf{r} -пространстве, или отражение относительно точки (операция инверсии $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$). Если двукратное применение операции \hat{T} эквивалентно тождественному преобразованию, то $\hat{T}^{-1} = \hat{T}$. Отсюда с учётом унитарности, $\hat{T}^{-1} = \hat{T}^+$, следует эрмитовость данного оператора \hat{T} , то есть он сам служит оператором сохраняющейся физической величины. Такая величина называется *чётностью* по отношению к рассматриваемому

дискретному преобразованию. Из равенства $\hat{T}^2 = \hat{1}$ легко вывести, что собственными значениями чётности являются числа ± 1 .

Если квантовый объект характеризуется семейством непрерывных преобразований симметрии $\hat{T}(a)$ вида (2.63), то отвечающий этой симметрии оператор физической величины \hat{f} , очевидно, не содержит t (так что $\partial\hat{f}/\partial t = 0$) и коммутирует с гамильтонианом вследствие (2.157). Действительно, подставив в (2.157) оператор $\hat{T}(a)$ в линейном по a приближении (2.64) и учитывая произвольность бесконечно малой величины a , мы приходим к условию коммутативности (2.155).

Аналогично, нескольким непрерывным преобразованиям симметрии, не коммутативным друг с другом, будут соответствовать операторы физических величин (скажем, \hat{f} и \hat{g}), которые между собой не коммутативны, а с гамильтонианом \hat{H} коммутативны. Это приведёт к наличию вырождения в спектре собственных значений ε_n оператора \hat{H} , как отмечалось в разделе 2.4.5.

2.7.4. Представление Гейзенберга

В рассматриваемом математическом аппарате квантовой механики операторы физических величин, характеризующих состояния системы, не содержат время t ; от времени зависят векторы состояний. Такое описание называют *шредингеровским*. Покажем, что существует эквивалентное описание, в котором векторы состояний не зависят от t , а вся зависимость от времени перенесена на операторы; оно называется *гейзенберговским* представлением.

Пусть \hat{H} – гамильтониан замкнутой системы. В этом случае справедлива формула (2.144), связывающая $|\psi(t)\rangle$ с $|\psi(0)\rangle$. Подставим (2.144) в (2.149) и воспользуемся эрмитовым сопряжением унитарного оператора (2.143). С учётом эрмитовости гамильтониана получаем

$$\langle f \rangle = \langle \psi(0) | e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{f} e^{-i\hat{H}t/\hbar} | \psi(0) \rangle.$$

Следовательно, средние значения любой физической величины, относящиеся к моменту времени t , можно найти как по формуле (2.149), так и по формуле

$$\langle f \rangle = \langle \psi(0) | \hat{f}_H(t) | \psi(0) \rangle, \quad (2.158)$$

где зависящий от времени оператор

$$\hat{f}_H(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{f} e^{-i\hat{H}t/\hbar} \quad (2.159)$$

называется оператором величины f в представлении Гейзенберга. Дифференцируя (2.159) по параметру t , легко вывести так называемое уравнение движения для оператора $\hat{f}_H(t)$, своим видом напоминающее равенство (2.153). В нашем изложении представление Гейзенберга применяться не будет.

2.7.5. Уравнение Шредингера для волновой функции частицы

Далее мы ограничимся, главным образом, изучением состояний одной нерелятивистской частицы, не подверженной действию переменного внешнего поля. Исходя из принципа соответствия, следует предположить, что в этом случае оператор Гамильтона \hat{H} по форме будет аналогичен известной функции Гамильтона частицы с массой m в классической нерелятивистской механике. Заменяя в такой функции Гамильтона импульс оператором импульса и координаты оператором координат, получим:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(\hat{\mathbf{r}}). \quad (2.160)$$

Здесь первое слагаемое, содержащее квадрат оператора импульса

$$\hat{\mathbf{p}}^2 = \hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{p}} = \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2, \quad (2.161)$$

является оператором кинетической энергии частицы. Слагаемое $U(\hat{\mathbf{r}})$ – это оператор потенциальной энергии взаимодействия частицы с внешним полем; в случае свободной частицы можно полагать $U(\hat{\mathbf{r}}) = 0$.

Учитывая формулы (2.107), (2.116)–(2.118), справедливые в координатном представлении, и вводя в рассмотрение оператор Лапласа

$$\nabla \cdot \nabla = \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}, \quad (2.162)$$

находим явное выражение для оператора Гамильтона (2.160):

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\mathbf{r}). \quad (2.163)$$

Переход к координатному представлению в уравнениях (2.145) – (2.148) сводится к замене символов $|\dots\rangle$ соответствующими волновыми функциями. Таким образом, уравнение Шредингера для волновой функции $\Psi(\mathbf{r}, t)$, описывающей состояние частицы в момент времени t , имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (2.164)$$

Его частные решения в случае не зависящего от времени поля $U(\mathbf{r})$ представляют собой волновые функции стационарных состояний:

$$\Psi_n(\mathbf{r}, t) = e^{-i\varepsilon_n t/\hbar} \psi_n(\mathbf{r}). \quad (2.165)$$

Общее решение имеет вид суперпозиции волновых функций стационарных состояний с произвольными коэффициентами A_n ,

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n A_n e^{-i\varepsilon_n t/\hbar} \psi_n(\mathbf{r}), \quad (2.166)$$

где ε_n – собственные значения, а $\psi_n(\mathbf{r})$ – собственные функции гамильтониана:

$$\hat{H}\psi_n(\mathbf{r}) = \varepsilon_n \psi_n(\mathbf{r}). \quad (2.167)$$

Подставив в (2.167) явное выражение гамильтониана (2.163), мы видим, что *уравнение Шредингера для волновых функций стационарных состояний частицы* представляет собой дифференциальное уравнение с частными производными второго порядка:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) + U(x, y, z)\psi = \varepsilon \psi. \quad (2.168)$$

Здесь заданными величинами считаются масса частицы m и потенциальная энергия $U(\mathbf{r})$ (в квантовой теории традиционно называемая «потенциалом»), а неизвестными являются функция $\psi(x, y, z)$ и значения параметра ε (полная энергия частицы), при которых искомая функция ψ удовлетворяет определённым требованиям. В непрерывной части энергетического спектра допустимые значения ε заполняют сплошной интервал, так что искать их нет необходимости.

В большинстве примеров (с $U \neq \infty$) достаточно требовать, чтобы волновая функция $\psi(\mathbf{r})$ была: а) однозначной функцией координат, б) непрерывной вместе со своими первыми производными, в) ограниченной при всех значениях $|\mathbf{r}|$. Если потенциал $U(\mathbf{r})$ скачком обращается в бесконечность, то в области такого скачка требование непрерывности производных волновой функции снимается. Подобные условия, налагаемые на искомые решения $\psi(\mathbf{r})$ уравнения Шредингера (2.168), называют *граничными условиями*. Непрерывность волновой функции необходима для существования ее вторых производных, входящих в уравнение (2.168). Остальные граничные условия ставятся так, чтобы из всевозможных решений дифференциального уравнения (2.168) отобрать физически осмысленные решения.

Прежде чем перейти к разделу 3, посвященному конкретным примерам, вернёмся к выражению (2.160) для гамильтониана частицы и

покажем, каким образом оно может быть получено на основе феноменологического метода – из соображений о симметрии и о калибровочной инвариантности уравнения Шредингера.

По отношению к *свободно* движущейся частице \mathbf{r} -пространство однородно, и поэтому параллельные переносы являются преобразованиями симметрии. Следовательно, оператор энергии свободной частицы \hat{H}_0 должен коммутировать с оператором импульса $\hat{\mathbf{p}}$ и, будучи выражен через $\hat{\mathbf{p}}$, не должен содержать оператор координат $\hat{\mathbf{r}}$, так как $\hat{\mathbf{r}}$ и $\hat{\mathbf{p}}$ не коммутативны. Энергия – скалярная величина, связанная в случае свободной частицы без спина только с вектором импульса, поэтому гамильтониан \hat{H}_0 должен быть пропорционален скалярному оператору $\hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{p}} = \hat{\mathbf{p}}^2$; члены, содержащие другие степени оператора $\hat{\mathbf{p}}^2$, соответствуют релятивистским поправкам, которые в нерелятивистской теории не должны учитываться. Обозначив коэффициент при $\hat{\mathbf{p}}^2$ как $1/2m$, где неотрицательный параметр m по определению называется массой частицы, приходим к явному выражению для оператора Гамильтона свободной частицы:

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta. \quad (2.169)$$

Условие $m > 0$ диктуется здесь тем, что в противном случае (при $m < 0$) у частицы не существовало бы основного состояния.

В присутствии источников силового поля однородность \mathbf{r} -пространства по отношению к частице нарушится, и тогда её гамильтониан \hat{H} должен будет утратить коммутативность с $\hat{\mathbf{p}}$; в этом случае появляется возможность добавить к выражению (2.169) некоторую функцию координат – потенциальную энергию $U(\mathbf{r})$. Таким образом, формула (2.160) для \hat{H} согласуется с соображениями о симметрии \mathbf{r} -пространства.

Способ учёта взаимодействия частицы с внешним полем можно установить также с помощью более глубокого анализа, основанного на *принципе калибровочной инвариантности*. Этот принцип заключается в утверждении, что форма квантово-механического уравнения движения

должна оставаться инвариантной (неизменной) при калибровочном преобразовании волновой функции, которое записывается аналогично преобразованию амплитуд вероятности (2.27):

$$\Psi(\mathbf{r}, t) \rightarrow \tilde{\Psi}(\mathbf{r}, t) = e^{i\gamma(\mathbf{r}, t)} \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (2.170)$$

где $\gamma(\mathbf{r}, t)$ – произвольная вещественная функция координат и времени.

Покажем, что в случае частицы, обладающей электрическим зарядом, принцип калибровочной инвариантности естественным образом приводит к представлению о потенциалах внешнего электромагнитного поля.

Сначала найдём вид уравнения, которому удовлетворяет преобразованная функция $\tilde{\Psi}(\mathbf{r}, t)$ при условии, что исходная функция $\Psi(\mathbf{r}, t)$ – решение уравнения Шредингера для свободной частицы:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} \Psi. \quad (2.171)$$

Учитывая, что $\Psi = e^{-i\gamma} \tilde{\Psi}$, имеем

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (e^{-i\gamma} \tilde{\Psi}) = e^{-i\gamma} \left(\hbar \frac{\partial \gamma}{\partial t} + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \tilde{\Psi},$$

$$\hat{\mathbf{p}} \Psi = -i\hbar \nabla (e^{-i\gamma} \tilde{\Psi}) = e^{-i\gamma} (\hat{\mathbf{p}} - \hbar(\nabla\gamma)) \tilde{\Psi},$$

$$\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} \Psi = e^{-i\gamma} \frac{(\hat{\mathbf{p}} - \hbar(\nabla\gamma))^2}{2m} \tilde{\Psi}.$$

Следовательно, при калибровочном преобразовании волновой функции (2.170) форма уравнения (2.171) изменяется – это уравнение принимает вид

$$i\hbar \frac{\partial \tilde{\Psi}}{\partial t} = \left(\frac{(\hat{\mathbf{p}} - \hbar(\nabla\gamma))^2}{2m} - \hbar \frac{\partial \gamma}{\partial t} \right) \tilde{\Psi}, \quad (2.172)$$

соответствующий добавлению к оператору $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ векторного слагаемого $(-\hbar\nabla\gamma)$ и добавлению к оператору энергии (2.169) скалярного слагаемого $(-\hbar \partial\gamma / \partial t)$.

Если считать, что преобразование (2.170) есть результат двух преобразований, проведённых одно за другим с помощью калибровочных функций γ_1 и γ_2 , то в (2.170) и (2.172) $\gamma = \gamma_1 + \gamma_2$. Из этого ясно, что очередное калибровочное преобразование опять приведёт в (2.172) к добавлению соответствующих векторного и скалярного слагаемых указанного выше типа. Значит, для придания уравнению Шредингера калибровочно-инвариантной формы необходимо заранее включить в гамильтониан слагаемые такого же типа и считать, что они определённым образом преобразуются одновременно с волновой функцией, *компенсируя* вклады от калибровочного преобразования.

Исходя из этих соображений, запишем гамильтониан частицы в следующем виде

$$\hat{H} = \frac{(\hat{\mathbf{p}} - (q/c)\mathbf{A})^2}{2m} + q\phi. \quad (2.173)$$

Для того чтобы в итоге прийти к общепринятым обозначениям, величину γ представим как $\gamma = (q/\hbar c)f$, где $f(\mathbf{r}, t)$ – произвольная вещественная функция, остальные множители – постоянные. Согласно проведённому выше рассмотрению, уравнение Шредингера (2.164) с гамильтонианом (2.173) будет сохранять свою форму неизменной при калибровочных преобразованиях волновой функции

$$\tilde{\Psi}(\mathbf{r}, t) = \exp(iq/\hbar c) \Psi(\mathbf{r}, t),$$

если так называемые *векторный* \mathbf{A} и *скалярный* ϕ *потенциалы* одновременно с волновой функцией преобразуются по формулам

$$\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + \nabla f, \quad (2.174)$$

$$\tilde{\varphi}(\mathbf{r}, t) = \varphi(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{c} \frac{\partial f}{\partial t}. \quad (2.175)$$

При выборе потенциалов $\mathbf{A} \equiv 0$, $\varphi \equiv 0$ гамильтониан (2.173) совпадает с исходным гамильтонианом свободной частицы (2.169). Однако, теперь можно рассматривать выражение (2.173) и как результат обобщения исходной формулы (2.169) на случай произвольно заданных \mathbf{A} и φ . Другими словами, в общем случае гамильтониан (2.173) соответствует частице *во внешнем поле*, задаваемом потенциалами \mathbf{A} и φ , которые не могут быть полностью устранены калибровочным преобразованием (2.174)–(2.175). Обсудим физическую интерпретацию этих потенциалов.

При замене в (2.173) оператора $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ классически понимаемым вектором обобщённого импульса \mathbf{p} выражение (2.173) переходит в известную в классической теории функцию Гамильтона нерелятивистской частицы с электрическим зарядом q в электромагнитном поле. Поэтому следует считать, что введённые выше потенциалы \mathbf{A} и φ определяют обычным образом электрическое \mathbf{E} и магнитное \mathbf{B} поля [13]:

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla \varphi, \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}. \quad (2.176)$$

Эта интерпретация потенциалов подтверждается вычислением средних значений скорости и ускорения частицы, которые в квантовой механике определяются как первая и вторая производные по времени усреднённого радиус-вектора частицы $\langle \mathbf{r} \rangle$. Применение формул дифференцирования (2.153) и (2.154) к оператору координат $\hat{\mathbf{r}}$ с учётом явного вида гамильтониана (2.173) даёт (детали вычислений мы рекомендуем читателю воспроизвести в качестве упражнения):

$$\frac{d\hat{\mathbf{r}}}{dt} = \frac{1}{m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right), \quad (2.177)$$

$$\frac{d\langle \mathbf{r} \rangle}{dt} = \langle \psi | \frac{d\hat{\mathbf{r}}}{dt} | \psi \rangle. \quad (2.178)$$

Поскольку величина (2.178) рассматривается как усреднённая скорость $\langle \mathbf{v} \rangle$ частицы, выражение (2.177) служит оператором скорости $\hat{\mathbf{v}}$:

$$\hat{\mathbf{v}} = \frac{d\hat{\mathbf{r}}}{dt} = \frac{1}{m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right).$$

Дифференцируя оператор $\hat{\mathbf{v}}$ подобным же образом, найдём что

$$m \frac{d\hat{\mathbf{v}}}{dt} = q \mathbf{E} + \frac{q}{c} \frac{1}{2} (\hat{\mathbf{v}} \times \mathbf{B} - \mathbf{B} \times \hat{\mathbf{v}}). \quad (2.179)$$

Это выражение согласуется с классической формулой для силы Лоренца. Действительно, из (2.179) при усреднении по какому-либо состоянию частицы $|\psi\rangle$ следует равенство, по форме напоминающее уравнение Ньютона в классической механике,

$$m \left\langle \frac{d\mathbf{v}}{dt} \right\rangle = \mathbf{F}, \quad (2.180)$$

с правой частью \mathbf{F} , которая в случае однородного (или мало изменяющегося от точки к точке в области локализации частицы) магнитного поля \mathbf{B} имеет вид

$$\mathbf{F} = q \langle \mathbf{E} \rangle + \frac{q}{c} (\langle \mathbf{v} \rangle \times \mathbf{B}). \quad (2.181)$$

В отсутствие магнитного и переменного электрического полей удобно полагать $\mathbf{A} \equiv 0$. С такой калибровкой векторного потенциала и с обозначением потенциальной энергии частицы $q\phi(\mathbf{r}) \equiv U(\mathbf{r})$ гамильтониан (2.173) принимает форму (2.160). При $\mathbf{A} \equiv 0$ правая часть в (2.180) есть

$\mathbf{F} = -\langle \nabla U \rangle$, в соответствии с известной формулой для потенциального поля сил в классической механике: $\mathbf{F}(\mathbf{r}) = -\nabla U(\mathbf{r})$.

Подчеркнем, что в квантовой механике ввиду неопределенности траектории частицы представление о поле сил $\mathbf{F}(\mathbf{r})$ не играет такой большой роли, как в классической механике. Понятие потенциала оказывается более фундаментальным, чем понятие силы, – в гамильтониан входит не сила, а потенциал. В задачах о движении (нерелятивистском) частицы под действием переменного электромагнитного поля гамильтониан имеет вид (2.173); в отсутствие магнитного и переменного электрического полей он принимает форму (2.160), с которой мы и будем иметь дело в следующих разделах.

3. ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЙ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

3.1. СВОБОДНОЕ ДВИЖЕНИЕ ЧАСТИЦЫ

Рассмотрим движение частицы в отсутствие сил ($\mathbf{F} = -\nabla U \equiv 0$), то есть – свободное движение. В этом случае потенциальная энергия частицы равна константе, и ее можно принять за начало отсчета энергии, положив $U = 0$. Тогда гамильтониан (2.160) принимает вид

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m}. \quad (3.1)$$

Такой оператор коммутативен с операторами проекций импульса,

$$[\hat{H}_0, \hat{\mathbf{p}}] = 0,$$

то есть импульс свободно движущейся частицы является сохраняющейся величиной. В квантовой механике это означает, что в любом состоянии $\Psi(\mathbf{r}, t)$, удовлетворяющем волновому уравнению Шредингера с

гамильтонианом \hat{H}_0 , среднее значение вектора импульса не изменяется со временем:

$$\frac{d}{dt}\langle \mathbf{p} \rangle = 0.$$

Волновые функции $\psi(\mathbf{r})$ стационарных состояний свободной частицы должны быть найдены из уравнения Шредингера (2.167) с гамильтонианом \hat{H}_0 :

$$\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} \psi(\mathbf{r}) = \varepsilon \psi(\mathbf{r}).$$

Поскольку \hat{H}_0 коммутирует с оператором импульса, то решения $\psi(\mathbf{r})$ можно выбрать в виде собственных функций оператора импульса, то есть в виде плоских волн $\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$ (см. раздел 2.6):

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = C e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}.$$

При этом уравнение Шредингера для стационарных состояний свободной частицы обращается в равенство

$$\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{\mathbf{p}} \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}), \quad (3.2)$$

где

$$\varepsilon_{\mathbf{p}} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m}. \quad (3.3)$$

Квантовыми числами стационарных состояний здесь служат три компоненты вектора импульса p_x, p_y, p_z . Если движение свободной частицы рассматривается в бесконечном пространстве ($V \rightarrow \infty$), то спектр значений импульса \mathbf{p} непрерывен, и, следовательно, непрерывен энергетический спектр свободной частицы (3.3).

Следует отметить, что гамильтониан свободной частицы \hat{H}_0 коммутативен не только с оператором импульса $\hat{\mathbf{p}}$. Другой возможный набор взаимно коммутативных операторов составляют \hat{H}_0 и операторы орбитального момента частицы \hat{l}_z и $\hat{\mathbf{l}}^2$ (см. раздел 4.4). Волновые функции, собственные для этого набора операторов, описывают стационарные состояния свободной частицы с определенными значениями величины орбитального момента импульса и проекции момента на ось z . Но для простоты мы ограничиваемся рассмотрением состояний свободной частицы с определенным импульсом.

С учётом зависимости от времени стационарные состояния свободной частицы, характеризующиеся определёнными значениями \mathbf{p} , описываются волновыми функциями вида

$$\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = e^{-i\varepsilon_{\mathbf{p}} t/\hbar} \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = C e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} - \varepsilon_{\mathbf{p}} t)/\hbar}, \quad (3.4)$$

где C – нормировочная постоянная.

Функции (3.4) дают идеализированное описание состояний свободной частицы, так как они соответствуют точно определённым значениям энергии (и импульса), принадлежащим непрерывному спектру. На практике может быть известным лишь некоторый интервал, в котором находится значение непрерывной величины. Поэтому физически предпочтительнее описывать состояние свободной частицы суперпозицией волн (3.4), аналогичной (2.142):

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} a(\mathbf{p}) e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} - \varepsilon_{\mathbf{p}} t)/\hbar}. \quad (3.5)$$

Волновая функция (3.5) удовлетворяет волновому уравнению Шредингера с гамильтонианом \hat{H}_0 ,

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} \Psi,$$

причем $|a(\mathbf{p})|^2 / (2\pi\hbar)^3$ есть плотность вероятности обнаружения различных значений импульса у частицы в состоянии с волновой функцией (3.5).

Для иллюстрации свойств таких состояний рассмотрим одномерное движение, описываемое волновой функцией

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dp a(p) e^{i p x / \hbar - i \varepsilon_p t / \hbar}, \quad (3.6)$$

где с точностью до нормировочного множителя

$$a(p) = \begin{cases} 1 & \text{для } p_0 - \delta p < p < p_0 + \delta p, \\ 0 & \text{для } p \text{ вне этого интервала.} \end{cases}$$

Будем считать, что $\delta p \ll p_0$; при этом условии функция (3.6) называется *волновым пакетом* (или группой волн) с импульсом, приблизительно равным p_0 . Величина $2\delta p$ – это ширина интервала, которому принадлежат возможные значения импульса частицы, находящейся в состоянии (3.6).

Ограничимся в (3.6) первыми двумя членами разложения энергии $\varepsilon_p = p^2 / 2m$ по степеням величины $q = p - p_0$

$$\varepsilon_p \approx \varepsilon_{p_0} + v(p_0) (p - p_0), \quad (3.7)$$

где

$$v(p_0) = \left(\frac{\partial \varepsilon_p}{\partial p} \right)_{p=p_0} = \frac{p_0}{m}. \quad (3.8)$$

Тогда

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &\approx \int_{-\delta p}^{\delta p} dq e^{i q (x - vt) / \hbar} e^{i (p_0 x - \varepsilon_{p_0} t) / \hbar} = \\ &= 2 \delta p \frac{\sin((x - vt) \delta p / \hbar)}{(x - vt) \delta p / \hbar} e^{i (p_0 x - \varepsilon_{p_0} t) / \hbar}. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Отличие волнового пакета (3.9) от одиночной плоской волны

$$\Psi_{p_0}(x, t) = C e^{i(p_0 x - \varepsilon_{p_0} t) / \hbar} \quad (3.10)$$

состоит в том, что в (3.9) «амплитуда» волны (множитель перед экспонентой) зависит от x и t . Этот множитель максимален при значении координаты x , равном

$$x(t) = v(p_0)t, \quad (3.11)$$

и быстро убывает вне интервала шириной

$$\Delta x \sim \hbar / \delta p.$$

Таким образом, в x -пространстве волновой пакет имеет ширину порядка $\hbar / \delta p$, причем он движется со скоростью (3.8), называемой групповой скоростью. Значит, вероятность обнаружения частицы также сосредоточена в области размером $\Delta x \sim \hbar / \delta p$, и это «облако вероятности» перемещается с групповой скоростью $v = p_0 / m$.

Отметим, что вследствие неравенства $\delta p \ll p_0$ ширина пакета велика по сравнению с длиной волны: $\Delta x \gg \lambda$, где $\lambda = 2\pi\hbar / p_0$ – дебройлевская длина волны частицы. Поскольку импульс частицы определен с точностью порядка δp , то за время t ширина волнового пакета Δx должна увеличиваться на величину порядка $(\delta p / m)t$ (в приближении (3.7) указанное расплывание пакета не проявляется). Это уширение мало по сравнению с расстоянием $L = (p_0 / m)t$, которое волновой пакет проходит за время t . Следовательно, если длина пути, пройденного пакетом, велика по сравнению с размером пакета ($L \gg \Delta x$), то движение волнового пакета вполне напоминает движение классической частицы по траектории (3.11).

Чем меньше неопределенность импульса δp , тем шире волновой пакет (в x -пространстве). В пределе $\delta p \rightarrow 0$ мы получаем одиночную

плоскую волну (3.10) – состояние с определенным импульсом и полностью неопределенной координатой. Тем не менее, можно считать, что такая волна, как и волновой пакет, «бежит» со скоростью p_0/m , поскольку величина групповой скорости не зависит от δp . На этом основании в некоторых задачах удобно полагать, что плоская волна $\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$ описывает пространственно однородный пучок свободных частиц, движущихся со скоростью $\mathbf{v} = \mathbf{p}/m$, причём плотность частиц в пучке определяется нормировочным множителем C и равна $|\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})|^2 = |C|^2$. Тогда вектор плотности потока частиц есть

$$\mathbf{j} = \frac{\mathbf{p}}{m} |C|^2. \quad (3.12)$$

Разумеется, в строгой интерпретации $|C|^2$ есть плотность вероятности, а вектор \mathbf{j} , определяемый выражением (3.12), – плотность потока вероятности для одной частицы.

При заданных \mathbf{j} и \mathbf{p}/m из формулы (3.12) можно найти величину нормировочного множителя C ; такой выбор C называется нормировкой плоской волны «на плотность потока».

3.2. ОТРАЖЕНИЕ ЧАСТИЦЫ ОТ ПОТЕНЦИАЛЬНОГО БАРЬЕРА

Во многих случаях уравнение Шредингера (2.168) с помощью разделения переменных сводится к одномерным уравнениям. При одномерном движении оно имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U(x)\psi(x) = \varepsilon\psi(x), \quad (3.13)$$

или, в более удобной форме,

$$\psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (\varepsilon - U(x)) \psi(x) = 0. \quad (3.14)$$

Пусть поле $U(x)$ соответствует бесконечно протяжённому прямоугольному потенциальному барьеру величиной $W > 0$ (потенциальная стенка, см. рис. 3.1):

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0; \\ W, & x > 0. \end{cases} \quad (3.15)$$

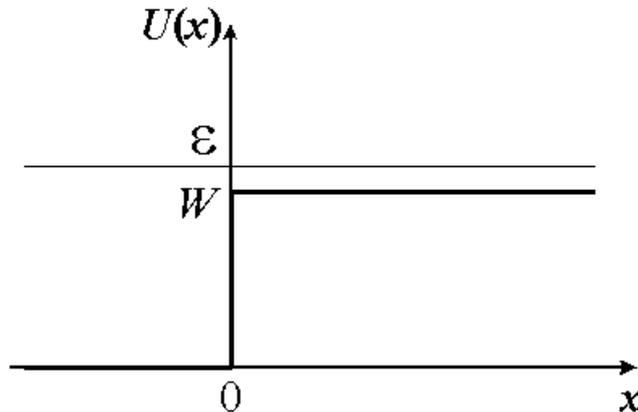


Рис. 3.1. Одномерный потенциальный барьер высотой W . Здесь изображен случай, в котором энергия частицы ε больше высоты барьера

Найдем решения уравнения Шредингера (3.14) при различных значениях энергии частицы.

a) Случай $\varepsilon > W$. Введем в рассмотрение волновые числа k_1 и k_2 , соответствующие областям $x < 0$ и $x > 0$:

$$k_1 = \sqrt{2m\varepsilon} / \hbar, \quad (3.16)$$

$$k_2 = \sqrt{2m(\varepsilon - W)} / \hbar. \quad (3.17)$$

Тогда

$$\varepsilon - U(x) = \hbar^2 k_1^2 / 2m, \quad x < 0,$$

$$\varepsilon - U(x) = \hbar^2 k_2^2 / 2m, \quad x > 0. \quad (3.18)$$

При $x < 0$ уравнение Шредингера (3.14) принимает вид

$$\psi'' + k_1^2 \psi = 0. \quad (3.19)$$

Его решение, представляющее собой волновую функцию $\psi(x)$ стационарного состояния с энергией ε в области $x < 0$, есть

$$\psi(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}, \quad x < 0, \quad (3.20)$$

где A_1 и B_1 – постоянные.

При $x > 0$ уравнение (3.14) принимает вид

$$\psi'' + k_2^2 \psi = 0, \quad (3.21)$$

а его решение, представляющее волновую функцию с той же энергией ε в области $x > 0$, есть

$$\psi(x) = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}, \quad x > 0. \quad (3.22)$$

Четыре неизвестных коэффициента A_1 , B_1 , A_2 и B_2 следует подчинить лишь трём уравнениям – условиям непрерывности $\psi(x)$ и $\psi'(x)$ при $x = 0$ и условию нормировки. Следовательно, выбор указанных коэффициентов остаётся в какой-то мере произвольным. Чтобы разобраться в этой ситуации, прежде всего заметим, что спектр значений ε в нашей задаче непрерывен, так как перечисленные условия не приводят к дискретизации возможных значений k_1 или k_2 . Значит, мы можем рассмотреть решение $\psi(x, t)$ волнового уравнения Шредингера в виде интегральной суперпозиции стационарных состояний с близкими значениями энергии ε .

Начнем с области $x < 0$. Легко понять, что результатом вычисления $\psi(x, t)$, аналогичного расчету волнового пакета в предыдущем разделе, будут два волновых пакета, так как в (3.20) есть два слагаемых. Мы найдем, что один из пакетов имеет амплитуду, пропорциональную A_1 , и движется по траектории $x(t) = (\hbar k_1 / m) t$; он находится в области $x < 0$ при $t < 0$. Второй волновой пакет, с амплитудой, пропорциональной B_1 , движется по траектории $x(t) = (-\hbar k_1 / m) t$ и, следовательно, появляется в области $x < 0$ позднее первого пакета – при $t > 0$. Поэтому слагаемые в

(3.20) можно рассматривать отдельно друг от друга и считать, что $|A_1|^2$ – плотность частиц, падающих на барьер со скоростью $\hbar k_1/m$ из области $x \rightarrow -\infty$, а $|B_1|^2$ – плотность частиц, с такой же (по величине) скоростью уходящих от барьера назад, в область $x \rightarrow -\infty$.

