Федеральное агентство по образованию
САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

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

С. Н. ЛЫКОВ В. Э. ГАСУМЯНЦ С. А. РЫКОВ

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА
ЗАДАЧИ С РЕШЕНИЯМИ

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 (076.2)
ББК 22.37я73
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. Задачи с решениями :** учеб. пособие / С. Н. Лыков, В. Э. Гасумянц, С. А. Рыков ; под ред. И. П. Ипатовой. − СПб. Изд-во Политехн. ун-та, 2008. − 315 с.

Пособие соответствует государственному образовательному стандарту направления подготовки 140400 «Техническая физика» и содержанию учебной программы дисциплины ЕН.Ф.03.02 «Теоретическая физика».

Пособие является практическим дополнением к изложению теоретических основ квантовой механики. Приведено 98 задач, относящихся ко всем основным разделам квантовой механики, снабженных подробными решениями. Большое внимание уделяется физической интерпретации полученных результатов, а также иллюстрации реализации физических принципов квантовой механики и ее математического аппарата в решении актуальных задач. Все задачи сгруппированы по основным разделам квантовой механики, при этом каждый раздел предваряется краткими теоретическими сведениями (формулы, определения), необходимыми при решении приведенных в нем задач.

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.

© Лыков С. Н., Гасумянц В. Э., Рыков С.А., 2008
© Санкт-Петербургский государственный политехнический университет, 2008

ISBN 978-5-7422-2039-8

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение …… 4
1. Физические основы квантовой механики …….. 7
1.1. Задачи …….. 7
1.2. Решения ……... 10
2. Амплитуды вероятности и векторы состояний …….. 26
2.1. Задачи …….. 28
2.2. Решения ……... 34
3. Операторы и матрицы в квантовой механике …… 60
3.1. Задачи …….. 64
3.2. Решения ……... 72
4. Волновая функция. Уравнение Шредингера …….. 107
4.1. Задачи …….. 110
4.2. Решения ……... 114
5. Барьеры. Состояния с непрерывным спектром энергии ……..... 143
5.1. Задачи …….. 143
5.2. Решения ……... 146
6. Задачи об осцилляторах …… 164
6.1. Задачи …….. 165
6.2. Решения ……... 167
7. Момент импульса …….. 195
7.1. Задачи …….. 200
7.2. Решения ……... 201
8. Спин …… 222
8.1. Задачи …….. 225
8.2. Решения ……... 228
9. Возмущение, переходы ……..... 248
9.1. Задачи …….. 253
9.2. Решения ……... 256
Библиографический список …… 314

ВВЕДЕНИЕ

Обычно считают, что для решения задач по физике необходимо, прежде всего, составить наглядное представление об изучаемом явлении и тогда с помощью известных физических законов удастся определить все необходимые его количественные характеристики. Математическое описание возникающей картины воспринимается при этом как нечто второстепенное по сравнению с лежащими в основе физической интерпретации «наглядными образами» – последним в физике всегда отводилась главная роль. В классической механике примерами понятий такого рода служат материальная точка и траектория, в классической электродинамике – векторные электрическое и магнитное поля, наглядно изображаемые силовыми линиями.

Переходя к изучению квантовой механики, студенты, с одной стороны, продолжают иметь дело с привычными физическими представлениями и терминами, пользуются приобретенными навыками решения задач, но, в то же время, сталкиваются с принципиально новой ситуацией, не поддающейся быстрому осмыслению. В квантовой области наглядные картины движения, ранее служившие опорой физической интуиции, ведут в большинстве своем к ошибочным ответам и должны быть отброшены, а основным средством получения правильных результатов и анализа их физического смысла становится довольно абстрактный математический аппарат (волновые функции, операторы, матрицы и т. п.). Математика полностью берет на себя роль *необходимого языка* квантовой физики, вне рамок которого не удается ни провести последовательное физическое рассуждение, ни раскрыть смысл обсуждаемых понятий.

Традиционные ссылки на «корпускулярно-волновой дуализм», более уместные по ходу изложения истории вопроса, чем при формулировании принципов квантовой механики, не вносят ясности и только затрудняют изучение принципов квантовой механики, поскольку создают иллюзию возможности соединения логически не совмещаемых друг с другом понятий. В действительности квантовая механика не является результатом объединения классической картины частиц с классическим же

представлением о волнах. Фундаментальная квантово-механическая концепция – амплитуда вероятности (или волновая функция ψ) – отвергает привычные способы описания физической реальности.

Только в самых простых, одночастичных задачах волновая функция $\psi(\mathbf{r},t)$ действительно принимает математическую форму волны, и тогда классические представления об интерференции помогают узнаваемым путем выделить характерные черты рассматриваемых явлений. Но формулы здесь лишь с виду одни и те же. В общем случае, в задачах о многочастичных системах волновая функция $\psi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,...,\mathbf{r}_n,t)$ зависит от большого числа координатных переменных и уже не ассоциируется с реальными волновыми процессами в обычном трехмерном пространстве. Она может иметь вид произведения одночастичных функций любой кратности; такая структура чужда классической теории поля и приобретает смысл только в статистическом описании – в связи с произведением вероятностей событий. Таким образом, амплитуды вероятности по своему смыслу совершенно не совпадают с классическими полевыми величинами и составляют основу самостоятельного построения, которое, может быть, следовало бы называть не «квантовой механикой», а «квантовой логикой».

Процесс решения задачи по квантовой физике складывается из трех стадий. Первая из них – это перевод заданных физических условий на язык математики, описание исходной физической картины в терминах амплитуд вероятностей, векторов состояний, операторов и т. д. Затем следуют формальные преобразования в рамках математического аппарата квантовой механики, характер и цель которых определяется постановкой задачи. Заключительный этап – это физическая интерпретация результата, то есть его перевод с языка абстрактных величин на язык наблюдаемых событий и явлений. Первый и последний этапы не могут быть полностью формализованы и, несомненно, включают элементы искусства; выполняя их, приходится отделять существенное от второстепенного, делать физически разумные приближения и предположения. Успех же промежуточных вычислений целиком связан с уровнем владения математической техникой.

Предлагаемое пособие может быть полезным как для проведения упражнений или семинаров по квантовой механике, так и для

самостоятельных занятий. При отборе материала для данного сборника предпочтение было отдано тем задачам, которые не требуют выполнения сложных расчетов, но в то же время, на наш взгляд, в определенной мере иллюстрируют роль и смысл основных понятий квантовой теории. Мы представляли себе читателя, студента, готовящегося к самостоятельной научной работе, желающего научиться понимать язык современных публикаций по квантовой физике, но, возможно, не планирующего профессионально заниматься теоретическими исследованиями. За более емким изложением методов квантовой теории следует обратиться, например, к учебникам [1–5,10] и задачникам [6–9].

1. ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Физические основы квантовой теории – это совокупность результатов обширных и разнообразных экспериментов, накопленная учеными к началу XX века в ходе настойчивых попыток досконально понять строение окружающего мира, составить единое представление о свойствах материи на различных уровнях ее проявления – в механике, химии, физике твердых тел, физике молекул, атомов, элементарных частиц. Подобные вопросы с необходимой степенью подробности рассматриваются в предшествующем «Квантовой механике» лекционном курсе «Атомная физика» (или в равноценной ему по содержанию дисциплине «Прикладная физика») и прорабатываются на сопутствующих таким курсам практических занятиях.

Задачи, приведенные в данной главе, носят вспомогательный характер. Они не заменяют указанный выше материал и адресованы читателю уже с ним ознакомившемуся и приступающему теперь к изучению квантовой механики. Эти задачи позволят освежить в памяти ряд фактов, касающихся становления основных идей квантовой теории, помогут сконцентрировать внимание на ключевых понятиях еще до того, как излагаемая на лекциях по квантовой механике информация станет достаточной для перехода к более сложным задачам следующих глав. Затронутые ниже вопросы можно рассматривать и как темы для небольших студенческих докладов, дискуссий.

1.1. ЗАДАЧИ

1.1. При исследовании интерференционных распределений вероятности, наблюдаемых, например, в опытах по рассеянию частиц, важную роль играет понятие *длины волны* λ квантовой частицы. Опыты показывают, что λ зависит от массы m частицы и ее энергии ε. Исходя из соображений размерности, найти зависимость $\lambda(m,\varepsilon)$; определить, как λ зависит от импульса частицы p; установить характер связи между неопределенностью координаты δx и импульса δp квантовой частицы;

выяснить, существует ли формула для $\lambda(m,\varepsilon)$ в классической нерелятивистской механике.

1.2. Количественно оценить масштаб длины волны де Бройля λ для электрона с энергией $\varepsilon \sim 10$ эВ. При каком значении энергии электрон имел бы длину волны порядка длины волны видимого света? Как изменятся полученные результаты, если вместо электрона рассмотреть более массивную частицу, например, протон?

1.3. Частица с массой m за счет внешних сил удерживается в области пространства с линейными размерами порядка некоторой величины a. Оценить масштаб минимального значения кинетической энергии частицы.

1.4. В основных чертах (без учета движения ядра и релятивистских эффектов) структура атома водорода определяется постоянными $e, m, \hbar$, где e – электрический заряд электрона, m – масса электрона, $\hbar$ – постоянная Планка. Пользуясь соображениями размерности, оценить линейный размер атома водорода и энергию связи электрона.

1.5. Рассматривая движение электрона в атоме водорода, в нерелятивистском приближении оценить с помощью соображений размерности скорость этого движения.

1.6. Для частиц массы m оценить комптоновскую длину Λ, определив ее как граничное значение неопределенности координат частицы, ниже которого неопределенность энергии превышает релятивистскую энергию покоя частицы.

1.7. а) Пользуясь соображениями размерности, указать естественную с точки зрения квантовой теории единицу измерения момента импульса частиц.

б) Применяя соображения размерности и полагая, что собственный магнитный момент μ частицы пропорционален ее спину и электрическому заряду, оценить порядок величины μ. (Спин – это собственный момент

импульса частицы, не связанный с орбитальным движением. В частности, спин электрона, протона, нейтрона равен 1/2 в единицах, указанных в предыдущем пункте).

1.8. Для двухатомной молекулы сравнить масштабы интервалов между уровнями энергии в спектре орбитальных электронных $\varepsilon_{эл}$, колебательных $\varepsilon_{кол}$ и вращательных $\varepsilon_{вращ}$ состояний молекулы.

1.9. Частицы массы m образуют газ с концентрацией n (число частиц в единице объема). Оценить температуру квантового вырождения газа, то есть такую температуру T_0, ниже которой неопределенность координат частицы становится больше среднего расстояния между частицами.

1.10. Оценить масштаб поправок к энергетическим уровням атома водорода, возникающих за счет релятивистской поправки к кинетической энергии электрона.

1.11. Пусть электрон, рассматриваемый здесь как классическая частица, обладающая массой m, зарядом e и собственным моментом импульса (спином) $\hbar\mathbf{s}$, движется со скоростью $\mathbf{v}$ в заданном электрическом поле $\mathbf{E} = -\nabla U / e$, где $U(\mathbf{r})$ – потенциальная энергия взаимодействия электрона с зарядами-источниками данного электрического поля. Тогда в системе отсчета, связанной с электроном, присутствует магнитное поле, в первом порядке по v/c равное $\mathbf{B} = \mathbf{E} \times \mathbf{v} / c$ (оно создается движущимися относительно электрона зарядами-источниками поля $\mathbf{E}$). Взаимодействие спинового магнитного момента электрона $\boldsymbol{\mu} = \dfrac{e}{mc}\hbar\mathbf{s}$ с указанным магнитным полем назовем «спин-орбитальным взаимодействием».

Исходя из приведенной классической картины, показать, что энергия спин-орбитального взаимодействия $V^{\text{с.о.}}$ в случае сферически симметричного поля $U(\mathbf{r})$ пропорциональна $\mathbf{l} \cdot \mathbf{s}$, где $\mathbf{l}$ – орбитальный

момент импульса электрона в единицах $\hbar$; оценить масштаб поправок к энергии атома водорода за счет спин-орбитального взаимодействия.

1.12. С помощью соображений размерности убедиться, что из фундаментальных постоянных $\hbar$, c и G, где G – гравитационная постоянная, единственным образом составляются единицы длины, массы и времени – так называемые *планковские единицы*. Оценить порядок величины планковских масштабов длины, массы и времени в единицах системы СГС.

1.2. РЕШЕНИЯ

1.1. Выясним, существует ли формула вида

$$\lambda = C m^x \varepsilon^y \hbar^z , \qquad (1)$$

где C – безразмерный коэффициент пропорциональности; x, y, z – пока неизвестные показатели степени. С этой целью попытаемся найти такие значения показателей степени, при которых размерность левой и правой стороны равенства (1) будет одинакова, – необходимое условие того, что равенство (1) имеет физический смысл. В качестве систематического метода решения подобных задач полезен следующий прием. Исходим из предположения, что размерность любой физической величины всегда может быть выражена через независимые размерности длины L, массы M и времени T и выписываем такие выражения для величин, фигурирующих в задаче. Для этого пригодны наиболее простые формулы известных физических законов, взятые в системе единиц СГС (система СГС основана как раз на трех основных единицах с размерностью L, M, T); безразмерные коэффициенты в них можно опускать. Применительно к (1) имеем: $[\lambda] = L$, $[C] = 1$, $[m] = M$, $[\varepsilon] = [mv^2/2] = M(L/T)^2$, $[\hbar] = [\varepsilon]T = ML^2/T$. Заменив величины в проверяемом соотношении полученными выражениями, приходим к равенству

$$L = M^{x+y+z} L^{2y+2z} T^{-2y-z} , \qquad (2)$$

позволяющему составить систему уравнений для искомых показателей степени:

$$\begin{cases} x + y + z = 0 \\ 2y + 2z = 1 \\ 2y + z = 0 \end{cases}. \qquad (3)$$

В данном примере указанная система решение имеет, причем единственное: $x = -1/2,\ y = -1/2,\ z = 1$. Следовательно, допустима лишь следующая форма функциональной зависимости $\lambda(m, \varepsilon)$:

$$\lambda = C\frac{\hbar}{\sqrt{m\varepsilon}}. \qquad (4)$$

Численное значение коэффициента C соображениями размерности не определяется. Последовательное вычисление безразмерных коэффициентов (без подгонки под экспериментальные данные) требует детальной разработки теории рассматриваемого явления и нередко, оказавшись трудоемким, приводит к результату «порядка единицы». С этой точки зрения ценность соображений размерности состоит еще и в том, что, не вычисляя безразмерный коэффициент, а просто полагая его приближенно равным единице, мы без труда получаем предварительную оценку порядка интересующей нас величины:

$$\lambda \sim \frac{\hbar}{\sqrt{m\varepsilon}}. \qquad (5)$$

Выяснить, во сколько именно раз оцениваемое так значение отличается от истинного, можно только сравнением с точной формулой. Последовательный математический аппарат квантовой механики дает для длины волны частицы *формулу де Бройля*: $\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} \approx \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m\varepsilon}}$; видно, что оценка (5) занижена в $\pi\sqrt{2}$ раз – таков в данном случае множитель «порядка единицы». Однако, лучше иметь хотя бы приблизительное представление о масштабе рассматриваемой величины, чем вообще не иметь никакого.

В опытах по рассеянию или дифракции частиц их движение до и после акта рассеяния можно считать свободным; при этом величина ε в (5) представляет собой кинетическую энергию: $\varepsilon_{\text{кин}} = p^2/2m$ – в нерелятивистском приближении, справедливом при $p \ll mc$, где p – импульс частицы, c – скорость света. Подставив это выражение для ε в (5), находим зависимость длины волны частицы от импульса (согласующуюся с формулой де Бройля):

$$\lambda \sim \frac{\hbar}{p}. \tag{6}$$

К результату (6) ведет и построение величины λ, имеющей смысл длины, из $\hbar, p, m$ рассмотренным выше методом анализа размерностей. Действительно, заменив все величины в предполагаемом соотношении $\lambda \sim m^x p^y \hbar^z$ выражениями для их размерности ($[p] = [mv] = ML/T$ и т.д.), получаем равенство $L = M^{x+y+z} L^{y+2z} T^{-y-z}$. Отсюда следует система уравнений $x + y + z = 0$, $y + 2z = 1$, $y + z = 0$, имеющая единственное решение $x = 0$, $y = -1$, $z = 1$, которому и отвечает соотношение (6).

Необходимо отметить, что последовательный вывод формулы де Бройля $\lambda = 2\pi\hbar/p$ в квантовой теории основан на гораздо более глубоких принципах, чем соображения размерности, и позволяет убедиться в справедливости этой формулы также в релятивистском случае, в том числе и для фотонов, которые, как известно, не имеют массы ($m = 0$). Построение же на основе размерностей при учете массы частиц и скорости света привело бы нас к неоднозначному ответу – вместо (6) получилось бы выражение $f(p/mc)\,\hbar/p$, где $f(p/mc)$ – произвольная функция безразмерной переменной p/mc. Если заранее потребовать, чтобы искомая квантово-механическая формула для $\lambda(p)$ имела универсальный вид вне зависимости от массы частиц, то и при учете скорости света соображения размерности дадут верный ответ (6). Таким образом, успех построения формул методом анализа размерностей зависит от того, насколько обоснован выбор исходных величин.

Хотя соображения размерности не могут заменить последовательное физическое рассмотрение и далеко не всегда ведут к однозначным оценкам, они, во всяком случае, существенно помогают вспомнить тот или иной физический закон, избежать грубой ошибки. Проиллюстрируем это на примере *соотношений неопределенности Гейзенберга*, связывающих неопределенность декартовых координат x, y, z частицы и соответствующих проекций p_x, p_y, p_z ее импульса $\mathbf{p}$:

$$\delta x\, \delta p_x \geq \hbar/2, \qquad \delta y\, \delta p_y \geq \hbar/2, \qquad \delta z\, \delta p_z \geq \hbar/2. \tag{7}$$

Для оценок обычно бывает достаточно заменить знак неравенства знаком равенства по порядку величины (~). Если распределение вероятности координат частицы (в квантовой теории равное квадрату модуля *волновой функции* $\psi(\mathbf{r})$ частицы) сосредоточено в области пространства с линейным размером δx, примерно одним и тем же во всех направлениях, то нет причин и для заметного различия между значениями δp_x, δp_y, δp_z – они будут порядка неопределенности δp величины импульса $p = \sqrt{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}$. В этом случае три соотношения (7) сводятся к одному:

$$\delta x\, \delta p \sim \hbar. \tag{8}$$

Такая связь между $\delta x, \delta p$ и $\hbar$ (как и соотношение (6) между $\lambda, p, \hbar$) непосредственно следует из соображений размерности; придя с помощью последних к (8), проще вспомнить и точную форму соотношений неопределенности (7).

Рассмотренные примеры служат, наконец, еще одной цели – они позволяют почувствовать, насколько фундаментальна роль постоянной Планка в формулировании квантово-механических закономерностей. Тот факт, что в классической механике постоянная Планка нигде не учитывается, соответствует переходу в формулах квантовой механики к пределу $\hbar \to 0$. Как видно из (5) или (6), при $\hbar \to 0$ длина волны частиц с заданной энергией стремится к нулю. Следовательно, переход от квантово-механического к классическому описанию движения частиц должен быть аналогичен известному переходу от волновой оптики к геометрической в коротковолновом пределе: замена представления о распределенной в

пространстве световой волне картиной сколь угодно узких пучков света является в механике аналогией перехода с языка волновых функций на язык траекторий частиц.

В классической нерелятивистской механике невозможно построить формулу для длины волны λ как функции энергии ε и массы m частицы. Действительно, записав соотношение вида $\lambda = C m^x \varepsilon^y$, отличающееся от (1) отсутствием постоянной Планка, мы придем к системе уравнений (3) с показателем степени $z = 0$, но при таком значении z указанная система решений не имеет. Поскольку, таким образом, классическая механика не допускает понятия о длине волны частиц $\lambda(m, \varepsilon)$, она *принципиально* не способна объяснить наблюдаемые на опыте явления с интерференционными распределениями вероятности (например, явление дифракции частиц на кристаллах).

1.3. В классической механике кинетическая энергия частицы выражается формулой $\varepsilon = p^2 / 2m$ и минимальна при значении импульса $p = 0$. В квантовой механике из соотношения неопределенности $\delta x \, \delta p \sim \hbar$ (см. формулу (8) в задаче 1.1) следует, что при конечной величине неопределенности координат $\delta x \sim a$ импульс не может быть точно равен нулю: неопределенность импульса имеет порядок $\delta p \sim \hbar / a$. Поэтому частица обладает отличным от нуля средним значением кинетической энергии $\varepsilon = \left\langle p^2 \right\rangle / 2m$, где $\left\langle p^2 \right\rangle \sim (\delta p)^2 \sim \hbar^2 / a^2$. Таким образом, искомая оценка имеет следующий вид: $\varepsilon \sim \hbar^2 / 2ma^2$. Соображения размерности также ведут к энергетическому масштабу $\varepsilon \sim \hbar^2 / ma^2$.

1.4. С классической точки зрения атом водорода состоит из двух точечных зарядов $\pm e$ (электрона и протона), находящихся на некотором расстоянии r друг от друга и обладающих энергией кулоновского притяжения $-e^2 / r$ (что позволяет нам записать: $[e^2] = [\varepsilon] L = ML^3 T^{-2}$). Поскольку протон почти в $2 \cdot 10^3$ раз массивнее электрона, будем рассматривать ядро атома как классическую материальную точку,

покоящуюся в начале координат. Действительно, чем массивнее частица, тем в меньшей степени проявляются при заданных условиях ее «волновые свойства». Если теперь попытаться оценить радиус электронной орбиты по формуле $r \sim (e^2)^x m^y$, то придем (методом, рассмотренным в задаче 1.1) к несовместной системе уравнений для показателей степени x, y. Это означает, что только из постоянных e и m невозможно составить какое-либо выражение для радиуса атома – в классической механике размер орбиты частицы в кулоновском поле определяется начальными условиями и может быть любым. Кроме того, при учете непрерывной потери энергии на электромагнитное излучение, предсказываемое законами классической электродинамики, такая орбита вообще не может быть стационарной – электрон должен падать на ядро. Подобные предсказания неизбежно вступают в противоречие с наблюдаемым фактом стабильности свойств атомов, молекул, вещества.

В квантовой механике в силу принципа неопределенности лишается смысла само понятие классической орбиты электрона, но для оценки линейного размера a атома оно и не является необходимым. Заменив все величины в предполагаемой формуле $a \sim (e^2)^x m^y \hbar^z$ выражениями для их размерностей, получаем равенство

$$L = M^{x+y+z} L^{3x+2z} T^{-2x-z}.$$

Отсюда следует система уравнений $x + y + z = 0$, $3x + 2z = 1$, $-2x - z = 0$, имеющая единственное решение: $x = -1$, $y = -1$, $z = 2$. Таким образом, искомая оценка размера атома водорода имеет вид $a \sim \hbar^2 / me^2$. Величина

$$a_B = \hbar^2 / me^2 \qquad (1)$$

получила название *радиуса Бора.* В квантовой механике по традиции продолжают использовать термин «радиус электронной орбиты», подразумевая под этим приблизительный размер области пространства, в которой электрон обнаруживается с преобладающей вероятностью.

Построение тем же методом формулы для энергии связи электрона (потенциала ионизации атома водорода) $\varepsilon_{эл}$ из постоянных $e, m, \hbar$ дает:

$$\varepsilon_{\text{эл}} \sim me^4/\hbar^2 = \hbar^2/ma_B^2 . \qquad (2)$$

Подстановка $a = a_B$ в полученное в задаче 1.3 соотношение $\varepsilon \sim \hbar^2/ma^2$ для кинетической энергии частицы, как и подстановка $r \sim a_B$ в выражение для абсолютной величины энергии взаимодействия e^2/r, также ведет к (2). Соотношение (2), как и должно быть, согласуется с формулой для дискретных уровней энергии атома водорода, которая в квантовой механике выводится с помощью уравнения Шредингера:

$$\varepsilon_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}, \qquad n = 1,2,3, \ldots \qquad (3)$$

Энергия связи электрона определяется из (3) как разность $\varepsilon_\infty - \varepsilon_1 = me^4/2\hbar^2$. Эту величину иногда называют постоянной Ридберга, а когда применяют ее в качестве единицы энергии – «ридбергом» (обозначается Ry):

$$Ry = me^4/2\hbar^2 \approx 13{,}6 \text{ эВ}. \qquad (4)$$

1.5. Единственная величина с размерностью скорости, которую можно составить из постоянных, определяющих структуру атома (то есть из массы электрона m, его электрического заряда e и постоянной Планка $\hbar$), есть $v \sim e^2/\hbar$; масса электрона не вошла в это выражение. Оцениваемая так скорость составляет $e^2/\hbar c \approx 1/137$ долю скорости света c. Безразмерная комбинация фундаментальных констант $e^2/\hbar c = \alpha$ получила название *постоянной тонкой структуры*, она возникает в расчетах релятивистских поправок к нерелятивистской картине энергетических уровней атомов и в других задачах квантовой электродинамики.

Оценка $v \sim e^2/\hbar$ применима также для скорости электронов на внешних орбитах более сложных атомов – имеющих Z электронов и ядро с зарядом $Z|e|$. Действительно, по отношению к внешнему электрону заряд ядра в значительной мере экранирован внутренними электронами атома и характеризуется эффективной величиной $Z_{эфф} \approx 1$. В силу этого

же обстоятельства, оценка радиуса внешних орбит электронов дается формулой Бора $a_B = \hbar^2 / me^2$, а энергия ионизации имеет порядок $me^4 / \hbar^2$, как и в случае атома водорода. Иными словами, в рассматриваемом приближении размеры атомов, энергия внешних электронов и скорость последних не зависят от Z, то есть эти параметры по порядку величины одинаковы для всех атомов. При этом, конечно, следует иметь в виду, что оценки, основанные только на соображениях размерности, определяют лишь масштаб или удобные в теории «единицы измерения» величин и не выявляют деталей физической картины. В данном примере оценки не отражают периодической зависимости размеров атомов и их потенциалов ионизации от Z, которая на самом деле имеется и проявляется в периодической системе элементов.

Для оценки порядка величины параметров внутренних орбит электрона надо заменить e^2 на Ze^2, так как энергия или сила взаимодействия электрона с неэкранированным зарядом ядра определяется произведением заряда электрона на заряд ядра. Таким образом, $v \sim Ze^2 / \hbar$; отсюда видно, в частности, что с ростом Z масштаб релятивистских поправок в теории энергетических уровней атома должен увеличиваться. В тяжелых атомах отношение скорости внутренних электронов к скорости света оказывается порядка единицы.

1.6. Из релятивистского выражения для энергии частицы

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = \sqrt{(mc^2)^2 + (\mathbf{p}c)^2}$$

видно, что неопределенность энергии $\delta\varepsilon$ превысит величину mc^2, если неопределенность импульса δp превзойдет по порядку величины граничное значение, равное mc. Подставив в условие $\delta p = mc$ выражение $\delta p = \hbar / \Lambda$, которым Λ вводится как соответствующая неопределенность координат, имеем

$$\Lambda = \frac{\hbar}{mc}.$$

Как показывает квантовая электродинамика, физический смысл комптоновской длины, состоит в том, что на микроскопических расстояниях, заметно меньших чем Λ, могут быть существенны явления «поляризации вакуума» – квантовые релятивистские процессы рождения пар частица-античастица того же сорта, что и рассматриваемая частица массы m. В отсутствие внешних источников энергии такие процессы являются виртуальными, то есть не наблюдаемыми. Но они становятся реальными при наличии взаимодействия или «возмущения», локализующего рассматриваемую частицу в элементе объема с линейными размерами, заметно меньшими чем Λ; при этом необходимая для рождения пар энергия берется от источника такого возмущения.

1.7. а) Размерность момента импульса совпадает с размерностью постоянной Планка, поэтому в квантовой теории именно постоянная Планка служит естественной единицей измерения момента импульса.

б) Магнитный момент частицы имеет порядок $\mu \sim e\hbar/mc = e\Lambda$, где e и m – электрический заряд и масса частицы, c – скорость света; Λ – комптоновская длина.

Отметим, что из величин e, m, $\hbar$ единственным образом составляется комбинация с размерностью магнитного момента (совпадающей с размерностью электрического дипольного момента «заряд × длина»): она имеет вид $\hbar^2/em = ea_B$. Это выражение выглядело бы разумно при оценке электрического дипольного момента атома или молекулы, но в применении к «элементарной частице» такая комбинация ведет к бессмысленному результату в пределе $e \to 0$ и поэтому не может служить искомой оценкой магнитного момента. Кроме того, поскольку магнитные явления всегда имеют релятивистскую природу, в ответ должна входить скорость света c. С учетом же скорости света одни только соображения размерности в рассматриваемой задаче уже не могут дать однозначного ответа. Действительно, из e, $\hbar$ и c составляется безразмерная величина $\alpha = e^2/\hbar c$ (постоянная тонкой структуры) и, следовательно, требуемую размерность будет иметь выражение $f(\alpha)\hbar^2/em$, где $f(\alpha)$ – произвольная безразмерная функция. Подобная

ситуация возникает всякий раз, когда исходные данные в задаче допускают построение безразмерного параметра или нескольких безразмерных параметров. В этих случаях анализ размерностей недостаточен для получения единственного ответа, необходимо привлечь дополнительные соображения.

В рассматриваемом примере к ответу ведет физическое требование пропорциональности магнитного момента электрическому заряду частицы, причем результат согласуется также с тем, что собственный магнитный момент частицы должен быть пропорционален ее спину, то есть пропорционален $\hbar$.

Точное выражение для собственного магнитного момента частицы можно записать в виде $\mu = g\mu_B$, где $\mu_B = |e|\hbar/2mc$ – величина, называемая магнетоном Бора, g – безразмерный коэффициент, определяемый экспериментально в отдельности для каждого сорта частиц. Коэффициент g оказывается порядка единицы; для электрона он приблизительно равен -1.00116.

1.8. Один из фундаментальных экспериментальных фактов, обнаруженных первоначально при спектроскопических исследованиях веществ и приведший впоследствии к возникновению квантовой теории, заключается в *дискретности энергетических спектров*, соответствующих различным степеням свободы квантовой системы конечного объема. Этот факт и в настоящее время сохраняет практическую значимость, так как энергетический спектр отражает индивидуальные особенности системы, служит, образно говоря, ее визитной карточкой. Схематично дискретный спектр энергии представляется формулой

$$\varepsilon_n = \varepsilon f(n), \qquad (1)$$

где $f(n)$ – зависящая от вида рассматриваемой системы безразмерная функция *квантовых чисел* n, нумерующих дискретные энергетические уровни, ε – характерное для данной системы значение энергии (в качестве примера см. формулу (3) в задаче 1.4). В общем случае интервалы $\varepsilon_{n+1} - \varepsilon_n$ между соседними уровнями зависят от n, но если отвлечься от этого обстоятельства и считать разность $\mathbf{n}_1 = \mathbf{r}_1/r_1 = \mathbf{p}_1/p$ величиной

порядка единицы, то можно сказать, что интервалы между уровнями энергии имеют порядок характерного значения ε.

Для приблизительной оценки ε в молекулах мы не станем вникать в детали их строения, а учтем только большое различие между массой m электрона и массой M атома.

Размер молекулы, как и расстояние a между ядрами атомов в ней, имеет тот же порядок величины, что и радиус орбит внешних (валентных) электронов в атоме, то есть $a \sim a_B = \hbar^2 / me^2$. С этим размером связан порядок величины кинетической и потенциальной энергии электронов в кулоновском поле неподвижных ядер (см. задачу 1.4), так что характерным значением энергии валентных электронов является величина

$$\varepsilon_{\text{эл}} \sim \frac{\hbar^2}{ma^2} \sim Ry\,. \tag{2}$$

Интервалы между колебательными уровнями молекулы оцениваются как $\varepsilon_{\text{кол}} = \hbar\omega$, где ω – характерное значение частоты колебаний атомов друг относительно друга. Для того чтобы установить порядок величины ω, воспользуемся формулой $U(x) = M\omega^2 x^2 / 2$, описывающей потенциальную энергию гармонического осциллятора с собственной частотой ω и массой M; x – отклонение координаты осциллятора от равновесного значения. Так как химическая связь атомов в молекуле обусловлена движением валентных электронов, то при удалении атомов друг от друга на расстояние x порядка размеров молекулы a (когда молекула уже начинает «разрываться») ее потенциальная энергия $M\omega^2 a^2 / 2$ должна стать порядка энергии связи, то есть порядка $\varepsilon_{\text{эл}}$. Таким образом, $M\omega^2 a^2 \sim \hbar^2 / ma^2$; отсюда

$$\omega \sim \sqrt{\frac{m}{M}}\,\frac{\hbar}{ma^2}$$

и, следовательно,

$$\varepsilon_{\text{кол}} = \hbar\omega \sim \sqrt{\frac{m}{M}}\,\varepsilon_{\text{эл}} \tag{3}$$

Для оценки энергии вращения молекулы воспользуемся соотношением $\varepsilon_{\text{вращ}} \sim (\hbar J)^2 / I$ где J – момент импульса молекулы в единицах $\hbar$ (то есть J – безразмерная величина), $I \sim Ma^2$ – момент инерции. Дискретность вращательных уровней энергии, как показывает квантовая теория, обусловлена тем, что *момент импульса принимает только дискретные значения с шагом единица*. Но даже не зная этого факта, можно оценить $\varepsilon_{\text{вращ}}$ предположив, что безразмерная величина момента импульса для любого существенно квантового объекта имеет характерное значение $J \sim 1$; получаем:

$$\varepsilon_{\text{вращ}} \sim \frac{\hbar^2}{Ma^2} \sim \frac{m}{M} \varepsilon_{\text{эл}}. \tag{4}$$

В силу того что $m << M$, выполняются неравенства:

$$\varepsilon_{\text{вращ}} << \varepsilon_{\text{кол}} << \varepsilon_{\text{эл}}. \tag{5}$$

Например, если $\varepsilon_{\text{эл}} \sim 10$ эВ и $m / M \sim 10^{-4}$, то $\varepsilon_{\text{кол}} \sim 0{,}1$ эВ, $\varepsilon_{\text{вращ}} \sim 10^{-3}$ эВ.

1.9. По порядку величины среднее расстояние r между частицами есть $r = n^{-1/3}$. Эту величину следует сравнить с неопределенностью координат частицы

$$\delta r \sim \hbar / \delta p \sim \hbar / \sqrt{m\varepsilon} \sim \hbar / \sqrt{mkT},$$

где k – постоянная Больцмана, T – температура. Считая, что при $T = T_0$ выполняется равенство $\delta r \approx r$, имеем

$$\hbar / \sqrt{mkT_0} \sim n^{-1/3}.$$

Отсюда находим:

$$kT_0 \sim \frac{\hbar^2 n^{2/3}}{m}.$$

Проведенная оценка показывает лишь, что при заданных m и n существует характерное значение температуры T_0, ниже которого следует ожидать существенных изменений свойств газа вследствие усиливающейся

роли квантовых эффектов. Конкретный же вид этих эффектов зависит от типа рассматриваемой системы частиц. Например, как выясняется в курсе статистической физики, для системы электронов проводимости металла условие $T << T_0$ справедливо практически во всем диапазоне температур существования твердого тела и означает, что свойства электронного газа определяются в основном принципом запрета Паули; энергия kT_0 имеет порядок величины так называемой энергии Ферми электронного газа. В применении к идеальному газу бозонов T_0 служит оценкой порядка величины так называемой температуры конденсации Бозе-Эйнштейна.