Аналогичное рассмотрение в области $x > 0$, где стационарное состояние имеет вид (3.22), позволяет считать, что $|B_2|^2$ – плотность частиц, падающих на барьер со скоростью $(-\hbar k_2/m)$ из области $x \rightarrow +\infty$ (соответствующий волновой пакет движется к барьеру при $t < 0$), а $|A_2|^2$ – плотность частиц, уходящих со скоростью $\hbar k_2/m$ в область $x \rightarrow +\infty$ (волновой пакет с амплитудой, пропорциональной A_2 , появляется в области $x > 0$ при $t > 0$).

Таким образом, в общем случае решение (3.20), (3.22) относится к той ситуации, когда на бесконечности присутствуют два независимых источника, испускающих частицы навстречу друг другу. Другими словами, любой уровень энергии $\varepsilon > W$ *двукратно вырожден*: можно рассматривать частное решение $\psi(x)$ с $B_2 = 0$ и $A_1 \neq 0$, соответствующее наличию источника частиц только в области $x \rightarrow -\infty$, либо – еще одно частное решение, с $B_2 \neq 0$ и $A_1 = 0$, соответствующее наличию источника частиц с той же полной энергией ε в области $x \rightarrow +\infty$. Общее решение есть суперпозиция двух частных решений.

Рассмотрим, например, первое из указанных частных решений:

$$\psi(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}, \quad x < 0; \quad (3.23)$$

$$\psi(x) = A_2 e^{ik_2 x}, \quad x > 0. \quad (3.24)$$

Условия непрерывности волновой функции $\psi(x)$ и её первой производной $\psi'(x)$ при $x = 0$

$$\psi(-0) = \psi(+0),$$

$$\psi'(-0) = \psi'(0),$$

сводятся к двум уравнениям

$$\begin{aligned} A_1 + B_1 &= A_2, \\ ik_1(A_1 - B_1) &= ik_2 A_2, \end{aligned} \quad (3.25)$$

позволяющим выразить B_1 и A_2 через коэффициент A_1 , который будет играть роль нормировочной постоянной:

$$B_1 = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} A_1, \quad (3.26)$$

$$A_2 = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} A_1. \quad (3.27)$$

Пусть задана плотность потока частиц $j_{над}$, падающих на барьер из области $x \rightarrow -\infty$ со скоростью $\hbar k_1 / m$. Тогда, согласно (3.12), постоянную A_1 можно выбрать так, что

$$j_{над} = \frac{\hbar k_1}{m} |A_1|^2. \quad (3.28)$$

Принятое в (3.24) условие $B_2 = 0$ означает отсутствие частиц, падающих на барьер из области $x \rightarrow +\infty$. Поэтому волна с амплитудой B_1 описывает *отражение* частицы от барьера в область $x \rightarrow -\infty$, а волне с амплитудой A_2 аналогичным образом сопоставляется *прохождение* частицы в область $x \rightarrow +\infty$ из области $x \rightarrow -\infty$. Соответствующие плотности потоков есть

$$j_{отр} = \frac{\hbar k_1}{m} |B_1|^2, \quad (3.29)$$

$$j_{прош} = \frac{\hbar k_2}{m} |A_2|^2. \quad (3.30)$$

Вероятности отражения и прохождения частицы определяются, соответственно, как *коэффициент отражения* $R = j_{отр} / j_{над}$ и

коэффициент прохождения $D = j_{\text{прош}} / j_{\text{над}}$. С помощью формул (3.26) – (3.30) находим:

$$R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2}, \quad (3.31)$$

$$D = \frac{k_2}{k_1} \frac{|A_2|^2}{|A_1|^2} = \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2}. \quad (3.32)$$

Автоматически выполняется соотношение

$$R + D = 1, \quad (3.33)$$

означающее, что взаимодействие частицы с полем $U(x)$ не приводит к ее исчезновению или к появлению новых частиц. Соотношение (3.33) подтверждает интерпретацию величин R и D как вероятностей.

Выражение (3.31) показывает, что коэффициент R всегда отличен от нуля, то есть частица может с некоторой вероятностью отразиться от потенциального барьера несмотря на то, что её энергия превышает величину барьера ($\varepsilon > W$). Это явление имеет квантовую природу и называется *надбарьерным отражением* (согласно же классической механике частица с энергией $\varepsilon > W$, дойдя до потенциального барьера, с достоверностью продолжает двигаться в прежнем направлении).

Надбарьерное отражение существует и при плавной форме потенциальной стенки $U(x)$. В задачах с плавно изменяющимся потенциалом $U(x)$ для определения коэффициентов B_1 и A_2 , необходимых при вычислении R или D , следует найти то решение уравнения Шредингера (3.14), которое имеет асимптотический вид (3.23) при $x \rightarrow -\infty$ и вид (3.24) при $x \rightarrow +\infty$.

б) Случай $0 < \varepsilon < W$ (рис. 3.2, а).

Теперь вместо (3.16) и (3.17) мы применим обозначения

$$k = \sqrt{2m\varepsilon} / \hbar, \quad (3.34)$$

$$\kappa = \sqrt{2m(W - \varepsilon)} / \hbar, \quad (3.35)$$

так что, с учётом (3.15),

$$\begin{aligned} \varepsilon - U(x) &= \hbar^2 k^2 / 2m, & x < 0, \\ \varepsilon - U(x) &= -\hbar^2 \kappa^2 / 2m, & x > 0. \end{aligned} \quad (3.36)$$

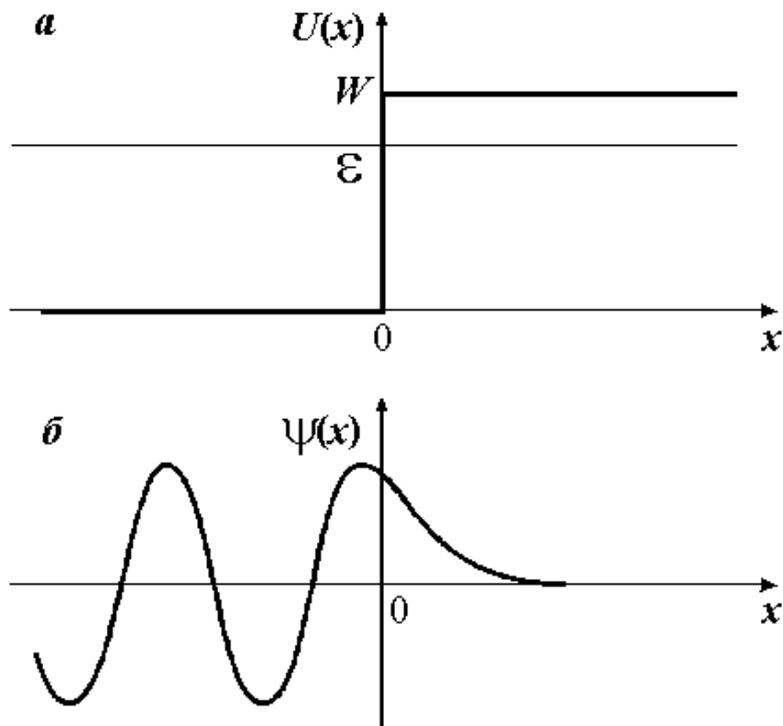


Рис. 3.2, *a* – энергетическая диаграмма в случае, когда энергия частицы меньше высоты потенциального барьера ($\varepsilon < W$). *б* – график волновой функции стационарного состояния при $\varepsilon < W$

При $x < 0$ уравнение Шредингера (3.14) принимает вид

$$\psi'' + k^2 \psi = 0 \quad (3.37)$$

и имеет решение

$$\psi(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}, \quad x < 0. \quad (3.38)$$

При $x > 0$

$$\psi'' - \kappa^2 \psi = 0, \quad (3.39)$$

поэтому

$$\psi(x) = A_2 e^{-\kappa x} + B_2 e^{\kappa x}, \quad x > 0. \quad (3.40)$$

В рассматриваемом случае энергетический спектр по-прежнему непрерывен, но коэффициент B_2 уже не произволен – для обеспечения ограниченности волновой функции необходимо положить $B_2 = 0$, так как $e^{\kappa x} \rightarrow \infty$ при $x \rightarrow +\infty$. Таким образом, при $\varepsilon < W$ значения ε не вырождены: каждому значению энергии ε принадлежит одно стационарное состояние $\psi(x)$, определяемое формулами (3.38) и (3.40) с $B_2 = 0$:

$$\psi(x) = \begin{cases} A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}, & x < 0; \\ A_2 e^{-\kappa x}, & x > 0. \end{cases} \quad (3.41)$$

Этот же результат получается из (3.23)–(3.24) при $k_1 = k$ и $k_2 = i\kappa$. Поэтому условия непрерывности волновой функции (3.41) и её производной в точке $x = 0$ сводятся к соотношениям (3.26)–(3.27) с $k_1 = k$ и $k_2 = i\kappa$:

$$B_1 = \frac{k - i\kappa}{k + i\kappa} A_1, \quad (3.42)$$

$$A_2 = \frac{2k}{k + i\kappa} A_1. \quad (3.43)$$

Из (3.42) видно, что $|B_1| = |A_1|$ – амплитуды падающей и отраженной волн равны; следовательно, частицы с энергией $\varepsilon < W$, падающие на потенциальную стенку из области $x \rightarrow -\infty$, полностью отражаются назад.

Если обозначить через δ фазу комплексного числа $k + i\kappa$, и рассматривать величину $2A_1 e^{-i\delta}$ как нормировочную постоянную C , то волновая функция (3.41) с коэффициентами (3.42)–(3.43) запишется в виде

$$\psi(x) = C \begin{cases} \cos(kx + \delta), & x < 0, \\ e^{-\kappa x} \cos \delta, & x > 0. \end{cases} \quad (3.44)$$

График этой функции изображен на рис. 3.2, б.

В классической механике область $x > 0$ в поле барьера (3.15) недоступна для частицы с энергией $\varepsilon < W$. Согласно же (3.44), квантовая частица может быть обнаружена в классически запрещённой области $x > 0$ с плотностью вероятности $|\psi|^2 \sim \exp(-2\kappa x)$. Глубина такого проникновения частицы в область потенциального барьера имеет порядок величины $1/\kappa = \hbar/\sqrt{2m(W - \varepsilon)}$.

3.3. ТУННЕЛЬНЫЙ ЭФФЕКТ

Рассмотрим прохождение частицы, совершающей одномерное движение, через прямоугольный потенциальный барьер конечной протяжённости d при условии, что энергия частицы меньше, чем высота барьера ($\varepsilon < W$, см. рис. 3.3). Пользуясь обозначениями (3.34)–(3.35), можно записать общее решение уравнения Шредингера (3.14) при $\varepsilon < W$ в виде:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}, & x < 0, \\ \psi(x) &= A_2 e^{-\kappa x} + B_2 e^{\kappa x}, & 0 < x < d, \\ \psi(x) &= A_3 e^{ikx} + B_3 e^{-ikx}, & x > d. \end{aligned} \quad (3.45)$$

Как и в предыдущем примере, здесь следует считать, что волна вида Ae^{ikx} описывает пучок частиц с плотностью $|A|^2$, имеющих скорость $\hbar k/m$ и движущихся в направлении оси x . Волна вида Be^{-ikx} сопоставляется пучку частиц с плотностью $|B|^2$, движущихся со скоростью $(-\hbar k/m)$ в противоположном направлении.

Требования непрерывности волновой функции и её производной в точках $x = 0$ и $x = d$ вместе с условием нормировки составляют всего пять уравнений для шести коэффициентов в (3.45). В результате,

энергетический спектр остается непрерывным и двукратно вырожденным; это отвечает физической возможности задавать частице произвольное значение энергии ε и направлять пучок частиц на потенциальный барьер как из области $x \rightarrow -\infty$, так и из области $x \rightarrow +\infty$.

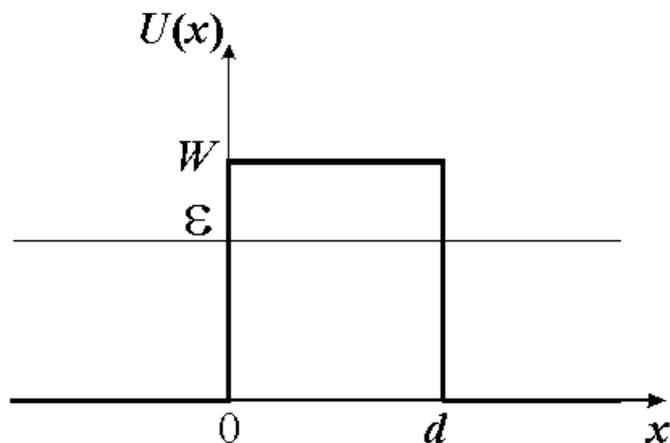


Рис. 3.3. Потенциальный барьер конечной протяженности

Пусть, например, частицы падают на барьер только из области $x \rightarrow -\infty$. В этом случае $B_3 = 0$ и $A_1 \neq 0$. С помощью упомянутых требований непрерывности все остальные коэффициенты можно выразить через коэффициент A_1 , который определяется плотностью потока частиц $j_{пад}$, падающих на барьер:

$$j_{пад} = \frac{\hbar k}{m} |A_1|^2.$$

Коэффициент A_3 определяет плотность потока частиц $j_{прош}$, проходящих сквозь барьер в область $x \rightarrow +\infty$:

$$j_{прош} = \frac{\hbar k}{m} |A_3|^2. \quad (3.46)$$

Приведем результат вычисления коэффициента A_3 :

$$A_3 = 4k\kappa \left(e^{\kappa d} (k + i\kappa)^2 - e^{-\kappa d} (k - i\kappa)^2 \right)^{-1} i e^{-ikd} A_1.$$

Отсюда можно видеть, что вероятность прохождения частицы сквозь барьер отлична от нуля:

$$D = \frac{J_{\text{прош}}}{J_{\text{над}}} = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} = \left(1 + \frac{1}{4} \left(\frac{k}{\kappa} + \frac{\kappa}{k} \right)^2 \text{sh}^2 \kappa d \right)^{-1}. \quad (3.47)$$

Прохождение частицы через потенциальный барьер высотой W , большей, чем энергия частицы ($\varepsilon < W$), получило название *туннельного эффекта*. В рамках классической механики такой эффект невозможен, а в квантовой механике он существует вследствие того, что волновая функция на границе с барьером не обращается скачком в ноль – ее «хвост» проникает в область барьера.

Если протяженность барьера d велика по сравнению с глубиной проникновения волновой функции $1/\kappa$, то $e^{-\kappa d} \ll 1$, и вероятность туннельного прохождения частицы сквозь барьер становится экспоненциально малой. Действительно, в этом случае из (3.47) следует приближенное равенство

$$D \approx \frac{16 k^2 \kappa^2}{(k^2 + \kappa^2)^2} \exp(-2\kappa d), \quad (3.48)$$

показывающее, что вероятность D экспоненциально уменьшается с ростом ширины барьера d .

3.4. ЧАСТИЦА В БЕСКОНЕЧНОЙ ПРЯМОУГОЛЬНОЙ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМЕ

Найдём энергетический спектр и волновые функции стационарных состояний при одномерном движении частицы в поле $U(x)$, имеющем вид бесконечной потенциальной ямы

$$U(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a; \\ W \rightarrow \infty, & x < 0, x > a. \end{cases} \quad (3.49)$$

Исходя из результатов раздела 3.2 следует ожидать, что внутри ямы волновая функция должна иметь вид суммы волн, отражающихся от

стенок ямы, а в области потенциальных стенок ($x < 0$ и $x > a$), у нее могут быть лишь монотонно убывающие «хвосты» длиной порядка $1/\kappa = \hbar / \sqrt{2m(W - \varepsilon)}$. Эта длина проникновения обращается в ноль в пределе с $W \rightarrow \infty$. Следовательно, в пределе бесконечно высоких потенциальных стенок волновая функция всюду вне ямы равна нулю:

$$\psi(x) = 0 \quad \text{при } x < 0, \quad x > a. \quad (3.50)$$

В области потенциальной ямы ($0 < x < a$) уравнение Шредингера (3.14) принимает вид (3.37); его общее решение есть

$$\psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}, \quad 0 < x < a, \quad (3.51)$$

где

$$k = \sqrt{2m\varepsilon} / \hbar, \quad (3.52)$$

A и B – произвольные постоянные.

Поскольку на стенках ямы (в точках $x = 0$ и $x = a$) потенциал U обращается в бесконечность, в этих точках снимается требование непрерывности производной волновой функции. Сама же волновая функция должна быть непрерывна всюду; с учетом (3.50) это означает, что на стенках ямы волновая функция должна обращаться в нуль

Таким образом, в точке $x = 0$ мы имеем условие $\psi(0) = 0$. С учётом явного выражения (3.51) для $\psi(x)$ это условие сводится к уравнению $A + B = 0$ для постоянных A и B , так что

$$B = -A.$$

Учитывая это равенство и вводя обозначение $C = 2iA$, можно записать волновую функцию (3.51) в форме

$$\psi(x) = C \sin(kx), \quad 0 < x < a, \quad (3.53)$$

где C служит нормировочной постоянной. Условие непрерывности волновой функции в точке $x = a$, то есть $\psi(a) = 0$, теперь приобретает вид уравнения для k :

$$C \sin(ka) = 0, \quad (3.54)$$

Отсюда следует, что k принимает только дискретные значения ($k = k_n$):

$$k_n = \frac{\pi}{a} n, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.55)$$

В (3.55) учитываются лишь те значения квантового числа n , которым отвечает набор независимых не равных тождественно нулю функций (3.53); значения $0, -1, -2, \dots$ отброшены.

Подставив $k = k_n$ в (3.52), находим энергетический спектр частицы в потенциальной яме (3.49); вследствие дискретности k_n энергия частицы ε также принимает только дискретные значения:

$$\varepsilon_n = \frac{\hbar^2}{ma^2} \frac{\pi^2}{2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.56)$$

Вычислим нормировочные множители волновых функций (3.53). Нормировочный интеграл для волновой функции $\psi_n(x)$, принадлежащей энергетическому уровню $\varepsilon = \varepsilon_n$, с учётом (3.50), (3.53) и (3.55) имеет вид

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi_n|^2 = |C|^2 \int_0^a dx \sin^2(\pi nx/a) = |C|^2 a/2.$$

Приравняв это выражение единице, находим нормировочный множитель: $C = \sqrt{2/a}$. Таким образом, волновые функции $\psi_n(x)$ стационарных состояний $|n\rangle$ частицы в одномерной потенциальной яме (3.49) вычислены полностью:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi n x}{a}\right) \quad \text{при } 0 \leq x \leq a; \quad (3.57)$$

$$\psi_n(x) = 0 \quad \text{при } x < 0, x > a.$$

Уровни энергии (3.56) и принадлежащие им волновые функции (3.57) схематично изображены на рис. 3.4.

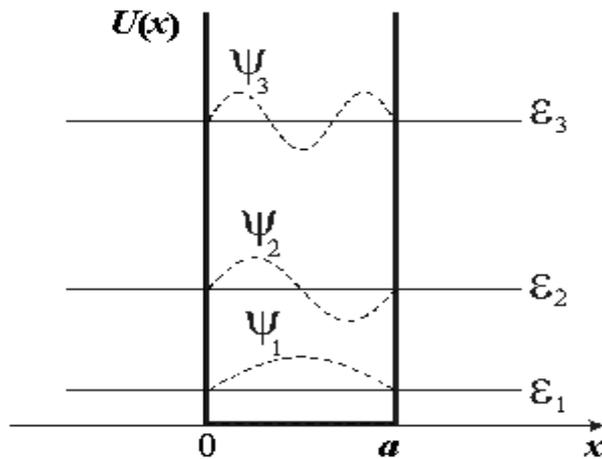


Рис. 3.4. Уровни энергии ε_n и волновые функции $\psi_n(x)$ стационарных состояний частицы при одномерном движении в бесконечной прямоугольной потенциальной яме

На основе этих результатов легко решить аналогичную трехмерную задачу. Будем искать стационарные состояния и энергетический спектр частицы, движущейся в трёхмерном прямоугольном «потенциальном ящике» с бесконечными потенциальными стенками:

$$U(\mathbf{r}) = \begin{cases} 0 & \text{при } 0 < x < a, 0 < y < b, 0 < z < c; \\ \infty & \text{вне указанной области.} \end{cases}$$

Уравнение Шредингера (2.168) с таким потенциалом $U(\mathbf{r})$ допускает запись в форме

$$\hat{H}^{(x)}\psi + \hat{H}^{(y)}\psi + \hat{H}^{(z)}\psi = \varepsilon\psi, \quad (3.58)$$

где каждый из операторов

$$\hat{H}^{(k)} = \frac{\hat{p}_k^2}{2m} + U^{(k)}(x_k), \quad k = x, y, z, \quad (3.59)$$

включает только одну из трёх координатных переменных, причем одномерные потенциалы $U^{(x)}(x)$, $U^{(y)}(y)$ и $U^{(z)}(z)$ определены аналогично (3.49).

Применим к уравнению (3.58) метод разделения переменных, то есть будем искать решение $\psi(\mathbf{r})$ в виде произведения трёх независимых функций:

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi^{(x)}(x) \psi^{(y)}(y) \psi^{(z)}(z). \quad (3.60)$$

Тем самым задача сводится к поиску решений трех одномерных уравнений (3.63). В самом деле, при действии оператора $\hat{H}^{(k)}$ на произведение (3.60) две функции, не зависящие от k -ой координаты, можно вынести из-под знака оператора. Значит, если разделить левую и правую части уравнения (3.58) на выражение (3.60), то получим равенство

$$\frac{\hat{H}^{(x)}\psi^{(x)}}{\psi^{(x)}} + \frac{\hat{H}^{(y)}\psi^{(y)}}{\psi^{(y)}} + \frac{\hat{H}^{(z)}\psi^{(z)}}{\psi^{(z)}} = \varepsilon, \quad (3.61)$$

в котором правая сторона есть постоянная. Поэтому надо требовать, чтобы каждое из трёх слагаемых в левой стороне, являющихся функциями различных переменных, тоже было бы величиной постоянной (такие постоянные называются константами разделения): $\hat{H}^{(k)}\psi^{(k)} / \psi^{(k)} = \varepsilon^{(k)}$. Равенство (3.61) при этом примет вид

$$\varepsilon^{(x)} + \varepsilon^{(y)} + \varepsilon^{(z)} = \varepsilon. \quad (3.62)$$

Таким образом, решив для каждого из трех операторов $\hat{H}^{(k)}$ одномерную задачу «на собственные значения»

$$\hat{H}^{(k)} \psi^{(k)} = \varepsilon^{(k)} \psi^{(k)}, \quad k = x, y, z, \quad (3.63)$$

мы получим по формулам (3.62) и (3.60) энергетический спектр и волновые функции исходной трёхмерной задачи.

В рассматриваемом примере решение одномерного уравнения Шредингера даётся формулами (3.56) и (3.57). Следовательно, уровни энергии частицы в трёхмерном потенциальном ящике с непроницаемыми стенками представляются выражением

$$\varepsilon_{n_1 n_2 n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2} \right), \quad (3.64)$$

а волновые функции имеют вид

$$\Psi_{n_1 n_2 n_3}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{8}{abc}} \sin\left(\frac{\pi n_1 x}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi n_2 y}{b}\right) \sin\left(\frac{\pi n_3 z}{c}\right). \quad (3.65)$$

Числа n_1 , n_2 и n_3 , независимо друг от друга принимающие значения $1, 2, 3, \dots$, служат здесь квантовыми числами стационарных состояний.

При $a = b$ или $a = b = c$ поле $U(\mathbf{r})$ имеет повышенную симметрию, что ведет к вырождению энергетических уровней (3.64). Основное состояние частицы характеризуется квантовыми числами $n_1 = n_2 = n_3 = 1$; оно в любом случае не вырождено.

3.5. ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР

Рассмотрим одномерное движение частицы в потенциальной яме вида

$$U(x) = \frac{m \omega_0^2 x^2}{2}, \quad (3.66)$$

где m – масса частицы, ω_0 – заданный параметр с размерностью частоты. В классической механике частица с потенциальной энергией (3.66) испытывает действие силы

$$F = -\partial U / \partial x = -m\omega_0^2 x$$

и совершает гармоническое колебание с частотой ω_0 . Действительно, уравнение Ньютона в этой задаче принимает вид

$$\frac{d^2 x}{dt^2} = -\omega_0^2 x,$$

так что его общее решение можно записать в форме

$$x(t) = A \cos(\omega_0 t + \delta), \quad (3.67)$$

где A и δ – произвольные постоянные (это амплитуда и фаза гармонического колебания, определяемые начальными условиями). Поэтому частица, совершающая одномерное движение с потенциальной энергией (3.66), называется *гармоническим осциллятором* или линейным осциллятором.

В квантовой механике задача о гармоническом осцилляторе заключается в определении энергетического спектра и волновых функции стационарных состояний. Уравнение Шредингера (3.14) с потенциалом (3.66) при использовании вместо x и ε безразмерных величин

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}} x, \quad (3.68)$$

$$v = \frac{2\varepsilon}{\hbar\omega_0} \quad (3.69)$$

принимает вид

$$\psi''(\xi) - \xi^2 \psi(\xi) + v \psi(\xi) = 0. \quad (3.70)$$

Рассмотрим сначала асимптотическое поведение искомых функций $\psi(\xi)$ при $\xi \rightarrow \pm\infty$. В этом пределе слагаемое $v\psi$ в (3.70) пренебрежимо по сравнению с $\xi^2\psi$, так что можно заменить (3.70) приближённым уравнением

$$\psi'' - \xi^2 \psi = 0, \quad \xi^2 \rightarrow \infty. \quad (3.71)$$

Непосредственной проверкой можно убедиться в том, что одно из двух линейно независимых решений уравнения (3.71) приближённо ведёт себя как

$$\psi \sim e^{-\xi^2/2}, \quad \xi^2 \rightarrow \infty. \quad (3.72)$$

Оно экспоненциально убывает с ростом ξ^2 . Второе же асимптотическое решение при $\xi^2 \rightarrow \infty$ неограниченно возрастает (как $e^{\xi^2/2}$) и должно быть отброшено в связи с требованием ограниченности волновых функций.

Таким образом, нас интересуют только те решения ψ уравнения (3.70), которые убывают при $\xi \rightarrow \pm\infty$; характер убывания описывается формулой (3.72). Будем искать эти решения в виде

$$\psi(\xi) = C w(\xi) e^{-\xi^2/2}, \quad (3.73)$$

где C – нормировочная постоянная, $w(\xi)$ – новая неизвестная функция. Подставив (3.73) в (3.70), получаем уравнение для $w(\xi)$:

$$w'' - 2\xi w' + (v-1)w = 0. \quad (3.74)$$

Ищем $w(\xi)$ в виде степенного ряда

$$w(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k. \quad (3.75)$$

Подставив (3.75) в (3.74), имеем

$$\sum_{k=0}^{\infty} a_k k(k-1) \xi^{k-2} + \sum_{k=0}^{\infty} a_k (-2k) \xi^k + \sum_{k=0}^{\infty} a_k (v-1) \xi^k = 0. \quad (3.76)$$

В первой сумме выражения (3.76) слагаемые с $k=0$ и $k=1$ равны нулю, поэтому, заменив в ней k на $k+2$, можем объединить все три суммы и записать уравнение (3.76) в виде

$$\sum_{k=0}^{\infty} (a_{k+2} (k+2)(k+1) + a_k (v-1-2k)) \xi^k = 0. \quad (3.77)$$

Для того чтобы это равенство выполнялось при любых значениях переменной ξ , все коэффициенты степенного ряда (3.77) должны быть равны нулю. Из этого условия следует рекуррентная формула

$$a_{k+2} = a_k \frac{2k+1-v}{(k+2)(k+1)}, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (3.78)$$

позволяющая выразить коэффициенты a_k с чётными номерами k через a_0 , а с нечётными – через a_1 . Постоянные a_0 и a_1 произвольны.

Волновая функция (3.73) имеет требуемое асимптотическое поведение (3.72), если функция $w(\xi)$ при $\xi \rightarrow \infty$ ограничена или возрастает не быстрее ξ^n с любым конечным n . Однако, из рекуррентной формулы (3.78) при достаточно больших значениях k , существенных для анализа поведения $w(\xi)$ в области $\xi \rightarrow \infty$, в общем случае следует соотношение $a_{k+2}/a_k \approx 2/k$. Такое соотношение характерно для функций с асимптотическим поведением $w \sim e^{\xi^2}$. Это поведение не согласуется с требованием ограниченности искомых волновых функций (3.73). Поэтому необходимо рассмотреть специальные случаи – такие, в которых ряд (3.75) обрывается, то есть сводится к полиному какой-либо степени n .