1.10. Релятивистская формула для энергии свободной частицы имеет вид:

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = \sqrt{(mc^2)^2 + (\mathbf{p}c)^2} = mc^2\sqrt{1+\left(\frac{p}{mc}\right)^2}\ .$$

При $p < mc$ справедливо разложение $\varepsilon(\mathbf{p})$ в ряд по степеням безразмерного отношения p/mc:

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = mc^2 + \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{8}\frac{p^2}{m}\left(\frac{p}{mc}\right)^2 + \ldots$$

Здесь второе слагаемое представляет собой нерелятивистскую кинетическую энергию $\varepsilon_{\text{кин}}$ частицы, а третье – ближайшую не равную нулю поправку. Эта поправка, как видим, имеет порядок $(p/mc)^2\varepsilon_{\text{кин}}$. В атоме водорода масштабом для $\varepsilon_{\text{кин}}$ служит единица энергии $Ry = me^4/2\hbar^2 \approx 13{,}6$ эВ (см. задачу 1.4). Оценим величину p/mc. Считая, что импульс p имеет порядок неопределенности импульса $\delta p = \hbar/a_B$, возникающей вследствие локализации электрона в атоме размером $a_B = \hbar^2/me^2$, находим:

$$p/mc \sim \hbar/a_B\, mc = e^2/\hbar c \approx 1/137$$

– величина, известная как постоянная тонкой структуры α (это же следует из проведенной в задаче 1.5 оценки скорости электрона $p/m = v$).

Следовательно, искомая релятивистская поправка к энергии атома водорода имеет масштаб $\alpha^2 Ry$. В случае одноэлектронных ионов с зарядом ядра $Z|e|$ следует заменить e^2 на Ze^2, так что поправка будет иметь заметно больший масштаб: $Z^4\alpha^2 Ry$.

1.11. Запишем выражение для магнитного поля, выразив $\mathbf{v}$ через $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$ – импульс электрона в нерелятивистском приближении:

$$\mathbf{B} = \mathbf{E}\times\mathbf{v}/c = -(\nabla U\times\mathbf{v})/ec = -(\nabla U\times\mathbf{p})/ecm.$$

Подставим это в формулу для энергии магнитного момента $\boldsymbol{\mu}$ во внешнем магнитном поле $\mathbf{B}$:

$$-\boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{B} = \frac{e\hbar}{mc}\mathbf{s}\cdot(\nabla U\times\mathbf{p})/ecm.$$

Учитывая, что $\hbar\mathbf{l} = \mathbf{r}\times\mathbf{p}$ и что при сферической симметрии поля потенциальная энергия $U(\mathbf{r})$ зависит только от модуля r радиус-вектора $\mathbf{r}$, так что $\nabla U(r) = \frac{dU}{dr}\frac{\mathbf{r}}{r}$, полученное выражение представим в виде:

$$\frac{\hbar}{m^2c^2}\,\frac{1}{r}\,\frac{dU}{dr}\,(\mathbf{r}\times\mathbf{p})\cdot\mathbf{s} \;=\; \frac{\hbar^2}{m^2c^2}\,\frac{1}{r}\,\frac{dU}{dr}\,(\mathbf{l}\cdot\mathbf{s}). \qquad (1)$$

Эту формулу можно применить для оценок порядка величины энергии *спин-орбитального взаимодействия* ($V^{\text{с.о.}}$), но приведенный вывод нельзя считать строгим и точным. Дело в том, что взаимодействие магнитного момента электрона с магнитным полем, возникающим при движении электрона в электрическом поле, является релятивистским квантовым эффектом и должно рассматриваться в релятивистской квантовой теории – с помощью уравнения Дирака. Последовательное рассмотрение приводит к выражению (1) с дополнительным множителем $1/2$ (и, кроме того, величины $\mathbf{l}$ и $\mathbf{s}$ определяются как операторы).

Для электрона в атоме водорода $U = -\dfrac{e^2}{r}$ и $\dfrac{dU}{dr} = \dfrac{e^2}{r^2}$, поэтому:

$$V^{\text{c.o.}} \sim \frac{e^2\hbar^2}{m^2c^2}\,\frac{1}{r^3}\,\mathbf{l}\cdot\mathbf{s}. \qquad (2)$$

Оценим масштаб этой величины, полагая, что $\mathbf{l}\cdot\mathbf{s} \sim 1$ и $r \sim a_B = \hbar^2/me^2$. Результат имеет вид: $V^{\text{c.o.}} \sim \alpha^2 Ry$ – величина того же порядка, что и релятивистская поправка в атоме водорода к кинетической энергии электрона (см. задачу 1.10).

В математическом аппарате квантовой механики физическим величинам (энергии, импульсу, моменту импульса и ряду других) сопоставляются операторы. В частности, соотношение (2) в последовательной релятивистской квантовой теории принимает вид операторного равенства:

$$\hat{V}^{\text{c.o.}} = \frac{e^2\hbar^2}{2m^2c^2}\,\frac{1}{r^3}\,\hat{\mathbf{l}}\cdot\hat{\mathbf{s}}. \qquad (3)$$

Оператор $\hat{\mathbf{l}}\cdot\hat{\mathbf{s}}$, как мы увидим в дальнейшем, имеет дискретный спектр. Это означает, что уровни энергии, найденные в нерелятивистском приближении (формула (3) в задаче 1.4), вследствие спин-орбитального взаимодействия расщепляются на подуровни – приобретают *тонкую структуру*. Полученная выше оценка ($V^{\text{c.o.}} \sim \alpha^2 Ry$) дает масштаб энергетических интервалов тонкой структуры в спектре уровней энергии атома водорода.

1.12. Планковская длина $l_{Pl} = (\hbar G/c^3)^{1/2} \sim 10^{-33}$ см, планковское время $t_{Pl} = l_{Pl}/c \sim 10^{-43}$ с, планковская масса $m_{Pl} = \hbar/l_{Pl}c \sim 10^{-5}$ г. Физический смысл этих масштабов в настоящее время полностью не раскрыт – ни экспериментально (интервалы длины 10^{-33} см и времени 10^{-43} с столь малы, что с экспериментальной точки зрения представляются совершенно недоступными), ни теоретически (из множества разрабатываемых версий еще не выбрана достаточно удовлетворительная

квантовая теория гравитации). Поскольку в указанных выражениях наряду с постоянной Планка и скоростью света присутствует гравитационная постоянная, ожидается, что на интервалах пространства-времени, меньших чем l_{Pl}, должны быть одинаково существенны как релятивистские квантовые эффекты, так и гравитационные явления; например, могут оказаться вероятными большие флуктуации метрики пространства-времени или даже изменения его размерности и других топологических характеристик. Окончательные ответы на подобные интригующие вопросы еще не известны.

2. АМПЛИТУДЫ ВЕРОЯТНОСТИ И ВЕКТОРЫ СОСТОЯНИЙ

Любое *состояние* $|\psi\rangle$ квантовой системы по отношению к возможным результатам f_k измерения той или иной физической величины f характеризуется совокупностью комплексных *амплитуд вероятности* A_k. Квадрат модуля амплитуды вероятности, $|A_k|^2 = W_k$, есть вероятность того, что в акте измерения величины f будет обнаружено значение $f = f_k$.

Основу математического аппарата квантовой теории составляет *принцип суперпозиции*:

$$|\psi\rangle = \sum_k A_k |k\rangle. \qquad \text{(I)}$$

Равенство (I) означает, что величины A_k в вычислениях выполняют роль компонент N-мерного вектора $|\psi\rangle$, представленного в виде разложения по ортонормированной системе N-мерных базисных векторов $|k\rangle$. К таким равенствам применимы все обычные правила линейной алгебры (а в пределе $N \to \infty$ – методы работы с разложениями по ортонормированным системам функций, рассматриваемые в курсе математической физики).

Для любых векторов состояния $|\psi\rangle$ и $|\phi\rangle$ определено скалярное произведение:

$$\langle\phi|\psi\rangle = \sum_k B_k^* A_k, \qquad \text{(II)}$$

где A_k – компоненты вектора $|\psi\rangle$, B_k^* – комплексно сопряженные компоненты B_k вектора $|\phi\rangle$. Справедливо равенство: $\langle\psi|\phi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle^*$. В силу условия ортонормировки, имеющего вид

$$\langle k|k'\rangle = \delta_{kk'}, \qquad \text{(III)}$$

коэффициенты A_k линейной комбинации (I) представляются скалярными произведениями $|\psi\rangle$ на $|k\rangle$:

$$\langle k|\psi\rangle = A_k . \qquad \text{(IV)}$$

Отсюда очевидна интерпретация таких скалярных произведений: $\langle k|\psi\rangle$ есть амплитуда вероятности «события k», (то есть обнаружения результата $f = f_k$) для системы, находящейся в состоянии $|\psi\rangle$; принято также говорить, что это есть амплитуда вероятности обнаружить состояние $|k\rangle$ у системы в состоянии $|\psi\rangle$. При этом из (III) следует, что всякое базисное состояние $|k'\rangle$ характеризуется достоверностью события с номером $k = k'$, то есть значение $f = f_{k'}$ в состоянии $|k'\rangle$ будет обнаруживаться при данной постановке опыта в каждом испытании. Поэтому базисные состояния в опыте по измерению какой-либо физической величины f называют состояниями *с определенными значениями* f.

Измерениям различных физических величин в математическом аппарате квантовой механики сопоставляются, вообще говоря, различные базисы. Переход к описанию новой постановки опыта дается заменой в (I) базисных векторов состояния $|k\rangle$ их разложением

$$|k\rangle = \sum_x |x\rangle\langle x|k\rangle \qquad \text{(V)}$$

по ортонормированной системе новых базисных векторов, обозначенных здесь как $|x\rangle$. При этом амплитуды вероятности x-событий и k-событий в одном и том же состоянии $|\psi\rangle$ оказываются связанными между собой соотношениями

$$\langle x|\psi\rangle = \sum_k \langle x|k\rangle \langle k|\psi\rangle \qquad \text{(VI)}$$

и

$$\langle k|\psi\rangle = \sum_x \langle k|x\rangle \langle x|\psi\rangle . \qquad \text{(VII)}$$

Формулы вида (VI), (VII) применимы также в ситуациях, не связанных непосредственно с измерениями физических величин; необходимо лишь, чтобы индексы x, k имели отношение к нумерации альтернативных результатов в двух различных наборах событий, физически допустимых для рассматриваемой системы.

Темы многих задач для этой главы и следующих за ней взяты нами из курса «Фейнмановские лекции по физике» и сборника задач к этому курсу [5,6], где заинтересованный читатель может найти непревзойденное по ясности обсуждение основных положений квантовой механики.

Следует, по-видимому, отметить, что применяемая нами повсеместно система обозначений Дирака [2] в отечественной учебной литературе использовалась сравнительно редко. Обычно векторы состояний, коэффициенты их разложения и базисные векторы таких разложений называют «волновыми функциями» (даже если речь идет всего лишь о паре чисел A_1, A_2, как, например, при описании спиновых состояний электрона) и не всегда отделяют обозначениями один класс математических объектов от другого. На наш взгляд, при первоначальном знакомстве со структурой квантовой теории символы и термины, основанные на применении дираковских скобок $|...\rangle$, $\langle...|$, заметно облегчают изучение предмета. В научных статьях на английском языке обозначения Дирака распространены достаточно широко, причем термины «волновая функция» (wave function) и «вектор состояния» (state vector) или более краткий термин «состояние» (state) для квантово-механических величин типа $|\psi\rangle$ используются почти одинаково часто.

2.1. ЗАДАЧИ

2.1. Рассматривается дифракция света на экране с двумя неодинаковыми отверстиями. Пусть известно, что вероятность прохождения фотона в детектор через отверстие «2» в 100 раз меньше, чем через отверстие «1». Во сколько раз дифракционный максимум вероятности превышает минимум?

2.2. Фотон распространяется без поглощения в интерферометре с двумя одинаковыми полупрозрачными зеркалами (рис. 2.1) и попадает в один из детекторов «1», «2», «3». Даны значения вероятности обнаружения фотона этими детекторами: $W_1 = W_2 = 0.25$, $W_3 = 0.5$. Как изменятся W_1 и W_2, если детектор «3» удалить? Пути распространения фотона считать идеально симметричными.

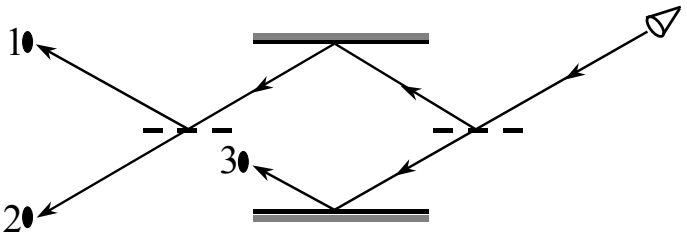

Рис. 2.1

2.3. Дана амплитуда вероятности $f(\mathbf{q})$ упругого рассеяния электрона на атоме, закрепленном в начале координат, как функция импульса $\hbar\mathbf{q} = \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2$, передаваемого электроном атому; $\mathbf{p}_1$ и $\mathbf{p}_2$ – векторы импульса электрона до и после акта рассеяния. Показать, что для атома, смещенного из начала координат на вектор $\mathbf{a}$, амплитуда рассеяния будет равна $e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{a}} f(\mathbf{q})$. Найти выражение для вероятности рассеяния на молекуле, образованной двумя одинаковыми атомами, расположенными в точках с координатами $\mathbf{a}$ и $\mathbf{b}$.

Указания. Величины $|\mathbf{a}|$ и $|\mathbf{b}|$ считать малыми по сравнению с расстояниями от начала координат до источника и детектора электронов. Возможностью многократного рассеяния пренебречь. Считать, что возникновение химической связи между атомами при образовании молекулы пренебрежимо мало изменяет одноатомную амплитуду рассеяния.

2.4. При условиях, указанных в задаче 2.3, найти вероятность рассеяния $\overline{W}$, усредненную по всевозможным направлениям оси двухатомной молекулы, считая все направления вектора расстояния между атомами $\mathbf{d} = \mathbf{a} - \mathbf{b}$ равновероятными.

2.5. Пусть вектор состояния частицы (или, в общем случае, какой-либо квантовой системы) в базисе, связанном с некоторыми альтернативными событиями «1» и «2», имеет вид

$$|A\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|2\rangle.$$

а) В двумерном пространстве состояний с указанным выше базисом найти с точностью до фазового множителя нормированный вектор состояния $|B\rangle$, ортогональный к $|A\rangle$. Определить вероятности событий «1» и «2» в найденном состоянии $|B\rangle$.

б) Выразить исходные базисные векторы состояний через $|A\rangle$ и $|B\rangle$, рассматривая последние как пару новых базисных состояний, связанную с некоторыми событиями «А» и «В». Найти вероятность событий «А» и «В» в состояниях $|1\rangle$ и $|2\rangle$.

в) Выписать матрицу $\hat{U}$ с элементами $U_{xk} = \langle x|k\rangle$, где $x = A, B$ и $k = 1,2$. Убедиться, что эта матрица унитарна.

г) Привести аргументы в пользу того, что состояние $|A\rangle$ нельзя интерпретировать так, будто некоторые из систем в статистическом ансамбле, описываемом вектором состояния $|A\rangle$, заведомо обладают «свойством 1», вызывающим события «1», а остальные системы этого ансамбля заведомо имеют «свойство 2» и поэтому вызывают события «2». Иными словами, убедиться что, *квантово-механическая суперпозиция базисных состояний не эквивалентна статистической смеси этих состояний.*

2.6. Рассматривается опыт, в котором фотон может быть испущен одним из двух когерентных источников (обозначенных на рис. 2.2 номерами $k = 1,2$). Пройдя через светоделитель – прозрачный слой вещества – или отразившись от него, фотон попадает в один из двух детекторов (отмеченных на рис. 2.2 номерами $x = 1,2$).

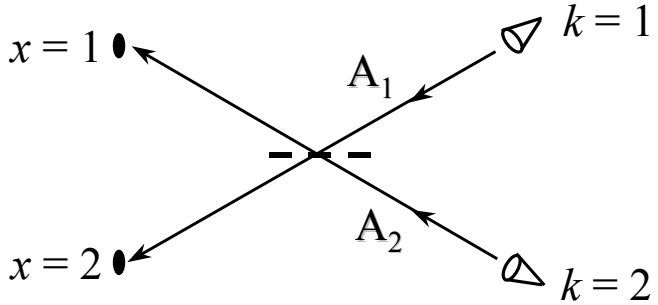

Рис. 2.2

Обозначим посредством $\langle x | k \rangle$ амплитуду вероятности обнаружения фотона детектором x при условии, что фотон был испущен источником k. Требуется исследовать соотношения между такими амплитудами, вытекающие из условия унитарности матрицы $\hat{U}$ с элементами $U_{xk} = \langle x | k \rangle$ при дополнительном условии $\det \hat{U} = 1$.

2.7. а) Показать, что матрица, равная произведению унитарных матриц, унитарна. б) Вычислить матрицу, описывающую распространение фотона через симметричный интерферометр с двумя одинаковыми светоделителями, рассмотренный в задаче 2.2 (см. рис. 2.1). в) Как изменятся значения вероятности регистрации фотона на выходах такого интерферометра, если в одно из его плеч ввести элемент, обеспечивающий набег фазы α? г) Обобщить результаты на случай, когда каждый из двух одинаковых симметричных светоделителей характеризуется заданным коэффициентом пропускания D по интенсивности (коэффициент отражения светоделителя при этом есть $R = 1 - D$).

2.8. Предположим, что состояние квантовой системы, состоящей из подсистем «1» и «2», имеет вид *прямого произведения* индивидуальных векторов состояния подсистем: $|\Phi\rangle = |\psi\rangle_1 \otimes |\chi\rangle_2$. Пусть $|a\rangle_1$ и $|b\rangle_2$ – наборы ортонормированных базисных состояний этих подсистем. Исходя из того, что символ $|a\rangle \otimes |b\rangle$ означает состояние, в котором с достоверностью происходят события «*a*» и «*b*», причем знак $\otimes$ обладает алгебраическими свойствами умножения, записать разложение $|\Phi\rangle$ по базисным состояниям системы, имеющим вид $|a\rangle_1 \otimes |b\rangle_2$. Интерпретировать коэффициенты разложения как амплитуды вероятности. Пользуясь указанным базисом, записать наиболее общее выражение для вектора состояния системы.

2.9. Рассматривается многоканальный интерферометр, схематично изображенный на рис. 2.3. Частица попадает через любой из N каналов k в один из N детекторов x. Каждый канал снабжен регистрирующим

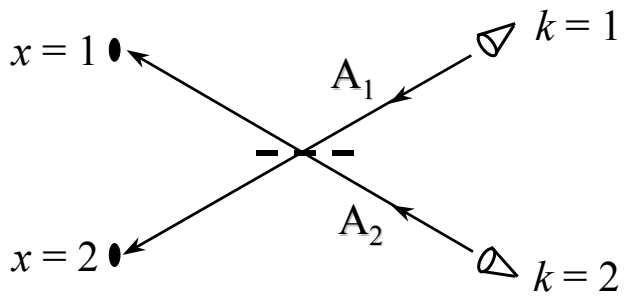

Рис. 2.3

устройством r, которое может с некоторой вероятностью обнаружить прохождение частицы через данный канал, не препятствуя ее движению к выходам интерферометра.

а) Записать разложение вектора состояния $|\Phi\rangle$ системы «интерферометр плюс регистрирующие устройства» по базисным состояниям вида $|k\rangle \otimes |r\rangle$, где $k = 1,..., N$, $r = 0, 1, ..., N$. Каждое из состояний этого вида с $r \neq 0$ описывает ситуацию, в которой частица с достоверностью попадает в канал с номером k и оказывается замеченной регистрирующим устройством с номером r; обозначение же $|k\rangle \otimes |0\rangle$, отвечающее номеру $r = 0$, сопоставляется состоянию, в котором частица при прохождении по каналу k остается не замеченной ни одним из регистрирующих устройств. Учесть корреляцию, заключающуюся в том, что частица может быть замечена только при $r = k$. Выписать условие нормировки для $|\Phi\rangle$.

б) Перейти к разложению по базисным состояниям вида $|x\rangle \otimes |r\rangle$, считая заданными коэффициенты $\psi_{xk} = \langle x|k\rangle$ разложения $|k\rangle$ по $|x\rangle$ (в состоянии $|x\rangle$ частица с достоверностью обнаруживается детектором с данным номером x). Выписать выражение для вероятности попадания частицы в детектор x и убедиться, что регистрация прохождения частицы по каналам интерферометра *подавляет интерференционные члены* в распределении вероятностей W_x.

2.10. В упрощенном варианте известного опыта Брауна и Твисса фотоны, приходящие от двух удаленных независимых источников света с длиной волны λ, регистрируются двумя фотоприемниками «a» и «b» (рис. 2.4; $R >> D >> d >> \lambda$). Ведется счет совпадений актов регистрации. Как скорость счета совпадений зависит от расстояния d между фотоприемниками? Можно ли найти D, зная λ и R?

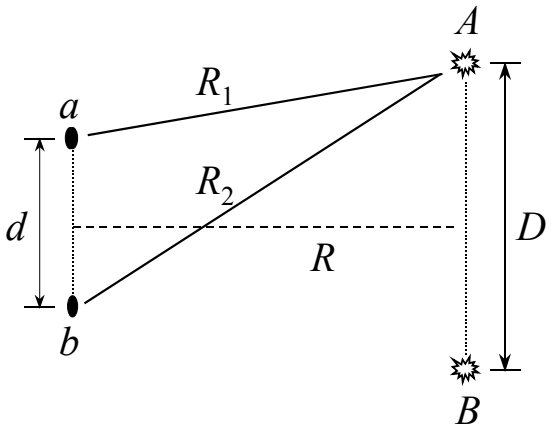

Рис. 2.4

Вместо указаний. Процитируем подробное, волнующее описание постановки вопроса, данное Р. Фейнманом в 1960-х годах в качестве одной из задач к курсу «Фейнмановские лекции по физике»:

«Диаметр ближайших к Земле звезд слишком мал, и его нельзя определить даже при помощи лучших современных телескопов, поскольку их угловое разрешение больше «углового диаметра» звезд. Диаметр звезд впервые определил Майкельсон, используя оптический интерферометр. Но точности этого метода едва хватает для самых близких звезд. В 1956 г. Браун и Твисс предложили новый метод для таких измерений, названный ими «методом корреляции интенсивностей» [Nature, **178**, 1046 (1956)]. Они опробовали его на звезде Сириус. Для этого они взяли два параболических рефлектора (авторы использовали зеркала от старых прожекторов), в фокусе каждого из которых был установлен фотоумножитель. Выходы умножителей соединялись коаксиальным кабелем с электронной схемой, которая регистрировала среднее значение от *произведения* токов в обоих умножителях (так называемую «корреляционную функцию»). По поведению этого произведения в зависимости от расстояния между зеркалами определялся угловой диаметр звезды. В то время многие физики утверждали, что этот метод не годится, поскольку свет – это фотоны, а каждый фотон попадает либо на одно зеркало, либо на другое, и никакой корреляции двух токов, следовательно, наблюдаться не может. Вы можете опровергнуть этот аргумент, рассматривая следующий идеализированный эксперимент. Два небольших источника света, скажем две лампочки A и B, помещаются на больших расстояниях от фотоумножителей a и b. Геометрические условия опыта показаны на рис. 2.4. С детекторами a и b соединены счетчики, сосчитывающие числа фотонов p_1 и p_2, регистрируемых в секунду каждым счетчиком. Счетчики a и b включены, кроме того, еще в «схему совпадений», которая регистрирует p_{12} – количество случаев в единицу времени, когда фотоэлектроны появляются

одновременно (т.е. в течение одного малого промежутка времени τ) в обоих умножителях. Пусть $\langle a|A\rangle$ – амплитуда появления фотона, испущенного источником A, в детекторе a в течение данного промежутка времени, определяемого разрешающей способностью схемы. Тогда $\langle a|A\rangle = c\,e^{i\alpha_1}$, где c – комплексная постоянная, а $\alpha_1 = kR_1$ (R_1 – расстояние от A до a, k – постоянная). Аналогично $\langle b|A\rangle = c\,e^{i\alpha_2}$, где $\alpha_2 = kR_2$, а R_2 – расстояние от A до b. Покажите, что скорость счета совпадений пропорциональна $2 + \cos 2k(R_2 - R_1)$. Как использовать этот результат для определения D, если R известно? Пренебрегайте тем фактом, что реальный процесс есть «наложение» таких простых модельных процессов, поскольку свет приходит из всех областей поверхности звезды, а не только из крайних, диаметрально противоположных точек».

2.2. РЕШЕНИЯ

2.1. Обозначим значения вероятности прохождения фотона через отверстия «1» и «2» как W_1 и W_2, соответственно. Тогда комплексные амплитуды вероятности для каждого из этих событий можно записать в виде

$$A_1 = \sqrt{W_1}\; e^{i\alpha_1}, \qquad A_2 = \sqrt{W_2}\; e^{i\alpha_2},$$

где α_1 и α_2 – некоторые действительные величины (фазы). В классической волновой теории комплексные амплитуды подобного вида сопоставляются световым волнам, приходящим в детектор от каждого из отверстий в экране. При этом предполагается, что детектор регистрирует интенсивность (поток энергии) суммарной волны, то есть величину, пропорциональную $\left|A_1 + A_2\right|^2$. Согласно же концепциям квантовой теории энергия световой волны поступает в детектор квантованными порциями (свет состоит из фотонов), так что сигнал детектора несет информацию о числе фотонов, обнаруживаемых в единицу времени.

Следовательно, это число, а с ним и вероятность W попадания фотона в детектор определяется указанным выше квадратом модуля суммарной амплитуды вероятности:

$$W = \left| A_1 + A_2 \right|^2 .$$

Здесь существенна только относительная фаза слагаемых (то есть разность фаз). Действительно, вынося за скобку одно из слагаемых под знаком модуля, например A_1, получаем

$$W = \left| A_1 \right|^2 \left| 1 + A_2 / A_1 \right|^2 = W_1 \left| 1 + \frac{\sqrt{W_2}}{\sqrt{W_1}} e^{i(\alpha_2 - \alpha_1)} \right|^2 .$$

Максимум вероятности реализуется при «синфазных» амплитудах A_1 и A_2 (когда $e^{i(\alpha_2 - \alpha_1)} = 1$), а минимум – в случае «противофазных» амплитуд (когда $e^{i(\alpha_2 - \alpha_1)} = -1$):

$$W_{\max} = W_1 \left(1 + \sqrt{W_2 / W_1} \right)^2, \quad W_{\min} = W_1 \left(1 - \sqrt{W_2 / W_1} \right)^2 .$$

Поскольку разность фаз $\alpha_2 - \alpha_1$ связана с разницей в «оптической длине» путей распространения света в детектор через отверстия «1» и «2», то при изменении положения детектора относительно отверстий наблюдаемая вероятность фотоотсчетов W будет периодически меняться от $W_{\min}$ до $W_{\max}$, как менялась бы интенсивность света при классическом описании явления дифракции электромагнитных волн.

Чем больше отношение $W_{\max} / W_{\min}$, тем выше контраст дифракционной картины, ярче проявляется интерференционный характер распределения вероятности фотоотсчетов. Очевидно, этому должно способствовать равенство величин W_1 и W_2. Значения W_1 и W_2, указанные в условии задачи, разнятся в сто раз, однако и в таком случае интерференция все еще существенна, так как отношение

$$W_{\max} / W_{\min} = 1{,}21 / 0{,}81 \approx 1{,}5$$

заметно превышает единицу.

2.2. Следуя представлению о том, любые частицы обладают «волновыми свойствами», сопоставим процессу распространения фотона волновую картину прохождения света. Это позволит нам определить относительные фазы амплитуд вероятности, отвечающих возможным путям движения фотона из источника в тот или иной детектор.

Так как в каждом испытании сигнал о регистрации фотона поступает только от одного из имеющихся детекторов, при наличии всех трех детекторов можно в каждом акте обнаружения фотона однозначно определить путь этого фотона. Соотнеся такие пути с приведенными в условии задачи значениями W_1, W_2, W_3, нетрудно установить, что в рассматриваемом интерферометре полупрозрачное зеркало (называемое светоделителем) делит падающий на него пучок света на два равных по интенсивности пучка, то есть вероятность отражения фотона от полупрозрачного зеркала, как и вероятность прохождения сквозь него, равна $1/2$. Тогда амплитудой вероятности отражения будет $\frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\alpha_{\text{отр}}}$, а амплитудой вероятности прохождения $\frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\alpha_{\text{прох}}}$ (фазы этих комплексных амплитуд нам не известны). С волновой точки зрения это означает, что амплитуда волны, падающей на светоделитель, в результате взаимодействия с ним приобретает множитель $1/\sqrt{2}$, и, кроме того, у волны возникает некоторый набег фазы $\alpha_{\text{отр}}$ при отражении или $\alpha_{\text{прох}}$ при прохождении.

После удаления детектора «3» возникает существенная неопределенность в том, каким из двух путей фотон прибывает в обнаруживающий его приемник. На волновом языке это соответствует интерференции волн, поступающих как в приемник «1», так и в приемник «2». В последний приходят две волны, испытавшие при распространении через светоделители один акт отражения и один акт прохождения; модули их амплитуд равны $\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2}} = \frac{1}{2}$. Заметим теперь, что эти две волны в силу симметрии путей их распространения должны быть синфазными. В таком случае нам нет необходимости уточнять значения фаз; для вычисления

искомой вероятности W_2 достаточно возвести в квадрат сумму найденных модулей амплитуд без учета общего фазового множителя: $W_2 = \left| 1/2 + 1/2 \right|^2 = 1.$

Пути, которые ведут в приемник «1», не обладают подобной симметрией: на одном из них происходит двукратное отражение от светоделителей, на другом – двукратное прохождение, и, следовательно, этим путям соответствует пока не известная нам разность фаз $2\alpha_{\text{отр}} - 2\alpha_{\text{прох}}$. Однако для вычисления вероятности W_1 теперь можно воспользоваться условием $W_1 + W_2 = 1$. Таким образом, $W_1 = 0$. В рамках волновой картины это означает, что детектор «1» не обнаруживает никаких волн; значит, в него приходят две противофазные волны!

В этих результатах привлекает внимание следующий факт. При наличии трех детекторов наблюдались такие значения вероятностей, какие и можно было ожидать, если наглядно представлять себе фотоны в виде некоторых «материальных точек» – частиц. Поскольку волновая картина предсказывает практически одновременную регистрацию света *всеми* детекторами (аналогично одновременному приему программы радиостанции любым числом приемников), а на самом деле фотон всякий раз обнаруживается *только одним* из детекторов, то, казалось бы, следует картину волн полностью отвергнуть и в дальнейшем твердо придерживаться представления о фотонах как о частицах. Однако, подобная классическая точка зрения неизбежно ведет к абсолютно ошибочному предсказанию результатов опыта с удаленным детектором «3»: $W_1 = W_2 = 0.5$ вместо соответствующих действительности значений $W_1 = 0$ и $W_2 = 1$. При удалении детектора «3» *открывается второй путь* распространения фотонов из источника в детектор «1», но вероятность W_1 в результате этого не увеличивается, а *обращается в нуль*! Как это может быть? На роль единственно приемлемого объяснения здесь, несомненно, претендует картина интерференции волн, но и прежний аргумент против волнового представления о фотонах сохраняет свою силу.

Мы вынуждены заключить, что никакого наглядного представления о фотоне, которое во всех случаях служило бы надежной опорой правильных предсказаний, *не существует*. «Корпускулярно-волновой

дуализм», если под этим понимать попытку объяснения в привычных классических терминах странностей квантового поведения частиц, противоречив и не вносит желаемой ясности. Извлечь из него пользу можно (как это и делается в рассматриваемых здесь задачах), если слова о «волновом поведении» частиц воспринимать не как «объяснение», а в качестве определенного рода инструкции: сигналы детекторов следует интерпретировать как счет частиц, а вероятности отсчетов вычислять посредством комплексных амплитуд – подобно интенсивности волны. Подчеркнем, что такой способ действий не означает отступления от ранее принятого в естественных науках уровня логической строгости, поскольку, как мы убедимся в дальнейших примерах, полуинтуитивные методы в конечном итоге сменяются последовательным математическим аппаратом квантовой механики и лишенной каких-либо внутренних противоречий статистической интерпретацией комплексных амплитуд и волновых функций.

Избавление от парадоксов дается, таким образом, ценой сознательного отказа от вопросов типа «что представляет собой фотон?». Ответы на подобные вопросы если и существуют, то лежат вне компетенции квантовой механики. Не исключено, что понятие о квантовых микрообъектах, появившееся в естествознании все-таки относительно недавно, является пока еще глубоко феноменологическим. Может быть с течением времени оно испытает эволюцию столь же серьезную, как, например, переход от древних гипотез о трех элементах мироздания к современным теориям элементарных частиц. С такой точки зрения очевидно, что изучение квантовой механики – это прежде всего овладение ее статистическими методами и математическим аппаратом, а не бесчисленные попытки буквальной интерпретации явлений в рамках дилеммы «волна-частица», почти неминуемо обреченные на неудачу.

2.3. Представив себе движение электрона как процесс распространения некоторой волны – «волны де Бройля», – вычислим набег фазы волны, приходящей в детектор при рассеянии электрона на атоме, который возникает в результате смещения атома из начала координат. Такое изменение фазы запишется как

$$\Delta\alpha = 2\pi\Delta r/\lambda,$$

где $\lambda = 2\pi\hbar/p$ – длина волны де Бройля, $\Delta r = (R_1 + R_2) - (r_1 + r_2)$ – изменение длины пути (рис. 2.5.). С помощью единичных векторов $\mathbf{n}_1 = \mathbf{r}_1/r_1 = \mathbf{p}_1/p$ и $\mathbf{n}_2 = \mathbf{r}_2/r_2 = \mathbf{p}_2/p$ можно записать следующие соотношения для величины векторов расстояний $\mathbf{R}_1 = \mathbf{r}_1 + \mathbf{a}$ и $\mathbf{R}_2 = \mathbf{r}_2 - \mathbf{a}$:

$$R_1^2 = r_1^2 + 2\mathbf{r}_1\cdot\mathbf{a} + a^2 \approx r_1^2 + 2\mathbf{r}_1\cdot\mathbf{a}, \quad R_1 \approx r_1\sqrt{1 + 2\mathbf{n}_1\cdot\mathbf{a}/r_1} \approx r_1 + \mathbf{n}_1\cdot\mathbf{a};$$

$$R_2^2 = r_2^2 - 2\mathbf{r}_2\cdot\mathbf{a} + a^2 \approx r_2^2 - 2\mathbf{r}_2\cdot\mathbf{a}, \quad R_2 \approx r_2\sqrt{1 - 2\mathbf{n}_2\cdot\mathbf{a}/r_2} \approx r_2 - \mathbf{n}_2\cdot\mathbf{a}.$$

Отсюда находим, что $\Delta r = \mathbf{n}_1\cdot\mathbf{a} - \mathbf{n}_2\cdot\mathbf{a} = (\mathbf{p}_1\cdot\mathbf{a} - \mathbf{p}_2\cdot\mathbf{a})/p = \hbar\mathbf{q}\cdot\mathbf{a}/p$, а искомое изменение фазы есть $\Delta\alpha = \mathbf{q}\cdot\mathbf{a}$. Этот набег фазы можно при необходимости учесть посредством фазового множителя $e^{i\Delta\alpha}$ в выражении для амплитуды рассеяния: $f(\mathbf{q})$ заменяется на $e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{a}} f(\mathbf{q})$.

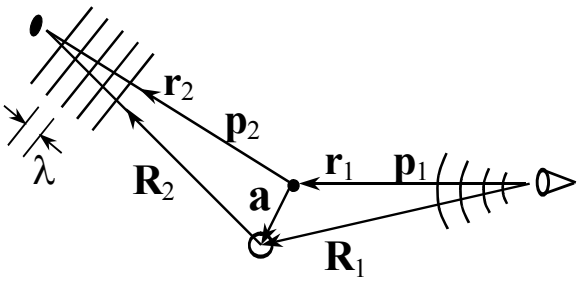

Рис. 2.5

При рассмотрении рассеяния электрона на двухатомной молекуле обозначим амплитуды рассеяния на одиночных атомах в точках **a** и **b** соответственно как A и B и воспользуемся полученным выше результатом:

$$A = e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{a}} f(\mathbf{q}), \qquad B = e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{b}} f(\mathbf{q}).$$

В рамках «волновых» представлений об электроне мы можем считать, что детектор реагирует на интенсивность суммарной волны, приходящей сразу от обоих атомов в молекуле, поскольку в рассматриваемом опыте нет данных, которые указывали бы, на каком именно из двух атомов реализуется акт рассеяния в каждом отдельном испытании. В квантовой теории такой ситуации сопоставляется суммарная амплитуда вероятности $A + B$; квадрат модуля этой величины определяет искомую вероятность рассеяния W:

$$W = |A + B|^2 = |A|^2 + |B|^2 + 2|A||B|\cos\varphi,$$

где $\varphi = \mathbf{q}\cdot\mathbf{a} - \mathbf{q}\cdot\mathbf{b} \equiv \mathbf{q}\cdot\mathbf{d}$ – разность фаз амплитуд A и B, $\mathbf{d} = \mathbf{a} - \mathbf{b}$ – вектор расстояния между атомами (ядрами) в молекуле. С учетом указанного выражения для разности фаз окончательно получаем:

$$W = 2\left|f(\mathbf{q})\right|^2 \left(1 + \cos(\mathbf{q}\cdot\mathbf{d})\right).$$

Слагаемое, пропорциональное косинусу разности фаз, придает этому распределению вероятности итерференционный характер: при $\mathbf{q}\cdot\mathbf{d} = 0, \pm 2\pi, \ldots$ значение W вероятности рассеяния на молекуле, образованной двумя одинаковыми атомами, в *четыре* раза больше, чем в случае рассеяния на одиночном атоме, а при $\mathbf{q}\cdot\mathbf{d} = \pm\pi, \pm 3\pi, \ldots$ вероятность W обращается в нуль.

Такая интерференция становится особенно существенной при рассеянии частиц на кристалле, то есть на совокупности большого числа n одинаковых атомов, регулярно расположенных в пространстве. В этом случае условие синфазности одноатомных амплитуд рассеяния, как можно показать, выполняется только для дискретного множества значений вектора $\mathbf{q}$ (называемых векторами обратной решетки); каждому из них соответствует значение вероятности W, пропорциональное n^2, поскольку при условии синфазности $W \sim \left|f + f + \ldots + f\right|^2 = \left|nf\right|^2$. Эти значения вероятности на много порядков превышают вероятность рассеяния с произвольным $\mathbf{q}$, не принадлежащим множеству векторов обратной решетки, так что фактически в опыте с упругим рассеянием происходят акты рассеяния только в определенных дискретных направлениях. Данное явление называется дифракцией частиц на кристаллах.

2.4. Усредним выражение для W из решения задачи 2.3 по направлениям вектора **d**:

$$\overline{W} = \int \frac{d\Omega}{4\pi} W = 2\left|f(\mathbf{q})\right|^2 \left(1 + \frac{\sin qd}{qd}\right),$$

где $d\Omega = \sin\theta\, d\theta\, d\varphi$, θ и φ – углы сферической системы координат с полярной осью вдоль $\mathbf{q}$.

Из этой формулы видно, что по результатам измерений вероятности $\overline{W}$ при различных значениях переданного импульса $\hbar q$ можно найти расстояние d между ядрами в двухатомной молекуле. В случае многоатомных молекул имеется подобная же ситуация; на этом основаны дифракционные методы исследования строения молекул.

2.5. а) Исходя из принципа суперпозиции, запишем искомое состояние $|B\rangle$ в виде линейной комбинации базисных состоянии $|1\rangle$, $|2\rangle$ с неизвестными коэффициентами B_1 и B_2:

$$|B\rangle = B_1 |1\rangle + B_2 |2\rangle.$$

Условие ортогональности, $\langle A|B\rangle = 0$, где

$$|A\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |2\rangle, \qquad (1)$$

означает, что $B_1/\sqrt{2} + B_2/\sqrt{2} = 0$; отсюда следует равенство $B_1 = -B_2$. Наряду с этим равенством должно выполняться условие нормировки, $\langle B|B\rangle = 1$. Оно, оставляя фазы чисел B_1 и B_2 произвольными, накладывает на модули этих чисел следующее ограничение: $|B_1|^2 + |B_2|^2 = 1$. Следовательно, с точностью до коэффициента вида $e^{i\alpha}$ с произвольным вещественным значением α (такой коэффициент называют фазовым множителем) искомый вектор состояния есть

$$|B\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |2\rangle. \qquad (2)$$

Распределение вероятности W_k событий $k = 1,2$ в состоянии $|B\rangle$ дается квадратами модулей коэффициентов при базисных векторах $|k\rangle$ в (2):

$$W_1 = |B_1|^2 = 1/2, \qquad W_2 = |B_2|^2 = 1/2.$$

Такими же будут численные значения W_k в состоянии $|A\rangle$.

б) Составив сумму, а затем и разность выражений (1) и (2), находим, что

$$|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|A\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|B\rangle, \tag{3}$$

$$|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|A\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|B\rangle. \tag{4}$$

Коэффициенты при $|A\rangle$ и $|B\rangle$ имеют смысл амплитуд вероятности событий «A» и «B». Значения вероятности (квадраты модулей амплитуд вероятности) событий «A» и «B» в состояниях (3), (4) одинаковы и равны $1/2$.

в) Скалярно умножая (3) и (4) на векторы состояний $|A\rangle$ и $|B\rangle$ с учетом условия ортонормировки ($\langle x'|x\rangle = \delta_{x'x}$, где $x', x = A, B$), находим матрицу $\hat{U}$ с элементами $U_{xk} = \langle x|k\rangle$. Это просто коэффициенты в (3) и (4):

$$\hat{U} = \begin{pmatrix} \langle A|1\rangle = 1/\sqrt{2} & \langle A|2\rangle = 1/\sqrt{2} \\ \langle B|1\rangle = 1/\sqrt{2} & \langle B|2\rangle = -1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \tag{5}$$

Элементы эрмитово сопряженной матрицы, $\hat{U}^+ = \hat{U}^{*T}$, в силу равенства $\langle x|k\rangle^* = \langle k|x\rangle$ имеют смысл амплитуд вероятности событий «1», «2» в состояниях $|A\rangle$, $|B\rangle$ и поэтому совпадают с коэффициентами в (1), (2):

$$\hat{U}^+ = \begin{pmatrix} \langle 1|A\rangle = 1/\sqrt{2} & \langle 1|B\rangle = 1/\sqrt{2} \\ \langle 2|A\rangle = 1/\sqrt{2} & \langle 2|B\rangle = -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}. \tag{6}$$

Для проверки того, что матрицы $\hat{U}$ и $\hat{U}^+$ взаимно обратны, достаточно их перемножить друг с другом:

$$\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Таким образом, выполняется условие унитарности: $\hat{U}^+ = \hat{U}^{-1}$.

г) Обсудим на рассматриваемом примере один из самых трудных для понимания и существенных аспектов статистической интерпретации квантово-механического принципа суперпозиции. Поскольку состоянию в виде линейной комбинации

$$|A\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|2\rangle,$$

сопоставляется картина равновероятных событий «1» и «2», то возникает искушение считать $|A\rangle$ просто описанием статистической смеси систем, обладающих некоторым свойством «А» и в то же время подразделяющихся по какому-то другому признаку на два типа: $k = 1,2$. Обращаем внимание читателя на то, что такая интерпретация линейных комбинаций векторов состояния *не верна*. Действительно, если бы она была допустима, то отдельным слагаемым в (1) соответствовали бы подансамбли $|1\rangle$ и $|2\rangle$ статистического ансамбля $|A\rangle$, то есть системы, которые с достоверностью обладают одним из признаков «1», «2» и в то же время с достоверностью имеют свойство «А». На самом же деле, как видно из (3) и (4), системы в состояниях $|1\rangle$ и $|2\rangle$ не обладают с достоверностью свойством «А» – в этих состояниях свойство «В» обнаруживается с той же вероятностью, что и «А».

Сравнивая друг с другом равенства (3) и (4) или (1) и (2), мы видим, что в квантовой механике свойства статистического ансамбля формируются в зависимости от относительных фаз слагаемых; это обстоятельство не находит адекватного отражения в классическом представлении о статистической смеси.

Связь приведенных выше формальных доводов с более конкретной физической картиной можно проиллюстрировать, несколько забегая вперед, целым рядом примеров. Так, если $|1\rangle$ и $|2\rangle$ – состояния электрона, локализованные вблизи одинаковых атомов «1» и «2», соответственно, то $|A\rangle$ и $|B\rangle$, определяемые формулами (1) и (2), будут иметь смысл состояний, отвечающих двум дискретным уровням энергии электрона в образованной этими атомами молекуле; переходя в состояние с определенной энергией, электрон утрачивает принадлежность к какому-либо одному из атомов. Представление о подобном «обобществлении» электрона сразу многими атомами играет важную роль в задачах химии и физики твердого тела, но не имеет адекватного истолкования в терминах классической физики. Другой пример: если $|1\rangle$ и $|2\rangle$ – состояния

электрона с определенными значениями проекции спина на ось z, то формулами (1) и (2) задаются состояния $|A\rangle$ и $|B\rangle$ с определенными значениями проекции спина на ось x; обладая определенной проекцией спина на какое-нибудь одно направление, электрон, следовательно, уже не обладает подобным свойством в отношении других направлений. Наконец, укажем пример, в котором особенно легко допустить неточность интерпретации. В квантовой механике состояние $|\mathbf{p}\rangle$ электрона с определенным импульсом имеет вид суперпозиции состояний $|\mathbf{r}\rangle$ с определенными координатами:

$$|\mathbf{p}\rangle = \sum_{\mathbf{r}} |\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}|\mathbf{p}\rangle,$$

где $\langle\mathbf{r}|\mathbf{p}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}$ – амплитуда вероятности значений координат $\mathbf{r}$ для электрона в состоянии с определенным импульсом $\mathbf{p}$, N – число (стремящееся к бесконечности) различных значений $\mathbf{r}$ или $\mathbf{p}$. В свою очередь, состояния с определенными координатами имеют вид аналогичных линейных комбинаций состояний с определенным импульсом; они содержат комплексно сопряженные коэффициенты $\langle\mathbf{p}|\mathbf{r}\rangle = \langle\mathbf{r}|\mathbf{p}\rangle^*$:

$$|\mathbf{r}\rangle = \sum_{\mathbf{p}} |\mathbf{p}\rangle\langle\mathbf{p}|\mathbf{r}\rangle.$$

Из этих выражений видно, что в состоянии с определенными координатами все значения импульса равновероятны, а в состоянии с определенным импульсом $|\mathbf{p}\rangle$ равновероятны все значения координат – электрон «размазан» по всему пространству. Состояния $|\mathbf{p}\rangle$ в квантовой теории успешно используются для описания статистически однородных пучков частиц в опытах по наблюдению рассеяния или дифракции. С точки же зрения экспериментатора, такие пучки – это, вне всякого сомнения, потоки очень маленьких материальных частичек, что бы там ни происходило в актах рассеяния на микроскопических расстояниях. Возникает соблазн представлять себе квантовое состояние $|\mathbf{p}\rangle$ как

статистический ансамбль обычных «материальных точек», имеющих один и тот же импульс **p** и просто-напросто разбросанных в пространстве по различным точкам **r** . Однако, как мы уже убедились, квантовые состояния не следует отождествлять с классическими статистическими ансамблями. Рассматриваемые здесь линейные комбинации отличаются от предшествующих лишь числом слагаемых и видом фазовых множителей, поэтому к ним в той же степени, что и выше, неприменима никакая классическая трактовка. Следовательно, при обсуждении состояний, отличных от $|\mathbf{r}\rangle$, мы должны избегать представления об электронах, как о точках.

2.6. Замечаем, что для произвольной матрицы вида

$$\hat{U} = \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} \\ U_{21} & U_{22} \end{pmatrix}$$

с не равным нулю определителем обратная матрица есть

$$\hat{U}^{-1} = \begin{pmatrix} U_{22}/d & -U_{12}/d \\ -U_{21}/d & U_{11}/d \end{pmatrix},$$

где $d = \det\hat{U} = U_{11}U_{22} - U_{12}U_{21}$ – определитель матрицы $\hat{U}$. Эрмитово сопряженная к $\hat{U}$ матрица, $\hat{U}^{+} = \hat{U}^{T*}$, имеет вид

$$\hat{U}^{+} = \begin{pmatrix} U_{11}^{*} & U_{21}^{*} \\ U_{12}^{*} & U_{22}^{*} \end{pmatrix}.$$

Условие унитарности, $\hat{U}^{+} = \hat{U}^{-1}$, означает поэтому, что элементы U_{xk} связаны друг с другом соотношениями

$$\begin{aligned} U_{11}^{*} &= U_{22}/d, & U_{22}^{*} &= U_{11}/d, \\ U_{21}^{*} &= -U_{12}/d, & U_{12}^{*} &= -U_{21}/d. \end{aligned} \qquad (1)$$

Из этих соотношений, как нетрудно убедиться, следует равенство $|d| = 1$, то есть определитель произвольной унитарной матрицы всегда может быть записан в виде некоторого фазового множителя: $d = e^{i\delta}$ (для унитарной

матрицы произвольного порядка равенство $d = e^{i\delta}$ непосредственно следует из того, что $\hat{U}^{+}\hat{U} = \hat{1}$). Тогда матрица $\hat{u} = e^{-i\delta/2}\hat{U}$ будет не только унитарной, но и *унимодулярной* – ее определитель равен единице. Таким образом, исходную унитарную матрицу $\hat{U}$ можно представить в виде

$$\hat{U} = e^{i\delta/2}\,\hat{u},$$

где $\hat{u}$ – унитарная унимодулярная матрица.

Заметим теперь, что матрицы $\hat{U}$ и $\hat{u}$ ведут к одинаковым результатам при вычислении вероятностей, и в этом смысле они эквивалентны. Действительно, пусть состояние $|\psi\rangle$ фотона в рассматриваемой задаче описывается амплитудами вероятности A_1 и A_2, связанными с наличием двух источников (так что $|A_1|^2$ и $|A_2|^2$ – значения вероятности испускания фотона источником с номером $k = 1$ или $k = 2$, соответственно):

$$|\psi\rangle = \sum_k A_k\,|k\rangle.$$

Тогда амплитуда вероятности регистрации фотона детектором с номером x есть:

$$\langle x|\psi\rangle = \sum_k A_k\,\langle x|k\rangle = \sum_k U_{xk}\,A_k = \sum_k u_{xk}\,\widetilde{A}_k, \qquad (2)$$

где мы ввели новые амплитуды, $\widetilde{A}_k = e^{i\delta/2}A_k$, отличающиеся от исходных только постоянным фазовым множителем. Такой множитель не меняет величину разности фаз амплитуд A_1, A_2 и не сказывается на значениях вероятности $|A_1|^2$ и $|A_2|^2$ появления фотона на том или ином «входе» светоделителя, поэтому состояния $|\psi\rangle$ и $|\widetilde{\psi}\rangle = e^{i\delta/2}|\psi\rangle$ физически эквивалентны.

Из равенств (2) видно, что амплитуды $\langle x|\psi\rangle$, которые можно рассматривать как описание состояния фотона на каждом из двух выходов светоделителя, связаны с амплитудами $\widetilde{A}_k$ на входах посредством

коэффициентов u_{xk}. Следовательно, матрица $\hat{u}$ или, что то же самое, *матрица* $\hat{U}$ *при дополнительном условии* $\det\hat{U}=1$ вполне описывает распространение фотона через светоделитель. Положив $d=1$ в формулах (1), получаем искомые соотношения между матричными элементами:

$$U_{22}^{*}=U_{11}, \qquad U_{12}^{*}=-U_{21}, \tag{3}$$

Величины U_{11}, U_{22} здесь имеют смысл амплитудных коэффициентов отражения фотона первой или второй поверхностью светоделителя соответственно, U_{12} и U_{21} – амплитудные коэффициенты прохождения фотона сквозь светоделитель с одной стороны на другую.

2.7. а) Пусть матрицы одинакового формата $\hat{U}_1$ и $\hat{U}_2$ унитарны, то есть $\hat{U}_1^{+}=\hat{U}_1^{-1}$ и $\hat{U}_2^{+}=\hat{U}_2^{-1}$. Тогда

$$(\hat{U}_2\hat{U}_1)^{+}=\hat{U}_1^{+}\hat{U}_2^{+}=\hat{U}_1^{-1}\hat{U}_2^{-1}=(\hat{U}_2\hat{U}_1)^{-1}.$$

Таким образом, $\hat{U}_2\hat{U}_1$ – унитарная матрица.

б) Согласно результатам задачи 2.6, распространение фотона в интерферометре через первый светоделитель можно описывать матрицей $\hat{U}_1$ с элементами, удовлетворяющими соотношениям

$$U_{22}^{*}=U_{11}, \qquad U_{12}^{*}=-U_{21}.$$

Учтем теперь, что в случае симметричного светоделителя, свойства которого по отношению к фотону одинаковы независимо от того, с какой из двух сторон на него падает свет, должны выполняться также равенства

$$U_{22}=U_{11}, \qquad U_{12}=U_{21}.$$

Следовательно, U_{11} – вещественная величина, U_{12} – чисто мнимая. Модули этих величин должны быть равны $1/\sqrt{2}$, поскольку мы рассматриваем светоделитель, пропускающий или отражающий фотон с вероятностью $1/2$. Таким образом, допустимо выбрать следующие значения для элементов матрицы $\hat{U}_1$ (указанные числа можно было бы взять и с противоположным знаком):

$$U_{22} = U_{11} = 1/\sqrt{2}\,, \qquad U_{12} = U_{21} = i/\sqrt{2}\,.$$

Второй светоделитель идентичен первому и поэтому описывается матрицей $\hat{U}_2 = \hat{U}_1$. Искомая матрица величин U_{xk} для интерферометра в целом имеет вид:

$$\hat{U} = \hat{U}_2\,\hat{U}_1 = \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix}.$$

Вычисляя с помощью этой матрицы амплитуды вероятности ψ_1 и ψ_2 регистрации фотона одним из двух детекторов на выходе интерферометра по формуле

$$\psi_x = \sum_k U_{xk}\, A_k\,, \qquad x, k = 1, 2 \tag{1}$$

со значениями амплитуд на входе интерферометра $A_1 = 1$ и $A_2 = 0$, находим: $\psi_1 = 0$, $\psi_2 = i$. Соответствующие вероятности есть:

$$W_1 = \left|\psi_1\right|^2 = 0\,, \qquad W_2 = \left|\psi_2\right|^2 = 1\,.$$

Они, как и должно быть, совпадают с полученными в задаче 2.2.

в) Распространение фотона от первого светоделителя ко второму по двум путям в отсутствие разности фаз на этих путях ($\alpha = 0$) можно было бы описывать унитарной матрицей

$$\begin{pmatrix} e^{i\beta} & 0 \\ 0 & e^{i\beta} \end{pmatrix} = e^{i\beta}\,\hat{1},$$

где β – фаза, равная оптической длине пути между светоделителями. Однако общий для всех амплитуд фазовый множитель $e^{i\beta}$ не сказывается на значениях вероятностей; опустив его, мы возвращаемся к рассмотренной выше матрице: $\hat{U} = \hat{U}_2\,\hat{1}\,\hat{U}_1 = \hat{U}_2\,\hat{U}_1$.

Наличие же не равной нулю разности фаз ($\alpha \neq 0$, рис. 2.6) можно учесть с помощью унитарной матрицы вида

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\alpha} \end{pmatrix}.$$

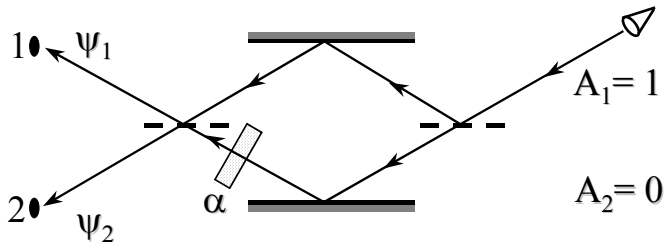

Рис. 2.6

Для того чтобы иметь дело с унитарной унимодулярной матрицей, здесь также следует выделить (и затем отбросить) общий множитель, равный $e^{i\alpha/2}$. Тогда распространение фотона между светоделителями будет описываться матрицей

$$\hat{U}_3 = \begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2} & 0 \\ 0 & e^{i\alpha/2} \end{pmatrix},$$

а матрица величин U_{xk} для всего интерферометра в целом примет вид

$$\hat{U} = \hat{U}_2 \hat{U}_3 \hat{U}_1 = \begin{pmatrix} -i\sin(\alpha/2) & i\cos(\alpha/2) \\ i\cos(\alpha/2) & i\sin(\alpha/2) \end{pmatrix}.$$

Формула (1) с $A_1 = 1$ и $A_2 = 0$ дает теперь следующие значения вероятности обнаружения фотона на выходах интерферометра:

$$W_1 = |\psi_1|^2 = \sin^2(\alpha/2), \qquad W_2 = |\psi_2|^2 = \cos^2(\alpha/2).$$

г) В случае симметричных светоделителей с заданной вероятностью пропускания D выбираем следующие значения элементов матриц $\hat{U}_1 = \hat{U}_2$:

$$U_{22} = U_{11} = \sqrt{1-D} = \sqrt{R}, \qquad U_{12} = U_{21} = i\sqrt{D},$$

где $R = 1 - D$ есть вероятность отражения фотона от светоделителя. Матрица $\hat{U} = \hat{U}_2\hat{U}_3\hat{U}_1$ становится равной

$$\hat{U} = \begin{pmatrix} \exp(-\frac{i\alpha}{2}) - 2D\cos\frac{\alpha}{2} & 2i\sqrt{RD}\cos\frac{\alpha}{2} \\ 2i\sqrt{RD}\cos\frac{\alpha}{2} & \exp\frac{i\alpha}{2} - 2D\cos\frac{\alpha}{2} \end{pmatrix}. \qquad (2)$$

При $A_1 = 1,\ A_2 = 0$ по формуле (1) с учетом (2) находим:

$$W_1 = |\psi_1|^2 = \left| e^{-i\alpha/2} - 2D\cos(\alpha/2) \right|^2 = R^2 + D^2 - 2RD\cos\alpha \ ,$$

$$W_2 = |\psi_2|^2 = \left| 2i\sqrt{RD}\cos(\alpha/2) \right|^2 = 2RD(1+\cos\alpha) \ . \qquad (3)$$

2.8. Разложив векторы состояния подсистем по базисным состояниям этих подсистем,

$$|\psi\rangle = \sum_a \psi_a |a\rangle, \qquad |\chi\rangle = \sum_b \chi_b |b\rangle,$$

получаем:

$$|\psi\rangle_1 \otimes |\chi\rangle_2 = \left(\sum_a \psi_a |a\rangle_1 \right) \otimes \left(\sum_b \chi_b |b\rangle_2 \right).$$

Это выражение принимает вид разложения по базисным состояниям системы $|a\rangle_1 \otimes |b\rangle_2$, как того требует квантово-механический принцип суперпозиции, если соответствующим образом перегруппировать слагаемые и сомножители (тем самым мы убеждаемся, что свойства операции $\otimes$ как операции умножения диктуются принципами квантовой теории):

$$|\psi\rangle_1 \otimes |\chi\rangle_2 = \sum_a \sum_b \psi_a \chi_b \, |a\rangle_1 \otimes |b\rangle_2 .$$

Отметим, что для того, чтобы коэффициенты такого разложения (то есть $\psi_a \chi_b$) можно было рассматривать как скалярные произведения вектора состояния системы $|\Phi\rangle$ на базисные состояния вида $|a\rangle_1 \otimes |b\rangle_2$, следует считать скалярное произведение $|a'\rangle_1 \otimes |b'\rangle_2$ на $|a\rangle_1 \otimes |b\rangle_2$ равным величине

$$\langle a|a'\rangle_1 \, \langle b|b'\rangle_2 = \delta_{aa'} \delta_{bb'} .$$

Согласно принципам квантовой механики, коэффициент $\psi_a \chi_b$ имеет смысл амплитуды вероятности того, что подсистема «1» обнаружится в состоянии $|a\rangle$ и при этом подсистема «2» обнаружится в состоянии $|b\rangle$. Вероятность такого события «*a* и *b*» есть

$\left|\psi_a\chi_b\right|^2 = \left|\psi_a\right|^2 \left|\chi_b\right|^2$, то есть она равна произведению вероятностей, относящихся к подсистемам в отдельности. Это означает, что в состоянии системы вида $\left|\psi\right\rangle_1 \otimes \left|\chi\right\rangle_2$ подсистемы «1» и «2» статистически независимы – они обладают не зависящими друг от друга распределениями вероятности $\left|\psi_a\right|^2$ и $\left|\chi_b\right|^2$. В таких случаях принято говорить, что подсистемы находятся в *чистых* квантовых состояниях.

В общем случае вектор состояния системы $\left|\Phi\right\rangle$ записывается как линейная комбинация

$$\left|\Phi\right\rangle = \sum_a \sum_b \Phi_{ab} \left|a\right\rangle_1 \otimes \left|b\right\rangle_2 \qquad (1)$$

с коэффициентами Φ_{ab}, не обязательно допускающими представление в виде произведения $\psi_a\chi_b$. Если $\Phi_{ab} \neq \psi_a\chi_b$, то подсистемам невозможно сопоставить индивидуальные векторы состояний, $\left|\Phi\right\rangle \neq \left|\psi\right\rangle_1 \otimes \left|\chi\right\rangle_2$. Тогда говорят, что каждая из подсистем находится в *смешанном* состоянии, и имеется *корреляция* в их статистических свойствах (состояния вида (1) называют также *запутанными* – entangled states).

Это можно пояснить следующим образом. Пусть a означает физическую величину, принимающую определенные значения в состояниях $\left|a\right\rangle$ подсистемы «1», и аналогичный смысл имеет величина b для подсистемы «2». В состоянии системы (1) при измерении указанных величин будут с вероятностью $\left|\Phi_{ab}\right|^2$ наблюдаться всевозможные допустимые значения a и b. Отберем подмножество результатов измерений, в которых у подсистемы «2» возникало какое-то фиксированное значение b. Тогда $\left|\Phi_{ab}\right|^2$ служит на этом подмножестве распределением вероятности для a, как если бы подсистема «1» обладала (с точностью до нормировочного множителя) индивидуальным вектором состояния

$$\left|\psi(b)\right\rangle = \sum_a \Phi_{ab} \left|a\right\rangle, \qquad (2)$$

зависящим от выбранного нами значения b *в подсистеме* «2». В наличии подобной зависимости и отражается упомянутая выше корреляция. Аналогичным образом при фиксированном a функция $\left|\Phi_{ab}\right|^2$ имеет смысл распределения вероятности для b, как если бы подсистема «2» имела индивидуальное состояние

$$\left|\chi(a)\right\rangle = \sum_b \Phi_{ab} \left|b\right\rangle,$$

зависящее от выбранного нами значения a в подсистеме «1».

Прежде чем в процессе становления квантовой механики окончательно утвердилась статистическая интерпретация ее математического формализма, предпринимались попытки интерпретировать вектор состояния как динамическую величину, характеризующую поведение отдельно взятого экземпляра квантового объекта (а не только статистические свойства ансамбля экземпляров). Такая интерпретация вела к парадоксальным выводам, противоречащим общепринятым представлениям о физических явлениях. Предположим, например, что вектор состояния $\left|\Phi\right\rangle$ вида (1) описывает вполне конкретную пару частиц, рожденных в результате распада какой-то нестабильной системы и разлетающихся в противоположные стороны. Тогда до проведения любого измерения над частицами у них нет индивидуальных состояний, но как только будет измерена какая-либо величина, скажем, у частицы «2» – с некоторым результатом b, – так $\left|\Phi\right\rangle$ мгновенно «редуцируется», превращается в произведение индивидуальных векторов состояния частиц (в сумме (1) по b остается единственное слагаемое):

$$\left|\Phi\right\rangle_{\text{редуц}} = \left|\psi(b)\right\rangle_1 \otimes \left|b\right\rangle_2.$$

Как видим, образующееся в ходе такой редукции состояние частицы «1» зависит, во-первых, от выбора физической величины для измерения над частицей «2» (поскольку разным физическим величинам в (1) соответствуют различные наборы базисных состояний), а во-вторых – от результата измерения. Это совершенно непонятно, так как к моменту измерения обе частицы уже удаляются друг от друга на макроскопическое

расстояние, не взаимодействуют между собой посредством каких бы то ни было сил, так что любые манипуляции с одной из частиц не должны влиять на эволюцию состояния другой частицы! Подобную ситуацию называют парадоксом Эйнштейна–Подольского–Розена.

Попытки найти удовлетворительное объяснение указанному нелокальному влиянию измерений на удаленный квантовый объект, а также представить редукцию состояний как физический процесс, реально происходящий в рассматриваемой системе частиц, успеха не имели. Статистическая интерпретация, при которой слова «состояние электрона» всегда понимаются как «состояние ансамбля электронов», снимает парадоксы (но не устраняет различий в статистических свойствах классических и квантовых систем). В такой интерпретации превращение вектора состояния $|\Phi\rangle$ в $|\Phi\rangle_{\text{редуц}}$ означает просто изменение используемых нами статистических данных о системе в результате измерений, выполняемых над ее частью; подобная редукция, очевидно, не требует специальных объяснений. Мы приходим к выводу, что статистическая трактовка основных понятий квантовой механики *принципиально* необходима.

2.9. а) Вектор состояния рассматриваемой системы есть

$$|\Phi\rangle = \sum_{k=1}^{N} \sum_{r=0}^{N} \Phi_{kr} |k\rangle \otimes |r\rangle . \qquad (1)$$

Поскольку прохождение частицы по каналу k может быть замечено регистрирующим устройством только с номером $r = k$, коэффициенты Φ_{kr} при $r \neq 0$ следует записать в виде

$$\Phi_{kr} = \Phi_k \, \delta_{kr} , \qquad r \neq 0 . \qquad (2)$$

С учетом (2) разложение (1) принимает вид

$$|\Phi\rangle = \sum_{k=1}^{N} \Phi_k \; |k\rangle \otimes |r = k\rangle + \sum_{k=1}^{N} \Phi_{k0} \; |k\rangle \otimes |0\rangle , \qquad (3)$$

где Φ_k – амплитуда вероятности того, что частица пойдет по каналу k и

будет там зарегистрирована, Φ_{k0} – амплитуда вероятности того, что частица пойдет по каналу k и останется не замеченной регистрирующими устройствами. Условие нормировки есть

$$\sum_{k=1}^{N}\left(\left|\Phi_k\right|^2 + \left|\Phi_{k0}\right|^2 \right) = 1 . \qquad (4)$$

б) Подставив в (3) разложение

$$\left|k\right\rangle = \sum_{x=1}^{N} \left|x\right\rangle\left\langle x\middle|k\right\rangle = \sum_{x=1}^{N} \left|x\right\rangle \psi_{xk} ,$$

где ψ_{xk} – амплитуда вероятности обнаружения детектором x частицы, прошедшей по каналу k, получаем:

$$\left|\Phi\right\rangle = \sum_{x=1}^{N}\sum_{k=1}^{N} \psi_{xk}\,\Phi_k \left|x\right\rangle \otimes \left|r=k\right\rangle + \sum_{x=1}^{N}\left(\sum_{k=1}^{N} \psi_{xk}\,\Phi_{k0} \right)\left|x\right\rangle \otimes \left|0\right\rangle . \qquad (5)$$

Коэффициенты в исходном разложении (см. (3)) определяются свойствами источника, с определенной вероятностью направляющего частицу в тот или иной канал, и чувствительностью промежуточных регистрирующих устройств. Разложение (5) содержит базисные состояния, связанные уже исключительно с детектирующей частью аппаратуры, то есть только с реально наблюдаемыми событиями. Последовательно просматривая присутствующие в (5) базисные векторы состояний и возводя в квадрат модули коэффициентов при этих векторах, мы устанавливаем характер наблюдаемых событий и находим их вероятность.

Видно, что если частица оказывается замеченной в канале k, то далее она попадает в детектор x с вероятностью

$$\left|\psi_{xk}\,\Phi_k\right|^2 = \left|\psi_{xk}\right|^2 \left|\Phi_k\right|^2 . \qquad (6)$$

Такие вклады (выражение (6) следует просуммировать по k) в полную вероятность W_x не зависят от фаз амплитуд вероятностей и поэтому не имеют интерференционного характера. Для вероятности же того, что частица придет в детектор x без регистрации ее прохождения через тот или иной канал, получаем выражение

$$\left|\sum_{k=1}^{N}\psi_{xk}\,\Phi_{k0}\right|^2=\sum_{k=1}^{N}\left|\psi_{xk}\,\Phi_{k0}\right|^2+\sum_{k'\neq k}\sum\psi^{*}_{xk'}\,\Phi^{*}_{k'0}\,\psi_{xk}\,\Phi_{k0}\,,\qquad(7)$$

которое содержит интерференционные члены (двойная сумма по не равным друг другу значениям k и k'); они зависят от разностей фаз, относящихся к распространению частицы по различным каналам интерферометра. Полное выражение для W_x имеет вид суммы вкладов (6) и (7):

$$W_x=\sum_{k=1}^{N}\left|\psi_{xk}\,\Phi_{k}\right|^2+\left|\sum_{k=1}^{N}\psi_{xk}\,\Phi_{k0}\right|^2.\qquad(8)$$

Каналам с регистрирующими устройствами малой чувствительности (лишь изредка замечающими прохождение частицы) должны соответствовать значения $\left|\Phi_k\right|^2$, малые по сравнению с $\left|\Phi_{k0}\right|^2$. Если регистрация частицы в каналах вообще невозможна, то все $\Phi_k=0$, и члены (6) обращаются в нуль; при этом (8) принимает вид квадрата модуля *суммы амплитуд вероятности*, что соответствует высококонтрастной интерференционной картине. В противоположном предельном случае, когда регистрация частицы в любом из каналов происходит с достоверностью, обращаются в нуль все Φ_{k0} и с ними содержащая интерференционные члены величина (7); при этом (8) автоматически принимает вид *суммы вероятностей*, как и должно было бы быть в соответствии с классическим правилом сложения вероятностей альтернативных событий. Таким образом, регистрация прохождения частицы в каналах интерферометра подавляет интерференционные члены в распределении вероятности W_x.