Из формулы (3.78) видно, что коэффициент a_{k+2} при $k=n$ и следующие за ним коэффициенты с номерами той же чётности обращаются в нуль (тогда как предыдущие коэффициенты могут быть

отличны от нуля), если параметр ν принимает дискретные значения, удовлетворяющие условию

$$2n + 1 - \nu = 0, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.79)$$

В этом случае полагая $a_0 = 1$ и $a_1 = 0$ при чётном n , получим полином $w_n(\xi)$ степени n , содержащий только чётные степени переменной ξ . При нечётном n полагаем $a_0 = 0$ и $a_1 = 1$, что ведёт к полиному $w_n(\xi)$ степени n , являющемуся нечётной функцией. Таким образом:

$$w_0 = 1, \quad w_1 = \xi, \quad w_2 = 1 - 2\xi^2, \quad \dots \quad (3.80)$$

Полиномы (3.80) с точностью до постоянных множителей совпадают с так называемыми полиномами Эрмита $H_n(\xi)$, определяемыми формулой

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}. \quad (3.81)$$

В полиноме $H_n(\xi)$ слагаемое наибольшей степени имеет вид $2^n \xi^n$:

$$H_0 = 1, \quad H_1 = 2\xi, \quad H_2 = -2 + 4\xi^2, \quad \dots \quad (3.82)$$

Окончательно волновые функции (3.73), описывающие стационарные состояния осциллятора, можно представить в виде

$$\psi_n(x) = C_n H_n(x/a) \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2}\right), \quad (3.83)$$

где

$$a = \sqrt{\hbar/m\omega_0}, \quad (3.84)$$

$$C_n = \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{n! 2^n}}. \quad (3.85)$$

Постоянные (3.85) выбраны так, что функции (3.83) удовлетворяют условию нормировки

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_n^2(x) = 1. \quad (3.86)$$

Каждая волновая функция (3.83) принадлежит определённому дискретному уровню энергии ε_n . Значения ε_n определяются из условия (3.79) с учётом (3.69):

$$\varepsilon_n = \hbar\omega_0 (n + 1/2), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.87)$$

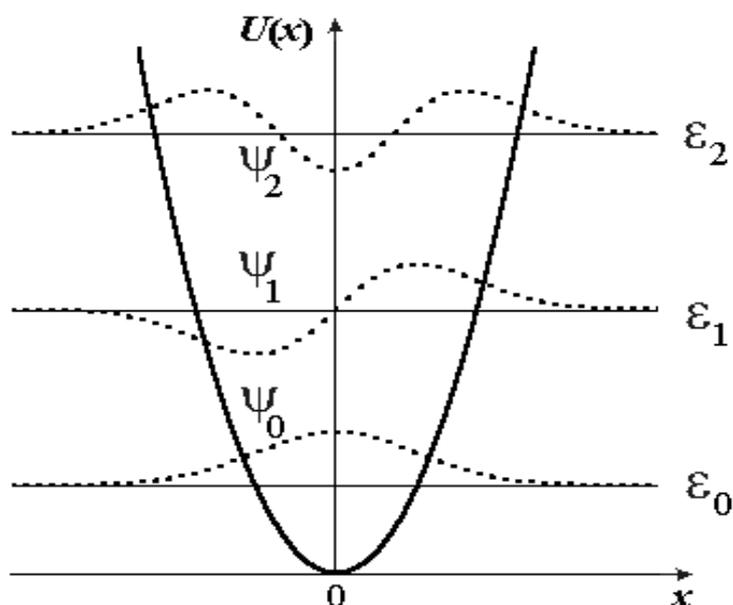


Рис. 3.5. Уровни энергии ε_n и волновые функции $\psi_n(x)$ стационарных состояний линейного осциллятора

Эти уровни и соответствующие им волновые функции изображены на рис. 3.5. Отметим, что энергетические уровни осциллятора (3.87) располагаются на шкале энергии через равные интервалы $\hbar\omega_0$. Энергия ε_0

основного состояния, обычно называемая энергией *нулевых колебаний*, не совпадает с минимальным значением потенциала $U(0) = 0$, а равна $\hbar\omega_0 / 2$. Плотность вероятности обнаружения частицы $|\psi_0(x)|^2$ в основном состоянии заметно отличается от нуля в интервале $\Delta x \sim a$ вблизи $x = 0$, где a – масштаб длины (3.84). В этих свойствах основного состояния проявляется принцип неопределенности (см. раздел 1.3); действительно, оценки $\Delta x \sim \sqrt{\hbar/m\omega_0}$ и $\epsilon_0 \sim \hbar\omega_0$ легко получить с помощью соотношений неопределённости (1.15), не решая уравнение Шредингера.

3.6. ОБЩИЕ СВОЙСТВА СТАЦИОНАРНЫХ СОСТОЯНИЙ ПРИ ОДНОМЕРНОМ ДВИЖЕНИИ ЧАСТИЦЫ

Рассмотренные задачи выявляют ряд существенных закономерностей одномерного движения. В этом разделе мы их перечислим (не приводя математических доказательств) с помощью ещё одного примера, который иллюстрируется рис. 3.6.

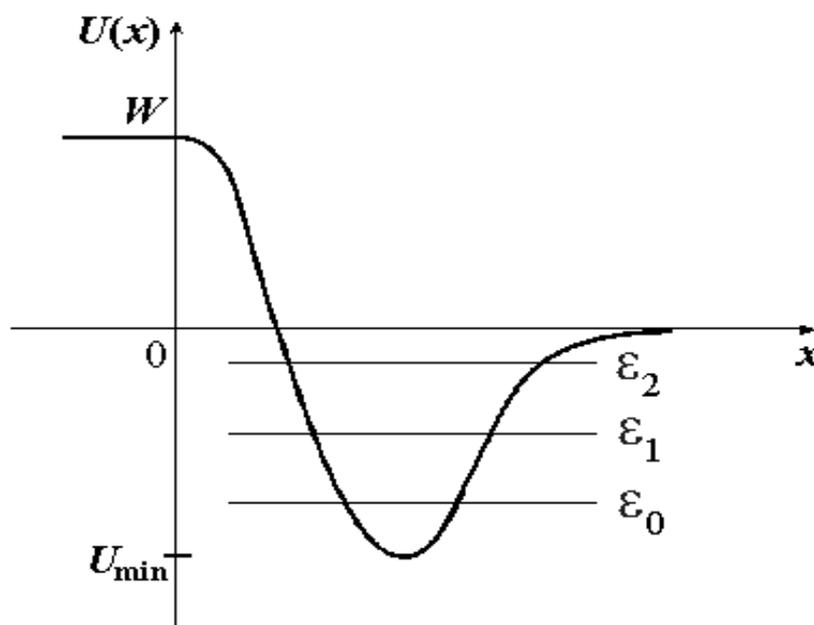


Рис. 3.6. Несимметричная потенциальная яма конечной глубины

Итак, пусть при $x \rightarrow -\infty$ потенциал $U(x)$ стремится к постоянной

величине $W > 0$, при $x \rightarrow +\infty$ потенциал обращается в нуль, а при конечных значениях x имеется потенциальная яма конечной глубины: в ней $U(x)$ достигает минимума $U_{\min} < 0$.

Тогда:

а) При энергии частицы $\varepsilon > W$ движение будет инфинитным (неограниченным) в обе стороны. Это означает, что частица может приближаться к потенциальному барьеру как из области $x \rightarrow -\infty$, так и из области $x \rightarrow +\infty$, испытывая затем с определённой вероятностью надбарьерное отражение и уходя опять на бесконечность. Спектр значений ε при $\varepsilon > W$ оказывается непрерывным и двукратно вырожденным. В тех областях, где потенциал становится постоянным (при $x \rightarrow \pm\infty$), волновая функция стационарного состояния в общем случае имеет вид суммы двух плоских волн, различающихся знаком волнового числа k и значениями амплитуд.

б) При $0 < \varepsilon < W$ движение будет инфинитным лишь с одной стороны. Частица может подходить к потенциальному барьеру лишь из области $x \rightarrow +\infty$; при этом она с достоверностью испытывает отражение назад. Спектр значений ε непрерывен и не вырожден. Волновая функция в области $x \rightarrow +\infty$ имеет вид «биений» падающей и отраженной волны одинаковой амплитуды, то есть асимптотическое поведение волновой функции стационарного состояния описывается выражением, аналогичным (3.44):

$$\psi(x) \sim \cos(kx + \delta), \quad x \rightarrow +\infty, \quad (3.88)$$

где волновое число $k = \sqrt{2m\varepsilon}/\hbar$, а фаза δ определяется формой потенциала $U(x)$ в области конечных значений x и величиной энергии частицы ε .

в) При $\varepsilon < 0$ движение может быть только полностью финитным (ограниченным конечной областью пространства) – если уровень энергии частицы в потенциальной яме не превышает высоты барьеров, то частица может находиться лишь в связанном состоянии. Энергетические уровни

связанных состояний дискретны ($\varepsilon = \varepsilon_n$) и не вырождены. Все они располагаются выше дна потенциальной ямы: $\varepsilon_n > U_{\min}$. В глубь барьеров волновые функции $\psi_n(x)$ монотонно убывают; так, при $x \rightarrow +\infty$ асимптотика волновой функции стационарного состояния имеет вид

$$\psi_n(x) \sim e^{-\kappa x}, \quad x \rightarrow +\infty, \quad (3.89)$$

где

$$\kappa = \sqrt{2m|\varepsilon_n|} / \hbar. \quad (3.90)$$

Масштаб длины $1/\kappa$ дает оценку глубины проникновения частицы в классически недоступную область с $U(x) > \varepsilon_n$.

Следует отметить, что в несимметричной потенциальной яме может не оказаться ни одного уровня энергии, то есть дискретная часть энергетического спектра может отсутствовать. Для существования связанных состояний частицы несимметричная потенциальная яма должна иметь достаточно большую глубину или ширину.

К волновым функциям $\psi_n(x)$, принадлежащим уровням ε_n дискретной части энергетического спектра, применимо следующее утверждение, называемое *осцилляционной теоремой*: на нижнем уровне энергии (то есть в основном состоянии) волновая функция не имеет узлов, а на вышележащих уровнях число узлов увеличивается от уровня к уровню на единицу. Другими словами, если пронумеровать значения ε_n в порядке их возрастания числами $n = 0, 1, 2, \dots$, то можно утверждать, что *функция $\psi_n(x)$ имеет n узлов*, то есть она n раз обращается в нуль при определенных значениях x . Узлы располагаются внутри классически доступной области. Если $\psi_n(x)$ равна нулю всюду вне ограниченного отрезка оси x (как в случае бесконечной прямоугольной потенциальной ямы), то узлами считаются нули функции $\psi_n(x)$ только внутри этого отрезка.

4. МОМЕНТ ИМПУЛЬСА

4.1. ОПЕРАТОРЫ МОМЕНТА ИМПУЛЬСА

Обозначим символом $\hat{R}(\boldsymbol{\alpha})$ оператор поворота, действующий на векторы состояний какого-либо квантового объекта. Векторный параметр $\boldsymbol{\alpha} = \alpha \mathbf{n}$ указывает направление оси вращения \mathbf{n} и величину угла поворота α . Такое вращение производится против часовой стрелки вокруг единичного вектора \mathbf{n} .

Основываясь на соображениях, изложенных в разделе 2.4, введём в рассмотрение операторы проекций момента импульса $\hbar \hat{J}_x$, $\hbar \hat{J}_y$ и $\hbar \hat{J}_z$. Этими эрмитовыми операторами по формулам, аналогичным (2.63), определяются унитарные операторы поворотов на произвольные углы α_x , α_y и α_z вокруг координатных осей:

$$\hat{R}(\alpha_x \mathbf{e}_x) = e^{-i\alpha_x \hat{J}_x}, \quad \hat{R}(\alpha_y \mathbf{e}_y) = e^{-i\alpha_y \hat{J}_y}, \quad \hat{R}(\alpha_z \mathbf{e}_z) = e^{-i\alpha_z \hat{J}_z}. \quad (4.1)$$

Введённые так операторы \hat{J}_k (где $k = x, y, z$) соответствуют проекциям момента, измеряемым в единицах \hbar . Частными примерами операторов момента будут операторы проекций орбитального момента импульса частицы, обозначаемые в дальнейшем \hat{l}_k , и спина \hat{s}_k . В общем случае под \hat{J}_k можно понимать сумму таких операторов, то есть – оператор проекции полного момента импульса частицы (или системы частиц).

Разложив каждый из операторов (4.1) в ряд по степеням угла поворота и отбросив члены высокого порядка, мы найдем, что при бесконечно малых углах поворотов операторы (4.1) в первом приближении имеют вид

$$\hat{R}(\alpha_k \mathbf{e}_k) = 1 - i\alpha_k \hat{J}_k, \quad k = x, y, z. \quad (4.2)$$

Произведение трёх операторов (4.2), отвечающее последовательности бесконечно малых поворотов вокруг \mathbf{e}_x , \mathbf{e}_y и \mathbf{e}_z и записанное с точностью до членов первого порядка малости, есть

$$\hat{R}(\boldsymbol{\alpha}) = 1 - i(\alpha_x \hat{J}_x + \alpha_y \hat{J}_y + \alpha_z \hat{J}_z) = 1 - i \boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{J}}. \quad (4.3)$$

Здесь введён векторный оператор момента импульса

$$\hat{\mathbf{J}} = \mathbf{e}_x \hat{J}_x + \mathbf{e}_y \hat{J}_y + \mathbf{e}_z \hat{J}_z. \quad (4.4)$$

Выражение (4.3) не содержит произведений операторов \hat{J}_k , так что в первом порядке малости по α_x , α_y и α_z повороты коммутативны. Подчеркнем, что так дело обстоит только в первом приближении. В действительности операции поворота вокруг различных направлений не коммутируют друг с другом; их некоммутативность проявляется, начиная со второго приближения.

Действие поворота (4.3) на вектор состояния $|\mathbf{r}\rangle$ бесспиновой частицы, находящейся в точке \mathbf{r} , естественно задать следующим образом:

$$\hat{R}(\boldsymbol{\alpha}) |\mathbf{r}\rangle = |\mathbf{r} + \delta\mathbf{r}\rangle, \quad (4.5)$$

где перемещение $\delta\mathbf{r}$ точки \mathbf{r} при бесконечно малом повороте в первом приближении по $\boldsymbol{\alpha}$ описывается известной формулой геометрии

$$\delta\mathbf{r} = \boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{r}. \quad (4.6)$$

Исходя из (4.5) и (4.6) читатель может самостоятельно убедиться, что результатом последовательности бесконечно малых поворотов $\hat{R}(-\boldsymbol{\beta}) \hat{R}(-\boldsymbol{\alpha}) \hat{R}(\boldsymbol{\beta}) \hat{R}(\boldsymbol{\alpha})$ является перемещение точки \mathbf{r} на вектор второго порядка малости

$$\boldsymbol{\beta} \times (\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{r}) - \boldsymbol{\alpha} \times (\boldsymbol{\beta} \times \mathbf{r}) = (\boldsymbol{\beta} \times \boldsymbol{\alpha}) \times \mathbf{r},$$

соответствующий повороту $\hat{R}(\boldsymbol{\beta} \times \boldsymbol{\alpha})$. Отметим, что при выводе этого результата нет необходимости использовать поправки второго порядка к

(4.6), поскольку рассматриваемый оператор заведомо сводится к \hat{I} при $\alpha = 0$ или $\beta = 0$ и, следовательно, не содержит слагаемых, зависящих от α или β в отдельности. Таким образом, с точностью до членов второго порядка малости

$$\hat{R}(-\beta) \hat{R}(-\alpha) \hat{R}(\beta) \hat{R}(\alpha) = \hat{R}(\beta \times \alpha).$$

Записывая здесь операторы \hat{R} согласно (4.3) и удерживая в соответствии с приведённым выше замечанием только слагаемые порядка $\alpha\beta$, можно вывести операторное равенство, справедливое при произвольных бесконечно малых α и β :

$$[\alpha \cdot \hat{\mathbf{J}}, \beta \cdot \hat{\mathbf{J}}] = -i(\beta \times \alpha) \cdot \hat{\mathbf{J}}.$$

Отсюда, полагая $\alpha = \alpha e_x$ и $\beta = \beta e_y$ (а затем циклически переставляя индексы x, y, z), находим *коммутационные соотношения для операторов проекций момента импульса*

$$[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i \hat{J}_z, \quad [\hat{J}_y, \hat{J}_z] = i \hat{J}_x, \quad [\hat{J}_z, \hat{J}_x] = i \hat{J}_y. \quad (4.7)$$

Эти соотношения обусловлены одними только свойствами поворотов и поэтому они справедливы в применении к любым квантовым объектам. В справедливости (4.7) можно убедиться также следующим образом. Пусть $\hat{\mathbf{f}}$ – оператор какой-либо *векторной* физической величины, действующий в том же пространстве квантовых состояний, в котором действуют рассматриваемые операторы момента (например, в случае бесспиновой частицы векторными операторами являются операторы координат $\hat{\mathbf{r}}$, импульса $\hat{\mathbf{p}}$, орбитального момента $\hat{\mathbf{L}}$). Это означает, что для любых векторов состояния $|\phi\rangle$ и $|\psi\rangle$ величина

$$\langle \phi | \hat{\mathbf{f}} | \psi \rangle = \mathbf{f}$$

при действии на $|\phi\rangle$ и $|\psi\rangle$ бесконечно малого поворота $\hat{R}(\boldsymbol{\alpha})$ преобразуется как обычный трехмерный вектор:

$$\langle \hat{R}\phi | \hat{\mathbf{f}} | \hat{R}\psi \rangle = \mathbf{f} + \delta\mathbf{f},$$

где

$$\delta\mathbf{f} = \boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{f}.$$

По-другому это можно выразить формулой

$$\langle \phi | \hat{R}^+ \hat{\mathbf{f}} \hat{R} | \psi \rangle = \langle \phi | (\hat{\mathbf{f}} + (\boldsymbol{\alpha} \times \hat{\mathbf{f}})) | \psi \rangle,$$

эквивалентной операторному равенству

$$\hat{R}^+(\boldsymbol{\alpha}) \hat{\mathbf{f}} \hat{R}(\boldsymbol{\alpha}) = \hat{\mathbf{f}} + (\boldsymbol{\alpha} \times \hat{\mathbf{f}}), \quad (4.8)$$

причем левая часть здесь должна быть записана с помощью (4.3) в первом порядке по $\boldsymbol{\alpha}$. С учетом эрмитовости оператора $\hat{\mathbf{J}}$ это дает:

$$[\hat{f}_k, \boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{J}}] = i(\boldsymbol{\alpha} \times \hat{\mathbf{f}})_k, \quad k = x, y, z. \quad (4.9)$$

Приравнивая выражения при независимых переменных α_l , образующиеся в левой и правой части (4.9), находим коммутационные соотношения для \hat{f}_k и \hat{J}_l . Так, при $k = x$ имеем:

$$[\hat{f}_x, \hat{J}_x] = 0, \quad [\hat{f}_x, \hat{J}_y] = i\hat{f}_z, \quad [\hat{f}_x, \hat{J}_z] = -i\hat{f}_y. \quad (4.10)$$

Соотношения, соответствующие $k = y, z$, можно получить прямо из (4.10) циклической заменой индексов. Выбрав $\hat{\mathbf{f}} = \hat{\mathbf{J}}$, приходим к уже известным равенствам (4.7).

В случае скалярного оператора \hat{f} число $\langle \phi | \hat{f} | \psi \rangle$ не изменяется при действии любого поворота на $|\phi\rangle$ и $|\psi\rangle$. Отсюда по аналогии с (4.9)

выводится равенство

$$[\hat{f}, \mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{J}}] = 0,$$

означающее, что *скалярный оператор коммутативен с операторами момента импульса*. Важным примером скалярного оператора служит оператор квадрата момента импульса:

$$\hat{\mathbf{J}}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2. \quad (4.11)$$

Коммутативность оператора $\hat{\mathbf{J}}^2$ с каждым из операторов \hat{J}_k , то есть равенства

$$[\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_x] = 0, \quad [\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_y] = 0, \quad [\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_z] = 0, \quad (4.12)$$

легко непосредственно проверить с помощью (4.7).

Наряду с операторами \hat{J}_x и \hat{J}_y в вычислениях полезную роль будут играть следующие две линейные комбинации, эрмитово сопряжённые друг другу:

$$\hat{J}_+ = \hat{J}_x + i\hat{J}_y, \quad \hat{J}_- = \hat{J}_x - i\hat{J}_y. \quad (4.13)$$

С помощью соотношений (4.7) выводятся операторные равенства

$$\hat{J}_- \hat{J}_+ = \hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{J}_z^2 - \hat{J}_z, \quad (4.14)$$

$$\hat{J}_z \hat{J}_- = \hat{J}_- (\hat{J}_z - 1), \quad (4.15)$$

$$\hat{J}_z \hat{J}_+ = \hat{J}_+ (\hat{J}_z + 1). \quad (4.16)$$

Этими равенствами мы воспользуемся для исследования состояний с определенным моментом.

4.2. СОСТОЯНИЯ С ОПРЕДЕЛЁННЫМ МОМЕНТОМ

Поскольку операторы \hat{J}_x , \hat{J}_y и \hat{J}_z друг с другом не коммутативны, то не существует общего для них полного набора собственных векторов, хотя для каждого из этих операторов свой полный набор собственных векторов найдется. Под состояниями «с определённым моментом» мы будем подразумевать собственные векторы, общие для коммутирующих друг с другом операторов $\hat{\mathbf{J}}^2$ и \hat{J}_z . Ось z , конечно, ничем не выделена среди других направлений. В силу изотропии \mathbf{r} -пространства все направления в нём эквивалентны, и любое из них можно выбрать в качестве оси z . Поэтому \hat{J}_z здесь выступает как оператор проекции момента на любое, произвольно заданное направление.

Векторы состояний $|m\rangle$ с определённым моментом должны удовлетворять одновременно двум уравнениям:

$$\hat{J}_z |m\rangle = m |m\rangle, \quad (4.17)$$

$$\hat{\mathbf{J}}^2 |m\rangle = \lambda |m\rangle, \quad (4.18)$$

где m – собственные значения проекции момента J_z , причём мы используем их для нумерации состояний $|m\rangle$, λ – собственные значения квадрата момента. Так как оператор $\hat{\mathbf{J}}^2$ коммутативен с не коммутирующими между собой операторами \hat{J}_k , в спектре значений λ возможно вырождение. Для вырождения же спектра значений m причины нет, и поэтому мы можем сразу считать, что векторы состояний $|m\rangle$ образуют ортонормированную систему:

$$\langle m' | m \rangle = \delta_{m'm}. \quad (4.19)$$

Будем искать допустимые значения m и λ , пользуясь рассмотренными в предыдущем разделе свойствами операторов момента.

Из (4.15) с учётом (4.17) следует равенство

$$\hat{J}_z \hat{J}_- |m\rangle = (m-1) \hat{J}_- |m\rangle, \quad (4.20)$$

показывающее, что вектор вида $\hat{J}_- |m\rangle$, если он не равен нулевому вектору, является собственным для оператора \hat{J}_z и принадлежит собственному значению $J_z = m-1$. Другими словами, вектор $\hat{J}_- |m\rangle$ с точностью до нормировочного множителя совпадает с $|m-1\rangle$. В связи с этим говорят, что оператор \hat{J}_- *понижает* значения m на единицу. Из (4.16) и (4.17) аналогичным образом выводится равенство

$$\hat{J}_z \hat{J}_+ |m\rangle = (m+1) \hat{J}_+ |m\rangle, \quad (4.21)$$

означающее, что $\hat{J}_+ |m\rangle$ – собственный вектор для \hat{J}_z , принадлежащий значению $J_z = m+1$. Таким образом, оператор \hat{J}_+ *повышает* значения m на единицу.

Условимся называть *мультиплетом* набор всевозможных не равных нулю векторов $|m\rangle$, получающихся из какого-либо одного вектора $|m\rangle$ многократным действием операторов \hat{J}_- и \hat{J}_+ с последующей нормировкой. Из коммутативности оператора $\hat{\mathbf{J}}^2$ с операторами \hat{J}_- и \hat{J}_+ легко видеть, что его собственное значение λ будет одним и тем же для всех векторов $|m\rangle$ данного мультиплета (но в разных мультиплетах значения λ могут различаться). Таким образом, все члены мультиплета являются собственными векторами для \hat{J}_z и $\hat{\mathbf{J}}^2$ с одним и тем же λ , причём соседние значения m в мультиплете различаются на единицу.

Покажем, что количество членов мультиплета с конечным λ конечно, так как значения m в мультиплете должны удовлетворять неравенству

$$-\sqrt{\lambda} \leq m \leq \sqrt{\lambda}. \quad (4.22)$$

С этой целью заметим, что левая сторона очевидного равенства

$$\langle m | (\hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{J}_z^2) | m \rangle = \langle m | \hat{J}_x^2 | m \rangle + \langle m | \hat{J}_y^2 | m \rangle$$

с учётом (4.17), (4.18) и условия нормировки $\langle m | m \rangle = 1$ равна $\lambda - m^2$. Правая же сторона не отрицательна; действительно, в силу эрмитовости операторов проекций момента \hat{J}_k и неотрицательности квадрата нормы имеем

$$\langle m | \hat{J}_k \hat{J}_k | m \rangle = \langle \hat{J}_k m | \hat{J}_k m \rangle \geq 0.$$

Таким образом, $\lambda - m^2 \geq 0$ и, следовательно, имеет место неравенство (4.22). Здесь не утверждается, что m обязано принимать все значения из указанного интервала. Мы уже знаем, что допустимые значения m следуют с шагом единица, а ниже мы увидим, что при этом m не достигает граничных значений интервала (4.22).

Можно показать также, что максимальное и минимальное значения m в мультиплете (существующие в силу (4.22)) противоположны. Физически это объясняется тем, что направления \mathbf{e}_z и $-\mathbf{e}_z$ равноправны и поэтому, если допустимы некоторые значения m проекции момента J_z , то допустимы и противоположные её значения.

Обозначим максимальное значение m в мультиплете как j ; тогда минимальным значением m будет $-j$:

$$m_{\max} = j, \quad m_{\min} = -j. \quad (4.23)$$

Определённое так значение j называется *абсолютной величиной момента* для состояний данного мультиплета. Заметим теперь, что вектор состояния $|m_{\max}\rangle$ отличен от нуля, но при действии на него оператором повышения \hat{J}_+ должен получиться нулевой вектор (так как в мультиплете нет состояний с $m > m_{\max}$):

$$\hat{J}_+ |m_{\max}\rangle = 0.$$

Применим к обеим сторонам этого заведомо верного равенства понижающий оператор \hat{J}_- ,

$$\hat{J}_- \hat{J}_+ |m_{\max}\rangle = 0, \quad (4.24)$$

и учтем, что $\hat{J}_- \hat{J}_+ = \hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{J}_z^2 - \hat{J}_z$, согласно (4.14). Для оператора $\hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{J}_z^2 - \hat{J}_z$ в силу (4.17) и (4.18) вектор состояния $|m_{\max}\rangle$ – собственный, причём он принадлежит собственному значению $\lambda - j^2 - j$. Тогда (4.24) сводится к равенству

$$(\lambda - j^2 - j) |m_{\max}\rangle = 0.$$

Отсюда следует, что $\lambda - j^2 - j = 0$, то есть собственные значения λ оператора квадрата момента в заданном мультиплете можно выразить через абсолютную величину момента в этом мультиплете:

$$\lambda = j(j+1). \quad (4.25)$$

Поскольку соседние значения m различаются на единицу, мы заключаем с учетом (4.23), что в мультиплете с заданной величиной момента j проекция момента $J_z \equiv m$ принимает следующие значения:

$$m = j, j-1, \dots, -j. \quad (4.26)$$

Легко подсчитать число N значений m в списке (4.26):

$$N = 2j + 1. \quad (4.27)$$

Это есть количество членов мультиплета, и оно с очевидностью должно быть целым: $N = 1, 2, 3, \dots$. Следовательно, для величины момента j допустимы, в принципе, только целые и полуцелые значения:

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots \quad (4.28)$$

Подведем итоги. Можно считать, что число j (4.28) нумерует различные мультиплеты, а число m нумерует векторы состояний в пределах каждого из мультиплетов; при этом вместо $|m\rangle$ более полным обозначением состояний с определённым моментом будет $|j, m\rangle$. Из проведённого рассмотрения ясно, что векторы состояний $|j, m\rangle$ удовлетворяют соотношениям

$$\hat{\mathbf{J}}^2 |j, m\rangle = j(j+1) |j, m\rangle, \quad (4.29)$$

$$\hat{J}_z |j, m\rangle = m |j, m\rangle, \quad m = j, j-1, \dots, -j. \quad (4.30)$$

Кроме того, следует считать, что состояния квантового объекта с различными значениями величины момента ($j' \neq j$) взаимно ортогональны:

$$\langle j', m' | j, m \rangle = \delta_{j'j} \delta_{m'm}, \quad (4.31)$$

поскольку согласно принципам квантовой механики величина $\langle j', m' | j, m \rangle$ представляет собой амплитуду вероятности значений j' и m' у квантового объекта в состоянии с определёнными значениями величины и проекции момента, равными j и m .

Перечислим основные характеристики нескольких мультиплетов, соответствующих первым членам последовательности (4.28).

При $j = 0$ мы имеем так называемый синглет – «мультиплет», состоящий из единственного ($N = 1$) вектора состояния: $|j = 0, m = 0\rangle \equiv |0, 0\rangle$. Результат применения к этому вектору состояния любого из операторов $\hat{\mathbf{J}}^2$, \hat{J}_z , \hat{J}_+ , \hat{J}_- равен нулю; например:

$$\hat{J}_z |0, 0\rangle = 0 = 0 |0, 0\rangle.$$

Поэтому можно сказать, что $|0,0\rangle$ – собственный вектор одновременно для всех операторов проекций момента, включая \hat{J}_x и \hat{J}_y , принадлежащий равным нулю собственным значениям этих операторов. Следовательно, действие любого поворота

$$\hat{R}(\boldsymbol{\alpha}) = \exp(-i \boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{J}}) = 1 - i \boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{J}} + \dots = 1 - i(\alpha_x \hat{J}_x + \alpha_y \hat{J}_y + \alpha_z \hat{J}_z) + \dots$$

на состояние $|0,0\rangle$ эквивалентно действию единичного оператора, то есть *синглетное состояние не изменяется при поворотах*. Верно и обратное: если $\hat{R}|\psi\rangle = |\psi\rangle$ при любых поворотах \hat{R} , то $|\psi\rangle$ – синглетное состояние, момент импульса квантового объекта в таком состоянии равен нулю. Состояния, не инвариантные (изменяющиеся) при поворотах, в общем случае представляют собой суперпозицию состояний с различными значениями j .

При $j = 1/2$ существует дублет состояний: $|1/2, 1/2\rangle$ и $|1/2, -1/2\rangle$. Как выяснится в разделе 5, такие векторы состояний можно применить для описания спиновой степени свободы частицы со спином $s = 1/2$.

При $j = 1$ имеем триплет: $|1,1\rangle$, $|1,0\rangle$ и $|1,-1\rangle$. Подобным же образом перечисляются и состояния в других мультиплетах. Во всех мультиплетах, за исключением синглета, состояния $|j,m\rangle$ в общем случае не инвариантны к произвольному повороту. При повороте на угол α_z вокруг оси z вектор состояния $|j,m\rangle$ приобретает фазовый множитель $\exp(-i m \alpha_z)$.