Рассмотренный пример позволяет в полной мере ощутить бесперспективность попыток составить себе сколько-нибудь наглядное представление о механизме возникновения «волновых свойств» частиц в рамках как классической, так и квантовой теории. В данном опыте результаты наблюдений классифицируются на два подмножества – события с регистрацией частицы в каком-либо канале и события без такой

регистрации. В первом случае траектория частицы в каждом испытании оказывается вполне определенной (если подразумевать под «траекторией» соответствующий канал), а распределение вероятностей на этом подмножестве событий имеет классический вид – не содержит интерференционных членов; это характерно для частицы-точки. Однако вперемешку с этими событиями в том же самом опыте реализуются и события, относящиеся ко второму подмножеству: их вероятность распределена подобно интенсивности некоей волны и, следовательно, движение частицы в таких случаях характеризуется макроскопической (порядка размеров интерферометра) неопределенностью траектории. Иными словами, если по результатам наблюдений удается «подсмотреть», где пролегал путь частицы, то квантовая специфика ее движения оказывается не актуальной, и можно сказать, что частица ведет себя как классическая материальная точка. Но если промежуточные этапы движения частицы не сопровождались реально наблюдаемыми событиями, то вступают в силу волновые аспекты, распределение вероятности за счет интерференционных членов *меняется*.

В квантовой механике подобное положение имеет общий характер. Альтернативные события в каждой постановке опыта можно подразделить на различимые (неинтерферирующие) и неразличимые (интерферирующие). Если такая классификация выполнена, то можно, не прибегая к формализму векторов состояния, сразу выписывать требуемые выражения для вероятностей с помощью простого правила: *в случае различимых альтернатив суммируются их вероятности (то есть квадраты модулей соответствующих амплитуд), тогда как в случае неразличимых альтернатив необходимо сначала суммировать амплитуды вероятности (с учетом их фаз) и только затем вычислять квадрат модуля получившейся величины.* Формализм векторов состояний позволяет получать те же ответы более дисциплинированным образом – путем перехода к надлежащему базису; всякая ортонормированная система базисных векторов состояния соответствует совокупности различимых альтернатив.

Отметим еще одно поучительное обстоятельство. Можно, не вступая в противоречие с нормировочным условием (4), ввести в данной задаче

раздельное описание свойств источника частицы и регистрирующих устройств, как и должно быть по существу рассматриваемой физической ситуации. Действительно, пусть A_k – амплитуда вероятности излучения частицы источником в канал k, B_{k1} – амплитуда вероятности того, что регистрирующее устройство в канале k частицу обнаружит, B_{k0} – не обнаружит. Условия нормировки для вновь введенных амплитуд естественно выбрать так:

$$\sum_{k=1}^{N} \left| A_k \right|^2 = 1, \tag{9}$$

$$\left| B_{k1} \right|^2 + \left| B_{k0} \right|^2 = 1 \quad \text{при каждом } k. \tag{10}$$

Тогда для того чтобы воспроизводились рассмотренные выше предельные случаи, следует считать, что в формулах (2) – (8)

$$\begin{aligned} \Phi_k &= A_k\, B_{k1}, \\ \Phi_{k0} &= A_k\, B_{k0}. \end{aligned} \tag{11}$$

Таким образом, *амплитуда вероятности сложного события, состоящего из нескольких актов, равна произведению амплитуд вероятности каждого акта*. Для амплитуды вероятности того, что частица пойдет по каналу k, будет там зарегистрирована и придет в детектор x, получаем на основе этого правила выражение $\psi_{xk}\, B_{k1}\, A_k$, а для амплитуды вероятности аналогичного события, но без промежуточной регистрации – выражение $\psi_{xk}\, B_{k0}\, A_k$; просуммировав должным образом вклады различимых и неразличимых альтернатив, возвращаемся с учетом (11) к результату (8).

2.10. Введем наряду с длиной волны λ постоянную $k = 2\pi/\lambda$ и выпишем амплитуды вероятности для всевозможных способов распространения единственного фотона из источников «A», «B» в детекторы «a», «b»:

$$\langle a|A\rangle = c\, e^{ikR_1}, \quad \langle b|A\rangle = c\, e^{ikR_2}, \quad \langle a|B\rangle = f\, e^{ikR_2}, \quad \langle b|B\rangle = f\, e^{ikR_1}. \tag{1}$$

Здесь комплексные коэффициенты c и f могут иметь случайные и некоррелированные друг с другом фазы, так как источники «A» и «B» независимы. Далее мы воспользуемся правилами, сформулированными в решении задачи 2.9.

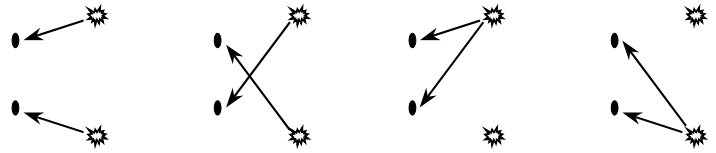

Рис. 2.7

Искомая скорость счета совпадений пропорциональна вероятности W распространения в детекторы одновременно двух фотонов. Такая вероятность должна быть выражена через произведения амплитуд вероятности однофотонных событий (1). Одновременное обнаружение двух фотонов детекторами «a» и «b» возможно четырьмя различными способами (см. рис. 2.7). При этом случаи I и II представляют собой неразличимые альтернативы, следовательно, должны суммироваться их амплитуды вероятности. Случаи же III и IV – различимые альтернативы, поскольку состояния источников здесь различны: только один из них теряет энергию при излучении двух фотонов. Значит, для учета случаев III и IV надо суммировать не амплитуды, а сами вероятности.

Таким образом,

$$W = \left|\langle a|A\rangle\langle b|B\rangle + \langle a|B\rangle\langle b|A\rangle\right|^2 + \left|\langle a|A\rangle\langle b|A\rangle\right|^2 + \left|\langle a|B\rangle\langle b|B\rangle\right|^2 =$$

$$= |c|^2 |f|^2 \left| e^{i2kR_1} + e^{i2kR_2} \right|^2 + |c|^4 + |f|^4 =$$

$$= 2|c|^2 |f|^2 \left(1 + \cos 2k(R_2 - R_1)\right) + |c|^4 + |f|^4. \qquad (2)$$

Если светимость источников «A» и «B» примерно одинакова, то можно в (2) положить $|f|^2 \approx |c|^2$; при этом вероятность W оказывается пропорциональной $2 + \cos 2k(R_2 - R_1)$:

$$W \approx 2|c|^4 \left(2 + \cos 2k(R_2 - R_1)\right). \qquad (3)$$

Выразим $R_2 - R_1$ в формулах (2) и (3) через заданные в условии задачи расстояния R, D, d с помощью следующих соотношений, вытекающих из геометрических условий рассматриваемого опыта:

$$R_1 = \left(R^2 + \left(\frac{D-d}{2} \right)^2 \right)^{1/2} = R \left(1 + \frac{1}{4R^2} (D-d)^2 \right)^{1/2} \approx R + \frac{1}{8R} \left(D^2 - 2Dd + d^2 \right),$$

$$R_2 = \left(R^2 + \left(\frac{D+d}{2} \right)^2 \right)^{1/2} = R \left(1 + \frac{1}{4R^2} (D+d)^2 \right)^{1/2} \approx R + \frac{1}{8R} \left(D^2 + 2Dd + d^2 \right).$$

Видно, что $R_2 - R_1 \approx Dd/2R$. Таким образом, полученные выражения для вероятности (2) и (3) содержат слагаемое, пропорциональное $\cos\left(2\pi Dd/\lambda R\right)$, и, следовательно, описывают *периодическую* зависимость $W(d)$ от расстояния между детекторами d; ее период есть $\Delta = \dfrac{\lambda R}{D}$.

Найдя из опыта периодически зависящий от d вклад в скорость счета совпадений, можно определить угловой размер D/R, а при известном расстоянии R до источников излучения – расстояние между ними D. Приведем численный пример. Пусть $\lambda \approx 0{,}5$ мкм $= 5 \cdot 10^{-5}$ см, что соответствует диапазону видимого света; $R \sim 10$ световых лет $\sim 10^{19}$ см – масштаб расстояний до звезд; $D \approx 10^{13}$ см – величина порядка расстояния между Солнцем и планетами, примем ее в качестве оценки диаметра звезды или расстояния между двумя звездами в двойной системе. Тогда $\Delta \approx 50$ см – вполне доступное наблюдению в рассматриваемом опыте значение периода зависимости $W(d)$.

3. ОПЕРАТОРЫ И МАТРИЦЫ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

В квантовой теории каждой физической величине f сопоставляется линейный эрмитов *оператор* $\hat{f}$. Разлагая векторы состояний в равенстве

$$|\phi\rangle = \hat{f}\,|\psi\rangle \qquad \text{(I)}$$

по произвольному полному ортонормированному базису $|x\rangle$ и скалярно умножая обе стороны (I) на $|x'\rangle$ получаем равенство (I) в матричной форме:

$$\phi_{x'} = \sum_x f_{x'x}\,\psi_x \qquad \text{(II)}$$

или

$$\begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \cdots \\ \phi_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_{11} & f_{12} & \cdots & f_{1N} \\ f_{21} & f_{22} & \cdots & f_{2N} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ f_{N1} & f_{N2} & \cdots & f_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \cdots \\ \psi_N \end{pmatrix}.$$

Здесь ψ_x – компоненты вектора состояния $|\psi\rangle$, ϕ_x – компоненты вектора $|\phi\rangle$, представляющего собой результат действия оператора $\hat{f}$ на $|\psi\rangle$, $f_{x'x}$ – *матричные элементы* оператора $\hat{f}$, определяемые как скалярные произведения векторов $\hat{f}\,|x\rangle$ на базисные векторы состояний $|x'\rangle$:

$$f_{x'x} = \langle x'|\,\hat{f}\,|x\rangle. \qquad \text{(III)}$$

При $N \to \infty$ вычисления в матричной форме также возможны, но более удобным является представление векторов состояния волновыми функциями; тогда равенство (I) принимает вид

$$\phi(q) = \hat{f}\ \psi(q), \qquad \text{(IV)}$$

где $\hat{f}$ – оператор, определенным образом действующий на функции, q – совокупность координатных переменных, от которых зависят волновые

функции ψ и ϕ. Строго говоря, переход при $N \to \infty$ от символических равенств типа (I) и (II) к функциональным, как (IV), требует привлечения методов анализа, которые рассматриваются в курсе математической физики; стремясь, в целях простоты, обойти эти вопросы, мы ограничиваемся ниже алгебраическими формулировками – они заведомо точны при любом конечном значении N размерности пространства квантовых состояний.

Эрмитово сопряженный оператор $\hat{f}^+$ представляется матрицей $\hat{f}^{*T}$, комплексно сопряженной и транспонированной по отношению к матрице $\hat{f}$:

$$\langle x' | \hat{f}^+ | x \rangle = \langle x | \hat{f} | x' \rangle^* = \langle \hat{f}\, x' | \, x \rangle .$$

Эрмитов оператор $\hat{f}$ характеризуется свойством $\hat{f}^+ = \hat{f}$. Число

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

в случае эрмитова оператора $\hat{f}$ вещественно при любом $|\psi\rangle$; оно интерпретируется как среднее значение величины f в состоянии, описываемом нормированным вектором состояния $|\psi\rangle$.

При переходе от исходного базиса, $|x\rangle$, к другому ортонормированному базису, $|k\rangle$ (это можно назвать переходом от «x-представления» к «k-представлению»), матричные элементы оператора преобразуются следующим образом:

$$\langle k' | \hat{f} | k \rangle = \sum_{x'} \sum_{x} \langle k' | x' \rangle \langle x' | \hat{f} \, | x \rangle \langle x | k \rangle ,$$

то есть

$$\hat{f}' = \hat{U}^+ \hat{f} \; \hat{U} ,$$

где $\hat{U}$ – матрица с элементами $U_{xk} = \langle x | k \rangle$, $\hat{f}'$ – матрица оператора в k-представлении, $\hat{f}$ – матрица этого же оператора в x-представлении.

Для эрмитова оператора всегда найдется ортонормированный базис, в котором матрица этого оператора имеет диагональный вид:

$$\langle k' | \hat{f} | k \rangle = f_k \, \delta_{k'k} . \qquad \text{(V)}$$

Приведение $\hat{f}$ к диагональному виду непосредственно связано с отысканием решений уравнения

$$\hat{f} \, | \psi \rangle = f \, | \psi \rangle , \qquad | \psi \rangle \neq 0 . \qquad \text{(VI)}$$

Значения f_k параметра f в (VI), при которых существуют не равные нулю решения уравнения (VI), называются *собственными значениями* оператора $\hat{f}$, а соответствующие им решения $| \psi \rangle$ – *собственными векторами* для $\hat{f}$. Любой собственный вектор $| \psi \rangle$, принадлежащий собственному значению $f = f_k$, интерпретируется как состояние с определенным (равным f_k) значением физической величины, описываемой оператором $\hat{f}$, причем спектр собственных значений определяет все допустимые значения этой физической величины. У эрмитова оператора собственные значения вещественны. Если оператор задан в виде матрицы порядка N, то его собственные значения находятся как корни алгебраического уравнения N-й степени:

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

Из собственных векторов эрмитова оператора можно построить полную ортонормированную систему базисных векторов, $| k \rangle$, принадлежащих собственным значениям f_k:

$$\hat{f} \, | k \rangle = f_k \, | k \rangle , \qquad k = 1, ..., N .$$

В таком базисе справедливо равенство (V), то есть матрица $\hat{f}$ диагональна, и ее диагональные элементы равны собственным значениям.

Для приведения к диагональному виду одновременно двух операторов физических величин, $\hat{f}$ и $\hat{g}$, необходимо, чтобы их коммутатор был равен нулю: $[\hat{f}, \hat{g}] = 0$, где $[\hat{f}, \hat{g}] \equiv \hat{f} \, \hat{g} \; - \; \hat{g} \, \hat{f}$.

Операторы $\hat{T}$, обладающие свойством $\hat{T}^{-1} = \hat{T}^{+}$, называются *унитарными*. Унитарный оператор представляется в виде $e^{i\hat{F}}$, где $\hat{F}$ – некоторый эрмитов оператор, и приводится к диагональной форме одновременно с $\hat{F}$ (при этом диагональные элементы унитарного оператора будут иметь вид фазовых множителей e^{iF_k}, где F_k – собственные значения оператора $\hat{F}$). Скалярные произведения инвариантны относительно преобразований, описываемых унитарными операторами: $\left\langle \hat{T}\,\phi \middle| \hat{T}\,\psi \right\rangle = \langle \phi | \psi \rangle$.

Среди разнообразных операторов физических величин первоочередную роль играют *операторы координат* частицы $\hat{\mathbf{r}}$, *импульса* $\hat{\mathbf{p}}$, *момента импульса* $\hbar\hat{\mathbf{J}}$ и *энергии* $\hat{H}$. С оператором импульса связаны унитарные операторы параллельного переноса квантового объекта на произвольный вектор $\mathbf{a}$:

$$\hat{T}(\mathbf{a}) = e^{-i\,\mathbf{a}\cdot\hat{\mathbf{p}}/\hbar},$$

с оператором момента импульса – унитарные операторы поворота на произвольный угол α вокруг любого направления (задаваемого единичным вектором $\mathbf{n}$):

$$\hat{R}(\alpha\mathbf{n}) = e^{-i\alpha\,\mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{J}}}.$$

Особенно важна роль оператора энергии $\hat{H}$ (называемого также оператором Гамильтона или *гамильтонианом*) – он определяет эволюцию квантовых состояний системы с течением времени в соответствии с *волновым уравнением Шредингера*:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left|\psi(t)\right\rangle = \hat{H}\left|\psi(t)\right\rangle. \qquad \text{(VII)}$$

В случае замкнутой системы или системы, находящейся в постоянном внешнем поле, гамильтониан не зависит от времени; при этом из уравнения Шредингера (VII) следует соотношение

$$\left|\psi(t_2)\right\rangle = e^{-i(t_2-t_1)\hat{H}/\hbar}\left|\psi(t_1)\right\rangle,$$

которое описывает эволюцию вектора состояния системы от момента времени t_1 к моменту t_2.

Явное выражение для оператора $\hat{H}$ зависит от вида рассматриваемой системы, ее симметрии. Преобразованиям симметрии сопоставляются унитарные операторы $\hat{T}$, которые связывают друг с другом физически эквивалентные состояния системы. Гамильтониан системы коммутативен с ее преобразованиями симметрии: $[\hat{H},\hat{T}]=0$.

Достаточно полное описание таких систем, как атомы, молекулы, кристаллы требует учета бесконечного числа состояний ($N\to\infty$) и дается в терминах волновых функций. Но если энергетический спектр системы имеет дискретную часть, а физические условия конкретной задачи таковы, что актуальны состояния лишь нескольких дискретных уровней энергии (обычно – ближайших к уровню *основного* состояния, то есть к уровню состояния с наименьшей энергией), то может оказаться полезным упрощенное рассмотрение системы – как квантового объекта с небольшим числом состояний N. В таком приближении гамильтониан задается конечной матрицей $\hat{H}$ порядка N. Численные значения ее элементов можно считать заранее известными (например, из анализа экспериментальных данных), либо трактовать их как параметры, которые при более полной постановке вопроса, в принципе, могут быть вычислены.

Следуя [5,6], мы приводим в данной главе задачи в основном указанного выше вида. Они показывают, что уже те скромные в математическом отношении возможности, которые предоставляются алгеброй матриц небольшого формата, ведут к формированию картины поведения квантовых систем, богатой качественными выводами и практически невыразимой языком классической физики.

3.1. ЗАДАЧИ

3.1. Пусть $|x\rangle$ – ортонормированные базисные векторы состояний некоторой квантово-механической системы ($x = 1, 2, \ldots, N$), $\tau = dt$ – бесконечно малый интервал времени. Найти соотношение, связывающее вероятность перехода системы за время τ из базисного состояния $|x\rangle$ в

состояние $|x'\rangle \neq |x\rangle$ того же набора базисных векторов с матричными элементами $H_{x'x}$ оператора Гамильтона рассматриваемой системы.

Указания. Ограничиться первым неисчезающим приближением по степеням τ. В задачах данной главы считать гамильтониан не зависящим от времени.

3.2. Пусть $|1\rangle$ и $|2\rangle$ – ортонормированные базисные векторы состояний квантового объекта с двумя состояниями ($N = 2$). Каков общий вид матрицы оператора Гамильтона в пренебрежении возможностью переходов между базисными состояниями, и как изменится ответ при учете этих переходов? Найти неопределенность $\delta\varepsilon$ энергии в состояниях $|1\rangle$ и $|2\rangle$, пользуясь формулой среднеквадратичного отклонения от среднего значения энергии.

3.3. Рассмотрим какую-либо систему с двумя состояниями ($N = 2$). Пусть не являющиеся стационарными ортонормированные базисные состояния $|1\rangle$ и $|2\rangle$ характеризуются тем, что они *физически эквивалентны*, то есть существует оператор преобразования симметрии $\hat{P}$, превращающий $|1\rangle$ в $|2\rangle$ и $|2\rangle$ в $|1\rangle$ (такая ситуация поясняется рисунком к задаче 3.4).

а) Найти матрицу оператора $\hat{P}$ в указанном здесь базисе, выяснить является ли она эрмитовой, унитарной?

б) Найти собственные значения и собственные векторы оператора $\hat{P}$.

в) Найти вид матрицы оператора Гамильтона с учетом отмеченной выше симметрии системы. *Указание.* Дополнить результат (6) решения задачи 3.2 следствиями условия коммутативности гамильтониана с преобразованиями симметрии.

3.4. Молекулярный ион водорода H_2^+ представляет собой систему, состощую из двух протонов и одного электрона. На рис. 3.1 изображены два физически эквивалентных состояния ($|1\rangle$ и $|2\rangle$) этой системы при

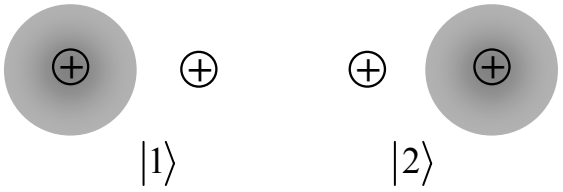

Рис. 3.1

достаточно большом расстоянии R между протонами; в каждом из таких состояний электрон локализован вблизи только одного из протонов, образуя атом водорода в основном состоянии, а другой протон лишен «электронного облака». При сближении протонов возникают переходы $|1\rangle \leftrightarrow |2\rangle$; их вероятность увеличивается с уменьшением R, и состояния $|1\rangle$, $|2\rangle$ уже не могут считаться стационарными.

Применяя в качестве простейшей модели для H_2^+ представление о квантовой системе с двумя состояниями, определить вид матрицы оператора Гамильтона, найти стационарные состояния и энергетический спектр в такой модели. Обсудить характер зависимости энергии основного состояния от R.

Указания. Воспользоваться результатами задачи 3.3, считая, что величина $M = \langle 1|\hat{H}|2\rangle$ отрицательна. При обсуждении учесть, что величина $\varepsilon_0 = \langle 1|\hat{H}|1\rangle$ включает энергию кулоновского отталкивания протонов друг от друга.

3.5. Рассматривается система, у которой энергетический спектр и стационарные состояния имеют вид (см. также результаты задачи 3.4):

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_0 - |M|\,, \qquad |\varepsilon_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|2\rangle;$$

$$\varepsilon_2 = \varepsilon_0 + |M|\,, \qquad |\varepsilon_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|2\rangle.$$

Пусть начальным является одно из нестационарных базисных состояний: $|\psi(0)\rangle = |1\rangle$. Найти состояние системы $|\psi(t)\rangle$ в произвольный момент времени и среднее значение энергии в этом состоянии. Определить, как изменяются со временем значения $W_2(t)$ и $W_1(t)$ вероятности того, что

система к моменту времени t обнаружится в состоянии $|2\rangle$ или $|1\rangle$, соответственно.

3.6. Гамильтониан системы с двумя состояниями имеет вид (см. также решение задачи 3.2)

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \varepsilon_1^{(0)} & M \\ M^* & \varepsilon_2^{(0)} \end{pmatrix}.$$

Найти энергетический спектр такой системы. Получить приближенные формулы для энергетических уровней в случае $|M| << \left|\Delta\varepsilon^{(0)}\right|$, где $\Delta\varepsilon^{(0)} = \varepsilon_2^{(0)} - \varepsilon_1^{(0)}$.

3.7. Молекула состоит их трех одинаковых атомов, расположенных в вершинах равностороннего треугольника. В отрицательном ионе такой молекулы есть дополнительный электрон. Электрон присоединяется к любому из трех атомов (этому соответствуют базисные состояния $|1\rangle$, $|2\rangle$ и $|3\rangle$) и может перескакивать с атома на атом. а) Записать матрицу оператора Гамильтона $\hat{H}$ и найти энергетические уровни иона в данной модели, считая, что $M = \langle 1|\hat{H}|2\rangle < 0$. б) Найти стационарные состояния системы, то есть – собственные векторы оператора $\hat{H}$.

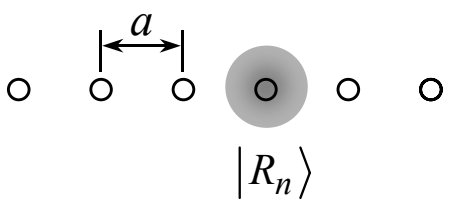

Рис. 3.2

3.8. Рассмотрим состояния электрона в одномерном идеальном кристалле, представляющем собой цепочку из N одинаковых атомов с одним и тем же расстоянием a между соседними атомами. В простейшей модели такой системы имеется N исходных физически эквивалентных ортонормированных базисных состояний $|R_n\rangle$, где $R_n = na$ – координата n-го атома, $n = \ldots -2,-1,0,1,2\ldots$ (всего N значений). В каждом из состояний $|R_n\rangle$ электрон локализован только около атома, находящегося в точке R_n

(рис. 3.2), имеет среднее значение энергии $\langle R_n|\hat{H}|R_n\rangle = \varepsilon_0$ и характеризуется матричными элементами (энергией перехода) $\langle R_{n+1}|\hat{H}|R_n\rangle = \langle R_n|\hat{H}|R_{n+1}\rangle = M$, где $M < 0$. Переходами между атомами, не являющимися ближайшими соседями, можно пренебречь.

а) Показать, что операторы $\hat{T}_{n'} = \sum_{n''} |R_{n''} + R_{n'}\rangle\langle R_{n''}|$, описывающие перемещения (*трансляции*) электрона в одномерном кристалле на расстояния $R_{n'}$, являются операторами преобразований симметрии. Коммутативны ли такие операторы друг с другом? *Указание*: трансляции считать циклическими (как если бы цепочка была замкнута «в кольцо»), так что $|R_{n\pm N}\rangle = |R_n\rangle$ – разные обозначения одного и того же состояния, причем $\hat{T}_N = \hat{T}_0 = \hat{1}$.

б) Найти собственные значения указанных выше операторов трансляций и ортонормированную систему собственных векторов $|q\rangle$, общую для всех этих операторов.

в) Проверить, что найденные в предыдущем пункте векторы состояний являются собственными для гамильтониана, и по ходу такой проверки найти энергетический спектр электрона в данной модели.

3.9. Пусть $\hat{K} + \hat{U}_1$ – гамильтониан для электрона, взаимодействующего с центром притяжения (например, с протоном), расположенным в точке $\mathbf{r}_1$; здесь $\hat{K}$ – оператор кинетической энергии электрона, $\hat{U}_1$ – оператор энергии взаимодействия. Энергия основного состояния ε_0 и соответствующий вектор состояния $|1\rangle$, удовлетворяющий уравнению

$$\left(\hat{K} + \hat{U}_1\right)|1\rangle = \varepsilon_0|1\rangle,$$

считаются известными. Пусть, кроме того, известно основное состояние электрона $|2\rangle$, удовлетворяющее уравнению

$$\left(\hat{K} + \hat{U}_2\right)|2\rangle = \varepsilon_0|2\rangle$$

и соответствующее расположению такого же центра притяжения не в точке $\mathbf{r}_1$, а в точке $\mathbf{r}_2$.

Используя нормированные состояния $|1\rangle$ и $|2\rangle$ в качестве базиса, но *не предполагая их взаимную ортогональность*, найти энергию основного состояния электрона, взаимодействующего одновременно с двумя указанными центрами притяжения.

3.10. Рассматривается квантовая система, имеющая только два стационарных состояния: $|0\rangle$ – основное состояние с энергией $\varepsilon_0 = 0$, $|1\rangle$ – возбужденное состояние с энергией $\varepsilon_1 > \varepsilon_0$. Эти состояния образуют полный ортонормированный базис. Пусть $\hat{c}$ – «понижающий» оператор, характеризующийся равенствами:

$$\hat{c}\,|1\rangle = |0\rangle, \qquad \hat{c}\,|0\rangle = 0\,.$$

В рассматриваемом случае такой оператор принято называть *фермионным оператором уничтожения*.

а) Установить результат действия оператора $\hat{c}^+$ на указанные базисные состояния $|0\rangle$, $|1\rangle$.

б) Проверить, что операторы $\hat{c}$, $\hat{c}^+$ удовлетворяют равенствам

$$\{\hat{c},\hat{c}^+\} = 1, \qquad \{\hat{c},\hat{c}\} = \{\hat{c}^+,\hat{c}^+\} = 0,$$

где фигурными скобками обозначен *антикоммутатор* операторов, определяемый формулой: $\{\hat{A},\hat{B}\} \equiv \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$.

в) Показать, что гамильтониан рассматриваемой системы может быть представлен в виде

$$\hat{H} = \varepsilon_1\,\hat{c}^+\,\hat{c}\,.$$

3.11. Лампа и поляризатор (например, поляроидная пленка) с осью пропускания $\tilde{x}$ образуют источник света, «приготавливающий» фотоны в состоянии линейной поляризации $|\tilde{x}\rangle$. Далее эти фотоны падают на второй поляризатор, в общем случае имеющий иное направление оси пропускания

– x, и либо сквозь него проходят, либо поглощаются в нем (рис. 3.3). Очевидно, можно думать, что проходящие фотоны «воспринимаются» вторым поляризатором как фотоны в состоянии линейной поляризации $|x\rangle$, а поглощаемые – в состоянии линейной поляризации $|y\rangle$. Опыт показывает, что если оси пропускания обоих поляризаторов параллельны, все фотоны, падающие на второй поляризатор, проходят, а если эти оси скрещены под углом 90°, то все фотоны поглощаются.

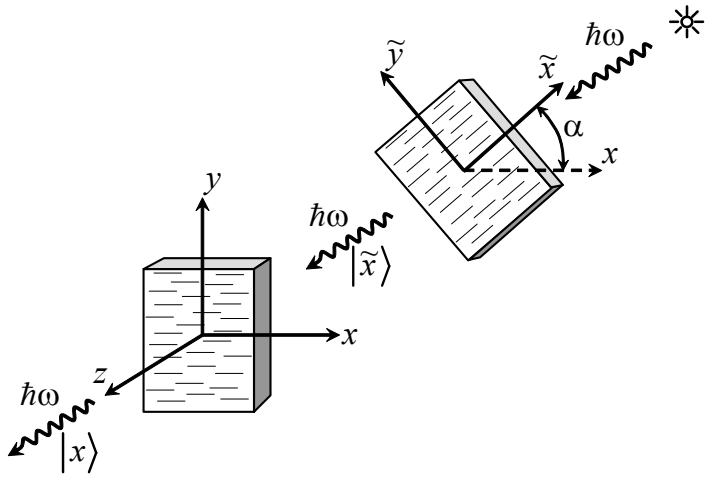

Рис. 3.3

а) Как вероятность прохождения фотона через второй поляроид зависит от угла α между осями x и $\tilde{x}$? *Указание*: предварительно следует определить матрицу оператора поворота на произвольный угол α вокруг направления распространения фотонов z.

б) Найти спектр значений проекции момента импульса J_z фотона относительно направления распространения z. Описать состояния поляризации фотона с определенным J_z. *Указание*: рассматривая полученную в предыдущем пункте матрицу поворота в случае бесконечно малых α, определить матрицу оператора момента $\hat{J}_z$, а затем найти ее собственные значения и собственные векторы.

3.12. Квантовая система состоит из подсистем «1» и «2», $\hat{f}$ – оператор физической величины для подсистемы «1», $\hat{g}$ – оператор физической величины для подсистемы «2». Показать, что в общем случае среднее значение произведения этих величин по состоянию системы не равно произведению средних по состояниям подсистем, $\langle f\, g\rangle \neq \langle f\rangle_1 \langle g\rangle_2$,

однако равенство будет иметь место, если подсистемы находятся в чистых квантовых состояниях.

3.13. Пусть $\hat{f}(\lambda)$ – эрмитов оператор физической величины, зависящей от вещественного параметра λ, f_k – собственные значения этого оператора, $|k\rangle$ – его собственные векторы. Показать, что для дискретной части спектра собственных значений f_k справедлива формула:

$$\langle k|\frac{\partial \hat{f}}{\partial \lambda}|k\rangle = \frac{\partial f_k}{\partial \lambda}.$$

3.14. Показать, что имеет место следующее операторное равенство:

$$e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}} = \hat{B} + [\hat{A},\hat{B}] + \frac{1}{2!}[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]] + \frac{1}{3!}[\hat{A},[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]]] + \ldots .$$

Указание. Оператор $\hat{B}(\lambda) = e^{\lambda\hat{A}}\,\hat{B}(0)\,e^{-\lambda\hat{A}}$ разложить в ряд по степеням λ; в получившемся равенстве положить $\lambda = 1$.

3.15. Сумма диагональных матричных элементов оператора $\hat{A}$ называется *следом* (или шпуром) оператора и обозначается символом $\mathrm{Sp}\,\hat{A}$.

а) Показать, что под знаком следа допускается производить циклическую перестановку операторов.

б) Показать, что при переходе от одного ортонормированного базиса к другому величина следа не изменяется.

3.16. Убедиться, что для эрмитова оператора справедливо равенство

$$\det(\exp\hat{A}) = \exp(\mathrm{Sp}\,\hat{A}).$$

3.2. РЕШЕНИЯ

3.1. Эволюция векторов состояний на промежутке времени τ в случае системы с не зависящим от времени гамильтонианом определяется соотношением:

$$\left|\psi(\tau)\right\rangle = e^{-i\hat{H}\tau/\hbar}\left|\psi(0)\right\rangle, \tag{1}$$

где $\left|\psi(0)\right\rangle$ – произвольное начальное состояние системы (в момент времени $t=0$). Разложив экспоненту по степеням τ и оставив только члены нулевого и первого порядка, имеем: $\left|\psi(\tau)\right\rangle \approx \left|\psi(0)\right\rangle - i\hat{H}\tau\left|\psi(0)\right\rangle/\hbar$. В качестве начального вектора состояния подставим сюда данный в условии задачи базисный вектор $\left|x\right\rangle$; получаем с указанной выше точностью:

$$\left|\psi(\tau)\right\rangle = \left|x\right\rangle - i\hat{H}\tau\left|x\right\rangle/\hbar. \tag{2}$$

Согласно принципам квантовой механики, амплитуда вероятности обнаружить систему в базисном состоянии $\left|x'\right\rangle$, если система описывается вектором состояния $\left|\psi(\tau)\right\rangle$, равна скалярному произведению $\left\langle x'\middle|\psi(\tau)\right\rangle$. Умножим скалярно на $\left|x'\right\rangle$ обе стороны равенства (2) и учтем условие ортонормировки базисных векторов:

$$\left\langle x'\middle|\psi(\tau)\right\rangle = \left\langle x'\middle|x\right\rangle - i\tau\left\langle x'\middle|\hat{H}\middle|x\right\rangle/\hbar = \delta_{x'x} - i\tau H_{x'x}/\hbar. \tag{3}$$

При $x' \neq x$ амплитуда вероятности (3) сводится к $-i\tau H_{x'x}/\hbar$; поэтому искомая вероятность $W_{x'x}(\tau)$ перехода системы за время $\tau \to 0$ из базисного состояния $\left|x\right\rangle$ в состояние $\left|x' \neq x\right\rangle$ запишется в виде:

$$W_{x'x}(\tau) = \left|\left\langle x'\middle|\psi(\tau)\right\rangle\right|^2 = \frac{\tau^2}{\hbar^2}\left|H_{x'x}\right|^2. \tag{4}$$

Таким образом, недиагональные матричные элементы оператора Гамильтона связаны с существованием переходов между различными базисными состояниями квантовой системы. Эти переходы следует рассматривать как свойство системы, в котором проявляется характерная для нее динамика, своеобразное внутреннее «движение». Более

определенное представление о подобном движении мы составим себе из результатов дальнейших задач.

Если же в данном базисе оператор Гамильтона $\hat{H}$ диагонален, то самопроизвольные переходы между такими базисными состояниями отсутствуют, причем – в течение любого промежутка времени, а не только бесконечно малого. Действительно, пусть матрица $\hat{H}$ диагональна; обозначим: $H_{11} = \varepsilon_1$, $H_{22} = \varepsilon_2$, …, $H_{NN} = \varepsilon_N$. Тогда будут диагональными и все матрицы вида $\hat{H}^2$, $\hat{H}^3$, …; диагональные элементы матрицы $\hat{H}^n$ – это ε_1^n, …, ε_N^n. В этом случае действие оператора

$$e^{-i\tau\hat{H}/\hbar} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\left(\frac{-i\tau}{\hbar}\right)^n \hat{H}^n,$$

например, на первый базисный вектор, $\left|1\right\rangle$, сводится просто к умножению вектора $\left|1\right\rangle$ на фазовый множитель вида $\exp(-i\tau\varepsilon_1/\hbar)$:

$$\left|\psi(\tau)\right\rangle = e^{-i\hat{H}\tau/\hbar}\left|x=1\right\rangle = e^{-i\varepsilon_1\tau/\hbar}\left|1\right\rangle.$$

Такая замена оператора $\hat{H}$ его собственным значением происходит в силу того, что здесь базисный вектор является собственным вектором оператора $\hat{H}$. С учетом ортонормировки базисных состояний получаем:

$$\left\langle x'\middle|\psi(\tau)\right\rangle = e^{-i\varepsilon_1\tau/\hbar}\left\langle x'\middle|1\right\rangle = e^{-i\varepsilon_1\tau/\hbar}\delta_{x',1}.$$

Вероятность перехода из состояния $\left|x=1\right\rangle$ в состояние $\left|x'\right\rangle$ за любое время τ есть

$$\left|\left\langle x'\middle|\psi(\tau)\right\rangle\right|^2 = (\delta_{x',1})^2 = \delta_{x',1}.$$

Она равна нулю при $x' \neq 1$, то есть переходы невозможны. Ввиду отсутствия переходов между такими базисными состояниями их называют *стационарными состояниями* системы.

3.2. Для начала представим оператор Гамильтона $\hat{H}$ в виде произвольной квадратной матрицы второго порядка и выпишем эрмитово

сопряженную матрицу $\hat{H}^+$:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}, \qquad \hat{H}^+ = \begin{pmatrix} a^* & c^* \\ b^* & d^* \end{pmatrix}. \tag{1}$$

Условие эрмитовости гамильтониана, $\hat{H} = \hat{H}^+$, в применении к (1) означает, что

$$a = a^*, \qquad d = d^*, \tag{2}$$

$$b = c^*, \qquad c = b^*. \tag{3}$$

Согласно равенствам (3), недиагональные элементы в (1) определяются одной комплексной величиной; ниже мы будем обозначать ее как M, так что $b \equiv M$, $c = M^*$. Равенства (2) показывают, что *диагональные элементы эрмитовой матрицы вещественны.* Диагональные матричные элементы оператора физической величины всегда имеют смысл средних значений этой величины в рассматриваемых базисных состояниях. Поскольку $\hat{H}$ – это оператор энергии, мы будем обозначать его средние значения буквой ε:

$$\langle 1|\hat{H}|1\rangle = \varepsilon_1, \qquad \langle 2|\hat{H}|2\rangle = \varepsilon_2. \tag{4}$$

Согласно результатам задачи 3.1, вероятность перехода из одного базисного состояния в другое определяется недиагональными матричными элементами гамильтониана. Следовательно, пренебрежению переходами между состояниями $|1\rangle$ и $|2\rangle$ отвечает равенство $M = 0$; матрица оператора Гамильтона в таком случае принимает вид:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 & 0 \\ 0 & \varepsilon_2 \end{pmatrix}. \tag{5}$$

При этом ε_1 и ε_2 имеют смысл дискретных *уровней энергии* стационарных состояний: уровень ε_1 относится к стационарному состоянию $|1\rangle$, а уровень ε_2 – к стационарному состоянию $|2\rangle$.

При наличии переходов между базисными состояниями матрица оператора Гамильтона в таком базисе должна быть недиагональной:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \varepsilon_1^{(0)} & M \\ M^* & \varepsilon_2^{(0)} \end{pmatrix}. \qquad (6)$$

Здесь мы изменили обозначения диагональных элементов в сравнении с (5), имея в виду, что теперь диагональные матричные элементы уже не являются точными уровнями энергии системы с гамильтонианом (6), а служат лишь «нулевым приближением» к точным значениям энергии стационарных состояний ε_1 и ε_2; последние определяются в задаче о приведении матрицы (6) к диагональной форме (5).

Квадрат неопределенности энергии дается формулой среднеквадратичного отклонения:

$$(\delta\varepsilon)^2 = \left\langle (\varepsilon - \langle\varepsilon\rangle)^2 \right\rangle. \qquad (7)$$

Раскрыв скобки под знаком усреднения $\langle ... \rangle$, получаем:

$$(\delta\varepsilon)^2 = \left\langle \varepsilon^2 \right\rangle - \langle\varepsilon\rangle^2 = \langle\psi|\hat{H}^2|\psi\rangle - \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle^2. \qquad (8)$$

Поскольку в качестве состояния $|\psi\rangle$ должны быть взяты указанные в условии задачи базисные состояния, то фактически нам требуется найти лишь диагональные элементы матрицы $\hat{H}^2$. Умножим матрицу (6) саму на себя:

$$\hat{H}^2 = \begin{pmatrix} (\varepsilon_1^{(0)})^2 + |M|^2 & (\varepsilon_1^{(0)} + \varepsilon_2^{(0)})M \\ (\varepsilon_1^{(0)} + \varepsilon_2^{(0)})M^* & (\varepsilon_2^{(0)})^2 + |M|^2 \end{pmatrix}. \qquad (9)$$

Подставив диагональные элементы матриц (9) и (6) в формулу (8), находим, что искомая неопределенность энергии $\delta\varepsilon$ в обоих базисных состояниях равна модулю недиагонального матричного элемента оператора Гамильтона:

$$\delta\varepsilon = |M|. \qquad (10)$$

Для *стационарных* состояний, как видно, в частности, из (5), неопределенность энергии равна нулю (это состояния *с определенной энергией*).

3.3. а) Выпишем равенства, характеризующие действие оператора $\hat{P}$ на исходные (указанные в условии задачи) базисные состояния $|x\rangle$, $x=1,2$:

$$\hat{P}|2\rangle=|1\rangle, \qquad \hat{P}|1\rangle=|2\rangle. \tag{1}$$

Скалярно умножая эти равенства на $|1\rangle$ и $|2\rangle$, а также учитывая условие ортонормировки, $\langle x|x'\rangle=\delta_{xx'}$, находим матричные элементы $P_{xx'}=\langle x|\hat{P}|x'\rangle$. Ими определяется искомая матрица $\hat{P}$:

$$\hat{P}=\begin{pmatrix}\langle 1|\hat{P}|1\rangle=0 & \langle 1|\hat{P}|2\rangle=1\\ \langle 2|\hat{P}|1\rangle=1 & \langle 2|\hat{P}|2\rangle=0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}. \tag{2}$$

При транспонировании и комплексном сопряжении эта матрица не меняется, следовательно, она эрмитова и может рассматриваться как оператор некоторой физической величины. Матрица (2) обладает свойством $\hat{P}^2=\hat{1}$, то есть $\hat{P}^{-1}=\hat{P}$; с учетом равенства $\hat{P}=\hat{P}^{+}$ это означает, что матрица (2) унитарна: $\hat{P}^{-1}=\hat{P}^{+}$.

б) Будем искать собственные векторы $|n\rangle$ и собственные значения λ оператора $\hat{P}$:

$$\hat{P}|n\rangle=\lambda|n\rangle, |n\rangle\neq 0. \tag{3}$$

Такое уравнение удобно рассматривать в виде

$$\left(\hat{P}-\lambda\hat{1}\right)|n\rangle=0, \tag{4}$$

где искомые векторы $|n\rangle$ представляются столбцами коэффициентов $C_{xn}=\langle x|n\rangle$ разложения по исходным базисным состояниям $|x\rangle$ (согласно формуле $|n\rangle=\sum_x |x\rangle\langle x|n\rangle$), а $(\hat{P}-\lambda\hat{1})$ – матрица в базисе $|x\rangle$:

$$\begin{pmatrix}-\lambda & 1\\ 1 & -\lambda\end{pmatrix}\begin{pmatrix}C_{1n}\\ C_{2n}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\ 0\end{pmatrix}. \tag{5}$$

Эта запись соответствует системе однородных линейных уравнений для неизвестных C_{xn}:

$$\begin{cases} -\lambda C_{1n} + C_{2n} = 0 \\ C_{1n} - \lambda C_{2n} = 0 \end{cases}. \tag{6}$$

Такая система имеет отличные от нуля решения только при условии обращения в нуль определителя, составленного из коэффициентов при неизвестных:

$$\det\left(\hat{P} - \lambda \hat{1}\right) = 0, \tag{7}$$

то есть

$$\lambda^2 - 1 = 0.$$

Отсюда мы находим собственные значения той физической величины, которая отвечает оператору $\hat{P}$ (в рассматриваемом примере эта величина может быть названа «четностью», она не имеет аналогии в классической механике):

$$\lambda_1 = 1, \qquad \lambda_2 = -1. \tag{8}$$

Подставив $\lambda = \lambda_1$ в систему уравнений (6) и решая ее, получаем равенство $C_{11} = C_{21}$, которое означает, что собственный вектор $|n = 1\rangle$, принадлежащий собственному значению $\lambda_1 = 1$, дается линейной комбинацией исходных базисных состояний с коэффициентами, равными друг другу. При выборе $C_{11} = C_{21} = 1/\sqrt{2}$ он оказывается нормированным; таким образом, один из двух искомых собственных векторов найден:

$$|n = 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|x = 1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|x = 2\rangle. \tag{9}$$

Подставив второе из собственных значений (8) в систему (6), получаем равенство $C_{12} = -C_{22}$. Следовательно, нормированный собственный вектор $|n = 2\rangle$, принадлежащий собственному значению $\lambda_2 = -1$, можно выбрать (с точностью до произвольного фазового множителя, как и первый собственный вектор) в виде:

$$|n = 2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|x = 1\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|x = 2\rangle. \tag{10}$$

Отметим, что подобная связь между двумя парами ортонормированных векторов состояния обсуждалась нами в задаче 2.3.

Состояние $|n=1\rangle$ – «четное», оно инвариантно к преобразованию $\hat{P}$. Состояние $|n=2\rangle$ – «нечетное», под действием $\hat{P}$ оно меняет знак. Исходные же базисные состояния, как ясно из равенств (1), не обладают определенной четностью по отношению к данному преобразованию $\hat{P}$.

в) Оператор Гамильтона системы с двумя состояниями в общем случае задается матрицей (6), указанной в решении задачи 3.2. Выясним, к чему приводит требование коммутативности такой матрицы с рассмотренной здесь матрицей $\hat{P}$. Замечаем, что:

$$\hat{P}\hat{H}=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\varepsilon_1^{(0)} & M\\ M^* & \varepsilon_2^{(0)}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}M^* & \varepsilon_2^{(0)}\\ \varepsilon_1^{(0)} & M\end{pmatrix},\quad \hat{H}\hat{P}=\begin{pmatrix}\varepsilon_1^{(0)} & M\\ M^* & \varepsilon_2^{(0)}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}M & \varepsilon_1^{(0)}\\ \varepsilon_2^{(0)} & M^*\end{pmatrix}.$$

Поэтому из равенства $\hat{P}\hat{H}=\hat{H}\hat{P}$ следует, что $M^*=M$ и $\varepsilon_2^{(0)}=\varepsilon_1^{(0)}\equiv\varepsilon_0$. Таким образом,

$$\hat{H}=\begin{pmatrix}\varepsilon_0 & M\\ M & \varepsilon_0\end{pmatrix}, \tag{11}$$

где M – действительная величина (как и ε_0). Другими словами, симметрия исходных базисных состояний $|1\rangle$ и $|2\rangle$ приводит к равенству средних значений энергии этих состояний, а также к равенству недиагональных элементов, ответственных за переходы $|1\rangle\to|2\rangle$ и $|2\rangle\to|1\rangle$, – результат, который, очевидно, следовало ожидать.

3.4. В силу симметрии исходных базисных состояний $|1\rangle$ и $|2\rangle$ матрица оператора Гамильтона в таком базисе дается формулой (11) задачи 3.3:

$$\hat{H}=\begin{pmatrix}\varepsilon_0 & M\\ M & \varepsilon_0\end{pmatrix}.$$

Будем искать ее собственные значения ε и собственные векторы $|\varepsilon\rangle$ (тем же методом, что и для матрицы $\hat{P}$ в упомянутой задаче). Они должны удовлетворять уравнению

$$\left(\hat{H} - \varepsilon \hat{1}\right)|\varepsilon\rangle = 0 .$$

Запишем разложение искомых векторов состояния по базисным состояниям $|1\rangle$ и $|2\rangle$:

$$|\varepsilon_1\rangle = C_{11}|1\rangle + C_{21}|2\rangle$$
$$|\varepsilon_2\rangle = C_{12}|1\rangle + C_{22}|2\rangle .$$

Коэффициенты этих разложений найдем из системы уравнений:

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_0 - \varepsilon & M \\ M & \varepsilon_0 - \varepsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{1n} \\ C_{2n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Условие

$$\det \begin{pmatrix} \varepsilon_0 - \varepsilon & M \\ M & \varepsilon_0 - \varepsilon \end{pmatrix} = 0$$

сводится к уравнению для ε

$$(\varepsilon - \varepsilon_0)^2 - M^2 = 0 .$$

Отсюда получаем собственные значения энергии ε:

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_0 + M , \qquad \varepsilon_2 = \varepsilon_0 - M .$$

Для $\varepsilon = \varepsilon_1$ находим, что $C_{11} = C_{21}$, а для $\varepsilon = \varepsilon_2$ – что $C_{12} = -C_{22}$. Точно такими же соотношениями определялись собственные векторы оператора $\hat{P}$ в задаче 3.3, поэтому найденные там собственные векторы (см. формулы (9) и (10)) одновременно являются искомыми векторами стационарных состояний в рассматриваемой модели H_2^+:

$$|\varepsilon_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|2\rangle, \qquad |\varepsilon_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|2\rangle .$$

Этого и следовало ожидать ввиду коммутативности операторов $\hat{P}$ и $\hat{H}$.

Указанное в условии задачи неравенство $M<0$, означает что $M=-|M|$. Поэтому собственные значения энергии можно записать в виде

$$\varepsilon_1=\varepsilon_0-|M|,\qquad \varepsilon_2=\varepsilon_0+|M|.$$

Основным состоянием здесь является $|\varepsilon_1\rangle$. Рис. 3.4 иллюстрирует расщепление уровня ε_0 за счет отличной от нуля величины M.

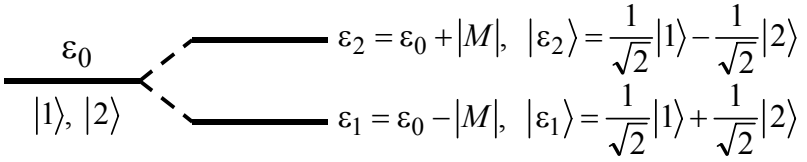

Рис. 3.4

Обратим внимание на то, что в найденных стационарных состояниях вероятность обнаружить электрон вблизи только одного из протонов есть $(1/\sqrt{2})^2=1/2$, то есть электрон «обобществляется» протонами. Поскольку подобное обобществление способно *снизить* энергию системы (одно из двух состояний $|\varepsilon_1\rangle$, $|\varepsilon_2\rangle$ при любом знаке M имеет энергию, меньшую, чем ε_0), оно в рамках рассматриваемой модели служит квантово-механическим объяснением возникновения химической связи между протоном и электронейтральным атомом водорода в реакции $H^+ + H \to H_2^+$.

В таком объяснении притяжения между H^+ и H наиболее существенный аспект – это переходы $|1\rangle \leftrightarrow |2\rangle$: электрон каким-то образом постоянно «перескакивает» от одного протона к другому. Существующая теория не содержит наглядного описания этого явления, и оно не может быть разъяснено на основе классических представлений о движении частиц. Поскольку в состояниях $|1\rangle$ и $|2\rangle$ электрон локализован в одной из двух потенциальных ям, обусловленных его кулоновским притяжением к протонам, а переходы $|1\rangle \leftrightarrow |2\rangle$, следовательно, представляют собой проникновение электрона под потенциальный барьер, то можно сказать, что здесь мы имеем дело с «туннельным эффектом». Конечно, это всего лишь констатация того факта, что вероятность обнаружения электрона в

том или ином месте пространства отлична от нуля даже для точек, разделенных потенциальным барьером, превышающим энергию электрона.

Детальную картину пространственного распределения вероятности дает рассмотрение на основе волновых функций $\psi_1(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | 1 \rangle$, $\psi_2(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | 2 \rangle$; из применяемых нами обозначений ясно, для каких событий эти величины являются амплитудами вероятности. Аналогично вводятся и волновые функции стационарных состояний. После надлежащей нормировки волновой функции ψ плотность вероятности вычисляется как $|\psi(\mathbf{r})|^2$ (в качестве упражнения попробуйте составить себе представление о поведении электронной плотности в каждом из состояний $|1\rangle$, $|2\rangle$, $|\varepsilon_1\rangle$, $|\varepsilon_2\rangle$, начав с графического изображения функций ψ_1, ψ_2 кривыми с максимумом в точках расположения протонов вдоль соединяющей протоны прямой).

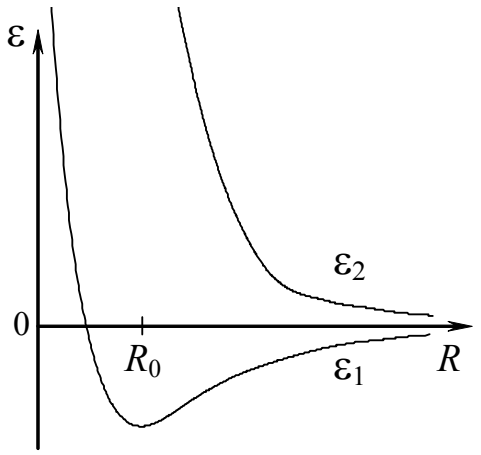

Рис. 3.5

Явно волновые функции определяются уравнением Шредингера. В применении к туннельному эффекту такие расчеты показывают, что вероятность туннелирования электрона на большие расстояния R пренебрежимо мала, причем она по экспоненциальному закону возрастает с уменьшением R; когда же эта вероятность близка к единице, зависимость от R становится гораздо слабее. В рассматриваемой здесь двухуровневой модели это означает, что величина $|M|$ как функция от R ведет себя подобным же образом: она исчезающе мала при $R \to \infty$, но быстро увеличивается с уменьшением R. Затем, однако, доминирующим должен стать другой эффект – увеличение $\varepsilon_0(R)$ вследствие кулоновского отталкивания сближающихся протонов. Мы приходим к выводу, что по указанным причинам энергия основного состояния ($\varepsilon_1(R) = \varepsilon_0 - |M|$) как функция от R приобретает минимум (рис. 3.5). Так объясняется существование устойчивой конфигурации молекулярного иона H_2^+ со

вполне определенным расстоянием между ядрами R_0. (Из опыта известно, что $R_0 \approx 1 \cdot 10^{-8}$ см – величина, сопоставимая с боровским радиусом a_B).

В заключение отметим недостатки рассмотренной модели. Ее, конечно, не следует воспринимать как полновесную квантовую теорию химической связи: без достаточно надежных вычислений волновых функций невозможно количественно исследовать поведение энергетических уровней ε_1 и ε_2 в зависимости от R (реалистические квантовые расчеты свойств H_2^+, допускающие сравнение с экспериментом, см., например, в [7-9]). Очевидно также, что поскольку волновые функции состояний $|1\rangle$ и $|2\rangle$ в пространстве перекрываются друг с другом, исходное предположение об ортогональности этих состояний может быть верным лишь приближенно. Наконец, особо подчеркнем, что при больших R (то есть при $R >> R_0$) состояние $|\varepsilon_1\rangle$ на практике не реализуется, и сила притяжения между H и H^+ меняется с расстоянием по степенному, а не экспоненциальному закону. При больших R на опыте будет наблюдаться состояние типа $|1\rangle$ (или $|2\rangle$). Такое состояние отличается по энергии от основного состояния $|\varepsilon_1\rangle$ всего лишь на экспоненциально малую величину, соответствуя при этом вполне естественной с физической точки зрения картине локализации электрона только у одного ядра; в состоянии же $|\varepsilon_1\rangle$ протоны должны обмениваться электроном, находясь уже на *макроскопическом* расстоянии друг от друга, – подобная картина выглядела бы нереальной (динамический аспект этой ситуации рассматривается в задаче 3.5).

В состояниях типа $|1\rangle$ (или $|2\rangle$) притяжение между атомом H и находящимся на большом расстоянии R от него ядром H^+ обусловлено возникновением у атома H электрического дипольного момента под действием электрического поля лишенного «электронного облака» ядра H^+ (упражнение: приведите аргументы в пользу того, что энергия такого взаимодействия пропорциональна $-1/R^4$).

3.5. Разложим начальное состояние $|1\rangle$ по стационарным состояниям:

$$|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\varepsilon_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\varepsilon_2\rangle$$

и воспользуемся известным законом изменения со временем вектора стационарного состояния, а именно

$$\left|\psi_{\varepsilon_n}(t)\right\rangle = e^{-i\varepsilon_n t/\hbar}|\varepsilon_n\rangle.$$

Таким образом, искомое состояние $|\psi(t)\rangle$ имеет вид:

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\varepsilon_1 t/\hbar}|\varepsilon_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\varepsilon_2 t/\hbar}|\varepsilon_2\rangle, \qquad (1)$$

а среднее значение энергии в этом состоянии есть

$$\langle\varepsilon\rangle = \langle\psi(t)|\hat{H}|\psi(t)\rangle = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 = \varepsilon_0.$$

Амплитуда вероятности обнаружить систему в базисном состоянии $|2\rangle$ есть

$$\langle 2|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\varepsilon_1 t/\hbar}\langle 2|\varepsilon_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\varepsilon_2 t/\hbar}\langle 2|\varepsilon_2\rangle =$$
$$= \frac{1}{2}e^{-i\varepsilon_2 t/\hbar}\left(e^{i(\varepsilon_2-\varepsilon_1)t/\hbar} - 1\right),$$

где мы учли, что $\langle 2|\varepsilon_1\rangle = -\langle 2|\varepsilon_2\rangle = 1/\sqrt{2}$. Следовательно,

$$W_2(t) = \left|\langle 2|\psi(t)\rangle\right|^2 = \frac{1}{4}\left(2 - 2\cos\left(\frac{\varepsilon_2-\varepsilon_1}{\hbar}t\right)\right) = \sin^2\left(|M|\,t/\hbar\right),$$
$$W_1(t) = 1 - W_2(t) = \cos^2\left(|M|\,t/\hbar\right). \qquad (2)$$

Найденные вероятности (2) осциллируют во времени с периодом $\tau = \pi\hbar/|M|$.

Обсудим этот результат применительно к рассмотренной в задаче 3.4 модели «химической связи» двух ядер, обменивающихся электроном. Если для оценки принять, что $|M|$ имеет порядок характерной для атомных систем электронной энергии ($\varepsilon_{эл} \sim Ry$), то получим $\tau \sim 10^{-16}$ с. Даже если величина $|M|$ на несколько порядков меньше указанного масштаба, частота

осцилляций вероятности (2) будет все еще очень высока: столь быстрые изменения вероятности локализации электрона около одного из ядер в системе атомных размеров недоступны непосредственному наблюдению. Поскольку в состоянии (1) распределение плотности «электронного облака» $\left|\left\langle \mathbf{r}\middle|\psi(t)\right\rangle\right|^2$ осциллирует с частотой $\omega = 2\pi/\tau = 2|M|/\hbar$, можно думать, что при более полном описании должны быть существенны процессы излучения или поглощения квантов электромагнитного поля (фотонов) с энергией $\hbar\omega = 2|M| = \varepsilon_2 - \varepsilon_1$. Все это указывает на то, что физически наблюдаемыми базисными состояниями здесь следует считать не $|1\rangle$, $|2\rangle$, а состояния с определенной энергией $|\varepsilon_1\rangle$, $|\varepsilon_2\rangle$ – в соответствии с разложением (1).

При макроскопически большом расстоянии R между ядрами, когда $|M| \to 0$, получаем $\tau \to \infty$. Время перехода $|1\rangle \to |2\rangle$ становится столь большим, что состояния $|1\rangle$, $|2\rangle$ будут практически стационарными. Кроме того, и здесь не следует упускать из виду, что идеализированное описание системы как объекта, оторванного от внешнего мира, тем менее оправдано, чем к более длительному интервалу времени оно относится. На достаточно большом промежутке времени неизбежно станут актуальными процессы взаимодействия с окружающей «средой», в ходе которых система с еще не успевшим измениться начальным состоянием $|1\rangle$ (или $|2\rangle$) будет «регистрироваться» и тем самым «приготавливаться» в этом же начальном состоянии снова и снова. В результате, при достаточно больших R физически наблюдаемыми базисными состояниями становятся $|1\rangle$, $|2\rangle$, а не $|\varepsilon_1\rangle$, $|\varepsilon_2\rangle$.

Физическое содержание ситуации, описываемой формулами (1), (2), не исчерпывается рассмотренным примером. Подобная картина характерна для многих, весьма различных по смыслу задач квантовой физики. Так, в релятивистской физике частиц примерами могут служить осцилляции в системе *K*-мезонов или нейтринные осцилляции – эффекты, связанные с тем, что регистрируемые в эксперименте состояния частиц не обязательно являются состояниями с определенной массой.

3.6. Собственные значения указанного в условии задачи гамильтониана $\hat{H}$ имеют вид:

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 &= \frac{\varepsilon_2^{(0)} + \varepsilon_1^{(0)}}{2} - \sqrt{\left(\varepsilon_2^{(0)} - \varepsilon_1^{(0)}\right)^2 \Big/ 4 + |M|^2}, \\ \varepsilon_2 &= \frac{\varepsilon_2^{(0)} + \varepsilon_1^{(0)}}{2} + \sqrt{\left(\varepsilon_2^{(0)} - \varepsilon_1^{(0)}\right)^2 \Big/ 4 + |M|^2}. \end{aligned} \quad (1)$$

Положение энергетических уровней $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ в зависимости от $|M|$ показано графиками на рис. 3.6. Пунктиром изображен случай $\varepsilon_2^{(0)} = \varepsilon_1^{(0)}$.

Пользуясь тем, что $\sqrt{1+\alpha} \approx 1 + \alpha/2$ при $|\alpha| << 1$, для случая $|M| << \left|\Delta\varepsilon^{(0)}\right|$ находим:

$$\varepsilon_1 \approx \varepsilon_1^{(0)} - |M|^2 \Big/ \left(\varepsilon_2^{(0)} - \varepsilon_1^{(0)}\right), \quad \varepsilon_2 \approx \varepsilon_2^{(0)} + |M|^2 \Big/ \left(\varepsilon_2^{(0)} - \varepsilon_1^{(0)}\right). \quad (2)$$

Эти результаты применимы, в частности, к простейшей модели одноэлектронной химической связи между двумя *неодинаковыми* ионами (то есть – в отсутствие симметрии состояний $|1\rangle$ и $|2\rangle$). Когда ионы одинаковы, энергия связи в подобной модели есть $\varepsilon_0 - \varepsilon_1 = |M|$. Если же ионы различны, то, как видно из (2), энергия связи может быть в $\left|M / \Delta\varepsilon^{(0)}\right|$ раз меньше, чем $|M|$; это позволяет заключить, что одноэлектронная связь между различными ионами менее прочна, чем между одинаковыми.

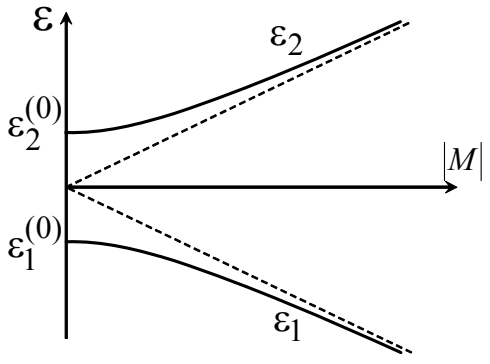

Рис. 3.6

3.7. а) Матрица оператора Гамильтона в исходном базисе с учетом симметрии рассматриваемой молекулы имеет вид:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \varepsilon_0 & M & M \\ M & \varepsilon_0 & M \\ M & M & \varepsilon_0 \end{pmatrix}. \quad (1)$$

(Дополнительная задача: найти матрицы всех имеющихся в данном случае преобразований симметрии и убедиться, что в силу требования коммутативности с такими преобразованиями произвольная эрмитова матрица третьего порядка необходимо приобретает вид матрицы типа (1)). Собственные значения матрицы (1) определяют энергетический спектр:

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_0 - 2|M|, \qquad \varepsilon_2 = \varepsilon_3 = \varepsilon_0 + |M|. \tag{2}$$

В (2) мы учли, что по условию задачи $M < 0$.

Уровень энергии возбужденных состояний здесь двукратно *вырожден*: $\varepsilon_2 = \varepsilon_3$. Это связано с тем, что среди преобразований симметрии в данном случае есть такие, которые не коммутативны друг с другом.

б) Стационарные состояния $|\varepsilon\rangle$, принадлежащие уровням энергии (2), ищем в виде

$$|\varepsilon\rangle = C_1|1\rangle + C_2|2\rangle + C_3|3\rangle. \tag{3}$$

Коэффициенты C_k должны удовлетворять системе уравнений

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_0 - \varepsilon & M & M \\ M & \varepsilon_0 - \varepsilon & M \\ M & M & \varepsilon_0 - \varepsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ C_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{4}$$

и условию нормировки

$$|C_1|^2 + |C_2|^2 + |C_3|^2 = 1. \tag{5}$$

При $\varepsilon = \varepsilon_1$ из (4) следует (с учетом равенства $|M| = -M$), что $C_1 = C_2 = C_3$. В силу (5) эти коэффициенты можно считать равными $1/\sqrt{3}$, так что собственный вектор гамильтониана (1), принадлежащий уровню $\varepsilon = \varepsilon_1$, имеет вид:

$$|\varepsilon_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(|1\rangle + |2\rangle + |3\rangle\right). \tag{6}$$

Для двукратно вырожденного уровня $\varepsilon = \varepsilon_2 = \varepsilon_3$ система уравнений (4) сводится к соотношению

$$C_1 + C_2 + C_3 = 0, \tag{7}$$

которым в рассматриваемом 3-мерном комплексном пространстве состояний определяется 2-мерное подпространство – «плоскость», ортогональная вектору состояния (6). Следовательно, в роли $|\varepsilon_2\rangle$ и $|\varepsilon_3\rangle$ могут выступать два любых взаимно ортогональных нормированных вектора, принадлежащих указанному подпространству, и, таким образом, все собственные векторы оператора $\hat{H}$ можно считать найденными.

Отметим, что более определенный выбор вырожденных стационарных состояний достигается требованием, чтобы искомые векторы состояний были собственными *одновременно* для $\hat{H}$ и для операторов преобразований симметрии, *коммутативных* с $\hat{H}$ и друг с другом. В рассматриваемой задаче достаточно подчинить все искомые $|\varepsilon_n\rangle$, например, уравнению

$$\hat{T}|\varepsilon_n\rangle = \lambda_n|\varepsilon_n\rangle, \tag{8}$$

где $\hat{T}$ – оператор «поворота на 120°», осуществляющий циклическую перестановку состояний $|1\rangle$, $|2\rangle$, $|3\rangle$:

$$\hat{T}|1\rangle = |2\rangle, \qquad \hat{T}|2\rangle = |3\rangle, \qquad \hat{T}|3\rangle = |1\rangle. \tag{9}$$

Нетрудно убедиться (в качестве упражнения), что собственными значениями унитарной матрицы $\hat{T}$, которая определяется равенствами (9), будут

$$\lambda_1 = 1, \qquad \lambda_2 = e^{i2\pi/3}, \qquad \lambda_3 = e^{-i2\pi/3}. \tag{10}$$

Первому из них принадлежит собственный вектор $|\varepsilon_1\rangle$ вида (6), а второму и третьему принадлежат, соответственно,

$$|\varepsilon_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(|1\rangle + e^{-i2\pi/3}|2\rangle + e^{i2\pi/3}|3\rangle\right),$$
$$|\varepsilon_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(|1\rangle + e^{i2\pi/3}|2\rangle + e^{-i2\pi/3}|3\rangle\right). \tag{11}$$

Все найденные таким образом состояния $|\varepsilon_n\rangle$ взаимно ортогональны, нормированы и являются собственными для гамильтониана (1). Отметим также, что в каждом из трех стационарных состояний (6), (11) электрон обнаруживается вблизи любого из атомов с одной и той же вероятностью (равной $|C_k|^2 = 1/3$), то есть он в равной мере «обобществлен» сразу всеми имеющимися атомами.

3.8. а) Замечаем, что

$$\hat{T}_{n'}|R_n\rangle = \sum_{n''} |R_{n''} + R_{n'}\rangle\langle R_{n''}|R_n\rangle = \sum_{n''} |R_{n''} + R_{n'}\rangle\, \delta_{n''n} = |R_n + R_{n'}\rangle,$$

то есть под действием оператора $\hat{T}_{n'}$ всякое состояние $|R_n\rangle$ превращается в физически эквивалентное состояние $|R_n + R_{n'}\rangle$. Из равенства $\hat{T}_n\,\hat{T}_{n'} = \hat{T}_{n+n'} = \hat{T}_{n'}\,\hat{T}_n$ видно, что все операторы трансляций коммутативны друг с другом и, следовательно, имеют общую систему собственных векторов $|q\rangle$.

б) Учтем следствия унитарности операторов трансляций, а именно, – что их собственные значения должны иметь вид фазовых множителей, и обозначим собственные значения для $\hat{T}_1$ как e^{-if_q}:

$$\hat{T}_1|q\rangle = e^{-if_q}|q\rangle. \qquad (1)$$

Поскольку $\hat{T}_n = (\hat{T}_1)^n$, то

$$\hat{T}_n|q\rangle = e^{-inf_q}|q\rangle. \qquad (2)$$

Из равенства $\hat{T}_N = \hat{1}$ следует, что $e^{-iNf_q} = 1$. Отсюда находим величины f_q:

$$f_q = \frac{2\pi}{N} n_q, \text{ где } n_q = \ldots -2,-1,0,1,2\ldots \text{ (всего } N \text{ значений).} \qquad (3)$$

Набор (3) ограничен – он содержит только те числа, которыми определяются *различные* собственные значения e^{-if_q}, причем выбор (3) не

единственен: другие возможные наборы чисел f_q, эквивалентные (3), получаются путем добавления к f_q числа $2\pi k$, где k – любое целое.

Для определения собственных векторов $|q\rangle$, соответствующих (3), найдем коэффициенты $\langle R_n|q\rangle$ в разложении

$$|q\rangle = \sum_n |R_n\rangle \langle R_n|q\rangle. \tag{4}$$

При этом будем считать, что N векторов состояния $|q\rangle$ образуют ортонормированную систему (в силу того, что они принадлежат различным собственным значениям). Замечаем, что

$$\langle R_n|q\rangle = \langle \hat{T}_n R_0|q\rangle = \langle R_0|\hat{T}_n^+|q\rangle. \tag{5}$$

Учитывая унитарность операторов трансляций и равенство (2) запишем:

$$\hat{T}_n^+|q\rangle = \hat{T}_{-n}|q\rangle = e^{inf_q}|q\rangle.$$

Использовав это в правой части равенства (5), получим

$$\langle R_n|q\rangle = e^{inf_q}\langle R_0|q\rangle. \tag{6}$$

В силу (6) и условия нормировки $\langle q|q\rangle = 1$, то есть

$$\langle q|q\rangle = \sum_n |\langle R_n|q\rangle|^2 = |\langle R_0|q\rangle|^2 \sum_n 1 = |\langle R_0|q\rangle|^2 N = 1,$$

величину $\langle R_0|q\rangle$ в (6) можно положить равной $1/\sqrt{N}$. Таким образом, собственные векторы $|q\rangle$ найдены:

$$|q\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n e^{inf_q}|R_n\rangle. \tag{7}$$

Для физической интерпретации величин f_q и состояний $|q\rangle$ сравним (2) с равенством, определяющим оператор импульса через операторы параллельных переносов (см. введение к данной главе). Поскольку $\hat{T}_n$ есть оператор одномерного переноса на «вектор решетки» $R_n = na$,

целесообразно записать фазовый множитель в (2) в виде $e^{-iR_n q/\hbar}$, введя вместо величины f_q так называемый *квазиимпульс* q:

$$q \equiv \frac{\hbar}{a} f_q = \frac{2\pi\hbar}{L} n_q, \text{ где } L = aN,\ n_q = \ldots -2,-1,0,1,2\ldots \text{ (всего } N \text{ значений).} \quad (8)$$

Тогда (7) принимает вид

$$|q\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n e^{iR_n q/\hbar} |R_n\rangle. \quad (9)$$

Это *состояния электрона с определенным квазиимпульсом*. Вследствие отмеченной выше неоднозначности величин f_q, квазиимпульс q определен с точностью до слагаемых, кратных $2\pi\hbar/a$; этим «квазиимпульс» и отличается от «импульса».