В силу соотношений (4.12), означающих, что оператор $\hat{\mathbf{J}}^2$ коммутативен с операторами проекций момента импульса, оператор $\hat{\mathbf{J}}^2$ коммутативен также с операторами поворотов $\hat{R}(\boldsymbol{\alpha})$. Поэтому состояния $|j,m\rangle$, преобразованные посредством поворотов в состояния $\hat{R}(\boldsymbol{\alpha})|j,m\rangle$, остаются собственными для $\hat{\mathbf{J}}^2$, то есть они обладают прежним значением величины момента j , хотя проекция момента J_z в таких состояниях может не иметь определённого значения. Это означает, что состояния

$|j, m\rangle$, входящие в один мультиплет, преобразуются при поворотах друг через друга; другими словами, состояние $\hat{R}(\boldsymbol{\alpha})|j, m\rangle$ может быть разложено по $(2j+1)$ -мерному базису $|j, m\rangle$ с заданным j . Матричные элементы оператора поворота

$$R_{m'm}^{(j)}(\boldsymbol{\alpha}) = \langle j, m' | \hat{R}(\boldsymbol{\alpha}) | j, m \rangle \quad (4.32)$$

имеют смысл амплитуд вероятности значений $J_z = m'$ в состоянии $\hat{R}(\boldsymbol{\alpha})|j, m\rangle$, так что разложение вектора состояния $\hat{R}(\boldsymbol{\alpha})|j, m\rangle$ по $2j+1$ базисным векторам $|j, m\rangle$ имеет вид

$$\hat{R}(\boldsymbol{\alpha})|j, m\rangle = \sum_{m'=-j}^j R_{m'm}^{(j)}(\boldsymbol{\alpha})|j, m'\rangle. \quad (4.33)$$

Теперь представим себе, что поворот действует не только на квантовый объект, но и на координатные оси: $x, y, z \rightarrow \tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}$. По отношению к повернутым осям состояние объекта остается неизменным, поэтому можно интерпретировать $\hat{R}(\boldsymbol{\alpha})|j, m\rangle$ как состояние $|j, \tilde{m}\rangle$ с прежним численным значением проекции момента $J_{\tilde{z}} = m$, определенное, однако, по отношению к новым координатным осям $\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}$, которые получаются поворотом $\boldsymbol{\alpha}$ первоначальных осей x, y, z . В исходном состоянии $|j, m\rangle$ проекция момента $J_{\tilde{z}}$ на ось \tilde{z} , вообще говоря, не является определённой. Амплитуды вероятности значений $J_{\tilde{z}} = m'$ в состоянии $|j, m\rangle$ составляют матрицу с элементами

$$D_{m'm}^{(j)}(\boldsymbol{\alpha}) = \langle j, \tilde{m}' | j, m \rangle = \langle j, m' | \hat{R}^+(\boldsymbol{\alpha}) | j, m \rangle. \quad (4.34)$$

Эта матрица вследствие унитарности операторов вращений ($\hat{R}^+ = \hat{R}^{-1}$) является обратной по отношению к матрице (4.32). Явное выражение для величин (4.32) и (4.34) в общем случае оказывается весьма громоздким [2].

Для наиболее простого случая (при $j=1/2$) матрицы $\hat{R}(\mathbf{a})$ рассматриваются в разделе 5.3.

Подчеркнём, наконец, что поворот с произвольным векторным параметром \mathbf{a} не является последовательностью трёх поворотов вокруг осей x, y, z с параметрами α_x, α_y и α_z , представляющими собой проекции вектора $\mathbf{a} = \alpha \mathbf{n}$. Числа $\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z$ служат лишь коэффициентами в операторном выражении $\alpha_x \hat{J}_x + \alpha_y \hat{J}_y + \alpha_z \hat{J}_z = \mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{J}}$, которым задается оператор поворота $\hat{R}(\mathbf{a}) = \exp(-i \mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{J}})$. В выражении $\mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{J}} = \alpha (\mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{J}})$ оператор $\mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{J}} \equiv \hat{\mathbf{J}}_{\mathbf{n}}$ имеет смысл оператора проекции момента на направление, задаваемое единичным вектором \mathbf{n} . Оператор $\exp(-i \mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{J}})$ не совпадает с произведением операторов (4.1) вследствие того, что \hat{J}_x, \hat{J}_y и \hat{J}_z не коммутативны. Отметим, что в литературе (см.[2]) часто встречается другая параметризация поворотов (углами Эйлера), которая позволяет разложить произвольное вращение на три поворота, выполняемые в строго определённой последовательности.

4.3. МАТРИЦЫ ОПЕРАТОРОВ МОМЕНТА

Операторы момента (как и операторы поворотов) при действии на $|j, m\rangle$ не изменяют величину момента импульса j и поэтому могут быть представлены конечными матрицами, действующими на векторы состояний в $(2j+1)$ -мерном подпространстве состояний с определённым j . Базисом в каждом из таких подпространств служат рассмотренные выше состояния $|j, m\rangle$. Полагая j фиксированным, мы будем обозначать эти векторы состояний просто как $|m\rangle$, причём условимся считать, что они нумеруются в порядке убывания значений проекции момента (4.26).

Из (4.29) и (4.31) следует, что матрица $\hat{\mathbf{J}}^2$ имеет вид $j(j+1)\hat{1}$, где $\hat{1}$ – единичная матрица. Согласно (4.30) матрица \hat{J}_z также имеет диагональный вид, но, в отличие от $\hat{\mathbf{J}}^2$, она не кратна единичной матрице:

$$\hat{J}_z = \begin{pmatrix} j & & \text{нули} \\ & j-1 & \\ & & \dots \\ \text{нули} & & & -j \end{pmatrix}. \quad (4.35)$$

Выведем формулы для матричных элементов операторов \hat{J}_x и \hat{J}_y . Учитывая равенство (4.14) вместе с равенством $(\hat{J}_-)^+ = \hat{J}_+$, заметим, что

$$\langle m | (\hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{J}_z^2 - \hat{J}_z) | m \rangle = \langle m | \hat{J}_- \hat{J}_+ | m \rangle = \langle \hat{J}_+ m | \hat{J}_+ m \rangle.$$

Здесь левая часть в силу (4.29) – (4.30) равна $(j-m)(j+m+1)$. Правую часть можно записать как $|C|^2$, где C – нормировочный коэффициент в выражении, характеризующем действие повышающего оператора \hat{J}_+ :

$$\hat{J}_+ |m\rangle = C |m+1\rangle.$$

Будем считать, что фазы базисных векторов $|m\rangle$ выбраны таким образом, что значения C неотрицательны. Тогда $C = \sqrt{(j-m)(j+m+1)}$, так что

$$\hat{J}_+ |m\rangle = \sqrt{(j-m)(j+m+1)} |m+1\rangle. \quad (4.36)$$

Умножив скалярно обе стороны равенства (4.36) на $|m'\rangle$ и принимая во внимание условие ортонормировки $\langle m' | m+1 \rangle = \delta_{m'm+1}$, находим элементы матрицы \hat{J}_+ :

$$\langle m' | \hat{J}_+ | m \rangle = \sqrt{(j-m)(j+m+1)} \delta_{m'm+1}.$$

Все они вещественны, а значит матрица \hat{J}_- , эрмитово сопряжённая по отношению к \hat{J}_+ , совпадает с транспонированной матрицей \hat{J}_+^T . Таким

образом, те матричные элементы, которые могут быть отличными от нуля, легко вычислить по формуле

$$\langle m+1 | \hat{J}_+ | m \rangle = \langle m | \hat{J}_- | m+1 \rangle = \sqrt{(j-m)(j+m+1)}. \quad (4.37)$$

И тогда для элементов матриц

$$\hat{J}_x = \frac{1}{2} \hat{J}_+ + \frac{1}{2} \hat{J}_-, \quad \hat{J}_y = -\frac{i}{2} \hat{J}_+ + \frac{i}{2} \hat{J}_-$$

справедливы следующие выражения:

$$\langle m+1 | \hat{J}_x | m \rangle = \langle m | \hat{J}_x | m+1 \rangle = \frac{1}{2} \sqrt{(j-m)(j+m+1)}, \quad (4.38)$$

$$\langle m+1 | \hat{J}_y | m \rangle = -\langle m | \hat{J}_y | m+1 \rangle = \frac{-i}{2} \sqrt{(j-m)(j+m+1)}. \quad (4.39)$$

Остальные матричные элементы равны нулю. Приведем два конкретных примера.

При $j = 1/2$ формулы (4.38), (4.39) и (4.35) дают:

$$\hat{J}_x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{J}_y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{J}_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4.40)$$

В математическом аппарате квантовой механики эти матрицы играют роль операторов проекций спина для частицы со спином $1/2$ (см. раздел 5).

При $j = 1$ аналогичным путем находим, что

$$\hat{J}_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{J}_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{J}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4.41)$$

Любому состоянию квантового объекта можно сопоставить вектор усреднённого момента импульса $\langle \mathbf{J} \rangle$:

$$\langle \mathbf{J} \rangle = \mathbf{e}_x \langle J_x \rangle + \mathbf{e}_y \langle J_y \rangle + \mathbf{e}_z \langle J_z \rangle. \quad (4.42)$$

Среднее $\langle J_k \rangle$ в состоянии $|j, m\rangle$ есть $\langle j, m | \hat{J}_k | j, m \rangle$ – диагональный элемент матрицы \hat{J}_k . У матриц \hat{J}_x и \hat{J}_y диагональные элементы равны нулю, а у матрицы \hat{J}_z они равны m . Следовательно, в состоянии $|j, m\rangle$

$$\langle \mathbf{J} \rangle = \langle j, m | \hat{\mathbf{J}} | j, m \rangle = m \mathbf{e}_z. \quad (4.43)$$

Таким образом, в состоянии $|j, m\rangle$ усреднённый вектор момента по величине равен проекции момента, а его направление определяется «направлением квантования» момента, то есть – той осью z , по отношению к которой в состояниях $|j, m\rangle$ проекция момента имеет определенное значение.

4.4. ОПЕРАТОРЫ ОРБИТАЛЬНОГО МОМЕНТА ЧАСТИЦЫ

Векторный оператор орбитального момента частицы мы будем обозначать символом $\hat{\mathbf{I}}$ (вместо $\hat{\mathbf{J}}$). Этот оператор связан с оператором бесконечно малого поворота $\hat{R}(\boldsymbol{\alpha})$ формулой, аналогичной (4.3):

$$\hat{R}(\boldsymbol{\alpha}) = 1 - i \boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{I}}, \quad \boldsymbol{\alpha} \rightarrow 0. \quad (4.44)$$

Оператор (4.44) действует на волновую функцию частицы $\psi(\mathbf{r})$. Он должен совпадать с оператором перемещения (2.114) при $\delta \mathbf{r} = \boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{r}$, имеющим вид

$$1 - \delta \mathbf{r} \cdot \nabla = 1 - (\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{r}) \cdot \nabla = 1 - \boldsymbol{\alpha} \cdot (\mathbf{r} \times \nabla). \quad (4.45)$$

Таким образом, приравняв (4.44) к (4.45) и учитывая, что полученное равенство справедливо при произвольном бесконечно малом \mathbf{a} , мы находим явное выражение для оператора орбитального момента импульса $\hat{\mathbf{I}}$ в координатном представлении:

$$\hat{\mathbf{I}} = \mathbf{r} \times (-i \nabla). \quad (4.46)$$

Операторная величина (4.46) безразмерна, она соответствует моменту импульса, измеряемому в единицах \hbar . Оператор момента импульса с классической размерностью равен

$$\hbar \hat{\mathbf{I}} = \mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}, \quad (4.47)$$

где $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ – оператор импульса частицы. Из (4.46) видно, что операторы проекций момента на декартовы координатные оси имеют вид

$$\hat{l}_x = -i \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right), \quad \hat{l}_y = -i \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right), \quad \hat{l}_z = -i \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right). \quad (4.48)$$

Эти операторы обладают теми же коммутационными свойствами, что и операторы \hat{J}_x , \hat{J}_y , \hat{J}_z (см. раздел 4.1).

Для дальнейших вычислений удобно воспользоваться сферической системой координат r, θ, φ (рис. 4.1). В этой системе координат оператор ∇ имеет вид

$$\nabla = \mathbf{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \mathbf{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \mathbf{e}_\varphi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad (4.49)$$

где \mathbf{e}_r , \mathbf{e}_θ и \mathbf{e}_φ – изменяющиеся от точки к точке единичные векторы, касательные к координатным линиям сферической системы координат; как видно из рис. 4.1, они взаимно ортогональны в каждой точке \mathbf{r} . С учётом отличной от нуля дивергенции векторных полей \mathbf{e}_r и \mathbf{e}_θ оператор Лапласа ($\Delta \equiv \nabla \cdot \nabla$) имеет вид

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right). \quad (4.50)$$

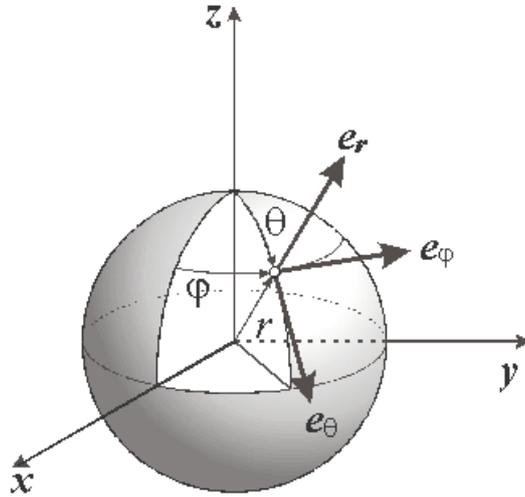


Рис. 4.1. Локальные орты \mathbf{e}_r , \mathbf{e}_θ , \mathbf{e}_φ сферической системы координат

Важно знать также вид операторов \hat{l}_z и $\hat{\mathbf{l}}^2$; эти коммутативные друг с другом операторы позволят нам построить общий для них полный набор собственных векторов $|l, m\rangle$ – состояния частицы с определённой величиной орбитального момента l и определёнными значениями проекции момента $l_z \equiv m$ (согласно традиции, установившейся в литературе по квантовой механике, значения проекции момента импульса мы всегда обозначаем буквой m). Подставив выражения $\mathbf{r} = r \mathbf{e}_r$ и (4.49) в (4.46), и приняв во внимание равенства

$$\mathbf{e}_r \times \mathbf{e}_r = 0, \quad \mathbf{e}_r \times \mathbf{e}_\theta = \mathbf{e}_\varphi, \quad \mathbf{e}_r \times \mathbf{e}_\varphi = -\mathbf{e}_\theta$$

получим

$$\hat{\mathbf{l}} = -i \mathbf{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + i \mathbf{e}_\theta \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (4.51)$$

При этом из формулы $\hat{l}_z = \mathbf{e}_z \cdot \hat{\mathbf{l}}$ с учетом равенств

$$\mathbf{e}_z \cdot \mathbf{e}_\varphi = 0, \quad \mathbf{e}_z \cdot \mathbf{e}_\theta = -\sin \theta,$$

справедливость которых ясна из рис. 4.1, следует, что

$$\hat{l}_z = -i \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (4.52)$$

Оператор $\hat{\mathbf{I}}^2$ можно вычислить (упражнение для читателя) с помощью (4.46) как произведение $\hat{\mathbf{I}} \cdot \hat{\mathbf{I}}$. Оно сводится к сумме двух слагаемых вида $(\mathbf{r} \times (\mathbf{r} \times \nabla)) \cdot \nabla$, в одном из которых левый оператор ∇ действует только на левый сомножитель \mathbf{r} , а в другом – на все величины, расположенные правее этого оператора. Раскрыв появляющиеся таким образом двойные векторные произведения, придем к следующему выражению для $\hat{\mathbf{I}}^2$:

$$r^2 \left(\frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \nabla \cdot \nabla \right) = r^2 \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \Delta \right).$$

Сравнив это выражение с (4.50), окончательно получим

$$\hat{\mathbf{I}}^2 = - \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \quad (4.53)$$

Формула (4.53) позволяет выразить угловую часть оператора Δ через $\hat{\mathbf{I}}^2$ и записать оператор Δ в форме

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2} \hat{\mathbf{I}}^2. \quad (4.54)$$

Из (4.51) видно, что действие операторов орбитального момента на волновые функции $\psi(r, \theta, \varphi)$ заключается в дифференцировании только по угловым координатам θ и φ , а радиальная переменная r не затрагивается.

Следовательно, любая функция $R(r)$, зависящая только от r , по отношению к операторам момента эквивалентна постоянной. Из (4.52) – (4.54) ясно, что операторы Δ , $\hat{\mathbf{I}}^2$ и \hat{l}_z коммутативны друг с другом; Δ и $\hat{\mathbf{I}}^2$ коммутативны также с \hat{l}_y и \hat{l}_x .

4.5. ЧАСТИЦА В СФЕРИЧЕСКИ СИММЕТРИЧНОМ ПОЛЕ

4.5.1. Система уравнений для волновой функции

Рассмотрим свойства решений уравнения Шредингера

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = \varepsilon\psi(\mathbf{r}) \quad (4.55)$$

для стационарных состояний частицы в силовом поле, обладающем *сферической симметрией*. Наличие такой симметрии означает, что потенциальная энергия частицы $U(r)$ не зависит от угловых координат θ и φ . С учётом формулы (4.54) гамильтониан частицы принимает вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(r) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\hat{\mathbf{I}}^2}{r^2} + U(r). \quad (4.56)$$

Такой оператор коммутативен со всеми тремя операторами декартовых проекций орбитального момента импульса $\hat{\mathbf{I}} = \mathbf{e}_x \hat{l}_x + \mathbf{e}_y \hat{l}_y + \mathbf{e}_z \hat{l}_z$

$$[\hat{H}, \hat{\mathbf{I}}] = 0,$$

то есть момент импульса частицы, движущейся в сферически симметричном поле, является сохраняющейся величиной. В квантовой механике это означает, что в любом состоянии $\Psi(\mathbf{r}, t)$, удовлетворяющем волновому уравнению Шредингера (2.164) с гамильтонианом (4.56), усредненный вектор момента импульса не изменяется со временем:

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{1} \rangle = 0.$$

Различные проекции оператора момента импульса не коммутативны друг с другом. Выберем в качестве набора взаимно коммутирующих операторов коммутирующие между собой операторы \hat{H} , $\hat{\mathbf{I}}^2$ и \hat{l}_z , то есть будем искать собственные функции $\psi(\mathbf{r})$ для \hat{H} как собственные функции одновременно для $\hat{\mathbf{I}}^2$ и \hat{l}_z . Тем самым мы получим стационарные состояния частицы в сферически симметричном поле в форме состояний $|l, m\rangle$ с определённым орбитальным моментом.

Волновые функции $\psi(\mathbf{r})$ искомым состояний должны удовлетворять одновременно трём уравнениям:

$$\hat{l}_z \psi = m \psi, \quad (4.57)$$

$$\hat{\mathbf{I}}^2 \psi = l(l+1) \psi, \quad (4.58)$$

$$\hat{H} \psi = \varepsilon \psi. \quad (4.59)$$

Здесь $l(l+1)$ – собственные значения квадрата момента, определяемые аналогично (4.25), m – собственные значения проекции момента l_z (их не следует путать с массой частицы m в (4.56)):

$$m = l, l-1, \dots, -l. \quad (4.60)$$

Применим метод разделения переменных, представив волновую функцию ψ в форме произведения новых неизвестных функций R и Y :

$$\psi(\mathbf{r}) = R(r) Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (4.61)$$

Подстановка выражения (4.61) в уравнения (4.57) – (4.59) приводит эти уравнения к виду

$$\hat{l}_z Y_{lm} = m Y_{lm}, \quad (4.62)$$

$$\hat{\mathbf{I}}^2 Y_{lm} = l(l+1) Y_{lm}, \quad (4.63)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + U(r) \right) R = \varepsilon R. \quad (4.64)$$

4.5.2. Угловая часть волновой функции

Функции $Y_{lm}(\theta, \varphi)$, зависящие только от угловых координат, будем также искать в виде произведения функций:

$$Y(\theta, \varphi) = X(\theta) \Phi(\varphi). \quad (4.65)$$

При этом уравнение (4.62) с учётом (4.52) сводится к

$$-i \frac{d\Phi}{d\varphi} = m \Phi. \quad (4.66)$$

Решением уравнения (4.66) является функция

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}, \quad (4.67)$$

где нормировочный множитель $1/\sqrt{2\pi}$ выбран из условия

$$\int_0^{2\pi} d\varphi |\Phi_m|^2 = 1. \quad (4.68)$$

Обратим теперь внимание на то, что координаты (r, θ, φ) и $(r, \theta, \varphi + 2\pi)$ определяют одну и ту же точку \mathbf{r} . Поскольку на волновую функцию (4.61), как и на всякое решение уравнения Шредингера (2.168), налагается условие однозначности (ψ должна однозначным образом

зависеть от координат), необходимо требовать, чтобы функции $\Phi_m(\varphi)$ были периодическими функциями с периодом 2π :

$$\Phi_m(\varphi + 2\pi) = \Phi_m(\varphi). \quad (4.69)$$

С учетом (4.67) это требование эквивалентно уравнению

$$e^{im2\pi} = 1.$$

Отсюда мы находим, что проекция $l_z \equiv m$ орбитального момента импульса может принимать только целые положительные и отрицательные значения:

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (4.70)$$

Сравнение (4.70) с результатом (4.60) общей теории момента импульса ведет к важному заключению, что величина l орбитального момента не может быть полуцелым числом – для l допустимы только целочисленные значения:

$$l = 0, 1, 2, \dots \quad (4.71)$$

Значениям l в этом ряду принято сопоставлять символы s, p, d, f, g, \dots .

Подставим произведение (4.65) в уравнение (4.63). Учитывая формулу (4.53) и равенство $d^2\Phi_m/d\varphi^2 = -m^2\Phi_m$, следующее из (4.66), приходим к уравнению для функции $X(\theta)$

$$-\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{dX}{d\theta} \right) + \frac{m^2}{\sin^2\theta} X = l(l+1)X. \quad (4.72)$$

Свойства такого уравнения хорошо известны из литературы по специальным функциям. Оно имеет ограниченные однозначные (с точностью до постоянного множителя) решения при целых значениях $l \geq |m|$, что как раз согласуется с (4.71) и (4.60). Этими решениями

являются так называемые присоединённые полиномы Лежандра $P_l^{(m)}(\cos\theta)$:

$$P_l^{(m)}(\cos\theta) = \frac{1}{2^l l!} \sin^m \theta \frac{d^{l+m}}{(d \cos \theta)^{l+m}} (\cos^2 \theta - 1)^l. \quad (4.73)$$

Искомые функции $X(\theta)$ могут отличаться от (4.73) только нормировочным множителем, и мы выберем их в виде:

$$X_{lm}(\theta) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)!}} (-1)^m P_l^{(m)}(\cos\theta). \quad (4.74)$$

Указанный здесь нормировочный множитель необходим для выполнения приведённого ниже равенства (4.76), а фазовый множитель $(-1)^m$ введён для согласования свойств функций Y_{lm} с формулами матричных элементов (4.36)–(4.39); в последних при рассмотрении орбитального момента достаточно заменить j на l . В (4.74) можно ввести также произвольный фазовый множитель, не зависящий от m , поэтому в литературе встречаются и немного другие определения функций (4.74).

Подставив (4.67) и (4.74) в (4.65), имеем окончательное выражение для угловой части волновой функции частицы, применимое в задачах с произвольным сферически симметричным полем $U(r)$:

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} (-1)^m P_l^{(m)}(\cos\theta) e^{im\varphi}. \quad (4.75)$$

В силу (4.70) функции $\Phi_m(\varphi)$, определяемые формулой (4.67), образуют ортонормированную систему:

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \Phi_{m'}^* \Phi_m = \delta_{m'm}.$$

Функции $X_{lm}(\theta)$ ортогональны при различных l (но не при различных m)

с весовым множителем $\sin \theta$:

$$\int_0^{\pi} \sin \theta d\theta X_{l'm}^* X_{lm} = \delta_{l'l}.$$

В результате, как легко заметить, выполняется равенство

$$\int d\Omega Y_{l'm}^* Y_{lm} = \delta_{l'l} \delta_{m'm}, \quad (4.76)$$

где $d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$ – элемент телесного угла. Равенство (4.76) показывает, что состояния с определенным орбитальным моментом обладают свойством ортонормированности:

$$\langle l', m' | l, m \rangle = \delta_{l'l} \delta_{m'm}. \quad (4.77)$$

Приведём выражения нескольких первых функций Y_{lm} :

$$\begin{aligned} Y_{00} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, & Y_{10} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, & Y_{20} &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1), \\ Y_{1,\pm 1} &= \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}, & Y_{2,\pm 1} &= \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \cos \theta \sin \theta e^{\pm i\varphi}, \\ & & Y_{2,\pm 2} &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi}. \end{aligned}$$

4.5.3. Радиальная часть волновой функции

Радиальная функция $R(r)$ в (4.61) определяется уравнением (4.64). С помощью подстановки

$$R(r) = \frac{\chi(r)}{r} \quad (4.78)$$

оно принимает вид одномерного уравнения Шредингера (3.14) для

вспомогательной функции $\chi(r)$:

$$\chi'' + \frac{2m}{\hbar^2}(\varepsilon - V_l(r))\chi = 0, \quad (4.79)$$

где

$$V_l(r) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} + U(r). \quad (4.80)$$

Величина $V_l(r)$ называется *эффективным потенциалом* для движения частицы с заданной величиной орбитального момента l . Первое слагаемое в (4.80) соответствует классическому представлению о центробежной энергии частицы с массой m и орбитальным моментом импульса $\hbar l$. Проекция момента l_z не входит в уравнение (4.79) и поэтому от неё не будут зависеть ни радиальные функции R , ни уровни энергии ε .

Рассмотрим сначала асимптотическое поведение радиальных функций на малых ($r \rightarrow 0$) и больших ($r \rightarrow \infty$) расстояниях.

При $r \rightarrow 0$ функция $\chi(r)$ должна обращаться в нуль, поскольку мы требуем, чтобы радиальная функция (4.78) была ограничена в силу ограниченности полной волновой функции (4.61). Поэтому предположим, что в рассматриваемом пределе

$$\chi(r) = C r^\gamma, \quad r \rightarrow 0. \quad (4.81)$$

Подставляя (4.81) в (4.79) и умножая на r^2 , имеем

$$\gamma(\gamma - 1)\chi = -\frac{2m}{\hbar^2} \left(r^2 \varepsilon - \frac{\hbar^2}{2m} l(l+1) - r^2 U(r) \right) \chi.$$

В правой стороне этого равенства при $r \rightarrow 0$ в большинстве случаев существенно только слагаемое с $l(l+1)$, так как обычно потенциал $U(r)$ обладает свойством

$$r^2 U(r) \rightarrow 0 \quad \text{при } r \rightarrow 0. \quad (4.82)$$

Тогда

$$\gamma(\gamma - 1) = l(l + 1).$$

Отсюда следует, что либо $\gamma = l + 1$, либо $\gamma = -l$. Поскольку $l \geq 0$, то следует выбрать решение χ с $\gamma = l + 1$, обращающееся, как и должно быть, в нуль при $r \rightarrow 0$. Таким образом, радиальная функция $R(r)$ обладает зависимостью от l и ведёт себя вблизи начала координат как r^l :

$$R_l(r) = C r^l, \quad r \rightarrow 0. \quad (4.83)$$

При $r \rightarrow \infty$ поведение $R_l(r)$ определяется тем, к какой области энергетического спектра принадлежит значение ε . Ввиду того, что уравнение (4.79) имеет одномерный характер, к вспомогательной функции $\chi(r)$ применимы все общие утверждения о свойствах одномерных стационарных состояний, перечисленные в разделе 3.6. С учетом (4.78) эти утверждения дают нам информацию и о свойствах функции $R_l(r)$. Поскольку согласно (4.81) функция $\chi(r)$ удовлетворяет граничному условию $\chi(0) = 0$, совпадающему с граничным условием в задаче с бесконечно высокой потенциальной стенкой в точке $r = 0$, а область отрицательных значений r не имеет физического смысла, то в интересующей нас области ($r > 0$) свойства решений уравнения (4.79) будут такими же, как в задаче о движении, ограниченном с одной стороны. В частности, можно сразу же сделать вывод, что при фиксированных значениях l и $l_z \equiv m$, которыми полностью определяется угловая часть волновой функции, все уровни энергии ε в (4.79) не вырождены.

Согласно (3.88) в области непрерывного спектра $\chi(r) \sim \cos(kr + \delta)$ при $r \rightarrow \infty$. Следовательно, радиальная функция ($R(r) = \chi(r)/r$) обладает зависимостью не только от l , но и от волнового числа $k = \sqrt{2m\varepsilon}/\hbar$, и ведёт себя как *сферическая волна* $r^{-1} \cos(kr + \delta)$. Фазу этой волны принято определять таким образом, чтобы асимптотическое выражение для радиальной функции имело вид

$$R_{kl}(r) \sim \frac{1}{r} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right), \quad r \rightarrow \infty. \quad (4.84)$$

Можно показать [2], что тогда в (4.84) для свободной частицы $\delta_l = 0$, а в общем случае фаза δ_l зависит от l и k и связана с формой потенциала $U(r)$. Непрерывному спектру ε (обычно это область $\varepsilon > 0$) отвечают состояния, в которых частица способна уходить на бесконечность. При этом о взаимодействии частиц с полем $U(r)$ говорят как о процессах *рассеяния* частиц источником этого поля; фаза δ_l служит количественной характеристикой таких процессов.

Дискретным уровням ε (обычно они расположены в области $\varepsilon < 0$) соответствуют *связанные состояния*. Для их существования поле $U(r)$ должно иметь вид достаточно глубокой потенциальной ямы. Согласно (3.89) волновые функции связанных состояний экспоненциально убывают, так что $\chi(r) \sim \exp(-\kappa r)$ при $r \rightarrow \infty$, где $\kappa = \sqrt{2m|\varepsilon|}/\hbar$.

Осцилляционная теорема, сформулированная в разделе 3.6, позволяет утверждать, что дискретные уровни энергии частицы с заданным l , определяемые в процессе решения одномерного уравнения (4.79), можно нумеровать числом

$$n_r = 0, 1, 2, \dots,$$

равным числу узлов радиальной функции $R_{n_r, l}(r)$ в области конечных значений r (не считая точки $r = 0$). Этот факт, вместе с картиной асимптотического поведения радиальной функции при $r \rightarrow 0$ (4.83) и при $r \rightarrow \infty$,

$$R_{n_r, l}(r) \sim e^{-\kappa r}, \quad r \rightarrow \infty, \quad (4.85)$$

вполне определяет характер радиальной функции $R_{n_r, l}(r)$, принадлежащей дискретному уровню энергии $\varepsilon = \varepsilon_{n_r, l}$. Рис. 4.2, а иллюстрирует поведение радиальной функции основного состояния (случай $l = 0$, $n_r = 0$) частицы в потенциальной яме конечного радиуса и конечной глубины. На рис. 4.2, б

показана форма эффективного потенциала при отличном от нуля моменте импульса l и приведен качественный вид радиальной функции для уровня энергии $\varepsilon_{n_r, l}$ с $l > 0$ и $n_r > 0$.

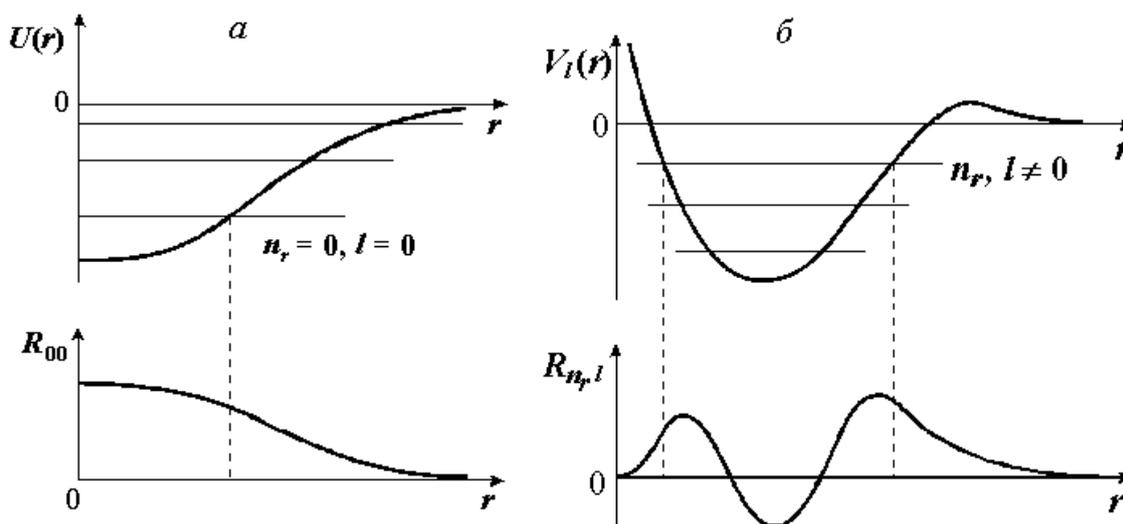


Рис. 4.2, *a* – сферически симметричная потенциальная яма $U(r)$ и радиальная часть волновой функции основного состояния $R_{00}(r)$.

б – эффективный потенциал $V_l(r)$ в случае потенциальной ямы, показанной на рис. 4.2, *a*, и радиальная часть $R_{n_r, l}(r)$ волновой функции возбуждённого состояния с не равным нулю числом узлов (в приведенном примере $n_r = 2$)

Таким образом, при движении частицы в сферически симметричном поле собственные функции (4.61) дискретного спектра энергии $\varepsilon_{n_r, l}$ имеют вид

$$\psi_{n_r, l, m}(\mathbf{r}) = R_{n_r, l}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (4.86)$$

Число n_r принято называть *радиальным* квантовым числом, l – *азимутальным* квантовым числом, m – *магнитным* квантовым числом. Аналогичным образом записываются и собственные функции $\psi_{k, l, m}(\mathbf{r})$ для непрерывной части энергетического спектра, но поведение их радиальной части (4.84) характеризуется не числом узлов n_r , а волновым числом k ,

которым определяется энергия $\varepsilon = \hbar^2 k^2 / (2m)$, а также длина волны $\lambda = 2\pi / k$ в области $r \rightarrow \infty$.

На волновые функции (4.86), относящиеся к дискретному энергетическому спектру, можно наложить нормировочное условие (2.96) – требование нормировки на единицу. В сферической системе координат элемент объёма имеет вид $d^3 \mathbf{r} = r^2 dr d\Omega$, поэтому с учётом (4.76) условие нормировки сводится к

$$\int_0^{\infty} dr r^2 |R_{n_r, l}|^2 \equiv \int_0^{\infty} dr |\chi_{n_r, l}|^2 = 1. \quad (4.87)$$

Необходимо подчеркнуть, что значения энергии $\varepsilon_{n_r, l}$ не зависят от квантового числа m , то есть каждый энергетический уровень $\varepsilon_{n_r, l}$ с $l \geq 1$ вырожден по m с кратностью $(2l + 1)$: одному и тому же уровню с заданным l принадлежит мультиплет состояний $|l, m\rangle$ с $m = l, l - 1, \dots, -l$. Следовательно, суперпозиции волновых функций (4.86) вида

$$\Psi_{n_r, l}(\mathbf{r}) = \sum_{m=-l}^l A_m \Psi_{n_r, l, m}(\mathbf{r}) \quad (4.88)$$

с произвольными коэффициентами A_m также описывают стационарные состояния с энергией $\varepsilon_{n_r, l}$ и определенной величиной орбитального момента l , но проекция момента $l_z \equiv m$ в состояниях (4.88) не имеет определенного значения. Величины $|A_m|^2$ дают распределение вероятности различных значений l_z в таких состояниях.

Преобразование $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$, называемое пространственной *инверсией*, в сферической системе координат сводится к замене $\theta \rightarrow \pi - \theta$, $\varphi \rightarrow \varphi + \pi$, $r \rightarrow r$. Из (4.73) и (4.75) можно видеть, что функция Y_{lm} при инверсии переходит в $(-1)^l Y_{lm}$. Следовательно, любое состояние

$\psi_l(\mathbf{r})$ с определённым значением величины момента l характеризуется свойством

$$\psi_l(-\mathbf{r}) = (-1)^l \psi_l(\mathbf{r}). \quad (4.89)$$

Это означает, что по отношению к инверсии состояние с определённым l обладает определённой чётностью, равной $(-1)^l$.

4.6. АТОМ ВОДОРОДА

Применим изложенную выше теорию к простейшему из атомов – атому водорода. Для упрощения мы пренебрежём спином электрона в атоме водорода и будем считать ядро атома (протон) классической материальной точкой, покоящейся в начале координат. При этом взаимодействие электрона с ядром описывается как кулоновское притяжение между электрическими зарядами e противоположного знака – оно характеризуется отрицательной потенциальной энергией

$$U(r) = -\frac{e^2}{r}. \quad (4.90)$$

Подставив (4.90) в (4.80), имеем уравнение (4.79) для функции $\chi(r) = r R(r)$ в явном виде

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} + \left(\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{me^2}{\hbar^2} \frac{2}{r} \right) \chi = 0, \quad (4.91)$$

где m – масса электрона, e – заряд электрона. Из сравнения размерностей слагаемых в (4.91) видно, что естественным масштабom длины, не зависящим от энергии ε , в этой задаче служит *радиус Бора* a :

$$a = \hbar^2 / me^2. \quad (4.92)$$

Ограничимся рассмотрением стационарных состояний с дискретным спектром энергии – для них $\varepsilon < 0$. Обозначив

$$\kappa^2 = -2m\varepsilon/\hbar^2, \quad (4.93)$$

$$\rho = r/a, \quad (4.94)$$

имеем уравнение (4.91) в виде

$$\chi''(\rho) + \left(-(\kappa a)^2 - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{2}{\rho} \right) \chi(\rho) = 0. \quad (4.95)$$

Согласно (4.83) и (4.85) функция $\chi(\rho)$ должна обладать следующим асимптотическим поведением:

$$\chi \sim \rho^{l+1}, \quad \rho \rightarrow 0; \quad (4.96)$$

$$\chi \sim e^{-\kappa a \rho}, \quad \rho \rightarrow \infty. \quad (4.97)$$

Будем искать решения уравнения (4.95) в форме произведения новой неизвестной функции $w(\rho)$ и множителей, обеспечивающих указанные асимптотики

$$\chi(\rho) = C w(\rho) \rho^{l+1} e^{-\kappa a \rho}, \quad (4.98)$$

где C – нормировочная постоянная.

Подставив (4.98) в (4.95), получим уравнение для $w(\rho)$

$$\rho w'' + 2(l+1 - \kappa a \rho) w' + 2(1 - (l+1)\kappa a) w = 0. \quad (4.99)$$

Ищем $w(\rho)$ в виде степенного ряда

$$w(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k. \quad (4.100)$$

Для выполнения (4.96) с учётом (4.98) необходимо, чтобы $w(0) \neq 0$, поэтому в (4.100) можно положить $a_0 = 1$. Подставив (4.100) в (4.99), имеем

$$\sum_{k=0}^{\infty} (k-1+2(l+1))k a_k \rho^{k-1} + \sum_{k=0}^{\infty} 2(1-(l+1)ka - kka) a_k \rho^k = 0. \quad (4.101)$$

В первой из этих двух сумм заменим k на $k+1$. Тогда обе суммы объединяются, и уравнение (4.101) принимает вид

$$\sum_{k=0}^{\infty} (a_{k+1}(k+2l+2)(k+1) - 2a_k ka(k+l+1-1/ka)) \rho^k = 0. \quad (4.102)$$

Для того чтобы (4.102) выполнялось при любых значениях переменной ρ , все коэффициенты степенного ряда (4.102) должны быть равны нулю. Из этого условия следует рекуррентная формула

$$a_{k+1} = a_k \frac{2ka(k+l+1-1/ka)}{(k+2l+2)(k+1)}, \quad (4.103)$$

позволяющая последовательно выразить коэффициенты a_k через a_0 .

Из формулы (4.103) при достаточно больших значениях k , существенных для анализа $w(\rho)$ в области $\rho \rightarrow \infty$, в общем случае следует соотношение $a_{k+1}/a_k \approx 2ka/k$, характерное для функции $w(\rho)$ с асимптотическим поведением $e^{2ka\rho}$. Это поведение не согласуется с (4.97); оно соответствует неограниченному росту волновой функции электрона на бесконечности, что физически бессмысленно. Следовательно, необходимо рассмотреть специальные случаи – такие, в которых ряд (4.100) сводится к полиномам конечной степени. С подобной ситуацией мы имели дело в разделе 3.5.

Заметим, что ряд (4.100) с коэффициентами, определяемыми рекуррентной формулой (4.103), обрывается, если величина $1/ka - l - 1$ принимает лишь целые неотрицательные значения: $0, 1, 2, \dots$. Эти значения, как можно будет убедиться в дальнейшем (и как требует осцилляционная

теорема), должны выступать в роли числа узлов искомым радиальных функций; поэтому мы сразу же введем здесь символ радиального квантового числа n_r :

$$1/\kappa a - l - 1 = n_r, \quad n_r = 0, 1, 2, \dots \quad (4.104)$$

Тогда

$$1/\kappa a = n, \quad (4.105)$$

где

$$n = n_r + l + 1. \quad (4.106)$$

Найдя κ из (4.105) и подставив в (4.93), получим, таким образом, формулу для дискретных уровней энергии атома водорода

$$\varepsilon_n = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4.107)$$

Эти уровни схематично изображены на рис. 4.3.

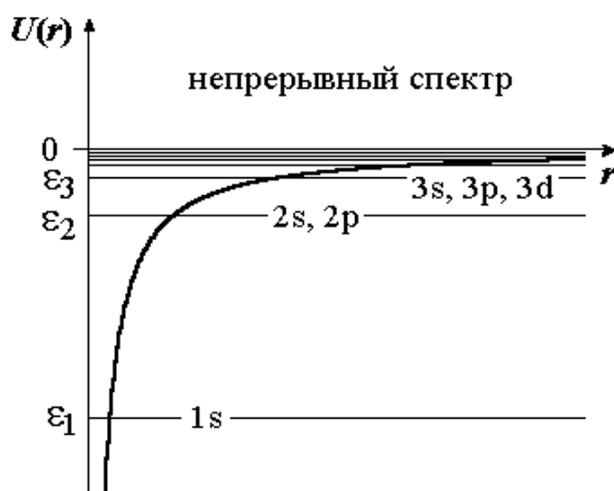


Рис. 4.3. Кулоновский потенциал $U(r) = -e^2/r$ и уровни энергии $\varepsilon_n = -Ry/n^2$ в нерелятивистской модели атома водорода. Здесь Ry – «постоянная Ридберга», играющая роль атомного масштаба энергии:

$$Ry = me^4/(2\hbar^2) \approx 13,6 \text{ эВ}$$

Следует подчеркнуть, что радиальное число n_r и азимутальное число l (величина орбитального момента электрона в единицах \hbar) принимают целые неотрицательные значения независимо друг от друга. Однако число $n = n_r + l + 1$ связано с l неравенством $n \geq l + 1$. Энергетические уровни (4.107) задаются именно значениями числа n , которое в связи с этим называется *главным* квантовым числом; при заданном n число l может принять лишь n различных значений:

$$l = 0, 1, \dots, n - 1. \quad (4.108)$$

Таким образом, при движении электрона в кулоновском поле уровни энергии ε_n вырождены не только по магнитному квантовому числу (с кратностью $2l + 1$), но и по азимутальному числу l . В результате, кратность вырождения уровня ε_n равна

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2.$$

Этот результат получен без учета спина. С учетом электронного спина указанная кратность вырождения энергетических уровней удваивается.

Волновые функции стационарных состояний, принадлежащие энергетическим уровням (4.107), имеют вид

$$\Psi_{nlm}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (4.109)$$

где

$$R_{nl}(r) = C w_{n_r, l}(r/a) (r/a)^l e^{-r/na}, \quad (4.110)$$

C – нормировочные множители, определяемые условием (4.87), $w_{n_r, l}(r/a)$ – полиномы степени n_r с коэффициентами (4.103). С учётом равенств $a_0 = 1$, (4.105) и (4.106) коэффициенты (4.103) при заданных n и $l \leq n - 1$ вычисляются по формуле

$$a_{k+1} = a_k \frac{2}{n} \frac{k - n_r}{(k + 2l + 2)(k + 1)}, \quad n_r = n - l - 1.$$

Полиномы $w_{n_r, l}$ могут быть выражены также через обобщённые полиномы Лагерра [2]. Выпишем в явной форме несколько первых функций R_{nl} , указывая квантовые числа nl с буквенным обозначением для l :

$$1s \quad R_{10} = (2/\sqrt{a^3}) e^{-r/a}.$$

$$2s \quad R_{20} = (1/\sqrt{2a^3})(1 - r/2a) e^{-r/2a}.$$

$$3s \quad R_{30} = (2/3\sqrt{3a^3})(1 - 2r/3a + 2r^2/27a^2) e^{-r/3a}.$$

$$2p \quad R_{21} = (1/2\sqrt{6a^3}) e^{-r/2a} r/a.$$

$$3p \quad R_{31} = (8/27\sqrt{6a^3})(1 - r/6a) e^{-r/3a} r/a.$$

$$3d \quad R_{32} = (4/81\sqrt{30a^3}) e^{-r/3a} r^2/a^2.$$

Приведенные результаты в основных чертах хорошо соответствуют эксперименту, причём это соответствие можно улучшить, если не прибегать к упомянутым в начале раздела упрощающим предположениям.

Все результаты, кроме того, распространяются на случай одноэлектронных ионов (He^+ , Li^{++} , ...). В этом случае потенциальная энергия электрона равна

$$U(r) = -Z e^2 / r, \quad (4.111)$$

где Z – число протонов в ядре (заряд ядра в единицах $|e|$). Сравнивая (4.111) с (4.90), видим, что для распространения результатов с $Z=1$ на «водородоподобный атом» с произвольным Z достаточно в полученных для атома водорода формулах заменить e^2 на Ze^2 ; это дает нам вместо (4.92) и (4.107):

$$a = \hbar^2 / (Z m e^2), \quad \varepsilon_n = -Z^2 m e^4 / (2 \hbar^2 n^2).$$

Таким образом, с ростом Z борковский радиус a уменьшается как $1/Z$, а энергия связи электрона $\varepsilon_\infty - \varepsilon_1$ увеличивается как Z^2 .

4.7. ЗАДАЧА ДВУХ ЧАСТИЦ

Рассмотрим систему, состоящую из двух взаимодействующих друг с другом частиц с массами m_1 и m_2 . Волновая функция системы определяет вероятность обнаружения первой частицы в элементе объема dV_1 , а второй – в элементе dV_2 , и поэтому она зависит от двух радиус-векторов: $\Psi = \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$. Соответственно, гамильтониан системы имеет вид:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \Delta_2 + U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|), \quad (4.112)$$

где Δ_1, Δ_2 – операторы Лапласа, включающие дифференцирование по компонентам векторов $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$. Первые два члена в (4.112) являются операторами кинетической энергии частиц, U – энергия взаимодействия, зависящая от расстояния между частицами $r = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$.

Покажем, что задача о стационарных состояниях системы двух частиц сводится к задаче о движении одной частицы в сферически симметричном поле.

Введем вместо $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ новые координатные переменные \mathbf{r}, \mathbf{R} :

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \quad (4.113)$$

$$\mathbf{R} = \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}. \quad (4.114)$$

Вектор \mathbf{r} определяет взаимное расстояние между частицами или, лучше сказать, – между точками, в которых частицы могут быть обнаружены с некоторой вероятностью, \mathbf{R} – радиус-вектор центра инерции системы. Полагая теперь, что волновая функция системы является функцией переменных \mathbf{r} , \mathbf{R} и зависит от исходных координат лишь в силу равенств (4.113)–(4.114), рассмотрим ее производные по компонентам векторов \mathbf{r}_j , где j – номер частицы ($j=1, 2$). В декартовой системе координат оператор дифференцирования по x_j запишется в виде

$$\frac{\partial}{\partial x_j} = \frac{\partial x}{\partial x_j} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial X}{\partial x_j} \frac{\partial}{\partial X} = \pm \frac{\partial}{\partial x} + \frac{m_j}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial X},$$

где знак «плюс» у символа $\partial/\partial x$ в правой стороне соответствует номеру $j=1$, а знак «минус» – номеру $j=2$. Тогда

$$-\frac{\hbar^2}{2m_j} \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} = -\frac{\hbar^2}{2m_j} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \mp \frac{\hbar^2}{m_1 + m_2} \frac{\partial^2}{\partial x \partial X} - \frac{\hbar^2 m_j}{2(m_1 + m_2)^2} \frac{\partial^2}{\partial X^2}.$$

Аналогично записываются вклады в \hat{H} , отвечающие y -компонентам и z -компонентам векторов \mathbf{r}_j . Те слагаемые, знак которых зависит от номера j , при суммировании по j взаимно уничтожаются, и гамильтониан (4.112) принимает вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2(m_1 + m_2)} \left(\frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2}{\partial Z^2} \right) + U(r)$$

Обозначив посредством Δ и $\Delta_{\mathbf{R}}$ операторы Лапласа, дифференцирующие волновую функцию по компонентам векторов \mathbf{r} и \mathbf{R} соответственно, получим:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_{\mathbf{R}} - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(r), \quad (4.115)$$

где $M = m_1 + m_2$ – полная масса системы, $m = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ – так называемая *приведенная масса* системы.

Оператор (4.115) имеет вид суммы двух независимых операторов – гамильтониана свободной частицы с массой M и гамильтониана частицы массы m , движущейся в сферически симметричном поле $U(r)$. Представив волновую функцию системы Ψ как произведение $\Phi(\mathbf{R})\psi(\mathbf{r})$, найдем, что уравнение Шредингера для стационарных состояний системы с полной энергией \mathcal{E}

$$\hat{H} \Psi = \mathcal{E} \Psi \quad (4.116)$$

сводится к двум независимым уравнениям:

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_{\mathbf{R}} \Phi(\mathbf{R}) = E \Phi(\mathbf{R}), \quad (4.117)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(r) \right) \psi(\mathbf{r}) = \varepsilon \psi(\mathbf{r}), \quad (4.118)$$

причем

$$\mathcal{E} = E + \varepsilon.$$

Решение $\Phi(\mathbf{R})$ уравнения (4.117) описывает движение центра инерции системы частиц как свободное движение с энергией E частицы массы $M = m_1 + m_2$. Решение $\psi(\mathbf{r})$ уравнения (4.118) описывает относительное движение взаимодействующих друг с другом частиц с

энергией ε как движение частицы массы $m = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ в сферически симметричном поле $U(r)$.

Волновую функцию движения системы частиц как целого, удовлетворяющую уравнению (4.117), можно выбрать в виде плоской волны: $\Phi(\mathbf{R}) = C \exp(i\mathbf{P} \cdot \mathbf{R} / \hbar)$. При этом $E = \mathbf{P}^2 / 2M$, где \mathbf{P} – полный импульс системы частиц. В системе отсчета, называемой «системой покоя центра инерции», $\mathbf{P} = 0$, так что $E = 0$, $\Phi(\mathbf{R}) = C$ – постоянная. Таким образом, в системе покоя центра инерции задача о движении двух взаимодействующих друг с другом частиц представляет собой задачу о движении одной частицы в сферически симметричном поле (уравнение (4.118)).

Изложенный метод позволяет, например, легко учесть движение ядра в задаче о стационарных состояниях атома водорода, рассматривавшейся в разделе 4.6. Для этого достаточно всюду, в том числе в формуле для энергетического спектра (4.107), заменить массу электрона m приведенной массой атома $m = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$, где m_1 – масса электрона, m_2 – масса ядра (протона). В рассматриваемом случае $m_1 / m_2 \sim 5 \cdot 10^{-4}$, поэтому для приведенной массы применимо приближенное выражение:

$$\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \approx m_1 (1 - m_1 / m_2), \quad m_1 \ll m_2. \quad (4.119)$$

Из (4.119) видно, что приведенная масса атома водорода лишь на 0.05% меньше массы электрона.

Отметим, что эта малая поправка может играть существенную роль при анализе спектроскопических наблюдений, которые часто характеризуются высокой точностью; например, она позволяет по наблюдаемому смещению спектральных линий отличать водород от дейтерия (дейтерий – изотоп водорода с вдвое более массивным ядром).

5. СПИН

5.1. СПИНОВЫЕ СОСТОЯНИЯ ЭЛЕКТРОНА

Спином называют собственный момент импульса частицы, не связанный с ее орбитальным движением. Частица со спином s , находящаяся в состоянии с равным нулю орбитальным моментом, обладает моментом импульса $j = s$. Согласно общей теории момента, изложенной в разделах 4.1–4.3, величина s , в принципе, может быть целым или полуцелым числом. Частица со спином s должна иметь $2s + 1$ спиновых состояний с определёнными значениями проекции спина $\sigma \equiv s_z$ на одно произвольно выбранное направление (обычно это ось z):

$$\sigma = s, s - 1, \dots, -s. \quad (5.1)$$

Нерелятивистская квантовая теория не предсказывает величину спина конкретных частиц. Чтобы определить спин, например, электрона, мы должны обратиться к экспериментальным фактам.

Характер опытов по измерению спина проще всего пояснить, отталкиваясь от воображаемой классической картины, в которой частица совершает вращение с моментом \mathbf{s} вокруг собственной оси, аналогичное вращению Земли вокруг её оси. Если частица имеет электрический заряд (или состоит из электрически заряженных частиц), то ее вращение сопровождается возникновением собственного магнитного момента $\boldsymbol{\mu}$. Вектор $\boldsymbol{\mu}$ параллелен вектору собственного механического момента \mathbf{s} , поэтому энергия взаимодействия магнитного момента с внешним магнитным полем \mathbf{B} , равная

$$U_{\text{маг}} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}, \quad (5.2)$$

пропорциональна косинусу угла между векторами \mathbf{s} и \mathbf{B} . Направление вектора \mathbf{s} относительно заданного направления \mathbf{B} может быть произвольным. С точки зрения классической механики непрерывному множеству таких направлений соответствует непрерывный спектр

положительных и отрицательных значений энергии (5.2). Взаимодействие собственного момента частицы \mathbf{s} с внешним магнитным полем, описываемое выражением (5.2), должно приводить к отклонению траекторий частиц при движении в неоднородном магнитном поле.

Опыт по наблюдению подобного отклонения траекторий впервые был осуществлен Штерном и Герлахом в 1922 году (еще до построения последовательной квантовой теории). Прибор Штерна–Герлаха представляет собой магнит с заострённым полюсным наконечником, с помощью которого создаётся магнитное поле \mathbf{B} , резко меняющееся по величине от одного полюса к другому (в направлении \mathbf{B}). Мы условимся считать, что вдоль этого направления выбрана ось z . На частицу, оказавшуюся между полюсами такого магнита, действует сила $F_z = -\partial U_{\text{маг}} / \partial z$, стремящаяся сместить частицу в область с меньшим значением $U_{\text{маг}}$. Величина и знак этой силы зависят от значения проекции собственного момента s_z . Таким образом, если пучок частиц, у которых всевозможные направления \mathbf{s} равновероятны, войдёт в прибор Штерна–Герлаха перпендикулярно оси z , то, согласно классическим представлениям, на выходе из прибора должен наблюдаться широкий, размытый пучок – частицы с $s_z > 0$ отклонятся на различные углы вдоль оси z , а частицы с $s_z < 0$ – в противоположном направлении.

Проведя подобные опыты с одновалентными атомами, Штерн и Герлах обнаружили, что исходный пучок атомов не размывается указанным выше образом, а *расщепляется на два узких пучка*. Анализ ожидаемых значений момента импульса атомов в пучке в дальнейшем показал, что наблюдаемое расщепление связано с наличием собственного механического момента непосредственно у валентного электрона в атоме. Поэтому, абстрагируясь от реальной картины эксперимента, можно считать, что речь здесь идёт, в принципе, о расщеплении пучка электронов на два пучка. Другими словами, опыт показывает, что допустимы только *два* значения проекции электронного спина s_z (рис. 5.1). Приравняв число спиновых состояний частицы $2s + 1$ количеству пучков, наблюдаемых на выходе прибора Штерна–Герлаха, легко узнать, чему равен спин частицы s . Расщепление пучка электронов на два пучка означает, что *электрон характеризуется величиной спина $s = 1/2$* .

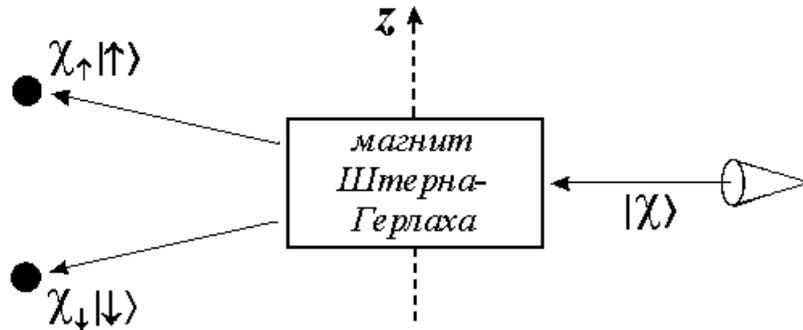


Рис. 5.1. Расщепление пучка электронов, находящихся в спиновом состоянии $|\chi\rangle$, на два пучка, соответствующих состояниям $|\uparrow\rangle$ и $|\downarrow\rangle$.

Черными кружками изображены детекторы электронов

Другие известные микрочастицы также обладают определенным значением спина ($0, 1/2, 1, \dots$). Опыт показывает, что для частиц каждого сорта спин s является постоянной характеристикой наряду с массой и электрическим зарядом, то есть, в отличие от орбитального момента импульса l , величина спина частицы s не может быть изменена.

При $s = 1/2$, согласно общей формуле (5.1), проекция спина $s_z \equiv \sigma$ принимает значения $\sigma = \pm 1/2$, равные по абсолютной величине значению s . В связи с этим говорят, что электрон может находиться в состоянии *со спином вдоль оси z* или в состоянии *со спином против оси z*. Однако это не означает, что у отдельно взятого электрона имеется вектор спина \mathbf{s} , направленный вдоль или против \mathbf{e}_z . Спин это квантово-механический момент импульса, и представление о нём не тождественно классической картине вращения тела вокруг своей оси. Спиновые состояния электрона с $\sigma = \pm 1/2$ по смыслу полностью аналогичны состояниям с определённым моментом $|j, m\rangle$, рассмотренным в главе 4. Они обозначаются как $|s, \sigma\rangle$ или, сокращённо, $|\sigma\rangle$; часто применяются также символы $\sigma = \uparrow, \downarrow$, соответствующие значениям $\sigma = 1/2, -1/2$. В спиновом состоянии $|\sigma\rangle$ электрон имеет определённое значение проекции $s_z = \sigma$, но не имеет

определённых значений s_y и s_x , и поэтому не обладает определённым вектором спина \mathbf{s} .

Прибор Штерна–Герлаха (с осью z) выполняет функцию анализатора проекции спина s_z – каждый электрон на выходе из прибора с некоторой вероятностью обнаруживается либо верхним, либо нижним детектором (рис. 5.1). Если верхний пучок электронов пропустить через ещё один анализатор Штерна–Герлаха с тем же самым направлением оси z , то все электроны с достоверностью выйдут по верхнему пути. Следовательно, они находятся в спиновом состоянии $|\uparrow\rangle$, то есть – в состоянии со спином вдоль оси z . Нижний пучок также не расщепляется очередным анализатором с прежним направлением оси z , а выходит по нижнему пути. Это соответствует состоянию $|\downarrow\rangle$, то есть – со спином против оси z . Однако, если второй анализатор повернуть относительно первого прибора, так что ось второго анализатора z' расположится под некоторым углом к оси z , то каждый пучок снова будет расщепляться на два пучка.

На практике при рассмотрении пучков частиц следует различать так называемые чистые и смешанные состояния. Дело в том, что обычно источник частиц создаёт смешанный пучок – в нем частицы с некоторой вероятностью распределены по различным состояниям. Подобная ситуация хорошо известна в оптике: обычные (тепловые) источники света создают хаотический, неполяризованный свет. Лишь пройдя через поляризатор, пучок света приобретает определённое направление поляризации. По аналогии мы можем говорить о той или иной степени *спиновой поляризации* пучка электронов. В случае смешанного, полностью неполяризованного пучка электронов вероятность обнаружения $\sigma = \uparrow$ или $\sigma = \downarrow$ равна $1/2$, причём это значение вероятности не изменяется при изменении направления оси z анализирующего прибора. Те электроны, которые пройдут по верхнему пути через прибор Штерна–Герлаха с некоторым направлением оси \tilde{z} , будут находиться в чистом спиновом состоянии $|\tilde{\uparrow}\rangle$ – со спином вдоль оси \tilde{z} ; в этом контексте прибор Штерна–Герлаха, у которого один из выходов используется в роли источника, выполняет функцию спиновой поляризатора. Если эти электроны теперь пропустить через второй прибор Штерна–Герлаха

(анализатор с осью z), то на его выходе вероятность обнаружения электрона верхним (или нижним) детектором будет определяться углом между осями z и \tilde{z} обоих приборов. Зависимость вероятности от угла мы вычислим в разделе 5.3.