в) Эрмитов оператор Гамильтона $\hat{H}$, у которого, согласно условию задачи, отличны от нуля только матричные элементы типа $\langle R_n|\hat{H}|R_n\rangle = \varepsilon_0$ и $\langle R_{n+1}|\hat{H}|R_n\rangle = \langle R_{n-1}|\hat{H}|R_n\rangle = M$, записывается в виде

$$\hat{H} = \sum_n \varepsilon_0 |R_n\rangle\langle R_n| + M \sum_n |R_{n+1}\rangle\langle R_n| + M \sum_n |R_{n-1}\rangle\langle R_n|. \quad (10)$$

Здесь каждая из трех сумм содержит N слагаемых. С помощью операторов трансляций этот гамильтониан можно представить в форме

$$\hat{H} = \varepsilon_0 \hat{1} + M\hat{T}_1 + M\hat{T}_{-1}. \quad (11)$$

Он, очевидно, коммутативен со всеми операторами трансляций, так что состояния с определенным квазиимпульсом (9) являются его собственными векторами. Учитывая, что $M = -|M|$ (вследствие указанного в условии задачи неравенства $M < 0$), а также, что

$$(\hat{T}_1 + \hat{T}_{-1})|q\rangle = (e^{-if_q} + e^{if_q})|q\rangle = 2\cos(qa/\hbar)|q\rangle,$$

получаем

$$\hat{H}|q\rangle = \varepsilon(q)|q\rangle, \quad (12)$$

где

$$\varepsilon(q) = \varepsilon_0 - 2|M| \cos(qa/\hbar). \qquad (13)$$

При $N >> 1$, то есть когда длина цепочки атомов ($L = aN$) берется большой в сравнении с межатомным расстоянием a в ней, спектр значений квазиимпульса q, согласно (8), становится «густым», почти непрерывным. Как видно из (13), то же относится и к спектру $\varepsilon(q)$, образованному N уровнями энергии, распределенными в конечном энергетическом интервале $4|M|$. На рис. 3.7 «зона» энергетических уровней $\varepsilon(q)$ изображена в виде непрерывного графика. Это одна из простейших моделей зонных энергетических спектров, рассматриваемых в физике твердого тела.

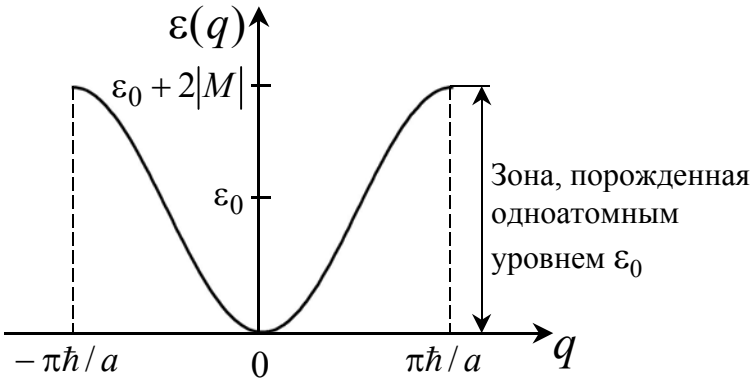

Рис. 3.7

У дна зоны, вблизи уровня основного состояния ($\varepsilon_{\text{осн}} = \varepsilon_0 - 2|M|$), справедливо неравенство $|qa/\hbar| << 1$ и применимо приближенное выражение, получающееся при разложении косинуса в степенной ряд: $\cos(qa/\hbar) \approx 1 - (qa/\hbar)^2/2$. В таком приближении энергия (13), отсчитанная *от уровня основного состояния*, дается выражением

$$\varepsilon_q = \frac{q^2}{2m_{\text{эфф}}}, \qquad (14)$$

имеющим вид энергии свободно движущейся классической частицы с *эффективной массой* $m_{\text{эфф}} = \hbar^2/2a^2|M|$.

Формула (13) имеет смысл и при не очень больших $N \geq 3$ – как модельное описание одноэлектронного энергетического спектра кольцеобразных молекул. В частности, при $N = 3$, выбрав в (8), например, $n_q = -1, 0, 1$, приходим с помощью (13) к картине энергетических уровней, полученной в задаче 3.7.

Представленный здесь формализм допускает также совершенно иную интерпретацию. По существу, в данной модели было использовано лишь предположение о том, что электрон способен каким-то образом перемещаться между физически эквивалентными областями пространства. Поэтому допустимо формально рассматривать параметр a как бесконечно малый интервал длины dx на координатной оси x и совершить предельный переход к $a \to 0$, $N \to \infty$, $|M| \to \infty$, причем таким образом, чтобы оставались конечными произвольно заданный макроскопический масштаб длины $L = aN$ и параметр с размерностью массы $\hbar^2 / 2a^2 |M| \equiv m$. Результатом этого предельного перехода является квантово-механическое описание одномерного *свободного движения* частицы с произвольной массой m на отрезке длиной L с «периодическими граничными условиями». При конечных значениях «квазиимпульс» (8) приобретает смысл обычного импульса. Формула (9), в которой теперь $|R_n\rangle$ следует понимать как состояние $|x\rangle$ частицы с определенным значением непрерывной координаты x, ведет к преобразованию Фурье, связывающему в квантовой механике координатное и импульсное представления. Энергетический спектр свободной нерелятивистской частицы при конечных значениях энергии дается формулой (14) с заранее заданным значением массы, то есть $\varepsilon_q = q^2 / 2m$. В свою очередь, это означает, что гамильтониан свободной частицы имеет вид $\hat{H} = \hat{q}^2 / 2m$, где $\hat{q}$ – оператор импульса. Обобщение на случаи двумерного или трехмерного движения происходит без привлечения существенно новых идей.

Мы видим, таким образом, что принципы квантовой механики очень глубоки и позволяют целый ряд, казалось бы, разнородных вопросов рассматривать с единой точки зрения – от картины дискретных уровней энергии молекул до зонного спектра кристаллов (отражающего, в частности, то неочевидное с позиций классической физики обстоятельство, что в регулярной решетке электрон в слабо возбужденных состояниях ведет себя подобно свободной частице с эффективной массой), включая как своеобразный предельный случай и собственно свободное движение.

3.9. Гамильтониан системы имеет вид

$$\hat{H} = \hat{K} + \hat{U}_1 + \hat{U}_2, \tag{1}$$

а стационарные состояния $|\psi\rangle$ и соответствующие им значения энергии ε должны удовлетворять уравнению

$$(\hat{K} + \hat{U}_1 + \hat{U}_2)|\psi\rangle = \varepsilon|\psi\rangle. \tag{2}$$

Будем искать $|\psi\rangle$ в виде линейной комбинации указанных в условии задачи состояний $|1\rangle$, $|2\rangle$ с пока неизвестными коэффициентами C_1, C_2:

$$|\psi\rangle = C_1|1\rangle + C_2|2\rangle. \tag{3}$$

Подставив (3) в (2) и приняв во внимание равенства

$$\left(\hat{K} + \hat{U}_1\right)|1\rangle = \varepsilon_0|1\rangle, \qquad \left(\hat{K} + \hat{U}_2\right)|2\rangle = \varepsilon_0|2\rangle, \tag{4}$$

придем к уравнению:

$$C_1(\varepsilon_0 - \varepsilon)|1\rangle + C_1\hat{U}_2|1\rangle + C_2(\varepsilon_0 - \varepsilon)|2\rangle + C_2U_1|2\rangle = 0. \tag{5}$$

Скалярно умножая левую и правую стороны (5) на $|1\rangle$, а также – на $|2\rangle$, получаем систему однородных уравнений для неизвестных постоянных C_1, C_2:

$$\begin{cases} \left((\varepsilon_0 - \varepsilon) + \langle 1|\hat{U}_2|1\rangle\right) C_1 + \left((\varepsilon_0 - \varepsilon)\langle 1|2\rangle + \langle 1|\hat{U}_1|2\rangle\right) C_2 = 0 \\ \left((\varepsilon_0 - \varepsilon)\langle 2|1\rangle + \langle 2|\hat{U}_2|1\rangle\right) C_1 + \left((\varepsilon_0 - \varepsilon) + \langle 2|\hat{U}_1|2\rangle\right) C_2 = 0 \end{cases}.$$

Поскольку потенциальные ямы U_1 и U_2 имеют одинаковую форму, величина $\langle 1|\hat{U}_2|1\rangle$, представляющая собой усредненную энергию взаимодействия электрона в состоянии $|1\rangle$ с центром притяжения, расположенным в точке $\mathbf{r}_2$, должна быть равна аналогичной величине $\langle 2|\hat{U}_1|2\rangle$. Обозначим эти вещественные величины посредством α:

$$\langle 1|\hat{U}_2|1\rangle = \langle 2|\hat{U}_1|2\rangle = \alpha. \tag{6}$$

С учетом подобных соображений симметрии запишем:

$$\langle 2|\hat{U}_2|1\rangle = \langle 1|\hat{U}_1|2\rangle = \beta. \qquad (7)$$

Кроме того, обозначим посредством γ величину $\langle 1|2\rangle$, являющуюся мерой неортогональности состояний $|1\rangle$, $|2\rangle$. Другими словами, γ – мера перекрытия «хвостов» волновых функций $\langle \mathbf{r}|1\rangle$ и $\langle \mathbf{r}|2\rangle$. Будем считать, что при надлежащем выборе фаз векторов состояний $|1\rangle$, $|2\rangle$ величины β и γ вещественны, причем

$$\langle 1|2\rangle = \langle 2|1\rangle = \gamma > 0. \qquad (8)$$

С введенными обозначениями система уравнений для C_1 и C_2 принимает вид:

$$\begin{cases} ((\varepsilon_0 - \varepsilon) + \alpha) C_1 + ((\varepsilon_0 - \varepsilon)\gamma + \beta) C_2 = 0 \\ ((\varepsilon_0 - \varepsilon)\gamma + \beta) C_1 + ((\varepsilon_0 - \varepsilon) + \alpha) C_2 = 0 \end{cases}. \qquad (9)$$

Такая система имеет нетривиальные решения только в том случае, когда определитель, составленный из коэффициентов при неизвестных, равен нулю:

$$((\varepsilon_0 - \varepsilon) + \alpha)^2 - ((\varepsilon_0 - \varepsilon)\gamma + \beta)^2 = 0. \qquad (10)$$

Корни ε_1, ε_2 получившегося таким образом уравнения для ε служат допустимыми значениями энергии:

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_0 + \frac{\alpha + \beta}{1 + \gamma}, \qquad \varepsilon_2 = \varepsilon_0 + \frac{\alpha - \beta}{1 - \gamma}. \qquad (11)$$

Из оценок $\alpha \sim \varepsilon_0 \gamma^2$, $\beta \sim \varepsilon_0 \gamma$ видно, что при малом перекрытии состояний $|1\rangle$ и $|2\rangle$ (при $\gamma << 1$) величина β играет более важную роль, чем α. Поскольку потенциальная энергия притяжения отрицательна, необходимо считать, что $\beta < 0$; тогда основному состоянию соответствует энергетический уровень ε_1, то есть $\varepsilon_1 < \varepsilon_2$.

Значению $\varepsilon = \varepsilon_1$ отвечает решение $C_1 = C_2$, так что нормированный вектор состояния, описывающий состояние с наименьшей энергией, имеет вид:

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1\rangle + |2\rangle\right).$$

Значению $\varepsilon = \varepsilon_2$ отвечает решение $C_1 = -C_2$, так что

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1\rangle - |2\rangle\right).$$

Качественно эти результаты совпадают с теми, которые были получены в задаче 3.4 без учета неортогональности состояний $|1\rangle$ и $|2\rangle$.

3.10. а) Скалярно умножая левую и правую части приведенных в условии задачи равенств

$$\hat{c}\,|1\rangle = |0\rangle, \qquad \hat{c}\,|0\rangle = 0, \tag{1}$$

на $|0\rangle$, а также на $|1\rangle$, находим вид оператора $\hat{c}$ в матричном представлении:

$$\hat{c} = \begin{pmatrix} c_{00} & c_{01} \\ c_{10} & c_{11} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{2}$$

где $c_{nn'} = \langle n|\hat{c}|n'\rangle$. Матрица, эрмитово сопряженная по отношению к матрице $\hat{c}$, имеет вид:

$$\hat{c}^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{3}$$

Действуя этой матрицей на столбцы, изображающие компоненты базисных векторов,

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \tag{4}$$

получаем:

$$\hat{c}^+\,|0\rangle = |1\rangle, \qquad \hat{c}^+\,|1\rangle = 0. \tag{5}$$

Таким образом, если $\hat{c}$ – оператор, уничтожающий возбужденное состояние, то $\hat{c}^+$ – «повышающий» оператор: действуя на основное состояние, он порождает возбужденное состояние системы.

б) Перемножение матриц (2) и (3) дает:

$$\hat{c}\,\hat{c}^+ = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \hat{c}^+\,\hat{c} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{6}$$

Следовательно:

$$\{\hat{c}, \hat{c}^+\} \equiv \hat{c}\hat{c}^+ + \hat{c}^+\hat{c} = 1. \tag{7}$$

Аналогично проверяется, что $\hat{c}\,\hat{c} = 0$, $\hat{c}^+\hat{c}^+ = 0$, и, следовательно,

$$\{\hat{c}, \hat{c}\} = 0, \qquad \{\hat{c}^+, \hat{c}^+\} = 0. \tag{8}$$

в) Из (6) видно, что оператор $\varepsilon_1 \hat{c}^+\,\hat{c}$ в базисе $|0\rangle$, $|1\rangle$ имеет диагональную форму, причем состояния $|0\rangle$ и $|1\rangle$ принадлежат собственным значениям $\varepsilon_0 = 0$ и ε_1, соответственно. Поэтому данный оператор можно трактовать как гамильтониан рассматриваемой системы:

$$\hat{H} = \varepsilon_1 \hat{c}^+\,\hat{c}. \tag{9}$$

Операторы $\hat{c}$ и $\hat{c}^+$, характеризующиеся свойствами (7)–(8), называют *фермионными операторами уничтожения и рождения*; такие операторы широко используются в задачах квантовой статистической физики.

3.11. а) Поскольку при $\alpha = 0$ все фотоны, падающие на второй поляризатор, проходят сквозь него, можно считать, что в этом случае $|\tilde{x}\rangle = |x\rangle$. При $\alpha = \pi/2$ можно считать, что $|\tilde{x}\rangle = |y\rangle$, так как при этом значении угла все фотоны поглощаются. Тогда разумно предположить, что оператор поворота $\hat{R}(\alpha \mathbf{e}_z)$ должен действовать на базисные состояния линейной поляризации $|x\rangle$ и $|y\rangle$ таким же образом, как он действовал бы на обычные орты декартовой системы координат $\mathbf{e}_x$ и $\mathbf{e}_y$. При этом, как ясно из приведенного в условии задачи рисунка, будут справедливы следующие равенства:

$$\begin{aligned} |\widetilde{x}\rangle &= \hat{R}(\alpha \mathbf{e}_z)|x\rangle = \cos\alpha\,|x\rangle + \sin\alpha\,|y\rangle, \\ |\widetilde{y}\rangle &= \hat{R}(\alpha \mathbf{e}_z)|y\rangle = -\sin\alpha\,|x\rangle + \cos\alpha\,|y\rangle. \end{aligned} \tag{1}$$

Скалярно умножив эти выражения на $|x\rangle$ и $|y\rangle$, находим матрицу поворота в базисе $|x\rangle$, $|y\rangle$:

$$\hat{R}(\alpha \mathbf{e}_z) = \begin{pmatrix} \langle x|\widetilde{x}\rangle & \langle x|\widetilde{y}\rangle \\ \langle y|\widetilde{x}\rangle & \langle y|\widetilde{y}\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha \\ \sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix}. \tag{2}$$

Интерпретируя теперь элементы этой матрицы как соответствующие амплитуды вероятности, получаем искомые формулы для вероятности прохождения и вероятности поглощения фотона:

$$\begin{aligned} W_{\text{прох}} &= \left|\langle x|\widetilde{x}\rangle\right|^2 = \cos^2\alpha, \\ W_{\text{погл}} &= \left|\langle y|\widetilde{x}\rangle\right|^2 = \sin^2\alpha. \end{aligned} \tag{3}$$

Этот результат в точности согласуется с известным из опыта законом Малюса для интенсивности света, проходящего через скрещенные поляризаторы.

б) Оператор $\hat{J}_z$ определяется равенством: $\hat{R}(\alpha \mathbf{e}_z) \equiv e^{-i\alpha \hat{J}_z} \approx \hat{1} - i\alpha \hat{J}_z$ при $\alpha \to 0$. Разложив тригонометрические функции в (2) в ряд по степеням α и ограничиваясь линейным приближением, замечаем, что:

$$\begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha \\ \sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} 1 & -\alpha \\ \alpha & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - i\alpha \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}.$$

Отсюда находим матрицу $\hat{J}_z$ в базисе $|x\rangle$, $|y\rangle$:

$$\hat{J}_z = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \tag{4}$$

Решив для матрицы (4) уже хорошо известную нам «задачу на собственные значения», получаем два собственных значения проекции момента импульса фотона на ось z (выбранную вдоль направления распространения света) и принадлежащие им собственные векторы. Если

для удобства обозначить эти значения J_z как λ, то результат запишется в виде $\lambda = \lambda_+,\ \lambda_-$, где

$$\lambda_+ = +1, \qquad \lambda_- = -1, \tag{5}$$

причем соответствующими векторами состояния фотона будут (с точностью до произвольного фазового множителя):

$$\left|\lambda_+\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left|x\right\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}}\left|y\right\rangle, \qquad \left|\lambda_-\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left|x\right\rangle - \frac{i}{\sqrt{2}}\left|y\right\rangle. \tag{6}$$

Примечательное свойство состояний (6) заключается в том, что под действием поворота вокруг направления распространения фотона у них изменяется лишь фазовый множитель:

$$\begin{aligned} \hat{R}(\alpha\mathbf{e}_z)\left|\lambda_+\right\rangle &= e^{-i\alpha\lambda_+}\left|\lambda_+\right\rangle = e^{-i\alpha}\left|\lambda_+\right\rangle, \\ \hat{R}(\alpha\mathbf{e}_z)\left|\lambda_-\right\rangle &= e^{-i\alpha\lambda_-}\left|\lambda_-\right\rangle = e^{i\alpha}\left|\lambda_-\right\rangle. \end{aligned} \tag{7}$$

Обсудим физический смысл этих результатов. В общем случае под действием произвольных поворотов квантовое состояние $\left|\psi\right\rangle$ любой частицы так или иначе преобразуется: например, состояние движения в каком-либо направлении $\mathbf{p}$ переходит в состояние с другим направлением движения. Это означает, что в разложении оператора поворота $\hat{R}(\alpha\mathbf{n}) = \hat{1} - i\alpha\,\mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{J}} + \ldots$ члены с $\hat{\mathbf{J}}$ существенны и, следовательно, состояние $\left|\psi\right\rangle$ обладает не равным нулю моментом импульса. (Действительно, в противном случае, когда любой поворот $\hat{R}$ действует как $\hat{1}$, справедливо равенство $\hat{\mathbf{J}}\left|\psi\right\rangle = 0\left|\psi\right\rangle$, и из него следует, что данное $\left|\psi\right\rangle$ есть состояние с определенным – *равным нулю* – моментом импульса).

В случае массивной частицы (с массой $m \neq 0$) такое рассмотрение можно провести, в частности, в ее «системе покоя», то есть для состояния с импульсом $\mathbf{p} = 0$; при этом координатная часть волновой функции тривиальна – равна нормировочной константе. Если повороты меняют состояние покоящейся частицы, значит частица обладает собственным моментом импульса, не связанным с орбитальным движением; это так называемый *спин* частицы.

Фотон, как и всякая безмассовая частица, не имеет системы покоя: при $\mathbf{p}=0$ энергия фотона ($\varepsilon(\mathbf{p})=c|\mathbf{p}|$) обращается в нуль, так что фотоны с равным нулю импульсом не существуют. Однако можно, придерживаясь некоторой аналогии со спином нерелятивистских частиц, ввести представление о спине фотона, если рассматривать поведение фотонных состояний при поворотах, не меняющих направление распространения. Тогда уже сам факт преобразования фотонных состояний (1) свидетельствует о том, что *фотон обладает спином*.

Формулы (5) дают спектр значений проекции фотонного спина на ось z, выбранную вдоль направления распространения света. Абсолютная величина спина считается равной максимальному значению проекции спина; таким образом, из (5) следует, что *спин фотона равен единице* (в единицах $\hbar$) и может быть только параллельным либо антипараллельным направлению распространения. Если состояниям с линейной поляризацией $|x\rangle$, $|y\rangle$ сопоставить классическую картину электромагнитной волны с электрическим полем $\mathbf{E}$, параллельным оси x или оси y, соответственно, то состояниям (6) будет отвечать картина вращающегося (вокруг оси z) поля $\mathbf{E}$, поскольку именно в такой картине поворот поля вокруг оси z сводится лишь к изменению фазы вращения. Таким образом, можно интерпретировать состояние фотона $|\lambda_+\rangle$, характеризующееся моментом импульса $J_z=+1$, как состояние с *правой круговой поляризацией*, а состояние $|\lambda_-\rangle$, которому отвечает $J_z=-1$, – как состояние с *левой круговой поляризацией*. (В качестве упражнения ответьте на вопросы: какова вероятность прохождения через поляризатор для фотонов в состояниях (6), с какой вероятностью у фотона в состояниях с линейной поляризацией будут обнаруживаться различные возможные значения J_z, и чему равно среднее значение $\langle J_z\rangle$ в этих состояниях?)

Соотношения, обратные к (6), имеют вид:

$$|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\lambda_+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\lambda_-\rangle, \qquad |y\rangle = \frac{1}{i\sqrt{2}}|\lambda_+\rangle - \frac{1}{i\sqrt{2}}|\lambda_-\rangle. \tag{8}$$

Ортонормированные пары $|x\rangle$, $|y\rangle$ и $|\lambda_+\rangle$, $|\lambda_-\rangle$ в равной мере пригодны для описания двух линейно независимых состояний поляризации фотона.

Поскольку состояния $|x\rangle$, $|y\rangle$ при поворотах ведут себя как обычные трехмерные орты $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y$, возникает вопрос – не следует ли включить в рассмотрение третье состояние поляризации, $|z\rangle$, аналогичное орту $\mathbf{e}_z$? Для безмассовых частиц, таких как фотон, ответ отрицательный: релятивистская квантовая теория показывает, что «продольные» фотоны не существуют вследствие того, что скорость распространения фотонов всегда равна предельной величине, то есть c (в классической электродинамике этому факту соответствует известное свойство *поперечности* электромагнитных волн). Однако мы можем гипотетически рассмотреть *массивную* частицу со спином $J=1$; для нее состояние $|z\rangle$ с линейной поляризацией вдоль оси z имеет смысл. Очевидно, матрица поворота $\hat{R}(\alpha\mathbf{e}_z)$ и, соответственно, матрица оператора проекции спина на ось z в базисе $|x\rangle$, $|y\rangle$, $|z\rangle$ будут иметь вид:

$$\hat{R}(\alpha\mathbf{e}_z)=\begin{pmatrix}\cos\alpha & -\sin\alpha & 0\\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}, \qquad \hat{J}_z=\begin{pmatrix}0 & -i & 0\\ i & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}. \tag{9}$$

Собственными значениями J_z теперь являются три числа, $\lambda_+=+1$, $\lambda_-=-1$, $\lambda_0=0$, причем последнему из них принадлежит собственный вектор $|\lambda_0\rangle=|z\rangle$, инвариантный относительно поворотов вокруг оси z. Произвольное спиновое состояние $|J=1\rangle$ частицы со спином единица представляется, согласно квантово-механическому принципу суперпозиции, разложением по любому из допустимых наборов базисных состояний, например:

$$|J=1\rangle = A_+|\lambda_+\rangle + A_-|\lambda_-\rangle + A_0|\lambda_0\rangle. \tag{10}$$

Еще раз подчеркнем, что реальные фотоны не имеют состояния с продольной поляризацией $|\lambda_0\rangle$, то есть амплитуда вероятности обнаружения фотона в таком состоянии всегда равна нулю: $A_0=0$.

3.12. Запишем вектор состояния системы в виде

$$|\Phi\rangle = \sum_a \sum_b \Phi_{ab} \, |a\rangle_1 \otimes |b\rangle_2 ,$$

где $|a\rangle_1$ и $|b\rangle_2$ – базисные состояния подсистем «1» и «2», соответственно. Если подсистемы находятся в чистых состояниях (см. обсуждение в задаче 2.8), то $\Phi_{ab} = \psi_a \chi_b$, так что

$$|\Phi\rangle = \left(\sum_a \psi_a |a\rangle_1 \right) \otimes \left(\sum_b \chi_b |b\rangle_2 \right) = |\psi\rangle_1 \otimes |\chi\rangle_2 .$$

Поскольку $\hat{f}$ действует только на состояния подсистемы «1», а $\hat{g}$ – на состояния подсистемы «2», то

$$\hat{f}\,\hat{g}|\Phi\rangle = \hat{f}|\psi\rangle_1 \otimes \hat{g}\,|\chi\rangle_2$$

и поэтому

$$\langle f\ g\rangle = \langle\Phi|\hat{f}\,\hat{g}|\Phi\rangle = \langle\psi|\hat{f}|\psi\rangle\,\langle\chi|\hat{g}|\chi\rangle = \langle f\rangle_1 \langle g\rangle_2 ,$$

что и требовалось показать для случая чистых состояний подсистем.

В общем случае

$$\hat{f}\,\hat{g}|\Phi\rangle = \sum_a \sum_b \Phi_{ab}\ \hat{f}|\ a\rangle_1 \otimes \hat{g}|\ b\rangle_2 ,$$

так что

$$\langle\Phi|\hat{f}\,\hat{g}|\Phi\rangle = \sum_{a'} \sum_{b'} \sum_a \sum_b \Phi^*_{a'b'} \Phi_{ab} \langle a'|\hat{f}|\ a\rangle\langle b'|\ \hat{g}|\ b\rangle ,$$

то есть

$$\langle f\ g\rangle = \sum_{a'} \sum_{b'} \sum_a \sum_b \Phi_{ab} \Phi^*_{a'b'} f_{a'a}\ g_{b'b} .$$

При наличии корреляции статистических свойств подсистем $\Phi_{ab} \neq \psi_a \chi_b$, и равенство среднего значения произведения величин произведению средних уже не имеет места.

Отметим, что для вычисления средних значений физической величины, относящейся только к одной подсистеме, например, к первой, можно положить второй оператор равным $\hat{1}$, так что $g_{b'b} = \delta_{b'b}$. Получаем:

$$\langle f \rangle = \sum_a \sum_{a'} \rho_{aa'} f_{a'a} \equiv \mathrm{Sp}(\hat{\rho}\hat{f}),$$

где матрица $\hat{\rho}$ с элементами

$$\rho_{aa'} = \sum_b \Phi_{ab} \Phi^*_{a'b}$$

называется *матрицей плотности* для подсистемы «1». Знак Sp (шпур) означает операцию вычисления *следа* матрицы, то есть суммы диагональных элементов. Таким образом, смешанное состояние подсистемы описывается матрицей плотности, позволяющей находить средние значения любых физических величин, относящихся к данной подсистеме. Диагональный элемент матрицы плотности

$$\rho_{aa} = \sum_b \left| \Phi_{ab} \right|^2$$

представляет собой вероятность обнаружения подсистемы в состоянии $|a\rangle$ при заданном состоянии системы $|\Phi\rangle$.

3.13. Те собственные векторы $|k\rangle$, которые принадлежат дискретным собственным значениям оператора $\hat{f}$, обладают сходящимся нормировочным интегралом и поэтому могут быть нормированы на единицу:

$$\langle k | k \rangle = 1. \qquad (1)$$

Дифференцируя обе стороны равенства (1) по λ и обозначая $\partial |k\rangle / \partial\lambda = |\tilde{k}\rangle$, получаем:

$$\langle \tilde{k} | k \rangle + \langle k | \tilde{k} \rangle = 0. \qquad (2)$$

Скалярно умножив на $|k\rangle$ обе стороны равенства

$$\hat{f} |k\rangle = f_k |k\rangle \qquad (3)$$

и продифференцировав по λ получившееся с учетом (1) соотношение

$$\langle k|\hat{f}|k\rangle = f_k\,, \tag{4}$$

имеем:

$$\langle \widetilde{k}\,|\hat{f}|k\rangle + \langle k|\frac{\partial\hat{f}}{\partial\lambda}|k\rangle + \langle k|\hat{f}|\widetilde{k}\,\rangle \;=\; \frac{\partial f_k}{\partial\lambda}\,. \tag{5}$$

Здесь первое слагаемое в силу (3) равно $f_k\langle \widetilde{k}\,|k\rangle$; третье слагаемое с учетом эрмитовости оператора $\hat{f}$ и вещественности его собственных значений принимает вид

$$\langle k|\hat{f}|\widetilde{k}\,\rangle = \langle \hat{f}k|\widetilde{k}\,\rangle = f_k\langle k|\widetilde{k}\,\rangle\,. \tag{6}$$

Таким образом, с учетом (2) два упомянутых члена в левой стороне (5) взаимно уничтожаются, и мы приходим к равенству, в справедливости которого требовалось убедиться:

$$\langle k|\frac{\partial\hat{f}}{\partial\lambda}|k\rangle \;=\; \frac{\partial f_k}{\partial\lambda}\,. \tag{7}$$

3.14. Выпишем производные по λ для операторного выражения

$$\hat{B}(\lambda) = e^{\lambda\hat{A}}\hat{B}(0)e^{-\lambda\hat{A}}\,. \tag{1}$$

Первая производная есть

$$\frac{d\hat{B}(\lambda)}{d\lambda} \;=\; \hat{A}e^{\lambda\hat{A}}\hat{B}(0)e^{-\lambda\hat{A}} - e^{\lambda\hat{A}}\hat{B}(0)e^{-\lambda\hat{A}}\hat{A} \;=\; \hat{A}\hat{B}(\lambda) - \hat{B}(\lambda)\hat{A}\,,$$

то есть

$$\frac{d\hat{B}(\lambda)}{d\lambda} \;=\; [\hat{A},\hat{B}(\lambda)]\,. \tag{2}$$

Дифференцируя по λ левую и правую стороны равенства (2), воспользуемся этим же самым равенством:

$$\frac{d^2\hat{B}(\lambda)}{d\lambda^2} \;=\; [\hat{A},[\hat{A},\hat{B}(\lambda)]]\,, \tag{3}$$

и так далее. Ряд Тейлора по степеням λ для оператора (1) имеет вид:

$$e^{\lambda\hat{A}}\hat{B}(0)e^{-\lambda\hat{A}} = \hat{B}(0) + \sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n!}\left.\frac{d^n\hat{B}(\lambda)}{d\lambda^n}\right|_{\lambda=0}\lambda^n. \qquad (4)$$

Подставляя в (4) найденные производные в форме коммутаторов, обозначая $\hat{B}(0)=\hat{B}$, и полагая $\lambda=1$, приходим к искомому операторному равенству:

$$e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}} = \hat{B}+[\hat{A},\hat{B}]+\frac{1}{2!}[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]]+\frac{1}{3!}[\hat{A},[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]]]+\dots . \qquad (5)$$

3.15. а) Рассмотрим след произведения нескольких, например трех, операторов:

$$\mathrm{Sp}\,(\hat{A}\hat{B}\hat{C}) = \sum_n\sum_{n'}\sum_{n''}A_{nn'}B_{n'n''}C_{n''n} = \sum_n\sum_{n'}\sum_{n''}C_{n''n}A_{nn'}B_{n'n''} = \mathrm{Sp}\,(\hat{C}\hat{A}\hat{B}). \qquad (1)$$

Подобным же образом доказывается допустимость циклической перестановки операторов под знаком следа при любом числе операторных сомножителей.

б) В формуле перехода от «n-представления» к «k-представлению»

$$\langle k|\hat{A}|k'\rangle = \sum_n\sum_{n'}\langle k|n\rangle\langle n|\hat{A}|n'\rangle\langle n'|k'\rangle \qquad (2)$$

положим $k'=k$ и проведем суммирование по k; получаем выражение для $\mathrm{Sp}\,\hat{A}$ в «k-представлении»:

$$\mathrm{Sp}\,\hat{A} = \sum_k\langle k|\hat{A}|k\rangle = \sum_k\sum_n\sum_{n'}\langle k|n\rangle\langle n|\hat{A}|n'\rangle\langle n'|k\rangle. \qquad (3)$$

С учетом равенства

$$\sum_k\langle n'|k\rangle\langle k|n\rangle = \langle n'|n\rangle = \delta_{n'n} \qquad (4)$$

формула (3) принимает вид:

$$\mathrm{Sp}\,\hat{A} = \sum_k\langle k|\hat{A}|k\rangle = \sum_n\langle n|\hat{A}|n\rangle. \qquad (5)$$

Правая сторона в (5) есть $\mathrm{Sp}\,\hat{A}$ в «n-представлении». Таким образом, величина $\mathrm{Sp}\,\hat{A}$ не зависит от выбора представления.