Отметим здесь же, что представление о чистых и смешанных состояниях применимо в отношении всех физических величин, а не только спина. При учете взаимодействия частицы с окружающими ее объектами, обладающими своими собственными степенями свободы со статистическим поведением, состояние частицы не описывается вектором состояния или волновой функцией; оно является смешанным и характеризуется так называемой матрицей плотности [2]. Однако, если статистические аспекты взаимодействия не существенны (как при взаимодействии частицы с заданным внешним полем), или если рассматриваемый объект представляет собой замкнутую систему, то состояние квантового объекта является чистым и характеризуется вектором состояния. В предыдущих разделах мы имели дело только с чистыми состояниями. В дальнейшем обсуждении мы также будем считать, что все рассматриваемые спиновые состояния электрона – чистые состояния.

Пусть электрон находится в произвольном спиновом состоянии $|\chi\rangle$ (например, это может быть состояние $|\tilde{\uparrow}\rangle$, приготовленное прибором Штерна–Герлаха с осью \tilde{z}). Вектор спинового состояния $|\chi\rangle$ принято называть *спинором*. В соответствии с принципом суперпозиции любой спинор $|\chi\rangle$ можно разложить по базисным спинорам $|\sigma\rangle$:

$$|\chi\rangle = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \chi_{\sigma} |\sigma\rangle = \chi_{\uparrow} |\uparrow\rangle + \chi_{\downarrow} |\downarrow\rangle. \quad (5.3)$$

Компоненты спинора χ_{σ} (коэффициенты в разложении (5.3)) определяют вероятности $|\chi_{\sigma}|^2$ обнаружения электрона со спином вдоль или против оси z . Сумма этих вероятностей должна быть равна единице,

$$|\chi_{\uparrow}|^2 + |\chi_{\downarrow}|^2 = 1, \quad (5.4)$$

что эквивалентно условию нормировки спинора:

$$\langle \chi | \chi \rangle = 1. \quad (5.5)$$

В рассматриваемом нами описании спиновой степени свободы орбитальные степени свободы электрона не учитываются. Чтобы учесть движение электрона, например, в спиновом состоянии $|\uparrow\rangle$ по верхней траектории на выходе прибора Штерна–Герлаха, надо ввести в рассмотрение орбитальное состояние $|\psi_{orb}\rangle$ с волновой функцией $\psi(\mathbf{r}, t)$ в виде движущегося волнового пакета. Раздельное описание спиновых и орбитальных степеней свободы привлекательно своей простотой, но оно применимо только в нерелятивистских задачах и предполагает отсутствие неоднородного магнитного поля.

5.2. ОПЕРАТОР СПИНА

О наличии у электрона спиновой степени свободы свидетельствуют многие эксперименты. Так, изучение энергетического спектра электрона во внешнем магнитном поле \mathbf{B} в тех случаях, где орбитальный момент импульса равен нулю, ведёт к представлению о двух дискретных уровнях магнитной энергии (5.2), отвечающих спиновым состояниям электрона $\sigma = \uparrow, \downarrow$. Согласно принципам квантовой теории, энергии (5.2) следует сопоставить оператор \hat{U}_{mag} , действующий в двумерном пространстве спиновых состояний электрона. Заданное поле \mathbf{B} здесь не рассматривается как квантовый объект, так что операторной величиной в (5.2) является *спиновый магнитный момент* электрона $\hat{\boldsymbol{\mu}}_{спин}$:

$$\hat{U}_{mag} = -\hat{\boldsymbol{\mu}}_{спин} \cdot \mathbf{B}. \quad (5.6)$$

Оператор $\hat{\boldsymbol{\mu}}_{спин}$ должен быть связан с *оператором спина* $\hat{\mathbf{s}}$ некоторым

числовым коэффициентом, который не определяется нерелятивистской квантовой теорией. Для электрона такая связь с удовлетворительной точностью описывается эмпирическим соотношением

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_{\text{спин}} = -2 \mu_B \hat{\mathbf{s}}, \quad (5.7)$$

где μ_B – постоянная, называемая *магнетоном Бора*:

$$\mu_B = \frac{|e| \hbar}{2mc} = 0,927 \cdot 10^{-20} \text{ эрг / Гс}. \quad (5.8)$$

Коэффициент 2 в выражении (5.7) с точностью порядка 0,1% согласуется с экспериментальными данными о величине собственного магнитного момента электрона. Примечательно, что указанный коэффициент 2 теоретически предсказывается релятивистским волновым уравнением Дирака [8], а поправки к этому коэффициенту, позволяющие достичь точного согласия с экспериментальными данными, удается вычислить методами современной квантовой электродинамики.

Векторный оператор спина $\hat{\mathbf{s}}$ можно выразить через *операторы проекций спина* \hat{s}_k (где $k = x, y, z$):

$$\hat{\mathbf{s}} = \mathbf{e}_x \hat{s}_x + \mathbf{e}_y \hat{s}_y + \mathbf{e}_z \hat{s}_z. \quad (5.9)$$

Операторы \hat{s}_k обладают коммутационными свойствами момента импульса (4.7), то есть

$$[\hat{s}_x, \hat{s}_y] = i \hat{s}_z, \quad [\hat{s}_y, \hat{s}_z] = i \hat{s}_x, \quad [\hat{s}_z, \hat{s}_x] = i \hat{s}_y. \quad (5.10)$$

В базисе, образованном двумя спинорами $|\sigma\rangle$ с $\sigma = \uparrow, \downarrow$, операторы проекций спина \hat{s}_k имеют вид матриц (4.40). Их принято записывать в форме

$$\hat{s}_k = \frac{1}{2} \hat{\sigma}_k, \quad k = x, y, z, \quad (5.11)$$

где матрицы

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (5.12)$$

называются *матрицами Паули*. Образовав из (5.12) матричный вектор $\hat{\sigma}$ аналогично (5.9), имеем

$$\hat{s} = \frac{1}{2} \hat{\sigma}. \quad (5.13)$$

В предыдущем разделе мы подчёркивали, что одиночному электрону нельзя приписать классически понимаемый, индивидуальный вектор спина. Вместе с тем мы знаем, что квантовое состояние $|\dots\rangle$ содержит информацию о статистическом поведении ансамбля одинаково приготовленных объектов и позволяет находить усредненные по квантовому ансамблю значения физических величин. Таким образом, электрону в любом спиновом состоянии $|\chi\rangle$ можно сопоставить усреднённый вектор спина $\langle \mathbf{s} \rangle$:

$$\langle \mathbf{s} \rangle = \langle \chi | \hat{s} | \chi \rangle = \frac{1}{2} \langle \chi | \hat{\sigma} | \chi \rangle. \quad (5.14)$$

Согласно (5.14) компоненты усреднённого вектора спина вычисляются по формуле

$$\langle s_k \rangle = \frac{1}{2} \sum_{\sigma'} \sum_{\sigma} \chi_{\sigma'}^* (\hat{\sigma}_k)_{\sigma'\sigma} \chi_{\sigma}, \quad (5.15)$$

где $(\hat{\sigma}_k)_{\sigma'\sigma}$ – элементы матриц Паули, χ_{σ} – компоненты нормированного спинора $|\chi\rangle$ по отношению к базисным состояниям $|\uparrow\rangle$ и $|\downarrow\rangle$, связанным с осью z . В явном виде:

$$\langle s_x \rangle = (1/2) (\chi_\uparrow^* \chi_\downarrow + \chi_\downarrow^* \chi_\uparrow), \quad (5.16)$$

$$\langle s_y \rangle = (-i/2) (\chi_\uparrow^* \chi_\downarrow - \chi_\downarrow^* \chi_\uparrow), \quad (5.17)$$

$$\langle s_z \rangle = (1/2) (|\chi_\uparrow|^2 - |\chi_\downarrow|^2). \quad (5.18)$$

Например, для спинора $|\uparrow\rangle$, имеющего компоненты $\chi_\uparrow = 1$ и $\chi_\downarrow = 0$, формулы (5.16)–(5.18) дают естественный результат: $\langle s_x \rangle = \langle s_y \rangle = 0$, $\langle s_z \rangle = 1/2$, то есть $\langle \mathbf{s} \rangle = (1/2) \mathbf{e}_z$. Аналогичным образом для спинора $|\downarrow\rangle$ получаем $\langle \mathbf{s} \rangle = (-1/2) \mathbf{e}_z$. С помощью формул (5.16)–(5.18) и условия нормировки (5.4) легко убедиться, что в любом состоянии $|\chi\rangle$ величина усреднённого вектора спина равна $1/2$:

$$\sqrt{\langle s_x \rangle^2 + \langle s_y \rangle^2 + \langle s_z \rangle^2} = \frac{1}{2}.$$

Таким образом,

$$\langle \mathbf{s} \rangle = \frac{1}{2} \mathbf{n}, \quad (5.19)$$

где $\mathbf{n} = \langle \chi | \hat{\boldsymbol{\sigma}} | \chi \rangle$ есть единичный вектор. Можно считать, что направление этого вектора задается направлением оси \tilde{z} спинового поляризатора, приготавливающего состояние $|\chi\rangle$.

С учётом (5.13) и (5.7) оператор энергии (5.6) представляется матрицей

$$\hat{U}_{mag} = \mu_B (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{B}) = \mu_B \begin{pmatrix} B_z & B_x - iB_y \\ B_x + iB_y & -B_z \end{pmatrix}. \quad (5.20)$$

Если ось z , по отношению к которой определяются базисные состояния $|\sigma\rangle$, выбрать вдоль \mathbf{B} , то получим $\mathbf{B} = B \mathbf{e}_z$, и при этом матрица (5.20) станет диагональной:

$$\hat{U}_{маг} = \begin{pmatrix} \mu_B B & 0 \\ 0 & -\mu_B B \end{pmatrix}. \quad (5.21)$$

Диагональные элементы в (5.21) это значения энергии взаимодействия спинового магнитного момента электрона с заданным магнитным полем \mathbf{B} в состояниях со спином вдоль и против направления \mathbf{B} .

5.3. ПОВОРОТЫ СПИНОРОВ

Оператор поворота $\hat{R}(\boldsymbol{\alpha})$, действующий на спиноры, в случае вращения на произвольный угол α вокруг k -ой координатной оси должен иметь вид

$$\hat{R}(\alpha \mathbf{e}_k) = e^{-i\alpha \hat{s}_k}. \quad (5.22)$$

Вычислим матрицу оператора (5.22), пользуясь базисом $|\sigma\rangle$, связанным с осью z . Подставив в (5.22) выражение (5.11) и разложив экспоненту в ряд по степеням α , имеем

$$\hat{R}(\alpha \mathbf{e}_k) = e^{-i\alpha \hat{\sigma}_k / 2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i\alpha}{2}\right)^n \hat{\sigma}_k^n. \quad (5.23)$$

Непосредственно перемножая матрицы Паули (5.12), легко убедиться, что

$$\hat{\sigma}_k^n = \hat{1} \quad \text{при } n = 0, 2, 4, \dots;$$

$$\hat{\sigma}_k^n = \hat{\sigma}_k \quad \text{при } n = 1, 3, 5, \dots$$

Коэффициенты ряда (5.23) при четных степенях матриц Паули совпадают с членами ряда по степеням α для функции $\cos(\alpha/2)$. Коэффициенты при нечетных степенях матриц Паули аналогичным образом составляют степенной ряд для функции $-i \sin(\alpha/2)$. Следовательно, (5.23) сводится к равенству

$$\hat{R}(\alpha \mathbf{e}_k) = \cos(\alpha/2) \hat{1} - i \sin(\alpha/2) \hat{\sigma}_k. \quad (5.24)$$

Подставляя в (5.24) матрицы (5.12), находим явные выражения для искомых матриц поворотов:

$$\hat{R}(\alpha \mathbf{e}_x) = \begin{pmatrix} \cos(\alpha/2) & -i \sin(\alpha/2) \\ -i \sin(\alpha/2) & \cos(\alpha/2) \end{pmatrix}, \quad (5.25)$$

$$\hat{R}(\alpha \mathbf{e}_y) = \begin{pmatrix} \cos(\alpha/2) & -\sin(\alpha/2) \\ \sin(\alpha/2) & \cos(\alpha/2) \end{pmatrix}, \quad (5.26)$$

$$\hat{R}(\alpha \mathbf{e}_z) = \begin{pmatrix} \exp(-i\alpha/2) & 0 \\ 0 & \exp(i\alpha/2) \end{pmatrix}. \quad (5.27)$$

В качестве простого примера применения этих матриц покажем, как с помощью выражений (5.26) вычисляются вероятности W_\uparrow и W_\downarrow обнаружения электрона со спином соответственно вдоль или против оси z в случае состояния $|\chi\rangle = |\tilde{\uparrow}\rangle$ со спином вдоль оси \tilde{z} при заданном угле α между осями z и \tilde{z} .

Замечаем, что $|\tilde{\uparrow}\rangle$ можно рассматривать как состояние $|\uparrow\rangle$, подвергнутое повороту на угол α вокруг оси y :

$$|\tilde{\uparrow}\rangle = \hat{R}(\alpha \mathbf{e}_y) |\uparrow\rangle. \quad (5.28)$$

При этом интересующие нас амплитуды вероятности совпадают с элементами первого столбца матрицы $\hat{R}(\alpha \mathbf{e}_y)$:

$$\chi_\uparrow = \langle \uparrow | \tilde{\uparrow} \rangle = \langle \uparrow | \hat{R} | \uparrow \rangle,$$

$$\chi_\downarrow = \langle \downarrow | \tilde{\uparrow} \rangle = \langle \downarrow | \hat{R} | \uparrow \rangle.$$

Взяв указанные матричные элементы из (5.26), имеем

$$\chi_{\uparrow} = \cos(\alpha/2), \quad \chi_{\downarrow} = \sin(\alpha/2).$$

Таким образом,

$$W_{\uparrow} = |\chi_{\uparrow}|^2 = \cos^2(\alpha/2), \quad (5.29)$$

$$W_{\downarrow} = |\chi_{\downarrow}|^2 = \sin^2(\alpha/2). \quad (5.30)$$

Подчеркнем, что матрицы преобразования спиноров (5.25)–(5.27) содержат угол поворота, делённый на два. Следовательно, для поворотов на угол 2π матрицы преобразования спиноров равны не единичной матрице $\hat{1}$, а $-\hat{1}$. Это означает, что *при повороте на угол 2π вокруг любого направления спинор $|\chi\rangle$ переходит в спинор $-|\chi\rangle$.*

5.4. СЛОЖЕНИЕ МОМЕНТОВ

Во многих задачах, касающихся поведения электронов в атомах, молекулах, твёрдых телах нерелятивистское приближение оказывается недостаточным. При учёте релятивистских поправок в гамильтониане электрона появляется слагаемое, пропорциональное $\hat{\mathbf{I}} \cdot \hat{\mathbf{s}}$; оно называется *спин-орбитальным взаимодействием*. Здесь $\hat{\mathbf{I}}$ – оператор момента, действующий в пространстве орбитальных состояний электрона (на волновые функции), $\hat{\mathbf{s}}$ – оператор спина, действующий в пространстве спиновых состояний электрона (на спиноры). Операторы $\hat{\mathbf{I}}$ и $\hat{\mathbf{s}}$ коммутативны друг с другом, так как они относятся к разным степеням свободы – действуют в разных пространствах.

Вследствие того, что операторы проекций орбитального момента \hat{l}_k друг с другом не коммутативны и операторы проекций спина \hat{s}_k друг с другом не коммутативны, оператор

$$\hat{\mathbf{I}} \cdot \hat{\mathbf{s}} = \hat{l}_x \hat{s}_x + \hat{l}_y \hat{s}_y + \hat{l}_z \hat{s}_z \quad (5.31)$$

не коммутирует с \hat{l}_z и \hat{s}_z , хотя он коммутирует с $\hat{\mathbf{l}}^2$ и $\hat{\mathbf{s}}^2$. Поэтому состояния электрона с определёнными значениями l_z и s_z в общем случае не могут быть собственными для оператора (5.31) и не обладают определёнными значениями энергии при учёте спин-орбитального взаимодействия. Возникает задача определения собственных значений оператора $\hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{s}}$ (с ними связаны поправки к энергии электрона, называемые *тонкой структурой* энергетических уровней) и его собственных векторов с заданными l и s .

Путь к решению подсказывается формулой

$$2 \hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{s}} = (\hat{\mathbf{l}} + \hat{\mathbf{s}})^2 - \hat{\mathbf{l}}^2 - \hat{\mathbf{s}}^2. \quad (5.32)$$

Из неё видно, что искомые векторы состояний должны быть собственными для оператора $\hat{\mathbf{J}}^2$, где $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{l}} + \hat{\mathbf{s}}$ – оператор суммарного (полного) момента импульса электрона. Действительно, в состояниях $|j, m\rangle$ с определённым суммарным моментом $J = j$ и его проекцией $J_z = m$, построенных по принципу суперпозиции из состояний с определёнными значениями l, l_z, s, s_z , оператор $\hat{\mathbf{J}}^2 = (\mathbf{l} + \mathbf{s})^2$ будет иметь определённое значение $j(j+1)$, и при этом операторы $\hat{\mathbf{l}}^2$ и $\hat{\mathbf{s}}^2$ тоже будут иметь определенные значения: $l(l+1)$ и $s(s+1)$, соответственно. Следовательно:

$$\hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{s}} |j, m\rangle = \frac{1}{2} (j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)) |j, m\rangle. \quad (5.33)$$

Остается только выяснить закон сложения моментов, определяющий возможные значения j при заданных l и s .

Аналогичная ситуация возникает при вычислении поправок к атомным уровням энергии, обусловленных взаимодействием электронов с магнитным моментом ядра (такие поправки называют *сверхтонкой структурой* уровней). Например, в $1s$ -состоянии атома водорода энергия взаимодействия магнитных моментов электрона и протона описывается оператором, пропорциональным $\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2$, где $\hat{\mathbf{s}}_1$ и $\hat{\mathbf{s}}_2$ – операторы спина

электрона и протона (протон как и электрон имеет спин $1/2$). Для учёта этого взаимодействия спиновые степени свободы электрона и протона следует рассматривать как единый квантовый объект, векторы состояний которого являются собственными для оператора \hat{S}^2 , где $\hat{S} = \hat{s}_1 + \hat{s}_2$.

К вопросу о сложении моментов можно подойти и с совершенно общей точки зрения, полезной также при рассмотрении любых систем частиц.

Представим себе, что квантовая система состоит из двух подсистем, 1 и 2. Без учёта взаимодействия каждая подсистема характеризуется свойственной ей совокупностью квантовых чисел, скажем, a и b . При этом базисные состояния системы $|a, b\rangle$ можно выбрать в виде так называемых прямых произведений базисных состояний подсистем:

$$|a, b\rangle = |a\rangle_1 \otimes |b\rangle_2. \quad (5.34)$$

По смыслу символ \otimes аналогичен союзу *и*: равенство (5.34) означает, что в состоянии системы $|a, b\rangle$ подсистема 1 имеет состояние $|a\rangle$ и *при этом* подсистема 2 имеет состояние $|b\rangle$. Исходя из общих принципов квантовой механики, нетрудно убедиться, что здесь символ \otimes по своим алгебраическим свойствам должен быть аналогичен символу умножения. Действительно, запишем для двух подсистем векторы произвольно заданных состояний в виде суперпозиции базисных состояний этих подсистем:

$$|\psi\rangle_1 = \sum_a \psi_a |a\rangle_1, \quad |\chi\rangle_2 = \sum_b \chi_b |b\rangle_2.$$

Состояние системы в целом должно описываться, с одной стороны, прямым произведением указанных векторов состояния, а с другой стороны, согласно принципу суперпозиции, оно должно иметь вид линейной комбинации базисных состояний (5.34). Следовательно, допустима перегруппировка слагаемых, характеризующая операцию \otimes именно как операцию с алгебраическими свойствами умножения:

$$\left(\sum_a \psi_a |a\rangle_1\right) \otimes \left(\sum_b \chi_b |b\rangle_2\right) = \sum_a \sum_b \psi_a \chi_b |a\rangle_1 \otimes |b\rangle_2.$$

Заодно отметим, что рассмотренное выражение для состояния системы справедливо только в том случае, когда к подсистемам применимо описание в терминах индивидуальных векторов состояний. В общем случае подсистемы не находятся в чистых состояниях $|\psi\rangle_1$ и $|\chi\rangle_2$, так что вектор состояния системы $|\Phi\rangle$ описывается суперпозицией базисных векторов (5.34) с коэффициентами Φ_{ab} , не допускающими представления в виде произведения $\psi_a \chi_b$:

$$|\Phi\rangle = \sum_a \sum_b \Phi_{ab} |a\rangle_1 \otimes |b\rangle_2.$$

Иногда говорят, что в системе с $\Phi_{ab} \neq \psi_a \chi_b$ состояния подсистем являются *запутанными* (или смешанными); можно показать, что смешанные состояния подсистем описываются матрицами плотности, которые полностью определяются совокупностью амплитуд Φ_{ab} .

Если N_1 и N_2 – размерности пространств состояний подсистем, равные, соответственно, числу базисных векторов $|a\rangle$ и $|b\rangle$, то размерность пространства состояний системы (число векторов вида (5.34)) есть

$$N = N_1 N_2.$$

Пусть \hat{f}_1 и \hat{f}_2 – операторы какой-либо физической величины в подсистемах 1 и 2. Каждый из них действует только на состояния своей подсистемы и поэтому друг с другом такие операторы коммутативны:

$$\hat{f}_1 \hat{f}_2 |a, b\rangle = \hat{f}_2 \hat{f}_1 |a, b\rangle = \hat{f}_1 |a\rangle_1 \otimes \hat{f}_2 |b\rangle_2. \quad (5.35)$$

Тогда сумма этих операторов соответствует физической величине, относящейся ко всей системе, причём

$$(\hat{f}_1 + \hat{f}_2) (|a\rangle_1 \otimes |b\rangle_2) = (\hat{f}_1 |a\rangle_1) \otimes |b\rangle_2 + |a\rangle_1 \otimes \hat{f}_2 |b\rangle_2. \quad (5.36)$$

Поясним справедливость правила (5.36) на важном для нас примере операторов момента, которые, как нам известно, связаны с операторами бесконечно малых поворотов (4.3). Оператор $\hat{\mathbf{J}}$ момента системы определяется с помощью поворота системы как целого, а операторы момента $\hat{\mathbf{J}}_1$ и $\hat{\mathbf{J}}_2$, относящиеся к подсистемам, соответствуют поворотам только этих подсистем. Поскольку при повороте α системы в целом каждая её подсистема испытывает точно такой же поворот, имеем

$$(1 - i\alpha \cdot \hat{\mathbf{J}}) |a, b\rangle = (1 - i\alpha \cdot \hat{\mathbf{J}}_1) |a\rangle_1 \otimes (1 - i\alpha \cdot \hat{\mathbf{J}}_2) |b\rangle_2,$$

где правая сторона должна быть записана только с точностью до слагаемых первого порядка по произвольному бесконечно малому параметру α (как и левая сторона). Раскрыв скобки с учётом (5.34), отбросив слагаемое второго порядка малости и приняв во внимание произвольность α , получаем

$$\hat{\mathbf{J}} (|a\rangle_1 \otimes |b\rangle_2) = \hat{\mathbf{J}}_1 |a\rangle_1 \otimes |b\rangle_2 + |a\rangle_1 \otimes \hat{\mathbf{J}}_2 |b\rangle_2. \quad (5.37)$$

Отсюда видно, что оператор момента системы $\hat{\mathbf{J}}$ можно рассматривать как сумму операторов $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{J}}_1 + \hat{\mathbf{J}}_2$, действующую на векторы состояний подсистем по правилу (5.36).

Следует отметить, что аналогичное рассмотрение параллельных переносов ведет к заключению об аддитивности импульса системы: $\hat{\mathbf{P}} = \hat{\mathbf{p}}_1 + \hat{\mathbf{p}}_2$. При поворотах или параллельных переносах исходные и преобразованные состояния относятся к одному и тому же моменту времени, поэтому аддитивность величин $\hat{\mathbf{J}}$ и $\hat{\mathbf{P}}$ не нарушается при включении взаимодействия подсистем. При рассмотрении же переносов во времени состояние системы в процессе временной эволюции может сохранить вид произведения (5.34) чистых состояний подсистем лишь в отсутствие взаимодействия между подсистемами. Следовательно, только

для невзаимодействующих объектов энергия аддитивна ($\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$), а в общем случае гамильтониан системы \hat{H} содержит оператор энергии взаимодействия и не сводится к сумме гамильтонианов подсистем.

Применим теперь (5.37) к состояниям $|a\rangle = |j_1, m_1\rangle$ и $|b\rangle = |j_2, m_2\rangle$, в которых подсистемы (с номером $i = 1, 2$) имеют определённые значения момента j_i и проекций момента m_i на ось z . Величины j_1 и j_2 будем считать фиксированными. Равенство (5.37) справедливо для операторов всех проекций момента (а также для комплексных комбинаций (4.13)). В частности, из него видно, что состояния

$$|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle \quad (5.38)$$

являются собственными для оператора $\hat{J}_z = \hat{J}_{1z} + \hat{J}_{2z}$. Эти состояния характеризуются определённой проекцией полного момента $J_z \equiv m$,

$$m = m_1 + m_2, \quad (5.39)$$

где m_1 и m_2 независимо друг от друга пробегают значения

$$m_1 = j_1, j_1 - 1, \dots, -j_1,$$

$$m_2 = j_2, j_2 - 1, \dots, -j_2.$$

Для того чтобы найти значения величины суммарного момента j , допустимые в пространстве состояний с базисом (5.38), замечаем, что среди состояний (5.38) есть одно состояние (это $|j_1, j_1\rangle \otimes |j_2, j_2\rangle$), отвечающее наибольшему значению проекции полного момента, $m = j_1 + j_2$. Есть и единственное состояние ($|j_1, -j_1\rangle \otimes |j_2, -j_2\rangle$), отвечающее наименьшему m , равному $m = -(j_1 + j_2)$. Эти состояния должны принадлежать мультиплету $|j, m\rangle$ с $j = j_1 + j_2$, так что указанное значение j допустимо, причём оно является наибольшим возможным. Далее замечаем, что среди состояний (5.38) есть два состояния с

$m = j_1 + j_2 - 1$, из которых, следовательно, могут быть построены линейные комбинации $|j, m\rangle$, принадлежащие мультиплетам с $j = j_1 + j_2$ и $j = j_1 + j_2 - 1$. Подобные рассуждения в конечном счёте приводят к следующему *закону сложения моментов*:

$$j = j_1 + j_2, \quad j_1 + j_2 - 1, \quad \dots, \quad |j_1 - j_2|. \quad (5.40)$$

Этот закон легко запомнить, поскольку наибольшее значение j в списке (5.40) согласуется с наглядным представлением о сложении обычных векторов \mathbf{J}_1 и \mathbf{J}_2 при их параллельном расположении, а наименьшее – при антипараллельном. Соседние значения j в (5.40) различаются на единицу; для момента импульса в квантовой механике единичный шаг дискретности характерен.

Нетрудно подсчитать число состояний $|j, m\rangle$ при условии, что каждый мультиплет со значением j из списка (5.40) берётся один раз. Это число оказывается равным числу состояний (5.38), то есть оно равно $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$. Следовательно, указанные состояния $|j, m\rangle$ можно использовать в задачах как базис вместо (5.38). Они имеют вид линейных комбинаций исходных базисных состояний (5.38)

$$|j, m\rangle = \sum_{\substack{m_1 \\ m_2 = m - m_1}} C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{j m} |j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle \quad (5.41)$$

с коэффициентами $C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{j m}$, называемыми *коэффициентами Клебша–Гордана*. Вычисление коэффициентов Клебша–Гордана в общем виде выходит за рамки нашего изложения; таблицы с их значениями можно найти во многих книгах по квантовой механике.

Вернёмся к примерам, упомянутым в начале данного раздела. Согласно закону сложения моментов (5.40), при $j_1 = l$ (где $l \geq 1$) и $j_2 = s = 1/2$ величина полного момента электрона j в формуле (5.33) может принимать только два значения: $j = l + 1/2$ и $j = l - 1/2$.

Рассмотрим подробнее второй пример – сложение спинов $s_1 = 1/2$ и $s_2 = 1/2$. Сначала перечислим базисные состояния с не зависящими друг от друга спинами двух частиц:

$$|\downarrow\rangle_1 \otimes |\downarrow\rangle_2, \quad |\uparrow\rangle_1 \otimes |\downarrow\rangle_2, \quad |\downarrow\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle_2, \quad |\uparrow\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle_2. \quad (5.42)$$

Возможные значения суммарного спина S согласно правилу (5.40) есть 1 и 0. Первое из состояний (5.42) имеет наименьшее значение проекции суммарного спина $S_z = -1$ и, следовательно, принадлежит триплету с $S = 1$. Два раза действуя на это состояние повышающим оператором $\hat{S}_+ = \hat{s}_{1+} + \hat{s}_{2+}$ в соответствии с формулами (4.36) и (5.36) (упражнение для читателя), находим в триплетные состояния $|S = 1, S_z\rangle$ в явном виде:

$$\left\{ \begin{array}{l} |1, 1\rangle = |\uparrow\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle_2 \\ |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |\uparrow\rangle_1 \otimes |\downarrow\rangle_2 + \frac{1}{\sqrt{2}} |\downarrow\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle_2 \\ |1, -1\rangle = |\downarrow\rangle_1 \otimes |\downarrow\rangle_2 \end{array} \right. \quad (5.43)$$

Синглетное состояние ($S = 0$) с точностью до фазового множителя определяется из условия ортогональности к состояниям триплета (5.43) и условия нормировки; оно имеет вид

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |\uparrow\rangle_1 \otimes |\downarrow\rangle_2 - \frac{1}{\sqrt{2}} |\downarrow\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle_2. \quad (5.44)$$

Как видно из сравнения (5.43)–(5.44) с общей формулой вида (5.41)

$$|S, S_z\rangle = \sum_{\substack{\sigma_1 = \pm 1/2 \\ \sigma_2 = S_z - \sigma_1}} C_{s_1 \sigma_1 s_2 \sigma_2}^{S S_z} |s_1, \sigma_1\rangle \otimes |s_2, \sigma_2\rangle,$$

в данном примере значениями коэффициентов Клебша–Гордана служат числа 0, 1, и $\pm 1/\sqrt{2}$. Эти коэффициенты составляют унитарную матрицу перехода от четырёхмерного ортонормированного базиса (5.42) к четырёхмерному ортонормированному базису (5.43)–(5.44).