К этому же выводу легко придти, пользуясь символическими обозначениями матриц. Пусть $\hat{A}$ есть матрица рассматриваемого оператора в «n-представлении», $\hat{A}'$ – матрица того же самого оператора в «k-представлении». Из (4) ясно, что $\langle k|n\rangle = U_{kn}$ и $\langle n'|k\rangle = (\hat{U}^{-1})_{n'k}$ являются элементами взаимно обратных матриц $\hat{U}$ и $\hat{U}^{-1}$, поэтому правило перехода (2) в матричных обозначениях имеет вид:

$$\hat{A}' = \hat{U}\,\hat{A}\,\hat{U}^{-1}. \tag{6}$$

Беря след в обеих сторонах равенства (6) и циклически переставляя матричные сомножители под знаком следа, приходим к искомому результату:

$$\mathrm{Sp}\,\hat{A}' = \mathrm{Sp}\,\hat{U}\hat{A}\hat{U}^{-1} = \mathrm{Sp}\,\hat{A}\hat{U}\hat{U}^{-1} = \mathrm{Sp}\,\hat{A}. \tag{7}$$

3.16. Воспользуемся тем представлением, в котором матрица оператора $\hat{A}$ имеет диагональный вид. Для эрмитова оператора такое представление заведомо существует, оно реализуется в ортонормированном базисе, построенном из собственных векторов оператора $\hat{A}$. В этом базисе диагональный вид будет иметь и матрица $\exp\hat{A}$:

$$(\exp\hat{A})_{n'n} = e^{A_n}\,\delta_{n'n}, \tag{1}$$

где A_n – собственные значения оператора $\hat{A}$. Следовательно,

$$\det(\exp\hat{A}) = \prod_n e^{A_n} = \exp\sum_n A_n = e^{\mathrm{Sp}\,\hat{A}}. \tag{2}$$

Таким образом, в рассматриваемом представлении получено равенство:

$$\det(\exp\hat{A}) = \exp(\mathrm{Sp}\,\hat{A}). \tag{3}$$

Нам осталось убедиться, что это соотношение справедливо во всех представлениях. Согласно результату задачи 3.15, величина $\exp(\mathrm{Sp}\,\hat{A})$ не должна меняться при изменении базиса. Покажем, что и величина определителя матрицы любого оператора не зависит от выбора представления.

Применим к матрице произвольного оператора $\hat{B}$ (в частности, $\hat{B} = \exp\hat{A}$) формулу преобразования (6) из задачи 3.15: $\hat{B}' = \hat{U}\hat{B}\hat{U}^{-1}$. Поскольку определитель произведения матриц равен произведению их определителей, то $\det\hat{U}^{-1} = 1/\det\hat{U}$ и

$$\det\hat{B}' = \det\,\hat{U}\hat{B}\hat{U}^{-1} = \det\hat{U}\,\det\hat{B}\,\det\hat{U}^{-1} = \det\hat{B}, \qquad (4)$$

что и требовалось показать.

4. ВОЛНОВАЯ ФУНКЦИЯ. УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

Представление о частице в квантовой механике основано на существовании процессов (событий), интерпретируемых как обнаружение частицы в той или иной точке пространства $\mathbf{r}$; такие события можно трактовать как акты *измерения координат* частицы. Состояние частицы описывается функцией $\psi(\mathbf{r},t)$, квадрат модуля которой равен *плотности вероятности* значений координат: $\left|\psi(\mathbf{r},t)\right|^2 dV$ есть вероятность того, что измерение координат даст значения x, y, z в элементе объема $dV = dx\,dy\,dz$, относящемся к точке $\mathbf{r} = x\,\mathbf{e}_x + y\,\mathbf{e}_y + z\,\mathbf{e}_z$. Функция $\psi(\mathbf{r},t)$ называется *волновой функцией* частицы.

В формализме векторов состояния волновая функция ψ имеет смысл амплитуды вероятности $\langle\mathbf{r}|\psi\rangle$ (с точностью до постоянного множителя, связанного с выбором нормировки) и задает вектор состояния частицы $|\psi\rangle$ в координатном представлении:

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

Под действием операторов бесконечно малого перемещения

$$\hat{T}(\delta\mathbf{r}) \;=\; \sum_{\mathbf{r}} |\,\mathbf{r}+\delta\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}| \;=\; \sum_{\mathbf{r}} |\,\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}-\delta\mathbf{r}|$$

вектор состояния частицы принимает вид

$$\hat{T}(\delta\mathbf{r})|\psi\rangle = \sum_{\mathbf{r}} |\,\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}-\delta\mathbf{r}|\psi\rangle .$$

Это означает, что действие таких операторов на волновую функцию определяется равенством

$$\hat{T}(\delta\mathbf{r})\,\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}-\delta\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}) - \delta\mathbf{r}\cdot\nabla\psi(\mathbf{r}),\ \delta\mathbf{r}\to 0,$$

то есть в координатном представлении операторы $\hat{T}(\delta\mathbf{r})$ записываются в форме

$$\hat{T}(\delta\mathbf{r}) = 1 - \delta\mathbf{r}\cdot\nabla, \qquad \delta\mathbf{r} \to 0. \tag{I}$$

Под $\hat{T}(\delta\mathbf{r})$ в (I) следует понимать операторы параллельных переносов (тогда $\delta\mathbf{r} = \mathbf{a}$) или поворотов ($\delta\mathbf{r} = \alpha\mathbf{n}\times\mathbf{r}$). Как указывалось в главе 3, этими операторами определяются операторы импульса $\hat{\mathbf{p}}$ и момента импульса $\hbar\hat{\mathbf{l}}$, соответственно (орбитальный момент импульса обозначаем как $\mathbf{l}$):

$$\hat{T}(\mathbf{a}) = 1 - i\mathbf{a}\cdot\hat{\mathbf{p}}/\hbar \ \text{ при } \mathbf{a}\to 0, \ \ \hat{R}(\alpha\mathbf{n}) = 1 - i\alpha\mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{l}} \ \text{ при } \alpha\to 0. \tag{II}$$

Сопоставляя (I) и (II), находим явные выражения для оператора импульса и орбитального момента импульса частицы в координатном представлении:

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla, \qquad \hbar\hat{\mathbf{l}} = \mathbf{r}\times\hat{\mathbf{p}}. \tag{III}$$

Оператор координаты $\hat{\mathbf{r}}$ умножает волновую функцию на $\mathbf{r}$.

Гамильтониан $\hat{H}$ определяется на основании *принципа соответствия* заменой координат и импульсов частиц операторами $\hat{\mathbf{r}}$ и $\hat{\mathbf{p}}$ в выражении для функции Гамильтона, известном в классической механике; для одной частицы в нерелятивистском приближении это дает:

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

где Δ – оператор Лапласа, U – потенциальная энергия частицы в заданном поле сил. Для частицы с электрическим зарядом q, находящейся в электромагнитном поле, заданном посредством потенциалов $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ и $\varphi(\mathbf{r},t)$, оператор $\hat{\mathbf{p}}$ в (IV) заменяется оператором $-i\hbar\nabla - (q/c)\mathbf{A}$, где c – скорость света, причем $U = q\varphi$. В задачах данной главы $\mathbf{A}\equiv 0$, а $U(\mathbf{r})$ не зависит от времени t.

Волновая функция частицы является решением волнового уравнения Шредингера:

$$i\hbar\,\frac{\partial\psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} \;=\; \hat{H}\,\psi(\mathbf{r},t). \tag{V}$$

В квантовой механике это уравнение столь же фундаментальное, как и уравнение Ньютона в классической механике. В случаях с не зависящим от времени гамильтонианом решение уравнения (V) имеет вид

$$\psi(\mathbf{r},t) = \sum_n A_n \, e^{-i\varepsilon_n t/\hbar} \psi_n(\mathbf{r}). \qquad \text{(VI)}$$

Такое решение задается коэффициентами A_n разложения волновой функции начального состояния $\psi(\mathbf{r},0)$ по полной системе стационарных состояний и считается известным, если найдены энергетический спектр ε_n и собственные функции $\psi_n(\mathbf{r})$ оператора $\hat{H}$, то есть если решено *уравнение Шредингера для стационарных состояний*:

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = \varepsilon\psi(\mathbf{r}). \qquad \text{(VII)}$$

В явной форме уравнение (VII) с гамильтонианом (IV) имеет вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = \varepsilon\psi(\mathbf{r}). \qquad \text{(VIII)}$$

Следует подчеркнуть, что этому уравнению удовлетворяют функции различного типа, но физический смысл будут иметь только те решения $\psi(\mathbf{r})$, которые подчиняются еще и некоторым дополнительным требованиям, называемым *граничными условиями*. Подобные условия выбираются с учетом конкретного вида потенциала $U(\mathbf{r})$ и характера физической задачи. Граничные условия необходимы, в частности, для определения уровней энергии ε_n и волновых функций в *дискретной* части энергетического спектра (подробнее об этом см. в [1–5, 7–9]). Разложение (VI) включает суммирование по дискретным ортонормированным состояниям (если таковые имеются при заданном потенциале) и интегрирование по состояниям, относящимся к непрерывной части спектра.

Вычисление коэффициентов в разложениях по системам ортогональных функций, нормировочных множителей, матричных элементов операторов и т.п. в координатном представлении производится на основе следующей формулы скалярного произведения:

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

где $\phi(\mathbf{r})$ и $\psi(\mathbf{r})$ – волновые функции соответственно состояний $|\phi\rangle$ и $|\psi\rangle$, $d^3\mathbf{r}$ – элемент объема, интегрирование ведется по всему $\mathbf{r}$-пространству.

В ряде случаев уравнение (VIII) с помощью разделения переменных приводится к одномерным уравнениям. При одномерном движении частицы уравнение Шредингера для стационарных состояний $\psi(x)$ можно записать в виде

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(\varepsilon - U(x)\right)\psi(x) = 0. \qquad \text{(X)}$$

В данной главе рассматриваются одномерные (или сводящиеся к одномерным) задачи, в основном выбранные из [7,8]; так как мы отбирали относительно легкие задачи, то настоятельно советуем читателю не ограничиваться этими примерами и активно изучать указанную литературу в полном объеме.

4.1. ЗАДАЧИ

4.1. Пусть в момент времени $t = 0$ волновая функция одномерного движения частицы имеет вид:

$$\psi(x) = Ce^{ip_0x/\hbar - (x-x_0)^2/2b^2},$$

где p_0, x_0, b – вещественные параметры, C – нормировочный множитель. Найти:

а) распределение вероятности $dW(x)$ для координаты x,

б) средние значения $\langle x\rangle$, $\langle x^2\rangle$, неопределенность координаты δx,

в) распределение вероятностей $dW(p)$ для импульса,

г) средние значения $\langle p\rangle$, $\langle p^2\rangle$, неопределенность импульса δp.

4.2. Пусть в начальный момент времени ($t = 0$) волновая функция частицы (с массой m), совершающей одномерное *свободное* движение, имеет вид

$$\psi(x, t = 0) = C e^{i p_0 x/\hbar - (x - x_0)^2/2b^2}, \text{ где } p_0 >> \hbar/b.$$

а) Изобразить графически качественный вид зависимости от координаты для вещественной или мнимой части функции $\psi(x, t = 0)$.

б) Найти волновую функцию $\psi(x,t)$ для произвольного момента времени. *Указание*: воспользоваться результатами задачи 4.1.

в) Определить, как изменяются со временем средние значения, обсуждавшиеся в задаче 4.1.

4.3. Пусть волновая функция частицы (в момент $t = 0$) при одномерном свободном движении имеет вид

$$\psi(x) = C \cos^2(x/b).$$

Найти распределение вероятности для импульса.

Указание: считать, что волновая функция задана на интервале $-L/2 < x < L/2$ и периодически продолжена на всю ось x с периодом $L \to \infty$.

4.4. Волновая функция частицы, совершающей свободное одномерное движение, имеет при $t = 0$ вид, приведенный в условии задачи 4.3. Найти распределение вероятности для координаты частицы в произвольный момент времени.

Указание: воспользоваться результатами задачи 4.3.

4.5. Найти волновую функцию $\psi(\mathbf{r}, t)$ трехмерного свободного движения частицы массы m, имеющую вид гауссова волнового пакета с начальной шириной b, начальным положением центра $\mathbf{r}_0$ и скоростью $\mathbf{v}$.

Указание: основываясь на методе разделения переменных в уравнении Шредингера с декартовыми координатами, обобщить результаты задач 4.1 и 4.2 на случай трехмерного $\mathbf{r}$-пространства.

4.6. а) Определить волновую функцию $\psi_{\mathbf{r}'}(\mathbf{r}, t=0)$ частицы в состоянии $|\mathbf{r}'\rangle$, то есть *в состоянии с определенными координатами*. Обсудить вид найденной функции при $t>0$ в случае свободной частицы массы m. *Указание*: выбрать волновую функцию в форме покоящегося гауссова пакета с центром в точке $\mathbf{r}'$ и устремить ширину пакета к нулю ($b \to 0$, см. задачу 4.5).

б) Найти волновую функцию свободной частицы при $t>0$, если волновая функция начального состояния задана в виде дельта-функции: $\psi(\mathbf{r}, t=0) = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$.

в) Показать, что волновая функция $\psi(\mathbf{r}, t)$ свободной частицы связана с произвольно задаваемой начальной волновой функцией $\psi(\mathbf{r}, 0)$ следующим интегральным соотношением:

$$\psi(\mathbf{r}, t) \;=\; \int d^3\mathbf{r}' \;\; G_0(\mathbf{r}, t;\, \mathbf{r}', 0) \;\; \psi(\mathbf{r}', 0),$$

где $G_0(\mathbf{r}, t;\, \mathbf{r}', 0)$ – функция, которую требовалось найти в пункте (б).

4.7. Электрон свободно движется в полости с непроницаемыми стенками, имеющей вид прямоугольного параллелепипеда объемом $V = L_1 L_2 L_3$. Написать выражения для энергетического спектра и волновых функций стационарных состояний. Оценить масштаб интервалов $\Delta\varepsilon$ между соседними уровнями энергии в двух случаях – в объеме атомных размеров ($L_1 \sim L_2 \sim L_3 \sim a_B$) и в макроскопическом кубе с размером ребра $L \sim 1$ см.

4.8. Сравниваются между собой одномерные стационарные состояния частицы в двух случаях – с потенциалами $U_1(x)$ и $U_2(x)$. Поле $U_1(x)$ представляет собой потенциальную яму и является симметричным, $U_1(-x) = U_1(x)$. Потенциал $U_2(x)$ имеет вид:

$$U_2(x) = \begin{cases} U_1(x) & \text{при } x > 0 \\ \infty & \text{при } x < 0 \end{cases}.$$

Найти соответствие между энергетическими уровнями дискретного спектра в потенциальных ямах $U_1(x)$ и $U_2(x)$. Как связаны

соответствующие волновые функции $\psi(x)$ стационарных состояний дискретного спектра в обеих задачах?

4.9. Частица массы m совершает одномерное движение в симметричной прямоугольной потенциальной яме глубиной U_0 и шириной $2a$:

$$U(x)=\begin{cases} 0 & \text{при } |x|>a, \\ -U_0 & \text{при } |x|<a. \end{cases}$$

а) Найти волновые функции стационарных состояний с дискретным энергетическим спектром. Указать способ вычисления уровней энергии ε_n. При каком условии в яме имеется не меньше двух уровней?

б) Найти энергию связи частицы в *мелкой* яме – при $U_0 << \hbar^2/ma^2$.

4.10. Рассмотреть стационарные состояния с дискретным энергетическим спектром при двумерном движении частицы с равной нулю проекцией момента импульса на ось z в *двумерной* потенциальной яме глубиной U_0 и радиуса a:

$$U(\mathbf{r})=\begin{cases} 0 & \text{при } r>a, \\ -U_0 & \text{при } 0<r<a, \end{cases} \qquad \text{где } r=\sqrt{x^2+y^2}.$$

Найти энергию связи частицы в случае «мелкой» ($U_0 << \hbar^2/ma^2$) ямы указанного вида.

4.11. Рассмотреть стационарные состояния с дискретным энергетическим спектром при равном нулю моменте импульса для частицы в сферически симметричной трехмерной потенциальной яме глубиной U_0 и радиуса a:

$$U(r)=\begin{cases} 0 & \text{при } r>a, \\ -U_0 & \text{при } 0<r<a, \end{cases} \qquad \text{где } r=\sqrt{x^2+y^2+z^2}.$$

Найти стационарные состояния в случае бесконечно глубокой ямы ($U_0 \to \infty$). Найти энергию связи частицы в случае «мелкой» ямы.

4.12. Найти волновые функции стационарных состояний частицы с зарядом q в однородном электрическом поле **E** при одномерном движении вдоль направления поля.

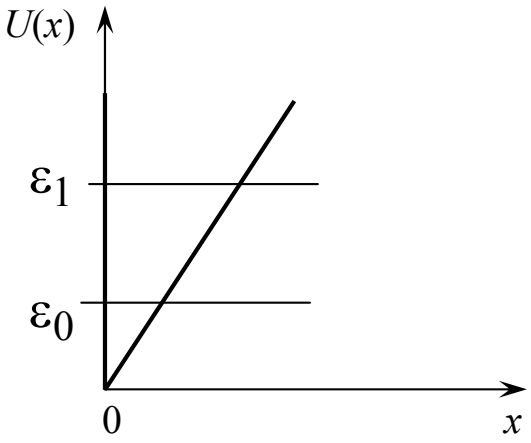

Рис. 4.1

4.13. Найти волновые функции стационарных состояний и указать способ вычисления уровней энергии для частицы в «треугольной» бесконечной потенциальной яме, показанной на рис. 4.1.

4.2. РЕШЕНИЯ

4.1. а) Сначала найдем нормировочный множитель. С этой целью проинтегрируем плотность вероятности $|\psi(x)|^2$ по всему пространству, то есть по x от $-\infty$ до $+\infty$. Поскольку в данном случае такой интеграл сходится, то выбираем нормировочный множитель C из условия

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\,|\psi(x)|^2 = 1, \tag{1}$$

соответствующего равенству $\langle\psi|\psi\rangle = 1$. В результате получаем $C = (\pi b^2)^{-1/4}$, так что искомое распределение вероятности для координаты имеет вид:

$$dW(x) = |\psi(x)|^2 dx = \frac{1}{\sqrt{\pi}\,b}\, e^{-(x-x_0)^2/b^2}\, dx. \tag{2}$$

Найденное выражение известно как распределение Гаусса. Отметим, что встречающиеся в данной задаче интегралы легко вычисляются с помощью

следующей формулы (и формул, получающихся из нее дифференцированием по параметрам):

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi\, e^{-A\xi^2 + B\xi} = \sqrt{\frac{\pi}{A}}\, e^{B^2/4A}, \qquad \mathrm{Re}\, A > 0. \tag{3}$$

б) Нетрудно видеть, что величина $\langle (x - x_0) \rangle$ равна нулю:

$$\langle (x - x_0) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, (x - x_0)\, |\psi(x)|^2 = 0, \tag{4}$$

так как выражение под интегралом с бесконечными пределами является нечетной функцией переменной $x - x_0$. Следовательно:

$$\langle x \rangle = x_0. \tag{5}$$

Далее, найдя с помощью (3) выражение для $\langle (x - x_0)^2 \rangle$, получаем:

$$\delta x = \sqrt{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle} = \sqrt{\langle (x - x_0)^2 \rangle} = b/\sqrt{2}, \tag{6}$$

$$\langle x^2 \rangle = x_0^2 + b^2/2. \tag{7}$$

в) Распределение вероятности для импульса $\mathbf{p}$ в трехмерном случае имеет вид

$$dW(\mathbf{p}) = \frac{|a(\mathbf{p})|^2}{(2\pi\hbar)^3}\, d^3\mathbf{p} \tag{8}$$

и определяется волновой функцией в *импульсном представлении*, то есть величиной $a(\mathbf{p})/(2\pi\hbar)^{3/2}$. Последняя связана с волновой функцией в координатном представлении $\psi(\mathbf{r})$ преобразованием Фурье:

$$\psi(\mathbf{r}) = \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}\, a(\mathbf{p})\, e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}, \tag{9}$$

$$a(\mathbf{p}) = \int d^3\mathbf{r}\, e^{-i\,\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}\, \psi(\mathbf{r}). \qquad (10)$$

Аналогичные формулы применимы в случае $\mathbf{r}$-пространства (и, соответственно, $\mathbf{p}$-пространства) любой размерности D; при этом элементами объема под знаками интегралов (9) и (10) будут $d^D\mathbf{p}/(2\pi\hbar)^D$ и $d^D\mathbf{r}$. Для одномерного движения с указанной в условии задачи волновой функцией $\psi(x)$ получаем:

$$a(p) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-ipx/\hbar}\, \psi(x) = \sqrt{2b\sqrt{\pi}}\; e^{i(p_0-p)x_0/\hbar}\; e^{-(p_0-p)^2 b^2/2\hbar^2}. \qquad (11)$$

Искомое распределение вероятности для импульса имеет гауссов вид:

$$dW(p) = \frac{\left|a(p)\right|^2}{2\pi\hbar}\, dp = \frac{b}{\hbar\sqrt{\pi}}\; e^{-(p-p_0)^2 b^2/\hbar^2}\, dp. \qquad (12)$$

г) Любой оператор вида $f(\hat{\mathbf{p}})$ в $\mathbf{p}$-представлении является оператором умножения на функцию $f(\mathbf{p})$. Это означает, что среднее значение любой физической величины вида $f(\mathbf{p})$ не только определяется выражением

$$\langle f \rangle = \int d^D\mathbf{r}\; \psi(\mathbf{r})^*\, f(\hat{\mathbf{p}})\; \psi(\mathbf{r}),$$

но и с тем же результатом дается формулой

$$\langle f \rangle = \int f(\mathbf{p})\, dW(\mathbf{p}) = \int \frac{d^D\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^D}\, f(\mathbf{p})\left|a(\mathbf{p})\right|^2. \qquad (13)$$

В рассматриваемой задаче, однако, нет необходимости вычислять такие интегралы (с $D=1$): распределения вероятности (12) и (2) имеют одну и ту же функциональную форму, и поэтому можно воспользоваться результатами пункта (б) с необходимыми изменениями обозначений. Таким образом, искомые средние значения есть

$$\langle p\rangle = p_0\,, \quad \left\langle p^2\right\rangle = p_0^2 + \hbar^2/2b^2\,, \qquad \delta p = \hbar/\sqrt{2}b\,. \tag{14}$$

Отметим, что $\delta x\,\delta p = \hbar/2$ – в согласии с соотношением неопределенности Гейзенберга.

4.2. а) Действительная часть экспоненты $e^{ip_0x/\hbar}$ равна косинусу (а мнимая часть – синусу) аргумента $p_0x/\hbar = 2\pi x/\lambda$, где $\lambda = 2\pi\hbar/p_0$ – *де бройлевская длина волны частицы* с импульсом p_0. Поскольку по условию задачи $p_0 >> \hbar/b$, то выполняется неравенство $\lambda << b$. Это означает, что волновая функция $\psi(x,t=0)$ представляет собой волновой пакет, для которого множитель $Ce^{-(x-x_0)^2/2b^2}$ играет роль огибающей, медленно меняющейся от точки к точке (рис. 4.2).

В начальный момент времени центр пакета находится в точке $\langle x\rangle = x_0$; ширина пакета: $\delta x \sim b$. В задаче 4.1 вычислен и ряд других характеристик такого пакета.

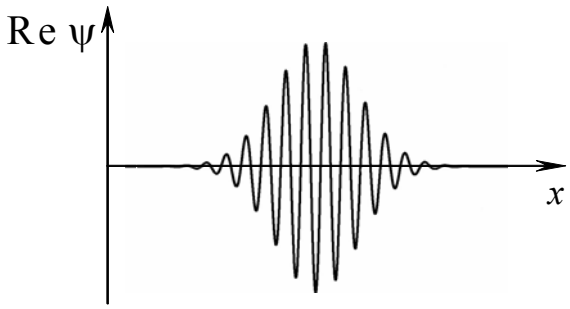

Рис. 4.2

б) Легко проверить, что волновые функции стационарных состояний свободной частицы могут быть выбраны в форме плоских волн $\psi_p(x) \sim e^{ipx/\hbar}$; соответствующий энергетический спектр в нерелятивистском приближении имеет вид $\varepsilon(p) = p^2/2m$, где p – импульс частицы. Поэтому разложение всякой функции $\psi(x, t=0)$ в интеграл Фурье по плоским волнам, то есть

$$\psi(x, t=0) = \int \frac{dp}{2\pi\hbar}\, a(p)\, e^{ipx/\hbar}\,, \tag{1}$$

можно рассматривать как разложение волновой функции свободной частицы по ее стационарным состояниям, относящееся к моменту времени

$t = 0$. Чтобы теперь получить волновую функцию свободной частицы для произвольного момента времени, надо в (1) под знак интеграла добавить фазовый множитель $e^{-i\varepsilon(p)t/\hbar}$ (см. формулу (VI) введения к данной главе):

$$\psi(x, t) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar}\, a(p)\, e^{-i\varepsilon(p)t/\hbar + ipx/\hbar}. \qquad (2)$$

Подставив в (2) явное выражение для $a(p)$ (из формулы (11) задачи 4.1), а также обозначив

$$x_0 + p_0 t/m \equiv x_0 + vt = x(t) \qquad (3)$$

и перейдя к интегрированию по переменной $\xi = (p - p_0)/\hbar$, получим:

$$\psi(x, t) = \frac{\sqrt{2b\sqrt{\pi}}}{2\pi}\, e^{ip_0 x/\hbar - i\varepsilon(p_0)t/\hbar} \int\limits_{-\infty}^{\infty} d\xi \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\left(b^2 + \frac{it\hbar}{m} \right) + i(x - x(t))\xi \right).$$

Интеграл вычисляется с помощью формулы (3), указанной в решении задачи 4.1; искомое выражение для волновой функции имеет вид:

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}(b + it\hbar/mb)}}\, e^{-(x-x(t))^2/2(b^2 + it\hbar/m)}\, e^{ip_0 x/\hbar - i\varepsilon(p_0)t/\hbar}. \qquad (4)$$

в) Графическое изображение зависимости функции (4) от x (точнее – ее действительной или мнимой части) будет подобным рассмотренному в пункте (а), так как быстрое изменение фазы функции (4) в той области, где $|\psi|$ заметно отличается от нуля, по-прежнему связано с величиной $p_0 x$. Наиболее же важный аспект зависимости от t здесь заключается в том, что волновой пакет (4) *движется* и *расплывается*, как это непосредственно видно из выражения для плотности вероятности значений x:

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}\beta(t)}\, e^{-(x-x(t))^2/\beta^2(t)}, \qquad (5)$$

где

$$\beta(t) = \sqrt{b^2 + (\hbar t/mb)^2}. \qquad (6)$$

Распределение (5) – гауссово; поэтому средние значения будут аналогичны величинам (5) – (7) задачи 4.1, но роль ширины пакета b теперь выполняет величина $\beta(t)$, а центром пакета является зависящее от времени значение $x(t)$ из (3):

$$\langle x \rangle = x(t) = x_0 + vt, \tag{7}$$

$$\delta x = \beta(t)/\sqrt{2} = \sqrt{(b^2 + (\hbar t / mb)^2)/2}. \tag{8}$$

Траектория (7) центра пакета соответствует классической картине свободного движения материальной точки со скоростью $v = p_0/m$. Из (8) видно, что пакет расплывается (в x-пространстве) на величину порядка первоначальной ширины b за время

$$\tau \sim mb^2/\hbar. \tag{9}$$

При $t >> mb^2/\hbar$ ширина пакета увеличивается по закону $\beta(t) \sim \hbar t/mb \sim t\,\delta p/m$. Это вызвано неопределенностью импульса частицы: чем меньше первоначальный размер b области локализации частицы (больше неопределенность импульса и, следовательно, неопределенность $\delta p/m$ скорости частицы), тем быстрее расплывается волновой пакет. (Упражнение: численно оцените время (9) для свободного электрона, локализованного в начальный момент времени в области пространства атомных размеров ($b \sim a_B$), а затем – для «крупинки» какого-нибудь вещества с линейным размером $\sim 10^{-2}$ см).

Отметим также, что при $p_0 >> \delta p$ ширина волнового пакета все время остается малой в сравнении с длиной $l = vt$ пути его центра, и в этом смысле можно говорить о движении частицы по траектории (7); это один из примеров так называемого квазиклассического движения. В противоположном случае ($p_0 << \delta p$) пакет расплывается намного быстрее, чем перемещается его центр, и говорить о сколько-нибудь определенной траектории частицы невозможно.

Из равенства (2), имеющего вид разложения $\psi(x,t)$ по плоским волнам $\psi_p(x)$, следует, что волновая функция в импульсном

представлении в момент времени t имеет вид

$$a(p,t) = a(p)\, e^{-i\varepsilon(p)\,t/\hbar}. \qquad (10)$$

Распределение вероятности $dW(p) \sim \left|a(p,t)\right|^2$, как явствует из (10), не зависит от t (то есть в p-пространстве волновой пакет, описывающий свободное движение частицы, не расплывается), так что формулы (14) задачи 4.1 остаются в силе для произвольного момента времени.

4.3. Заметим, что

$$\psi(x) = \frac{C}{2}\left(1+\cos\frac{2x}{b}\right) = \frac{C}{2}\left(e^0 + \frac{1}{2}\,e^{i2x/b} + \frac{1}{2}\,e^{-i2x/b}\right), \qquad (1)$$

и сравним эту сумму экспонент с правой частью разложения $\psi(x)$ по состояниям с определенным импульсом $\psi_p(x) = (1/\sqrt{L})\, e^{ipx/\hbar}$:

$$\psi(x) = \sum_p A_p\, \frac{1}{\sqrt{L}}\, e^{ipx/\hbar}. \qquad (2)$$

Видно, что не равны нулю лишь следующие три коэффициента разложения:

$$A_{p_0} = \frac{C\sqrt{L}}{2},\ p_0 = 0;\ \ A_{p_1} = \frac{C\sqrt{L}}{4},\ p_1 = \frac{2\hbar}{b};\ \ A_{p_2} = \frac{C\sqrt{L}}{4},\ p_2 = -\frac{2\hbar}{b}. \qquad (3)$$

Из условия нормировки $\left|A_{p_0}\right|^2 + \left|A_{p_1}\right|^2 + \left|A_{p_2}\right|^2 = 1$ находим: $C = 4/\sqrt{6L}$. Следовательно, искомые значения вероятности таковы:

$$W_{p=0} = \left|A_{p_0}\right|^2 = 4/6,\ \ W_{p=2\hbar/b} = \left|A_{p_1}\right|^2 = 1/6,\ \ W_{p=-2\hbar/b} = \left|A_{p_2}\right|^2 = 1/6. \qquad (4)$$

Покажем, как к этим же результатам приводит преобразование Фурье. При $L \to \infty$ можно воспользоваться интегральной формой разложения (2):

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi}\, a(q)\, e^{iqx}, \qquad (5)$$

где

$$a(q) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} dx\ \psi(x)\, e^{-iqx}, \qquad q \equiv p/\hbar\,. \tag{6}$$

Подставив в (6) явное выражение (1) для функции $\psi(x)$, получим три однотипных слагаемых вида

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} dx\ e^{i(q'-q)x} = 2\pi\,\delta(q'-q)\,. \tag{7}$$

В качестве пояснения к формуле (7) заметим, что для формального вывода равенства (7) достаточно вычислить интеграл (6) с $\psi(x)=\delta(x)$ и подставить получившуюся величину $a(q)=1$ в (5); после замены обозначений ($q'-q$ вместо x, x вместо q) формула (5) ведет к (7). Таким образом, компонента Фурье функции (1) есть

$$a(q) = \frac{C}{2}\,(2\pi\,\delta(q_0-q) + \frac{1}{2}\,2\pi\,\delta(q_1-q) + \frac{1}{2}\,2\pi\,\delta(q_2-q))\,, \tag{8}$$

где $q_j = p_j/\hbar$, значения p_j перечислены в (3). Подставим (8) в правую часть формулы

$$dW(q) = \frac{\left|a(q)\right|^2}{2\pi}\,dq\,. \tag{9}$$

Вычисляя $\left|a(q)\right|^2$, полагаем произведения различных δ-функций равными нулю, а квадраты δ-функций преобразуем следующим образом:

$$\left(2\pi\,\delta(q'-q)\right)^2 = 2\pi\,\delta(q'-q)\ 2\pi\,\delta(0) = 2\pi\,\delta(q'-q)\,L\,. \tag{10}$$

Последнее равенство получено заменой $2\pi\,\delta(0)$ на формально бесконечную длину L интервала интегрирования по x в соответствии с формулой (7) при $q'-q=0$. Формула (9) принимает вид:

$$dW(q) = \frac{C^2 L}{4}\left(\delta(q_0-q) + \frac{1}{4}\,\delta(q_1-q) + \frac{1}{4}\,\delta(q_2-q)\right)dq\,. \tag{11}$$

Из условия нормировки

$$\int_{q=-\infty}^{q=\infty} dW(q) = 1 \qquad (12)$$

с учетом равенства

$$\int_{-\infty}^{\infty} dq\, \delta(q_j - q) = 1 \qquad (13)$$

находим нормировочный множитель ($C = 4/\sqrt{6L}$) и получаем:

$$dW(q) = \frac{4}{6}\,\delta(q_0 - q)\,dq + \frac{1}{6}\,\delta(q_1 - q)\,dq + \frac{1}{6}\,\delta(q_2 - q)\,dq\,. \qquad (14)$$

Запись распределения вероятности в форме (9) предполагает, что вероятность значений непрерывной величины q в каком-либо интервале Δq (который обычно соответствует разрешающей способности измерений) дается интегрированием (9) в интервале Δq. Применительно к (14) это означает, что $\delta(q_j - q)\,dq$ заменяется единицей, если интервал Δq содержит точку $q = q_j$, и нулем в противном случае. Таким образом, формула (14) равноценна (4).

4.4. Заменим в формуле (2) или (1) задачи 4.3 коэффициенты A_p, относящиеся к моменту $t = 0$, коэффициентами $A_p(t) = A_p\, e^{-i\varepsilon(p)\,t/\hbar}$, где $\varepsilon(p) = p^2/2m$. Получаем:

$$\psi(x,t) = \frac{C}{2}\,(1 + e^{-i\varepsilon t/\hbar}\cos\frac{2x}{b}),$$

где

$$\varepsilon = (2\hbar/b)^2/2m = 2\hbar^2/mb^2, \qquad C = 4/\sqrt{6L}\,.$$

Искомая плотность вероятности для x имеет вид:

$$\left|\psi(x,t)\right|^2 = \frac{2}{3L}\left(1 + \cos^2\frac{2x}{b} + 2\cos\frac{2x}{b}\cos\frac{\varepsilon t}{\hbar}\right),$$

и, следовательно, осциллирует во времени с частотой $\varepsilon/\hbar$.

4.5. В декартовых координатах оператор Гамильтона свободной частицы в трехмерном пространстве имеет вид суммы трех операторов:

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2} \ . \qquad (1)$$

Его собственные функции можно выбрать в форме произведения трех одномерных плоских волн: $\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \psi_{p_x}(x)\,\psi_{p_y}(y)\,\psi_{p_z}(z) = C\,e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}$. Проверяя, удовлетворяют ли эти функции уравнению Шредингера $\hat{H}_0\psi_{\mathbf{p}} = \varepsilon(\mathbf{p})\,\psi_{\mathbf{p}}$, найдем, что энергетический спектр имеет вид суммы вкладов от каждой из трех степеней свободы, отвечающих движению вдоль x, y и z:

$$\varepsilon(\mathbf{p}) \ = \ p_x^2/2m + p_y^2/2m + p_z^2/2m \ = \ \mathbf{p}^2/2m . \qquad (2)$$

В итоге находим, что требуемое условиями данной задачи решение $\psi(\mathbf{r}, t)$ уравнения

$$i\hbar\,\frac{\partial\psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} \ = \ \hat{H}_0\,\psi(\mathbf{r},t) \qquad (3)$$

также представляется произведением трех одномерных функций; каждая из них определяется формулой (4) задачи 4.2 с соответствующим изменением обозначений координатных и импульсных переменных. Окончательный результат имеет вид:

$$\psi(\mathbf{r},t) = \left(\sqrt{\pi}\,(b + i\hbar t/mb)\right)^{-3/2} e^{-(\mathbf{r}-\mathbf{r}(t))^2/2(b^2+i\hbar t/m)}\ e^{im\mathbf{v}\cdot\mathbf{r}/\hbar - im\mathbf{v}^2 t/2\hbar}, \qquad (4)$$

где $\mathbf{r}(t) = \mathbf{r}_0 + \mathbf{v}\,t$ – траектория центра волнового пакета. Функция (4) нормирована на единицу по всему пространству:

$$\int d^3\mathbf{r}\,\left|\psi(\mathbf{r},t)\right|^2 = \int\limits_{-\infty}^{\infty} dx \int\limits_{-\infty}^{\infty} dy \int\limits_{-\infty}^{\infty} dz\ \left|\psi(x,y,z,t)\right|^2 \ = \ 1. \qquad (5)$$

Как выглядит выражение для компоненты Фурье $a(\mathbf{p},t)$ волновой функции (4), являющееся обобщением на случай трехмерного пространства формулы (11) задачи 4.1, читателю должно быть уже ясно.