Рассмотрим, как определяются компоненты произвольного вектора спиновых состояний $|\varphi\rangle$ системы двух частиц, в которой каждая из частиц обладает спином $1/2$. Пользуясь обозначением

$$|\sigma_1, \sigma_2\rangle = |\sigma_1\rangle_1 \otimes |\sigma_2\rangle_2,$$

запишем разложение $|\varphi\rangle$ по базису (5.42) в виде

$$|\varphi\rangle = \sum_{\sigma_1 = \uparrow, \downarrow} \sum_{\sigma_2 = \uparrow, \downarrow} \varphi_{\sigma_1 \sigma_2} |\sigma_1, \sigma_2\rangle.$$

Компонента $\varphi_{\sigma_1 \sigma_2}$ двухчастичного спинора $|\varphi\rangle$ даётся скалярным произведением

$$\varphi_{\sigma_1 \sigma_2} = \langle \sigma_1, \sigma_2 | \varphi \rangle,$$

она имеет смысл амплитуды вероятности обнаружения z -проекции спина частиц 1 и 2 соответственно равными σ_1 и σ_2 . Если каждая из частиц находится в чистом спиновом состоянии, скажем, $|\chi\rangle$ и $|\eta\rangle$, то

$$|\varphi\rangle = |\chi\rangle_1 \otimes |\eta\rangle_2,$$

и тогда

$$\varphi_{\sigma_1 \sigma_2} = \langle \sigma_1 | \chi \rangle \langle \sigma_2 | \eta \rangle = \chi_{\sigma_1} \eta_{\sigma_2}.$$

Введенное здесь определение скалярного произведения состояния вида $|\chi\rangle \otimes |\eta\rangle$ на $|\sigma_1\rangle \otimes |\sigma_2\rangle$ соответствует обычной теореме умножения вероятностей независимых событий: вероятность $|\langle \varphi_{\sigma_1 \sigma_2} | \varphi \rangle|^2$ обнаружения z -проекции спина частиц 1 и 2 соответственно равными σ_1 и σ_2 представляется произведением вероятностей $|\chi_{\sigma_1}|^2$ и $|\eta_{\sigma_2}|^2$.

Двухчастичный спинор $|\varphi\rangle$ можно разложить и по состояниям с определённым суммарным спином (5.43)–(5.44):

$$|\varphi\rangle = \sum_{S=0,1} \sum_{S_z=-S}^S A_{S,S_z} |S,S_z\rangle.$$

Компоненты $A_{S,S_z} = \langle S,S_z | \varphi \rangle$ также имеют смысл соответствующих амплитуд вероятности. Так, с учётом (5.44) амплитуда вероятности обнаружить $S=0$ (состояние, синглетное по спину) у пары частиц в спиновом состоянии $|\varphi\rangle = |\chi\rangle_1 \otimes |\eta\rangle_2$ есть

$$A_{00} = \langle 0,0 | \varphi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \uparrow | \chi \rangle \langle \downarrow | \eta \rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \downarrow | \chi \rangle \langle \uparrow | \eta \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_{\uparrow} \eta_{\downarrow} - \chi_{\downarrow} \eta_{\uparrow}).$$

Отметим, что величина $A_{00} = \langle 0,0 | \varphi \rangle$ не изменяется при действии оператора произвольного поворота \hat{R} одновременно на $|0,0\rangle$ и $|\varphi\rangle$, поскольку \hat{R} – унитарный оператор:

$$A'_{00} = \langle \hat{R} 0,0 | \hat{R} \varphi \rangle = \langle 0,0 | \hat{R}^+ \hat{R} \varphi \rangle = \langle 0,0 | \hat{R}^{-1} \hat{R} \varphi \rangle = \langle 0,0 | \varphi \rangle = A_{00}.$$

Синглет $|0,0\rangle$ сам по себе инвариантен к поворотам, поэтому здесь можно учесть только поворот двухчастичного спинора $|\varphi\rangle$,

$$|\varphi\rangle = |\chi\rangle_1 \otimes |\eta\rangle_2 \rightarrow \hat{R}|\varphi\rangle = \hat{R}|\chi\rangle_1 \otimes \hat{R}|\eta\rangle_2,$$

эквивалентный повороту одночастичных спиноров $|\chi\rangle$ и $|\eta\rangle$. Таким образом, инвариантность величины A_{00} показывает нам, что при одновременном повороте всех одночастичных спиноров выполняется равенство

$$\chi'_\uparrow\eta'_\downarrow - \chi'_\downarrow\eta'_\uparrow = \chi_\uparrow\eta_\downarrow - \chi_\downarrow\eta_\uparrow,$$

где штрихом отмечены компоненты спиноров $\hat{R}|\chi\rangle$ и $\hat{R}|\eta\rangle$.

Нетрудно непосредственно проверить, что выражение $\chi_\uparrow\eta_\downarrow - \chi_\downarrow\eta_\uparrow$ инвариантно не только к поворотам, но и ко всем тем линейным преобразованиям \hat{L} одночастичных спиноров, для которых $\det \hat{L} = 1$. Матрицы поворотов \hat{R} , как видно из (5.25) – (5.27), обладают свойством $\det \hat{R} = 1$; они составляют подгруппу в группе всех матриц \hat{L} размером 2×2 с $\det \hat{L} = 1$. Оказывается, остальные преобразования из этой группы, не сводящиеся к поворотам, могут быть интерпретированы как преобразования Лоренца для спиноров. Эти факты служат основой общей теории спиноров (см., например, [2]), в которой двухкомпонентные спиноры определяются как математические объекты, преобразующиеся произвольными матрицами \hat{L} с $\det \hat{L} = 1$. В нашем изложении нерелятивистской квантовой механики столь общий подход к спинорам остается невостребованным.

5.5. БОЗОНЫ И ФЕРМИОНЫ

Пусть $|a, b\rangle$ – вектор состояния двух частиц; квантовые числа a относятся к частице 1, квантовые числа b – к частице 2. Тогда $|b, a\rangle$ – состояние, получающееся перестановкой обеих частиц. В случае частиц разного сорта состояния $|a, b\rangle$ и $|b, a\rangle$ физически различны. Опыт показывает, что для частиц одного сорта справедлив *принцип неразличимости*, согласно которому такие частицы полностью тождественны. В случае тождественных частиц состояния $|a, b\rangle$ и $|b, a\rangle$ физически эквивалентны.

Указанная эквивалентность математически выражается в том, что вектор состояния при перестановке тождественных частиц может измениться только на некоторый фазовый множитель λ :

$$|b, a\rangle = \lambda |a, b\rangle. \quad (5.45)$$

Разумно предположить, что λ не зависит от начального состояния и поэтому при очередной перестановке частиц ещё раз появляется такой же множитель:

$$|a, b\rangle = \lambda |b, a\rangle = \lambda^2 |a, b\rangle.$$

Следовательно, $\lambda^2 = 1$, то есть $\lambda = 1$ или $\lambda = -1$. Мы приходим к выводу (согласуемому с опытом), что тождественные частицы подразделяются на два рода. О частицах, обладающих антисимметричными состояниями

$$|b, a\rangle = -|a, b\rangle \quad (5.46)$$

говорят как о частицах, подчиняющихся *статистике Ферми–Дирака*; такие частицы называют *фермионами*. О частицах, обладающих симметричными состояниями

$$|b, a\rangle = |a, b\rangle \quad (5.47)$$

говорят как о частицах, подчиняющихся *статистике Бозе–Эйнштейна*, и называют их *бозонами*. Эти свойства симметрии распространяются на произвольное число тождественных частиц; в силу принципа неразличимости все пары частиц в многочастичной системе имеют одинаковые свойства, так что

$$|a, b, c, \dots\rangle = \mp |b, a, c, \dots\rangle,$$

где знак минус соответствует фермионам, плюс – бозонам.

Существенное различие статистических свойств бозонов и фермионов проявляется уже в том, что бозоны могут находиться в состоянии $|a, a\rangle \neq 0$ с одинаковыми квантовыми числами частиц, тогда как в случае фермионов из (5.46) следует равенство $|a, a\rangle = -|a, a\rangle$, то есть $|a, a\rangle = 0$. Таким образом, в любой системе тождественных фермионов не могут одновременно находиться в одинаковых состояниях две (или более) частицы. Это утверждение называется *принципом Паули*.

Релятивистская квантовая теория показывает, что тип статистики частиц определяется их спином: *частицы с полуцелым спином – фермионы, а с целым – бозоны*. Не обращаясь к релятивистской теории можно следующим образом пояснить происхождение связи спина со статистикой [14].

При перестановке двух частиц (без поворота пары как целого) одна из частиц неизбежно поворачивается относительно другой на угол 2π (рис. 5.2).

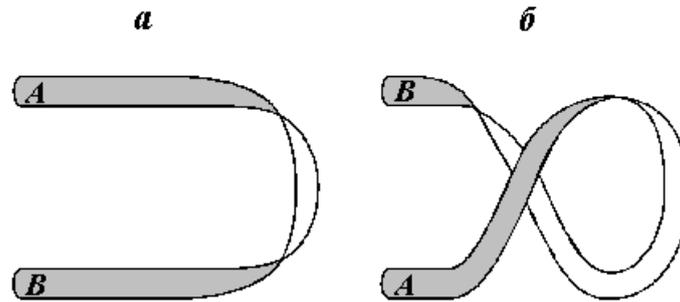


Рис. 5.2. Иллюстрация вращения объектов A и B друг относительно друга на угол 360° при их перестановке. После перестановки объектов, закрепленных на концах ленты (a), лента оказывается перекрученной (b). Видно, что она вернется в незакрученное состояние, если один из её концов повернуть на угол 360°

Рассмотрим частицы со спином $1/2$ и предположим, что состояние пары частиц до перестановки без учёта принципа неразличимости имеет вид

$$|a\rangle_1 \otimes |b\rangle_2 \quad (5.48)$$

Каждый из одночастичных векторов состояния $|a\rangle$ и $|b\rangle$ здесь имеет структуру прямого произведения $|\psi_{orb.}\rangle \otimes |\chi_{спин}\rangle$, то есть содержит орбитальную и спинорную части. Можно считать, что при перестановке частиц, когда автоматически возникает показанный на рис. 5.2 поворот на угол 2π , поворачивается лишь одна из частиц (относительно другой, неподвижной частицы). Поворот на угол 2π , как выяснилось в разделе 5.3, приводит к умножению спинора на -1 . Следовательно, при перестановке частиц со спином $s = 1/2$ состояние (5.48) переходит в $(-1)|b\rangle_1 \otimes |a\rangle_2$. В случае же частиц без спина ($s = 0$) минус не появится. Таким образом, состояние пары частиц после перестановки можно в общем случае записать в виде

$$\mp |b\rangle_1 \otimes |a\rangle_2, \quad (5.49)$$

где знак минус соответствует спину $s = 1/2$, плюс – спину $s = 0$.

Учтём теперь, что для тождественных частиц их перестановка физически не наблюдаема, и поэтому смысл должна иметь лишь суперпозиция состояний (5.48) и (5.49)

$$|a,b\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|a\rangle_1 \otimes |b\rangle_2 \mp |b\rangle_1 \otimes |a\rangle_2 \right). \quad (5.50)$$

Множитель $1/\sqrt{2}$ здесь введён для нормировки (предполагается, что $a \neq b$). Мы видим, что состояние (5.50), как и должно быть, удовлетворяет принципу неразличимости – обладает свойством либо симметрии, либо антисимметрии:

$$|b,a\rangle = \mp |a,b\rangle. \quad (5.51)$$

При этом антисимметрия (минус в (5.51)) имеет место для частиц со спином $1/2$, а симметрия (плюс) – для частиц со спином 0 .

Можно показать, что по отношению к поворотам на угол 2π вектор состояния квантового объекта с произвольным спином s ведёт себя как спиновое состояние системы $2s$ частиц со спином $1/2$, то есть приобретает множитель $(-1)^{2s}$. Поэтому формулы (5.50) и (5.51)

справедливы для тождественных частиц с произвольным спином, причём минус соответствует полуцелому спину, плюс – целому.

6. ВОЗМУЩЕНИЕ И ПЕРЕХОДЫ

6.1. ВОЗМУЩЕНИЕ, ЗАВИСЯЩЕЕ ОТ ВРЕМЕНИ

Во многих случаях точное решение уравнения Шредингера получить не удаётся, но после пренебрежения в гамильтониане некоторыми малыми величинами задача упрощается, и её точное решение становится возможным. В таких случаях сначала решают упрощённую задачу, а затем вычисляют поправки, обусловленные первоначально не учтёнными членами. Эти члены называются *возмущением*, а общий метод получения связанных с ними поправок – *теорией возмущений*.

До сих пор мы рассматривали квантовые системы, характеризующиеся не зависящим от времени гамильтонианом. У таких систем существуют стационарные состояния и энергетический спектр. При включении переменного внешнего поля $\hat{V}(t)$, которое мы будем рассматривать как возмущение, энергия уже не сохраняется, и понятие стационарных состояний, строго говоря, утрачивает смысл. Но до включения возмущения $\hat{V}(t)$ и после его выключения система может находиться в стационарных состояниях $|n\rangle$, соответствующих невозмущённому гамильтониану \hat{H}_0 . Начальное стационарное состояние $|n'\rangle$ под действием переменного поля изменяется, превращаясь в суперпозицию многих стационарных состояний $|n\rangle$. Возникновение такой суперпозиции означает, что система, испытавшая действие возмущения, может с определенной вероятностью обнаруживаться в состояниях n , отличных от начального состояния n' . Задача состоит в вычислении *вероятности перехода* $n' \rightarrow n$.

Будем считать известными энергетический спектр ε_n и полный ортонормированный набор стационарных состояний $|n\rangle$ невозмущённого

гамильтониана \hat{H}_0 (не зависящего от времени). При этом согласно (2.145)–(2.147) справедливы равенства

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_n(t)\rangle = \hat{H}_0 |\psi_n(t)\rangle = \varepsilon_n |\psi_n(t)\rangle, \quad (6.1)$$

где

$$|\psi_n(t)\rangle = e^{-i\omega_n t} |n\rangle, \quad (6.2)$$

$$\omega_n = \varepsilon_n / \hbar. \quad (6.3)$$

Пусть к начальному моменту времени t' рассматриваемая квантовая система пребывает в невозмущённом стационарном состоянии n' . Это означает, что вектором состояния системы $|\psi(t)\rangle$ при $t = t'$ является

$$|\psi(t')\rangle = |\psi_{n'}(t')\rangle. \quad (6.4)$$

При $t > t'$ включается возмущающий потенциал $\hat{V}(t)$, и гамильтониан системы приобретает вид

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t). \quad (6.5)$$

Вектор состояния системы $|\psi(t)\rangle$ при $t > t'$ следует искать как решение уравнения Шредингера (2.145) с гамильтонианом (6.5), то есть

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = (\hat{H}_0 + \hat{V}(t)) |\psi(t)\rangle. \quad (6.6)$$

Ищем решение $|\psi(t)\rangle$ в виде разложения по невозмущённым стационарным состояниям (6.2) с зависящими от времени коэффициентами $C_n(t)$:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n C_n(t) |\psi_n(t)\rangle. \quad (6.7)$$

Дифференцируя (6.7) по времени t и умножая на $i\hbar$, имеем

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \sum_n C_n(t) i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_n(t)\rangle + \sum_n i\hbar \frac{dC_n}{dt} |\psi_n(t)\rangle. \quad (6.8)$$

Первая сумма в правой стороне равенства (6.8) в силу (6.1) и (6.7) совпадает с $\hat{H}_0|\psi(t)\rangle$. Следовательно, вторая сумма, как видно из сравнения (6.8) с (6.6), равна выражению

$$\hat{V}(t) |\psi(t)\rangle = \sum_n C_n(t) \hat{V}(t) |\psi_n(t)\rangle. \quad (6.9)$$

Обозначив индекс n в суммах как n_1 , имеем, таким образом, уравнение

$$\sum_{n_1} i\hbar \frac{dC_{n_1}(t)}{dt} |\psi_{n_1}(t)\rangle = \sum_{n_1} \hat{V}(t) |\psi_{n_1}(t)\rangle C_{n_1}(t). \quad (6.10)$$

Умножим скалярно обе стороны уравнения (6.10) на $|\psi_n(t)\rangle$ и учтём, что

$$\langle \psi_n(t) | \psi_{n_1}(t) \rangle = e^{i(\omega_n - \omega_{n_1})t} \langle n | n_1 \rangle = \delta_{nn_1}.$$

Матричные элементы возмущающего потенциала, определённые с помощью зависящих от времени стационарных состояний невозмущённого гамильтониана, мы обозначим как $\tilde{V}_{nn_1}(t)$:

$$\langle \psi_n(t) | \hat{V}(t) | \psi_{n_1}(t) \rangle = e^{i(\omega_n - \omega_{n_1})t} \langle n | \hat{V}(t) | n_1 \rangle = \tilde{V}_{nn_1}(t). \quad (6.11)$$

Поскольку $|\psi_n(t)\rangle = e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} |n\rangle$, то матричные элементы (6.11) можно записать также в виде

$$\tilde{V}_{nn_1}(t) = \langle n | e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{V}(t) e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} | n_1 \rangle, \quad (6.12)$$

напоминающем представление Гейзенберга (2.159). Однако последнее определяется полным гамильтонианом замкнутой системы \hat{H} , тогда как экспоненты в (6.12) содержат только невозмущённую часть \hat{H}_0 гамильтониана. Величины (6.12) называются матричными элементами оператора $\hat{V}(t)$ в представлении взаимодействия (или в представлении Дирака). Возвращаясь к (6.10), имеем систему уравнений для функций $C_n(t)$:

$$\frac{dC_n(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \sum_{n_1} \tilde{V}_{nn_1}(t) C_{n_1}(t). \quad (6.13)$$

Предположим, что оператор $\hat{V}(t)$ пропорционален некоторому малому параметру. Будем искать $C_n(t)$ в виде разложения в ряд по степеням этого малого параметра. Такой ряд удобно записать в форме

$$C_n(t) = C_n^{(0)} + C_n^{(1)}(t) + C_n^{(2)}(t) + \dots, \quad (6.14)$$

где $C_n^{(0)}$ – решение системы (6.13) при $\hat{V} = 0$, называемое нулевым приближением, а остальные члены ряда являются поправками к нему: $C_n^{(1)}$ – величина того же порядка малости, что и возмущение \hat{V} , $C_n^{(2)}$ – величина второго порядка малости, и так далее.

В отсутствие возмущения правая сторона (6.13) равна нулю и, следовательно, $C_n^{(0)}$ – постоянные. Они определяются равенством (6.7) совместно с начальным условием (6.4), означающим, что

$$C_n(t') = \delta_{nn'}. \quad (6.15)$$

В нулевом приближении (при $\hat{V} = 0$) находим:

$$C_n^{(0)} = \delta_{nn'}. \quad (6.16)$$

Из (6.14) – (6.16) видно, что все поправки $C_n^{(k)}(t)$ при $t = t'$ должны обратиться в нуль.

Рассмотрим равенство, получающееся в результате подстановки (6.14) в (6.13) с учётом (6.16):

$$\frac{dC_n^{(1)}}{dt} + \frac{dC_n^{(2)}}{dt} + \dots = -\frac{i}{\hbar} \tilde{V}_{nn'} - \frac{i}{\hbar} \sum_{n_1} \tilde{V}_{nn_1} C_{n_1}^{(1)} + \dots \quad (6.17)$$

Малый параметр в операторе возмущения играет роль произвольной переменной, различные степени которой линейно независимы. Поэтому можно приравнять слагаемые одного и того же порядка малости в левой и правой стороне (6.17). Для членов первого порядка получим

$$\frac{dC_n^{(1)}(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \tilde{V}_{nn'}(t). \quad (6.18)$$

Интегрируя (6.18) по времени при начальном условии $C_n^{(1)}(t') = 0$, находим искомое выражение для поправки первого порядка $C_n^{(1)}(t)$:

$$C_n^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^t dt_1 \tilde{V}_{nn'}(t_1). \quad (6.19)$$

Аналогично для членов второго порядка в (6.17) имеем

$$\frac{dC_n^{(2)}(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \sum_{n_1} \tilde{V}_{nn_1}(t) C_{n_1}^{(1)}(t). \quad (6.20)$$

Подставив в (6.20) уже найденное выражение для $C_n^{(1)}(t)$ и интегрируя по t при условии $C_n^{(2)}(t') = 0$, получаем поправку второго порядка:

$$C_n^{(2)}(t) = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_{n_1} \int_{t'}^t dt_2 \int_{t'}^{t_2} dt_1 \tilde{V}_{nn_1}(t_2) \tilde{V}_{n_1n'}(t_1). \quad (6.21)$$

Продолжая этот процесс последовательного определения членов ряда (6.14), приходим к общей формуле для поправки k -го порядка:

$$C_n^{(k)}(t) = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^k \sum_{n_{k-1}} \dots \sum_{n_1} \int_{t'}^t dt_k \int_{t'}^{t_k} dt_{k-1} \dots \int_{t'}^{t_2} dt_1 \tilde{V}_{nn_{k-1}}(t_k) \dots \tilde{V}_{n_1n'}(t_1). \quad (6.22)$$

Указанный процесс позволяет, в принципе, найти функции $C_n(t)$ и тем самым определить состояние (6.7), возникающее под действием возмущения. При этом амплитуда вероятности обнаружить квантовую систему в состоянии n в момент времени t есть

$$\langle \psi_n(t) | \psi(t) \rangle = C_n(t). \quad (6.23)$$

Вероятность $W_{nn'}$ перехода $n' \rightarrow n$ за время $t - t'$ равна квадрату модуля амплитуды (6.23):

$$W_{nn'} = |C_n(t)|^2. \quad (6.24)$$

Часто интерес представляют переходы в состояния $n \neq n'$ под действием достаточно малого возмущения. Для приближённого вычисления вероятностей таких переходов во многих случаях достаточно ограничиться поправкой первого порядка (6.19):

$$W_{nn'} = \left| C_n^{(1)}(t) \right|^2, \quad n \neq n'. \quad (6.25)$$

Критерием применимости этого приближения является условие $|C_n^{(1)}(t)|^2 \ll 1$.

6.2. ПЕРЕХОДЫ В СОСТОЯНИЯ НЕПРЕРЫВНОГО СПЕКТРА ПРИ ПЕРИОДИЧЕСКОМ ВОЗМУЩЕНИИ

Рассмотрим переходы, возникающие под влиянием возмущения, зависящего от времени по закону гармонического колебания $\cos \omega t$ с частотой $\omega > 0$. Поскольку $\cos \omega t = (1/2)(e^{-i\omega t} + e^{i\omega t})$, эрмитов оператор энергии возмущения $\hat{V}(t)$ можно записать в виде

$$\hat{V}(t) = \hat{M} e^{-i\omega t} + \hat{M}^+ e^{i\omega t}, \quad (6.26)$$

где оператор возмущения \hat{M} не зависит от времени.

Предположим, что в начальный момент $t' = 0$ квантовая система находилась в невозмущённом стационарном состоянии $|n'\rangle$. Согласно (6.19) в первом приближении амплитуда вероятности перехода в состояние $n \neq n'$ к моменту времени t определяется выражением

$$C_n^{(1)}(t) = -\frac{iM_{nn'}}{\hbar} \int_0^t dt_1 e^{i(\omega_n - \omega_{n'} - \omega)t_1} - \frac{iM_{n'n}^*}{\hbar} \int_0^t dt_1 e^{i(\omega_n - \omega_{n'} + \omega)t_1}, \quad (6.27)$$

где

$$M_{nn'} = \langle n | \hat{M} | n' \rangle. \quad (6.28)$$

В общем случае подынтегральные функции в (6.27) осциллируют, и поправка (6.27) может оказаться пренебрежимо малой. Интерес представляют случаи, когда один из показателей экспонент в (6.27) близок к нулю – в этих случаях один из интегралов в (6.27) возрастает с ростом t и поэтому доминирует над другим интегралом. Например, пусть энергия рассматриваемых конечных состояний удовлетворяет условию

$$\omega_n \approx \omega_{n'} + \omega. \quad (6.29)$$

Тогда в (6.27) достаточно учесть только первое слагаемое, так как с ростом t оно оказывается доминирующим; в таком приближении имеем

$$C_n^{(1)}(t) = -\frac{i M_{nn'}}{\hbar} \frac{e^{i(\omega_n - \omega_{n'} - \omega)t} - 1}{i(\omega_n - \omega_{n'} - \omega)}, \quad (6.30)$$

$$\left| C_n^{(1)}(t) \right|^2 = \left| M_{nn'} \right|^2 \frac{4 \sin^2((\omega_n - \omega_{n'} - \omega)t/2)}{\hbar^2 (\omega_n - \omega_{n'} - \omega)^2}. \quad (6.31)$$

Выражение (6.31) можно записать в виде

$$\left| C_n^{(1)}(t) \right|^2 = t \frac{2\pi}{\hbar} \left| M_{nn'} \right|^2 F(t, \varepsilon_n - \varepsilon_{n'} - \hbar\omega), \quad (6.32)$$

где мы ввели в рассмотрение функцию

$$F(t, \varepsilon) = \frac{1}{\pi} \frac{\sin^2(\varepsilon t/2\hbar)}{\varepsilon^2 t/2\hbar}. \quad (6.33)$$

Эта функция при всех $t > 0$ обладает свойством

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon F(t, \varepsilon) = 1. \quad (6.34)$$

График функции (6.33) изображён на рис. 6.1. С учётом (6.34) видно, что пределом этой функции при $t \rightarrow \infty$ является дельта-функция Дирака:

$$F(t, \varepsilon) \rightarrow \delta(\varepsilon) \quad \text{при } t \rightarrow \infty. \quad (6.35)$$

Согласно (6.25) величину (6.32) можно интерпретировать как вероятность перехода $n' \rightarrow n$ за время t , если она мала по сравнению с единицей. В общем случае этот критерий с ростом t перестаёт выполняться, и тогда необходимо более последовательное рассмотрение. Ограничимся случаями, в которых за счёт малости матричных элементов $M_{nn'}$ указанный критерий применимости первого приближения выполняется и при достаточно больших значениях t . В этих случаях можно заменить F в (6.32) дельта-функцией (6.35). Если при этом мы

разделим выражение (6.32) на t , то придем к следующей формуле для скорости перехода $W_{nn'}/t$ из заданного начального состояния n' в заданное конечное состояние $n \neq n'$:

$$\frac{W_{nn'}}{t} = \frac{2\pi}{\hbar} |M_{nn'}|^2 \delta(\varepsilon_n - \varepsilon_{n'} - \hbar\omega). \quad (6.36)$$

Это есть вероятность перехода за единицу времени.

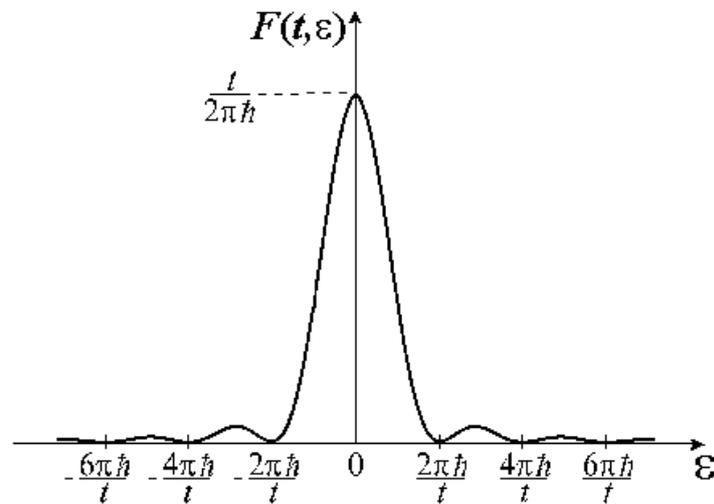


Рис. 6.1. График функции $F(t, \varepsilon)$. Высота пика обратно пропорциональна его ширине

Формула (6.36) приобретает количественный смысл в тех задачах, где можно провести интегрирование (по энергии или по частоте), устраняющее δ -функцию. Пусть, например, рассматривается переход между состояниями n' и n дискретного энергетического спектра под действием возмущения, которое характеризуется не одной строго заданной частотой ω , а непрерывным распределением частот. Можно считать, что в этом случае величина $|M_{nn'}|^2$ пропорциональна «интенсивности» возмущения $J(\omega)d\omega$, относящейся к значениям ω в интервале частот $d\omega$, причем она мала в меру малости $J(\omega)d\omega$. Тогда интерес будет представлять скорость перехода (6.36), проинтегрированная по спектру

частот ω . Интегрирование по ω устраняет дельта-функцию, и при этом функция $J(\omega)$, характеризующая спектральную плотность возмущения, заменяется значением $J(\omega_n - \omega_{n'})$. Рассмотренный пример показывает, что наличием δ -функции в (6.36) выражается закон сохранения энергии в замкнутой системе: переходы квантового объекта из начального состояния с меньшей энергией $\varepsilon_{n'}$ в конечное состояние с большей энергией ε_n вызываются теми спектральными составляющими возмущения, которым в соответствии с законом сохранения энергии отвечает квант энергии $\hbar\omega = \varepsilon_n - \varepsilon_{n'}$, отбираемый нашим объектом от источника возмущения.

Другой пример – переходы частицы из состояния $|n'\rangle$ с дискретным уровнем энергии $\varepsilon_{n'}$ в состояния непрерывного спектра ε под действием периодического возмущения с заданной частотой ω (рис. 6.2).

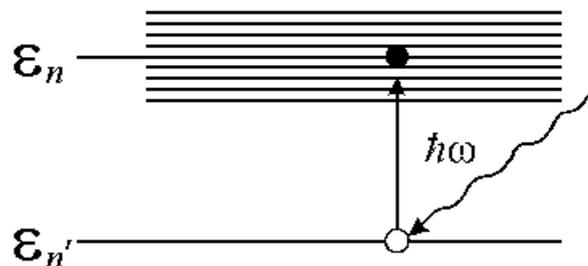


Рис. 6.2. Переход частицы из связанного состояния в состояние инфинитного движения при поглощении кванта энергии $\hbar\omega$

Можно считать, что непрерывный энергетический спектр ε образуется из множества густо расположенных дискретных уровней ε_n при устремлении объёма нормировочного куба V к бесконечности. Для таких состояний $|n\rangle$ нормировочные множители волновых функций частицы малы в меру малости $1/\sqrt{V}$ и поэтому величина $|M_{nn'}|^2$ при $V \rightarrow \infty$ убывает как $1/V$. Поскольку имеется очень много конечных состояний с близкими значениями ε_n , то интерес представляет скорость перехода (6.36), просуммированная по всем таким состояниям n :

$$w = \sum_n \frac{2\pi}{\hbar} |M_{nn'}|^2 \delta(\varepsilon_n - \varepsilon_{нач}). \quad (6.37)$$

Здесь $\varepsilon_{нач}$ – энергия начального состояния замкнутой системы, в нее входит энергия частицы и квант энергии $\hbar\omega$ возмущающего поля:

$$\varepsilon_{нач} = \varepsilon_{n'} + \hbar\omega. \quad (6.38)$$

Суммирование в (6.37) сводится к интегрированию по ε_n :

$$\sum_n \dots = \int d\varepsilon_n \rho(\varepsilon_n) \dots, \quad (6.39)$$

где $\rho(\varepsilon_n)d\varepsilon_n$ – количество состояний $|n\rangle$ в интервале $d\varepsilon_n$ со значениями энергии вблизи ε_n . Функция $\rho(\varepsilon)$ называется *плотностью состояний*. Применяя правило (6.39) в (6.37) и учитывая, что δ -функция снимает интегрирование по ε_n , получаем окончательный результат для скорости переходов (вероятность переходов за единицу времени) в состояния непрерывного спектра из заданного состояния $|n'\rangle$:

$$w = \frac{2\pi}{\hbar} |M_{nn'}|^2 \rho(\varepsilon_{нач}). \quad (6.40)$$

Здесь $\rho(\varepsilon_{нач})$ – плотность конечных состояний с энергией, равной полной энергии начального состояния (6.38); условие $\varepsilon_n = \varepsilon_{нач}$ должно учитываться и при вычислении квадрата модуля $|M_{nn'}|^2$ матричного элемента оператора возмущения, ответственного за переходы $n' \rightarrow n$. Формула (6.40) называется *золотым правилом Ферми* (или *золотым правилом квантовой механики*).

6.3. СООТНОШЕНИЕ НЕОПРЕДЕЛЁННОСТИ ДЛЯ ЭНЕРГИИ

В выражении для вероятности перехода (6.32) время t имеет смысл интервала времени δt между актом приготовления начального состояния квантовой системы и актом детектирования конечного состояния. При $\delta t \rightarrow \infty$ из (6.32) следует формула (6.36) с δ -функцией, показывающая, что переходы возможны только в те конечные состояния, энергия $\varepsilon_{кон}$ которых равна полной энергии начального состояния: $\varepsilon_{кон} = \varepsilon_{нач}$.

Однако при конечных значениях δt вероятность перехода (6.32) определяется «размазанной» дельта-функцией F (рис. 6.1) и поэтому заметно отличается от нуля в интервале $\delta\varepsilon$ значений $\varepsilon_{кон} - \varepsilon_{нач}$ порядка $\hbar/\delta t$. Следовательно, переходы возможны во все состояния, для которых равенство $\varepsilon_{кон} \approx \varepsilon_{нач}$ выполняется с точностью $\delta\varepsilon \sim \hbar/\delta t$.

Это означает, что в квантовой механике энергия ε любого состояния имеет неопределённость $\delta\varepsilon$, обусловленную конечностью интервала времени δt , в течение которого существует данное состояние. Взаимосвязь между $\delta\varepsilon$ и δt выражается *соотношением неопределённости для энергии*:

$$\delta\varepsilon \delta t \sim \hbar. \quad (6.41)$$

На практике длительность существования определённого состояния квантовой системы часто ограничивается наличием неизбежного взаимодействия с другими системами. Например, понятие дискретных энергетических уровней электрона точно определено только в рамках представления о постоянном внешнем поле. При учёте же взаимодействия с квантованным электромагнитным полем (с фотонами) любое возбуждённое состояние электрона в дискретном энергетическом спектре не является строго стационарным, а характеризуется некоторым временем жизни τ . За время τ электрон с не малой вероятностью спонтанно излучает фотон (или несколько фотонов) и переходит в основное состояние. Согласно соотношению неопределённости (6.41) энергетический уровень возбуждённого состояния должен иметь *ширину* $\Gamma \sim \hbar/\tau$. В отсутствие каких-либо дополнительных причин уширения

уровня величина Γ проявляется в эксперименте как ширина $\Delta\omega \sim 1/\tau$ спектральной линии излучения.

6.4. ВОЗМУЩЕНИЕ СТАЦИОНАРНЫХ СОСТОЯНИЙ

Вернёмся к рассмотрению систем, не подверженных действию переменных (во времени) полей. Такие системы характеризуются не зависящим от времени гамильтонианом \hat{H} .

Если точные решения уравнения Шредингера для стационарных состояний с гамильтонианом \hat{H} получить затруднительно, то целесообразно представить \hat{H} в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad (6.42)$$

где \hat{H}_0 – гамильтониан задачи, допускающей точное решение, \hat{V} – оператор возмущения. При этом ставится задача приближенного вычисления собственных значений энергии (для состояний дискретного спектра) ε_n и волновых функций, соответствующих стационарным состояниям $|\varepsilon_n\rangle$, из уравнения Шредингера с гамильтонианом (6.42):

$$(\hat{H}_0 + \hat{V}) |\varepsilon_n\rangle = \varepsilon_n |\varepsilon_n\rangle. \quad (6.43)$$

Предварительно должны быть определены собственные значения $\varepsilon_k^{(0)}$ и волновые функции стационарных состояний $|k\rangle$ невозмущённого оператора \hat{H}_0 . Они удовлетворяют уравнению

$$\hat{H}_0 |k\rangle = \varepsilon_k^{(0)} |k\rangle. \quad (6.44)$$

Будем искать состояния $|\varepsilon_n\rangle$ в виде разложения по невозмущённым стационарным состояниям $|k\rangle$ с неизвестными постоянными коэффициентами C_{kn} :

$$|\varepsilon_n\rangle = \sum_k C_{kn} |k\rangle. \quad (6.45)$$

Подставляя (6.45) в (6.43) и учитывая (6.44), имеем

$$\sum_k C_{kn} \varepsilon_k^{(0)} |k\rangle + \sum_k C_{kn} \hat{V} |k\rangle = \sum_k C_{kn} \varepsilon_n |k\rangle.$$

Обозначив индекс k в суммах как k' , получим

$$\sum_{k'} (\varepsilon_n - \varepsilon_{k'}^{(0)}) C_{k'n} |k'\rangle = \sum_{k'} \hat{V} |k'\rangle C_{k'n}. \quad (6.46)$$

Умножая скалярно обе стороны (6.46) на $|k\rangle$ и учитывая, что

$$\langle k|k'\rangle = \delta_{kk'}, \quad \langle k|\hat{V}|k'\rangle = V_{kk'},$$

приходим к системе уравнений

$$(\varepsilon_n - \varepsilon_k^{(0)}) C_{kn} = \sum_{k'} V_{kk'} C_{k'n}. \quad (6.47)$$

Предположим, что оператор возмущения \hat{V} пропорционален некоторому малому параметру. Будем искать ε_n и C_{kn} в виде разложений в ряды по степеням указанного параметра:

$$\varepsilon_n = \varepsilon_n^{(0)} + \varepsilon_n^{(1)} + \varepsilon_n^{(2)} + \dots, \quad (6.48)$$

$$C_{kn} = C_{kn}^{(0)} + C_{kn}^{(1)} + C_{kn}^{(2)} + \dots \quad (6.49)$$

Здесь $\varepsilon_n^{(m)}$ и $C_{kn}^{(m)}$ – величины того же порядка малости, что и \hat{V}^m .

Подставив (6.48) и (6.49) в (6.47), получим

$$(\varepsilon_n^{(0)} - \varepsilon_k^{(0)} + \varepsilon_n^{(1)} + \varepsilon_n^{(2)} + \dots)(C_{kn}^{(0)} + C_{kn}^{(1)} + \dots) = \sum_{k'} V_{kk'} (C_{k'n}^{(0)} + C_{k'n}^{(1)} + \dots). \quad (6.50)$$

Ещё одна совокупность уравнений (читатель может выписать эти уравнения самостоятельно) возникает при подстановке (6.45) и (6.49) в равенство

$$\langle \varepsilon_n | \varepsilon_{n'} \rangle = \delta_{nn'}, \quad (6.51)$$

или при использовании (6.49) совместно с условием унитарности матрицы коэффициентов $C_{kn} = \langle k | \varepsilon_n \rangle$.

Приравняем слагаемые одинакового порядка малости из левой и правой стороны (6.50). Так же следует поступить с членами равенства (6.51). В нулевом приближении, то есть при выключенном возмущении ($\hat{V} = 0$) правая сторона (6.50) равна нулю, поэтому

$$(\varepsilon_n^{(0)} - \varepsilon_k^{(0)}) C_{kn}^{(0)} = 0. \quad (6.52)$$

Дальнейший анализ оказывается различным для случая невырожденного спектра значений $\varepsilon_k^{(0)}$ и случаев с вырождением.

a) В отсутствие вырождения собственных значений оператора \hat{H}_0 разность энергий в (6.52) отлична от нуля при всех $k \neq n$. Поэтому можно положить

$$C_{kn}^{(0)} = \delta_{kn}. \quad (6.53)$$

Это означает, что в нулевом приближении искомое состояние $|\varepsilon_n\rangle$ совпадает с одним из невозмущённых состояний $|k\rangle$, то есть $|\varepsilon_n\rangle \approx |n\rangle$.

Подставив (6.53) в получающееся из (6.50) соотношение между величинами первого порядка малости

$$(\varepsilon_n^{(0)} - \varepsilon_k^{(0)}) C_{kn}^{(1)} + \varepsilon_n^{(1)} C_{kn}^{(0)} = \sum_{k'} V_{kk'} C_{k'n}^{(0)},$$

имеем

$$(\varepsilon_n^{(0)} - \varepsilon_k^{(0)}) C_{kn}^{(1)} + \varepsilon_n^{(1)} \delta_{kn} = V_{kn}. \quad (6.54)$$

Здесь при заданном n мы можем полагать как $k = n$, так и $k \neq n$. Величина $C_{nn}^{(1)}$ не определяется соотношением (6.54), и, как нетрудно показать с помощью (6.51), может быть выбрана равной нулю:

$$C_{nn}^{(1)} = 0. \quad (6.55)$$

Для $C_{kn}^{(1)}$ при $k \neq n$ из (6.54) следует формула

$$C_{kn}^{(1)} = \frac{V_{kn}}{\varepsilon_n^{(0)} - \varepsilon_k^{(0)}}, \quad k \neq n. \quad (6.56)$$

Таким образом, выписывая искомый вектор состояния $|\varepsilon_n\rangle$ с учётом найденных величин $C_{kn}^{(m)}$ нулевого и первого приближения и обозначая многоточием поправки более высокого порядка, имеем следующий результат

$$|\varepsilon_n\rangle = |n\rangle + \sum_{k \neq n} \frac{V_{kn}}{\varepsilon_n^{(0)} - \varepsilon_k^{(0)}} |k\rangle + \dots \quad (6.57)$$

При рассмотрении конкретных примеров символы векторов состояний в (6.57) заменяются соответствующими волновыми функциями (в желаемом представлении).

Поправка первого приближения к собственному значению энергии $\varepsilon_n^{(0)}$ определяется из уравнения (6.54) при $k = n$:

$$\varepsilon_n^{(1)} = V_{nn}. \quad (6.58)$$

Эта поправка, как мы видим, равна диагональному матричному элементу оператора возмущения, то есть – среднему значению энергии возмущения в невозмущённом состоянии $|n\rangle$.

Нередко оказывается, что для интересующего уровня энергии поправка первого приближения (6.58) равна нулю. В таких случаях следует найти поправку второго приближения. Подставив уже известные нам величины $C_{nn}^{(0)} = 1$ и $C_{nn}^{(1)} = 0$ в (6.50) при $k = n$ и выписывая только слагаемые второго порядка малости, получим равенство

$$\varepsilon_n^{(2)} = \sum_{k'} V_{nk'} C_{k'n}^{(1)}.$$

Отсюда с учётом (6.55) и (6.56) находим искомую поправку второго приближения для энергии:

$$\varepsilon_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} \frac{V_{nk} V_{kn}}{\varepsilon_n^{(0)} - \varepsilon_k^{(0)}}. \quad (6.59)$$

В силу эрмитовости оператора энергии возмущения справедливо равенство $V_{nk} V_{kn} = |V_{nk}|^2$; учитывая его, легко заметить, что поправка второго приближения (6.59) к энергии основного состояния (к наименьшему значению $\varepsilon_n^{(0)}$) всегда отрицательна.

Таким образом, с учётом найденных поправок формула для энергии ε_n возмущённого состояния $|\varepsilon_n\rangle$ имеет вид

$$\varepsilon_n = \varepsilon_n^{(0)} + V_{nn} + \sum_{k \neq n} \frac{|V_{nk}|^2}{\varepsilon_n^{(0)} - \varepsilon_k^{(0)}} + \dots \quad (6.60)$$

Из (6.56) и (6.59) следует, что для применимости указанных приближений необходимо выполнение неравенств

$$|V_{kn}| \ll |\varepsilon_n^{(0)} - \varepsilon_k^{(0)}|. \quad (6.61)$$

Действительно, неравенства (6.61) обеспечивают убывание поправок с ростом порядка их малости.

б) При наличии вырожденных собственных значений оператора \hat{H}_0 изложенный метод неприменим. Покажем, как найти поправки первого приближения к вырожденному уровню энергии $\varepsilon_n^{(0)}$.

Пусть g – кратность вырождения. Тогда в (6.52) одной и той же величине $\varepsilon^{(0)}$ равны $\varepsilon_n^{(0)}$ и $\varepsilon_k^{(0)}$ с номерами

$$k, n = n_1, n_2, \dots, n_g, \quad (6.62)$$

относящимися к рассматриваемому вырожденному уровню. Из (6.52) видно, что в нуль обращаются только те коэффициенты $C_{kn}^{(0)}$, номера которых относятся к различным уровням энергии, а коэффициенты с номерами (6.62) уравнением (6.52) не определяются. Эти коэффициенты подчиняются соотношениям для величин первого порядка малости, возникающим из (6.50) при условии, что все индексы пробегает значения n_1, \dots, n_g :

$$\varepsilon_n^{(1)} C_{kn}^{(0)} = \sum_{k'} V_{kk'} C_{k'n}^{(0)}. \quad (6.63)$$

При фиксированном n соотношения (6.63) представляют собой систему g однородных линейных уравнений для неизвестных $C_k^{(0)} \equiv C_{kn}^{(0)}$:

$$\sum_{k'} (V_{kk'} - \varepsilon^{(1)} \delta_{kk'}) C_{k'}^{(0)} = 0. \quad (6.64)$$

Здесь $\varepsilon^{(1)}$ – параметр, допустимые значения которого будут служить поправками $\varepsilon_n^{(1)}$ к вырожденному уровню энергии $\varepsilon^{(0)}$. Система (6.64) имеет отличные от нуля решения только при условии обращения в нуль определителя, составленного из коэффициентов при неизвестных. Таким образом, приходим к уравнению

$$\det(V_{kk'} - \varepsilon^{(1)} \delta_{kk'}) = 0 \quad (6.65)$$

для $\varepsilon^{(1)}$; это уравнение принято называть *секулярным* уравнением. Оно имеет g вещественных корней $\varepsilon_n^{(1)}$. Вычислив корни $\varepsilon_n^{(1)}$ и подставляя их поочередно в систему уравнений (6.64), можно найти коэффициенты $C_{kn}^{(0)}$. Этими коэффициентами определяются так называемые *правильные* состояния $|n\rangle$, принадлежащие в нулевом приближении вырожденному уровню энергии $\varepsilon^{(0)}$:

$$|n\rangle = \sum_{k=n_1}^{n_g} C_{kn}^{(0)} |k\rangle. \quad (6.66)$$

С учётом найденных поправок $\varepsilon_n^{(1)}$ состояния (6.66) в то же время принадлежат собственным значениям энергии ε_n первого приближения:

$$\varepsilon_n = \varepsilon^{(0)} + \varepsilon_n^{(1)}. \quad (6.67)$$

Можно сказать, что правильными являются такие состояния $|n\rangle$, которые в первом приближении не изменяются при включении взаимодействия

Формула (6.67) показывает, что *возмущение снимает вырождение* уровня $\varepsilon^{(0)}$. Если все корни $\varepsilon_n^{(1)}$ секулярного уравнения различны, то снятие вырождения будет полным. В противном случае остаётся вырождение меньшей кратности, чем первоначальная кратность g .

На практике встречаются также задачи, в которых одновременно с учетом матричных элементов $V_{kk'}$ с номерами n_1, \dots, n_g вырожденного (в нулевом приближении) уровня энергии следует учесть во втором порядке матричные элементы с номерами остальных уровней энергии. Для этой цели условимся латинскими индексами a, b, \dots нумеровать состояния n_1, \dots, n_g с равными значениями энергии, а греческие индексы α, β, \dots пусть относятся ко всем остальным состояниям. Полагая в (6.47) $k = a$ и разбивая сумму по k' на сумму по b и сумму по β , получим совокупность g уравнений (индекс n опускаем, как и в (6.64)):

$$(\varepsilon_a^{(0)} - \varepsilon) C_a + \sum_b V_{ab} C_b + \sum_{\beta} V_{a\beta} C_{\beta} = 0, \quad a, b = n_1, \dots, n_g. \quad (6.68)$$

Аналогичным образом, полагая в (6.47) $k = \alpha$, имеем систему всех остальных уравнений:

$$(\varepsilon_{\alpha}^{(0)} - \varepsilon) C_{\alpha} + \sum_b V_{\alpha b} C_b + \sum_{\beta} V_{\alpha\beta} C_{\beta} = 0. \quad (6.69)$$

Коэффициенты C_a можно считать величинами нулевого порядка по сравнению с коэффициентами более высокого порядка малости C_{α} , поскольку последние должны убывать обратно пропорционально величине энергетических зазоров, как убывают коэффициенты (6.56) в невырожденном случае. Поэтому пренебрежем в (6.69) всеми членами под знаком суммы по β , выразим C_{α} через оставшиеся слагаемые,

$$C_{\alpha} = (\varepsilon - \varepsilon_{\alpha}^{(0)})^{-1} \sum_b V_{\alpha b} C_b,$$

и воспользуемся этим выражением для коэффициентов C_{β} в (6.68):

$$(\varepsilon_a^{(0)} - \varepsilon) C_a + \sum_b \left(V_{ab} + \sum_{\beta} \frac{V_{a\beta} V_{\beta b}}{\varepsilon - \varepsilon_{\beta}^{(0)}} \right) C_b = 0. \quad (6.70)$$

Мы ожидаем, что искомые значения энергии ε будут мало отличаться от совпадающих друг с другом значений $\varepsilon_a^{(0)}$ с $a = n_1, \dots, n_g$, поэтому в энергетических знаменателях, входящих в уравнения (6.70), заменим неизвестную ε ее значением в нулевом приближении $\varepsilon_a^{(0)}$. В первом же слагаемом в (6.70) разность энергий имеет смысл искомой поправки $\varepsilon^{(1)} = \varepsilon - \varepsilon_a^{(0)}$ к вырожденному уровню энергии, так что в рассматриваемом приближении система уравнений (6.70) принимает вид

$$\sum_b \left(V_{ab} + \sum_{\beta} \frac{V_{a\beta} V_{\beta b}}{\varepsilon_a^{(0)} - \varepsilon_{\beta}^{(0)}} \right) C_b - \varepsilon^{(1)} C_a = 0.$$

Видно, что эту систему уравнений можно записать в прежней форме (6.64)

$$\sum_{k'} (V'_{kk'} - \varepsilon^{(1)} \delta_{kk'}) C_{k'}^{(0)} = 0, \quad k, k' = n_1, \dots, n_g, \quad (6.71)$$

но с новыми коэффициентами $V'_{kk'}$:

$$V'_{kk'} = V_{kk'} + \sum_{\beta} \frac{V_{k\beta} V_{\beta k'}}{\varepsilon_k^{(0)} - \varepsilon_{\beta}^{(0)}}. \quad \beta \neq n_1, \dots, n_g \quad (6.72)$$

Поправки к вырожденному уровню энергии $\varepsilon^{(0)}$ определяются как корни $\varepsilon_n^{(1)}$ секулярного уравнения (6.65), в котором матричные элементы возмущения $V_{kk'}$ теперь должны быть заменены величинами $V'_{kk'}$ по формуле (6.72).

6.5. УПРУГОЕ РАССЕЯНИЕ ЧАСТИЦЫ В БОРНОВСКОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

Рассмотрим движение частицы в постоянном внешнем поле, считая потенциальную энергию $U(\mathbf{r})$ возмущением для свободного движения. Нас будет интересовать движение в состояниях непрерывного спектра ($\varepsilon > 0$), отвечающее представлению о рассеянии частицы источником потенциала $U(\mathbf{r})$. Можно показать [2], что в данном случае теория возмущений применима при выполнении любого из двух условий

$$|U| \ll \frac{\hbar^2}{ma^2} \quad \text{при} \quad ka \leq 1, \quad |U| \ll \frac{\hbar^2}{ma^2} ka \quad \text{при} \quad ka \gg 1, \quad (6.73)$$

где a – радиус действия поля $U(\mathbf{r})$, $|U|$ – порядок величины поля $U(\mathbf{r})$ в основной области его существования, $k = \sqrt{2m\varepsilon}/\hbar = p/\hbar$ – волновое число частицы с импульсом p . Второе из указанных условий является более слабым и во всяком случае выполняется для частиц с достаточно большой энергией ε .

Невозмущённым оператором Гамильтона является гамильтониан свободной частицы

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}. \quad (6.74)$$

Его собственные функции могут быть выбраны в виде плоских волн $\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$, описывающих состояния частицы $|\mathbf{p}\rangle$ с определённым импульсом и энергией

$$\varepsilon = p^2/2m. \quad (6.75)$$

Искать поправки к значениям энергии в непрерывном спектре не имеет смысла. Зададимся целью вычислить скорость переходов $\mathbf{p}' \rightarrow \mathbf{p}$, характеризующую рассеяние частиц в поле $U(\mathbf{r})$. Рассматривая статическое возмущение $\hat{V} = U(\mathbf{r})$ как предельный случай периодического возмущения $U(\mathbf{r}) e^{-i\omega t}$ с равной нулю частотой ($\omega = 0$), воспользуемся золотым правилом (6.40).

Пусть \mathbf{p}' – импульс частицы в заданном начальном состоянии. В результате рассеяния частица переходит в конечное состояние с тем или иным импульсом \mathbf{p} . Согласно золотому правилу, энергия конечного состояния в замкнутой системе «частица плюс возмущающее поле» должна быть равна энергии начального состояния:

$$\varepsilon_{\text{кон}} = \varepsilon_{\text{нач}}. \quad (6.76)$$

Поскольку постоянному полю соответствуют равные нулю кванты энергии ($\hbar\omega = 0$), равенство (6.76) означает, что при рассеянии в постоянном поле энергия частицы не изменяется:

$$p^2 / 2m = p'^2 / 2m. \quad (6.77)$$

Следовательно, не меняется и величина импульса: $p = p'$; изменяется лишь его направление. Такое рассеяние частицы называют *упругим*.

Для того чтобы воспользоваться формулой золотого правила (6.40), необходимо вычислить матричный элемент $M_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}$ перехода $\mathbf{p}' \rightarrow \mathbf{p}$ и плотность конечных состояний системы ρ . Подставляя волновые функции начального и конечного состояний (нормированные в достаточно большом объёме V)

$$\psi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{p}'\cdot\mathbf{r}/\hbar}, \quad \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \quad (6.78)$$

в выражение для матричного элемента

$$M_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} = \langle \mathbf{p} | \hat{V} | \mathbf{p}' \rangle = \int d^3\mathbf{r} \psi_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r}), \quad (6.79)$$

и вводя обозначения

$$\hbar\mathbf{q} = \mathbf{p} - \mathbf{p}', \quad (6.80)$$

$$u(\mathbf{q}) = \int d^3\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} U(\mathbf{r}), \quad (6.81)$$

имеем

$$M_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} = u(\mathbf{q})/V. \quad (6.82)$$

Таким образом, в рассматриваемом приближении матричный элемент перехода $\mathbf{p}' \rightarrow \mathbf{p}$ определяется компонентой Фурье $u(\mathbf{q})$ поля $U(\mathbf{r})$ с волновым вектором $\mathbf{q} = (\mathbf{p} - \mathbf{p}')/\hbar$. Вектор \mathbf{q} характеризует изменение направления импульса частицы в процессе упругого рассеяния.

Рассчитаем плотность конечных состояний ρ , принадлежащих элементу объёма \mathbf{p} -пространства

$$d^3\mathbf{p} = p^2 dp d\Omega_{\mathbf{p}}, \quad (6.83)$$

где $d\Omega_{\mathbf{p}}$ – элемент телесного угла вдоль направления \mathbf{p} . Интервалу dp величины импульса p соответствует интервал энергии $d\varepsilon = (p/m)dp$, так что

$$dp = \frac{m}{p} d\varepsilon. \quad (6.84)$$

Приравняем число состояний $\rho d\varepsilon$ выведенной в разделе 2.6.2 величине (2.131):

$$\rho d\varepsilon = \frac{V d^3 \mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (6.85)$$

Подставляя в правую часть (6.85) выражения (6.83) и (6.84), находим интересующую нас плотность состояний

$$\rho = \frac{Vmp}{(2\pi\hbar)^3} d\Omega_{\mathbf{p}}. \quad (6.86)$$

Возвращаясь к формуле (6.40), получаем искомое выражение для скорости переходов (вероятность переходов в единицу времени) из состояния с заданным импульсом \mathbf{p}' в состояния с импульсом \mathbf{p} , лежащим в телесном угле $d\Omega_{\mathbf{p}}$:

$$w = \frac{2\pi}{\hbar} |M_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}|^2 \rho = \frac{mp|u(\mathbf{q})|^2}{V(2\pi\hbar^2)^2} d\Omega_{\mathbf{p}}. \quad (6.87)$$

При $V \rightarrow \infty$ величина (6.87) стремится к нулю. Наглядно это объясняется тем, что при увеличении объёма V вероятность пребывания частицы вблизи рассеивающего центра уменьшается.

Более удобно описывать процесс рассеяния другим способом, не связанным с произволом в выборе нормировочного объёма V . Будем считать, что плоская волна $\psi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r})$ характеризует пространственно однородный пучок частиц с импульсом \mathbf{p}' , падающих на рассеивающий центр из какого-то далекого источника. Величина плотности потока частиц

с учётом выражения для начальной волновой функции (6.78) и равенства $p' = p$ есть

$$j_{na\partial} = \frac{p'}{m} |\Psi_{\mathbf{p}'}|^2 = \frac{p}{mV}. \quad (6.88)$$

Очевидно, что скорость рассеяния w должна быть пропорциональна плотности потока $j_{na\partial}$, а коэффициент пропорциональности будет зависеть от свойств рассеивающего поля. Это утверждение записывается в виде

$$w = d\sigma j_{na\partial}. \quad (6.89)$$

Величина $d\sigma$ с размерностью площади называется эффективным *сечением* рассеяния; она характеризует вероятность рассеяния частиц в телесный угол $d\Omega_{\mathbf{p}}$ уже вне зависимости от того, какова плотность потока начальных частиц.

Разделив (6.87) на (6.88), находим, таким образом, следующее выражение для сечения рассеяния

$$d\sigma = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 |u(\mathbf{q})|^2 d\Omega_{\mathbf{p}}. \quad (6.90)$$

Это выражение называется *формулой Борна*; о лежащем в основе (6.90) приближении говорят как о *борновском приближении*. Формула (6.90) показывает, что вероятность рассеяния частицы с изменением вектора импульса на $\hbar\mathbf{q}$ определяется квадратом модуля компоненты Фурье $u(\mathbf{q})$ рассеивающего поля $U(\mathbf{r})$.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. *Ландау Л.Д.* Механика / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – М.: Физматлит, 2007. – 224 с.
2. *Ландау Л.Д.* Квантовая механика / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – М.: Физматлит, 2004. – 800 с.
3. *Давыдов А.С.* Квантовая механика / А.С. Давыдов. – М.: Наука, 1973. – 703 с.
4. *Базь А.И.* Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике / А.И. Базь, Я.Б. Зельдович, А.М. Переломов. – М.: Наука, 1971. – 544 с.
5. *Фейнман Р.* Фейнмановские лекции по физике. Т. 8, 9: Квантовая механика / Р. Фейнман, Р. Лейтон, М. Сэндс. – М.: Едиториал УРСС, 2004. – 528 с.
6. *Галицкий В.М.* Задачи по квантовой механике: в 2 ч. / В.М. Галицкий, Б.М. Карнаков, В.И. Коган. – М.: Едиториал УРСС, 2001. – 734 с.
7. *Флюгге З.* Задачи по квантовой механике: в 2 т. / З. Флюгге. – М.: Мир, 1974. – 656 с.
8. *Берестецкий В.Б.* Квантовая электродинамика / В.Б. Берестецкий, Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский. – М.: Физматлит, 2002. – 720 с.
9. *Фейнман Р.* КЭД странная теория света и вещества / Р. Фейнман. – М.: Наука. – 1988, библиотечка «Квант», вып. 66, 144 с.
10. *Дирак П.* Принципы квантовой механики / П. Дирак. – М.: Наука. – 1979, 480 с.
11. *Фейнман Р., Хибс А.* Квантовая механика и интегралы по траекториям / Р. Фейнман, А. Хибс. – М.: ИО НФМИ, 1998, 380 с.
12. *Швингер Ю.* Квантовая кинематика и динамика / Ю. Швингер. – М.: Наука, 1992 – 317 с.
13. *Ландау Л.Д.* Теория поля / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – М.: Физматлит, 2006. – 534 с.
14. *Фейнман Р.* Почему существуют античастицы / Р. Фейнман // Успехи физических наук. – 1989. – Т. 157. – Вып. 1. – С. 163–183.

Лыков Сергей Николаевич

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

Учебное пособие

Под редакцией Ипатовой Ии Павловны

Лицензия ЛР № 020593 от 07.08.97

Налоговая льгота — Общероссийский классификатор продукции
ОК 005-93, т. 2; 95 3005 — учебная литература

Подписано в печать 26.12.2008. Формат 60×84/16. Печать цифровая.
Усл. печ. л. 16,25. Уч.-изд. л. 16,25. Тираж 200. Заказ 3810б.

Отпечатано с готового оригинал-макета, представленного автором,
в Цифровом типографском центре Издательства Политехнического
университета.

195251, Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29.

Тел.: (812) 550-40-14

Тел./факс: (812) 297-57-76