4.6. а) Начнем с наводящих соображений о характере искомой функции при $t=0$. Если исходить из символических равенств $\langle \mathbf{r} | \mathbf{r}' \rangle = \sqrt{dV}\,\psi_{\mathbf{r}'}(\mathbf{r})$, $\langle \mathbf{r} | \mathbf{r}' \rangle = \delta_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}$ и $\delta_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}/dV = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$, то найдем, что

$$\psi_{\mathbf{r}'}(\mathbf{r}) = \delta_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}/\sqrt{dV} = \sqrt{dV}\,\delta_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}/dV = \sqrt{dV}\,\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}').$$

Эти равенства служат формальным приемом перехода от «дискретных» обозначений к «непрерывным». Видно, что $\psi_{\mathbf{r}'}(\mathbf{r})$ должна быть подобна дельта-функции, умноженной на величину $\sim b^{3/2}$, где b – стремящаяся к нулю ширина «дельта-функционного» сомножителя; появление множителя $b^{3/2}$ обусловлено тем, что дельта-функции $\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ должна быть равна плотность вероятности $|\psi_{\mathbf{r}'}|^2$, а не сама волновая функция $\psi_{\mathbf{r}'}$ состояния $|\mathbf{r}'\rangle$.

Воспользуемся выражением (4) задачи 4.5 для гауссова волнового пакета, положив $\mathbf{r}_0 = \mathbf{r}'$, $\mathbf{v}=0$, $t=0$. В силу указанной в задаче 4.1 формулы (3) при любом b справедливо равенство

$$\int d^3\mathbf{r}\ (2\pi b^2)^{-3/2}\ e^{-(\mathbf{r}-\mathbf{r}')^2/2b^2} = 1, \qquad (1)$$

означающее, что гауссова функция под знаком интеграла в (1) при $b \to 0$ есть $\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$. Обозначив

$$\gamma(b) = (2\sqrt{\pi}b)^{3/2}, \qquad (2)$$

получаем искомую волновую функцию состояния $|\mathbf{r}'\rangle$ в виде

$$\psi_{\mathbf{r}'}(\mathbf{r}, t=0) = \lim_{b\to 0} \gamma(b)\,(2\pi b^2)^{-3/2}\,e^{-(\mathbf{r}-\mathbf{r}')^2/2b^2} = \gamma(b)\big|_{b\to 0}\,\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'). \qquad (3)$$

Распределение вероятности для значений $\mathbf{r}$ дается квадратом функции (3), причем устремлять $b \to 0$ следует после возведения волновой функции в квадрат:

$$|\psi_{\mathbf{r}'}(\mathbf{r}, t=0)|^2 = \lim_{b\to 0} (\pi b^2)^{-3/2}\,e^{-(\mathbf{r}-\mathbf{r}')^2/b^2} = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'). \qquad (4)$$

Именно такой результат мы и ожидали получить.

Теперь рассмотрим эволюцию волновой функции (3) во времени. С этой целью устремим $b \to 0$ в формуле (4) задачи 4.5 *при* $t > 0$, по-прежнему полагая $\mathbf{r}_0 = \mathbf{r}'$, $\mathbf{v} = 0$. Предварительно выделив в показателе экспоненты мнимую часть, связанную с выражением

$$\frac{1}{b^2 + i\hbar t/m} = \frac{b^2 - i\hbar t/m}{b^4 + (\hbar t/m)^2} \equiv \frac{1}{\beta^2(t)} - \frac{i\hbar t/m}{b^4 + (\hbar t/m)^2},$$

имеем:

$$\psi_{\mathbf{r}'}(\mathbf{r}, t) = \lim_{b\to 0}\left(\left(\frac{b}{\sqrt{\pi}(b^2 + i\hbar t/m)}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{(\mathbf{r}-\mathbf{r}')^2}{2\beta^2(t)}\right)\right) \exp\frac{i(\mathbf{r}-\mathbf{r}')^2\hbar t/m}{2\,(b^4 + (\hbar t/m)^2)}.$$

Здесь экспонента вне скобок – фазовый множитель, поэтому плотность вероятности определяется только квадратом модуля выражения в больших скобках. Это будет гауссово распределение с чрезвычайно большой и увеличивающейся со временем шириной: $\beta(t) = \sqrt{b^2 + (\hbar t/mb)^2} \approx \hbar t/mb \to \infty$ при $b \to 0$, $t > 0$. Для точек $\mathbf{r}$, находящихся на «обозримом» удалении от начальной точки $\mathbf{r}'$, экспонента в скобках практически равна единице (ее спад становится заметным только в точках, удаленных от $\mathbf{r}'$ более чем на $\beta(t)$). Можно заменить эту экспоненту единицей, жертвуя сохранявшейся до сих пор нормировкой волновой функции. Тогда с обозначением (2) искомый результат запишется в виде:

$$\psi_{\mathbf{r}'}(\mathbf{r}, t) = \gamma(b)\big|_{b\to 0}\left(\frac{m}{2\pi\hbar i t}\right)^{3/2} \exp\frac{i}{\hbar}\,\frac{(\mathbf{r}-\mathbf{r}')^2 m}{2t}. \qquad (5)$$

Определяемая волновой функцией (5) плотность вероятности не зависит от $\mathbf{r}$ и убывает с течением времени как t^{-3}. Физический смысл этой картины совершенно понятен: в начальном состоянии частица, описываемая волновой функцией (3) как точечный объект, обладает бесконечной неопределенностью импульса (а также бесконечным средним квадратом импульса $\left\langle \mathbf{p}^2 \right\rangle = 3\hbar^2/2b^2\big|_{b\to 0}$ и бесконечной энергией

$\langle\varepsilon\rangle = \langle \mathbf{p}^2 \rangle / 2m$) и поэтому в следующие моменты времени сразу же оказывается «размазанной» по всему пространству. С течением времени расплывание пакета не прекращается – плотность вероятности продолжает убывать. Из всего этого можно сделать вывод, что представление о точечных состояниях частицы $|\mathbf{r}\rangle$ является еще большей идеализацией, чем картина состояний $|\mathbf{p}\rangle$ со строго определенным импульсом; к тому же следует помнить, что в действительности на масштабах b порядка комптоновской длины $\hbar / mc$ нерелятивистское рассмотрение перестает быть адекватным реальной физической ситуации.

б) Исключим множитель $\gamma(b)$ из выражения (3); тогда он не появится и в формуле (5). Таким образом, если начальное состояния свободной частицы $|\mathbf{r}'\rangle$ задается волновой функцией (не нормированной на единицу) вида $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, то волновая функция при $t > 0$ (обозначим ее как $G_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', 0)$) запишется в форме:

$$G_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', 0) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar i t} \right)^{3/2} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{(\mathbf{r}-\mathbf{r}')^2 m}{2t}} . \qquad (6)$$

Этот результат можно получить и более прямым путем. Компонента Фурье для начальной волновой функции вида $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ есть

$$a(\mathbf{p}) = \int d^3\mathbf{r}\; e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}\; \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}'/\hbar} . \qquad (7)$$

Чтобы найти волновую функцию для произвольного момента времени ($t > 0$) в случае свободной частицы, умножаем (7) на $e^{-i\varepsilon(\mathbf{p})t/\hbar}$, где $\varepsilon(\mathbf{p}) = \mathbf{p}^2 / 2m$, и выполняем обратное преобразование Фурье; обозначив искомую волновую функцию как $G_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', 0)$, получаем

$$G_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', 0) = \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}\, e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')/\hbar - i\mathbf{p}^2 t/2m\hbar} . \qquad (8)$$

Интеграл (8) легко вычисляется с помощью формулы (3) в задаче 4.1 (для обеспечения сходимости можно продолжить (8) на мнимые значения t заменой $t = -i\tau$, где $\tau > 0$, а в ответе вернуться к действительному t).

Результат совпадает с выражением (6). Из приведенного вывода ясно, что функция (6) удовлетворяет квантово-механическому уравнению движения свободной частицы (упражнение: проверьте это подстановкой (6) в уравнение (3), указанное в задаче 4.5).

в) Тождество, выражающее основное свойство дельта-функции,

$$\psi(\mathbf{r},0) \;=\; \int d^3\mathbf{r}' \;\; \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \;\; \psi(\mathbf{r}',0)\,, \tag{9}$$

имеет вид разложения волновой функции $\psi(\mathbf{r},0)$ произвольно заданного начального состояния $\big|\psi(0)\big\rangle$ частицы по волновым функциям $\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ состояний $\big|\mathbf{r}'\big\rangle$; значения $\psi(\mathbf{r}',0)$ играют роль коэффициентов разложения. В случае свободной частицы волновая функция вида $\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$, как мы теперь знаем, при $t>0$ принимает форму (6), так что равенство (9) непосредственно обращается в искомое интегральное соотношение

$$\psi(\mathbf{r},t) \;=\; \int d^3\mathbf{r}' \;\; G_0(\mathbf{r},t;\,\mathbf{r}',0) \;\; \psi(\mathbf{r}',0)\,. \tag{10}$$

Соотношение этого рода существует не только для свободного движения частицы, но и при движении в произвольным поле $U(\mathbf{r})$. Действительно, подставив в формулу

$$\psi(\mathbf{r},t) = \sum_n \; A_n \; e^{-i\varepsilon_n t/\hbar}\, \psi_n(\mathbf{r}) \tag{11}$$

выражение для коэффициентов разложения начального состояния по стационарным состояниям частицы в поле $U(\mathbf{r})$

$$A_n \;=\; \int d^3\mathbf{r}'\, \psi_n(\mathbf{r}')^*\psi(\mathbf{r}',0)\,, \tag{12}$$

приходим к равенству того же типа, что и (10):

$$\psi(\mathbf{r},t) \;=\; \int d^3\mathbf{r}' \;\; G(\mathbf{r},t;\,\mathbf{r}',0) \;\; \psi(\mathbf{r}',0)\,, \tag{13}$$

где

$$G(\mathbf{r},t;\,\mathbf{r}',0) \;=\; \sum_n \, e^{-i\varepsilon_n t/\hbar}\, \psi_n(\mathbf{r}) \; \psi_n^*(\mathbf{r}')\,. \tag{14}$$

Функция (14) по переменным $\mathbf{r},t$ является решением квантово-механического уравнения движения (см. (V) во введении к данной главе) с

начальным условием

$$G(\mathbf{r},0;\mathbf{r}',0) \;=\; \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\,. \qquad (15)$$

В ряде теоретических методов подобные функции встречаются под названием «функции Грина».

4.7. Метод разделения переменных в уравнении Шредингера с декартовыми координатами приводит к следующему результату:

$$\varepsilon_{n_1 n_2 n_3} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\left(\frac{n_1}{L_1}\right)^2+\left(\frac{n_2}{L_2}\right)^2+\left(\frac{n_3}{L_3}\right)^2\right),\ \text{где}\quad n_1,n_2,n_3 = 1,2,3,\ldots\,, \qquad (1)$$

$$\psi_{n_1 n_2 n_3}(x,y,z) = \sqrt{\frac{8}{V}}\,\sin\frac{\pi n_1 x}{L_1}\,\sin\frac{\pi n_2 y}{L_2}\,\sin\frac{\pi n_3 z}{L_3}\,. \qquad (2)$$

Вне полости волновые функции равны нулю.

В случае куба с длиной ребра L формула (1) принимает вид

$$\varepsilon_{n^2} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\,n^2,\quad \text{где}\quad n^2 \equiv n_1^2+n_2^2+n_3^2\,. \qquad (3)$$

Основному состоянию соответствует значение $n^2 = 3$, первому возбужденному уровню – значение $n^2 = 6$. Интервал $\Delta\varepsilon$ между этими двумя уровнями составляет $(3\pi^2/2)\,\hbar^2/mL^2$; комбинация размерных величин здесь именно та, которая ожидалась из соображений размерности. При $L \sim a_B$ имеем $\hbar^2/mL^2 \sim Ry$ (но за счет численного множителя $3\pi^2/2$ интервал $\Delta\varepsilon$ в данной модели заметно превышает аналогичную разность уровней в реальном атоме водорода).

При $L \sim 1$см получаем $\hbar^2/mL^2 \sim 10^{-16}\,Ry$. С практической точки зрения величина $\Delta\varepsilon$ такого порядка пренебрежимо мала, так что в макроскопическом объеме энергетический спектр электрона можно считать почти непрерывным (*квазинепрерывным*). Это справедливо несмотря на увеличение $\Delta\varepsilon$ с ростом n^2. В самом деле, рассмотрим уровни с большими квантовыми числами, зафиксировав, например, n_2, n_3 и

увеличивая n_1 на $\Delta n_1 \sim 1$. Соответствующий интервал $\Delta\varepsilon \approx (d\varepsilon / dn_1)\Delta n_1 \sim (\pi^2\hbar^2 / mL^2) n_1$ пропорционален большому числу n_1, однако $\Delta\varepsilon / \varepsilon \sim 1/n_1 << 1$ при $n_1 >> 1$, что и позволяет в макроскопическом случае считать спектр (3) или (1) квазинепрерывным.

Формулами (1), (2) выявляется тот факт, что даже при макроскопических значениях L детали описания свободного движения частицы в полости конечного объема *зависят* от формы полости и выбора граничных условий (это ассоциируется с картиной стоячих волн или с модами какого-либо поля в резонаторе и является одним из аспектов квантово-механического представления о «размазанности» частицы в **r**-пространстве). Выражения (1), (2) получены с условием, что волновая функция на стенках полости обращается в нуль. В этом случае энергия основного состояния частицы отлична от нуля (хотя и пренебрежимо мала) – она имеет порядок $\hbar^2 / mL_{\min}^2$, где $L_{\min}$ – наименьший из размеров L_1, L_2, L_3. Распределение вероятности $dW(\mathbf{r}) = \left|\psi_{n_1 n_2 n_3}\right|^2 dV$ при больших значениях n_1, n_2, n_3 (отвечающих актуальным с практической точки зрения значениям ε) имеет в направлении каждой координатной оси множество узлов, причем их положение чувствительно к вариациям размеров полости. Такими деталями разумно пренебречь и считать физически более значимым распределение $dW(\mathbf{r}) = dV / V$, получающееся заменой квадратов синусов их средними значениями, равными 1/2. При выборе же «периодических граничных условий» приходим к наиболее простому описанию свободного движения частицы: $\varepsilon(\mathbf{p}) = \mathbf{p}^2 / 2m$, в основном состоянии $\varepsilon(0) = 0$, $\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = V^{-1/2} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}$, $dW(\mathbf{r}) = \left|\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})\right|^2 dV = dV / V$.

Упражнение: убедитесь, что независимо от того, какие из указанных выше граничных условий выбраны, для *плотности состояний* $dZ(\varepsilon)/d\varepsilon$ (где $Z(\varepsilon)$ – число состояний свободной частицы в интервале энергии от 0 до ε, рассматриваемое в случае макроскопического объема V как плавная функция энергии) получается одно и то же выражение

$$dZ(\varepsilon)/d\varepsilon \;=\; V\,\frac{(2m)^{3/2}}{(2\pi)^2\hbar^3}\,\sqrt{\varepsilon}\,, \qquad (4)$$

и найдите аналогичную плотность состояний в случаях двумерного и одномерного движения.

4.8. Волновые функции $\psi_n(x)$ в симметричном поле $U_1(x)$ имеют определенную четность, равную $(-1)^n$, где $n = 0,1,2,\ldots$; при этом для *нечетных* состояний выполняются условия: $\psi_n(0) = \psi_n(\infty) = 0$. Точно такие же условия возникают как граничные условия *для всех* связанных состояний в поле $U_2(x)$, причем при $x > 0$ уравнения Шредингера с потенциалами $U_1(x)$ и $U_2(x)$ полностью совпадают друг с другом. В силу этих обстоятельств между энергетическими уровнями в обеих задачах имеется следующее соответствие (рис. 4.3):

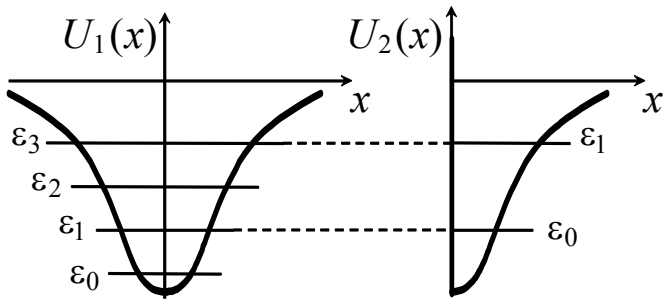

Рис. 4.3

$$\varepsilon_{2n+1}\Big|_{\text{для } U_1} \;=\; \varepsilon_n\Big|_{\text{для } U_2}\,, \qquad n = 0,\ 1,\ 2,\ \ldots \qquad (1)$$

Принадлежащие уровням (1) нормированные волновые функции связаны соотношением:

$$\sqrt{2}\,\psi_{2n+1}(x)\Big|_{\text{для } U_1} \;=\; \psi_n(x)\Big|_{\text{для } U_2}\,, \qquad x \ge 0\,. \qquad (2)$$

Множитель $\sqrt{2}$ обусловлен различием в нормировочных множителях, проистекающим из того, что интервал значений x в поле $U_1(x)$ вдвое длиннее, чем в случае поля $U_2(x)$: в первом случае $\left|\psi_n(-x)\right| = \left|\psi_n(x)\right|$, а во втором – $\psi_n(x)\big|_{x<0} = 0$.

Из (1) следует, что если в симметричном поле имеется только один дискретный уровень (яма $U_1(x)$ – «мелкая»), то в соответствующем поле

$U_2(x)$ вообще нет связанных состояний, то есть в случае несимметричной потенциальной ямы $U(x)$ дискретная часть энергетического спектра частицы может отсутствовать.

4.9. а) Введем неотрицательные величины q, k и κ_0 с размерностью «волнового вектора», определив их так, как показано на рис. 4.4. Тогда уравнение Шредингера (см. (X) во введении к данной главе) с $\varepsilon < 0$ в областях I, II и III запишется в виде

$$\text{I, III}: \quad \psi''(x) - q^2\,\psi(x) = 0, \qquad x < -a,\ \ x > a,$$

$$\text{II}: \quad \psi''(x) + k^2\,\psi(x) = 0, \qquad -a < x < a.$$

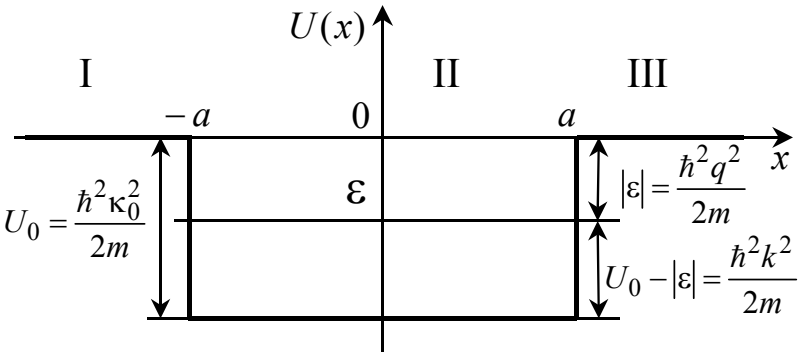

Рис. 4.4

Как в области I, так и в области III двумя линейно независимыми решениями, очевидно, будут функции $e^{\pm qx}$, а в области II – функции $e^{\pm ikx}$. Неограниченно возрастающие в глубь областей I, III решения не могут иметь физического смысла, поэтому коэффициенты при таких функциях необходимо выбрать равными нулю. Поскольку потенциал симметричен, $U(-x) = U(x)$, решения $\psi_n(x)$ должны подразделяться на четные и нечетные. Таким образом, ограниченные (убывающие) при $x \to \pm\infty$ решения уравнения Шредингера с учетом их ожидаемой симметрии можно записать в виде:

Четные *Нечетные*

I: $\psi(x) = Be^{qx}$, I: $\psi(x) = -Be^{qx}$,

II: $\psi(x) = \frac{A}{2}e^{ikx} + \frac{A}{2}e^{-ikx} = A\cos kx$, II: $\psi(x) = \frac{A}{2i}e^{ikx} - \frac{A}{2i}e^{-ikx} = A\sin kx$,

III: $\psi(x) = Be^{-qx}$, III: $\psi(x) = Be^{-qx}$.

Рассмотрим условия непрерывности ψ и ψ' на границах областей I и II, II и III:

Четные	*Нечетные*
$Be^{-qa} = A\cos ka,$	$Be^{-qa} = A\sin ka,$
$qBe^{-qa} = Ak\sin ka,$	$-Bqe^{-qa} = Ak\cos ka.$

Указанные соотношения непрерывности как в случае четных, так и в случае нечетных решений составляют соответствующую систему двух однородных уравнений для постоянных A и B. Следовательно, постоянные A и B будут не равны нулю только при условии обращения в нуль определителя системы. Из этого условия для четных состояний следует уравнение

$$q/k = \operatorname{tg} ka, \tag{1}$$

а для нечетных

$$-k/q = \operatorname{tg} ka. \tag{2}$$

Каждым из уравнений (1) и (2) с учетом вытекающего из соотношения $k^2 + q^2 = \kappa_0^2$ равенства

$$q/k = \sqrt{(\kappa_0/k)^2 - 1} = \sqrt{(\kappa_0 a/ka)^2 - 1} \tag{3}$$

определяются значения $k = k_n$. Они отвечают уровням энергии ε_n связанных состояний:

$$\varepsilon_n = -\frac{\hbar^2 q_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} - U_0 = -U_0\left(1 - (k_n/\kappa_0)^2\right). \tag{4}$$

Уравнения (1), (2) можно решать численно или находить решения $ka = k_n a$ графическим методом. В качестве примера на рис. 4.5 показан случай $\pi < \kappa_0 a < 3\pi/2$.

В данном примере имеются три точки пересечения кривых (точки A, B и C), ими соответственно определяется положение трех дискретных уровней энергии: $\varepsilon_0 < \varepsilon_1 < \varepsilon_2$. Видно, что даже при сколь угодно малом

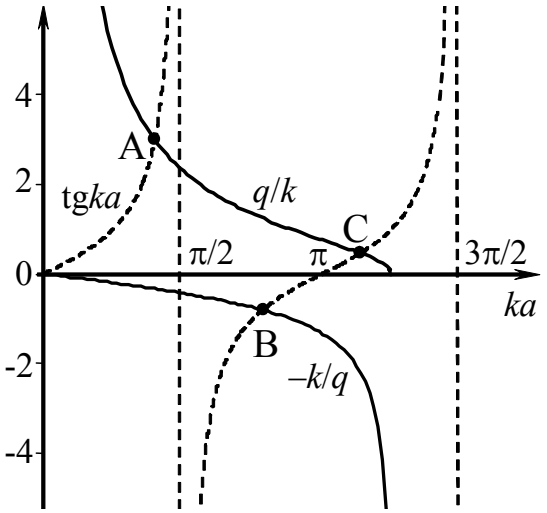

Рис. 4.5

значении параметра $(\kappa_0 a)^2 = 2mU_0a^2/\hbar^2$ в симметричной яме один уровень всегда имеется. Второй уровень появляется при $\kappa_0 a > \pi/2$, то есть при $U_0 a^2 > \pi^2\hbar^2/8m$.

Чтобы считать волновые функции полностью найденными, необходимо определить нормировочный множитель. Это, а также вычисление вероятности пребывания частицы вне ямы, то есть в области I или III, оставляем читателю для самостоятельных занятий.

б) В случае мелкой ямы выполняется неравенство $\kappa_0 a \ll 1$. При этом, как видно из рис. 4.5, единственный имеющийся уровень ε_0 можно найти из приближенного уравнения (следующего из (1) с учетом того, что $\operatorname{tg} ka \approx ka$): $q/k = ka$ или $qa = (ka)^2 \equiv (\kappa_0 a)^2 - (qa)^2$. Пренебрегая здесь величиной $(qa)^2$, имеющей второй порядок малости по отношению к qa, получим: $q \approx \kappa_0^2 a$. Таким образом, искомая энергия связи частицы ($|\varepsilon_0| = \hbar^2 q^2/2m$) в мелкой одномерной симметричной потенциальной яме найдена:

$$|\varepsilon_0| \approx 2mU_0^2 a^2/\hbar^2. \qquad (5)$$

Положение уровня ε_0, как видим, квадратично зависит от глубины U_0 и ширины a мелкой одномерной потенциальной ямы.

4.10. Поскольку потенциал $U(\mathbf{r})$ обладает аксиальной симметрией, то удобно воспользоваться цилиндрической системой координат r, φ, z (так что $x = r\cos\varphi$, $y = r\sin\varphi$, $z = z$). В цилиндрических координатах оператор Лапласа Δ имеет вид:

$$\Delta = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}, \quad r = \sqrt{x^2 + y^2}. \tag{1}$$

Двумерное движение частицы в перпендикулярных к оси z направлениях описывается волновыми функциями, не зависящими от координаты z. Условие равенства нулю проекции момента импульса на ось z означает, что искомые волновые функции ψ не зависят и от угловой координаты φ (в противном случае состояние частицы менялось бы при поворотах вокруг оси z, а это означало бы наличие z-проекции момента импульса, см. обсуждение в задаче 3.11). На функции же $\psi(r)$, зависящие только от двумерной радиальной координаты r, оператор (1) действует следующим образом:

$$\Delta\psi(r) = \frac{1}{r}\frac{d}{dr}\left(r\frac{d\psi}{dr}\right) = \frac{d^2\psi}{dr^2} + \frac{1}{r}\frac{d\psi}{dr}. \tag{2}$$

Поэтому уравнение Шредингера при условиях данной задачи запишется в виде:

$$\frac{d^2\psi}{dr^2} + \frac{1}{r}\frac{d\psi}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2}\big(\varepsilon - U(r)\big)\psi = 0. \tag{3}$$

Применяя обозначения, введенные в задаче 4.9 ($\varepsilon = -\hbar^2 q^2/2m < 0$, $U_0 = \hbar^2\kappa_0^2/2m$, $U_0 - |\varepsilon| = \hbar^2 k^2/2m$), и учитывая явный вид потенциала $U(r)$, приводим (3) к следующим двум уравнениям, относящимся к разным интервалам значений r:

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + \frac{1}{\xi}\frac{d\psi}{d\xi} + \psi = 0, \qquad 0 < \xi < ka, \qquad \xi \equiv kr. \tag{4}$$

$$\frac{d^2\psi}{d\zeta^2} + \frac{1}{\zeta}\frac{d\psi}{d\zeta} - \psi = 0, \qquad \zeta \equiv qr > qa. \tag{5}$$

Уравнение (4) представляет собой уравнение Бесселя

$$\frac{d^2w}{dz^2} + \frac{1}{z}\frac{dw}{dz} + \left(1 - \frac{\nu^2}{z^2}\right)w = 0 \tag{6}$$

с $\nu = 0$, а уравнение (5) – модифицированное уравнение Бесселя (получающееся из (6) заменой z на iz) с $\nu = 0$. Общее решение (4) можно взять в виде линейной комбинации функции Бесселя $J_0(kr)$ и функции Неймана $N_0(kr)$. Однако последняя не ограничена при $kr \to 0$, так что в силу условия ограниченности искомых решений уравнения Шредингера, следует коэффициент при $N_0(kr)$ выбрать равным нулю. Аналогично, двумя линейно независимыми решениями (5) будут модифицированные функции Бесселя $I_0(qr)$ и $K_0(qr)$; последняя из них убывает на бесконечности (при $r \to \infty$), а первая неограниченно растет и поэтому коэффициент при $I_0(qr)$ необходимо взять равным нулю. Таким образом, то решение $\psi(r)$ уравнения Шредингера, которое всюду ограничено и достаточно быстро убывает на бесконечности (как и должно быть для волновых функций связанных состояний), имеет вид:

$$\psi(r) = C \begin{cases} J_0(kr), & 0 < r < a, \\ A K_0(qr), & r > a, \end{cases} \tag{7}$$

где A – постоянная, C – нормировочный множитель. Из условий непрерывности $\psi(r)$ и $d\psi / dr$ при $r = a$:

$$J_0(ka) = A K_0(qa), \qquad k J_0'(ka) = q A K_0'(qa),$$

следует соотношение

$$q K_0'(qa) J_0(ka) = k J_0'(ka) K_0(qa), \tag{8}$$

являющееся в данной задаче уравнением для спектра уровней энергии ε_n.

Рассмотрим случай мелкой ямы, $U_0 << \hbar^2 / ma^2$. При этом $\kappa_0 a << 1$, а поскольку $k^2 + q^2 = \kappa_0^2$, то выполняются также неравенства $ka << 1$, $qa << 1$. Заменяя в (8) цилиндрические функции их приближенными выражениями при малом значении аргумента,

$$J_0(ka) \approx 1, \quad J_0'(ka) \approx -\frac{ka}{2}, \quad K_0(qa) \approx \ln\frac{2}{\gamma qa}, \quad K_0'(qa) \approx -\frac{1}{qa}, \tag{9}$$

(где $\gamma = 1{,}781...$ – постоянная Эйлера), получаем вместо (8) приближенное

уравнение для энергетического спектра:

$$1/a \;=\; (k^2 a/2)\ln(2/\gamma qa)\,.$$

Отсюда следует, что

$$qa \;=\; (2/\gamma)\exp\!\left(-\frac{2}{(\kappa_0 a)^2-(qa)^2}\right)\approx\;(2/\gamma)\exp\!\left(-\frac{2}{(\kappa_0 a)^2}\right),$$

причем других корней нет. Таким образом, в мелкой двумерной яме одно связанное состояние (с энергией $\varepsilon_0 = -\hbar^2 q^2/2m$) всегда имеется; энергия связи частицы в этом состоянии экспоненциально мала:

$$|\varepsilon_0| \;\approx\; \frac{2}{\gamma^2}\,\frac{\hbar^2}{ma^2}\,\exp\!\left(-\frac{2\hbar^2}{ma^2U_0}\right). \tag{10}$$

4.11. При наличии сферической симметрии удобно применять сферическую систему координат r, θ, φ; тогда $x = r\sin\theta\cos\varphi$, $y = r\sin\theta\sin\varphi$, $z = r\cos\theta$, а оператор Лапласа Δ имеет вид

$$\Delta \;=\; \frac{1}{r^2}\,\frac{\partial}{\partial r}\,r^2\,\frac{\partial}{\partial r} \;+\; \frac{1}{r^2\sin\theta}\,\frac{\partial}{\partial\theta}\,\sin\theta\,\frac{\partial}{\partial\theta} \;+\; \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\,\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}. \tag{1}$$

Движение частицы с равным нулю моментом импульса описывается волновыми функциями $\psi(r)$, не зависящими от угловых координат θ, φ. На такие функции оператор (1) действует следующим образом:

$$\Delta\psi(r) \;=\; \frac{1}{r^2}\,\frac{d}{dr}\left(r^2\,\frac{d\psi}{dr}\right) \;=\; \frac{d^2\psi}{dr^2} \;+\; \frac{2}{r}\,\frac{d\psi}{dr}. \tag{2}$$

Поэтому уравнение Шредингера в условиях данной задачи имеет вид:

$$\frac{d^2\psi}{dr^2} \;+\; \frac{2}{r}\,\frac{d\psi}{dr} \;+\; \frac{2m}{\hbar^2}\big(\varepsilon - U(r)\big)\psi \;=\; 0\,. \tag{3}$$

Такое уравнение подстановкой

$$\psi(r) = \frac{\chi(r)}{r} \tag{4}$$

приводится к форме, совпадающей с уравнением Шредингера при *одномерном* движении с «волновой функцией» $\chi(r)$:

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(\varepsilon - U(r)\right)\chi = 0, \qquad r > 0. \tag{5}$$

Нормировочный интеграл для вспомогательной функции $\chi(r)$ также имеет одномерный характер:

$$\int d^3\mathbf{r}\left|\psi(r)\right|^2 = 4\pi\int_0^\infty \left|\psi(r)\right|^2 r^2 dr = 4\pi\int_0^\infty \left|\chi(r)\right|^2 dr. \tag{6}$$

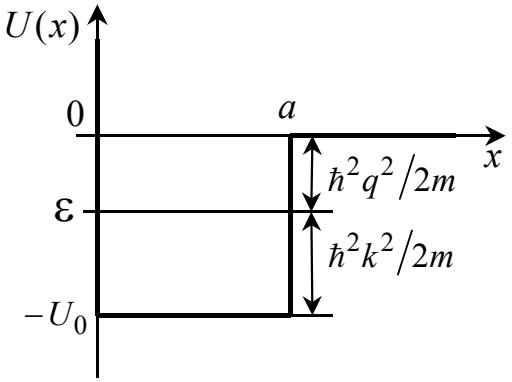

Рис. 4.6

Поскольку волновая функция (4) должна быть ограниченной, то одним из граничных условий к уравнению (5) должно быть требование обращения вспомогательной функции χ в нуль при $r \to 0$. В силу этого условия уравнение (5) с $\varepsilon < 0$ становится эквивалентным задаче о связанных состояниях χ_n в одномерной несимметричной потенциальной яме, показанной на рис. 4.6 ($U = \infty$ при $r < 0$).

Такие состояния, как нам известно из результатов задачи 4.8, находятся в соответствии с нечетными связанными состояниями в симметричной яме шириной $2a$. Волновые функции последних найдены в задаче 4.9 и могут быть записаны в виде:

$$\phi_n(x) = \begin{cases} A_n \sin k_n x, & -a < x < a, \\ B_n e^{-q_n x}, & x > a, \\ -B_n e^{q_n x}, & x < -a, \end{cases} \tag{7}$$

где

$$A_n = (a + 1/q_n)^{-1/2}, \qquad B_n = A_n e^{q_n a}\sin k_n a, \tag{8}$$

причем с коэффициентами (8) функции (7) при $-\infty < x < \infty$ нормированы на единицу. Тогда:

$$\chi_n(r) = \sqrt{2}\,\phi_n(r)\big|_{r>0} = \begin{cases} \sqrt{2}\,A_n \sin k_n r, & 0 < r < a, \\ \sqrt{2}\,B_n\, e^{-q_n r}, & r > a. \end{cases} \tag{9}$$

Нормировочный интеграл (6) с функциями (9) будет равен 4π, поэтому для нормировки волновых функций (4) на единицу необходимо разделить (4) на $\sqrt{4\pi}$. Таким образом, искомые волновые функции найдены:

$$\psi_n(r) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{\chi_n(r)}{r}. \tag{10}$$

Внутри потенциальной ямы ($r < a$) функции (10) имеют вид *сферических волн* $r^{-1}\sin kr$, а вне ямы ($r > a$) эти функции убывают по экспоненциальному закону e^{-qr}.

Значения энергии ε_n, которым принадлежат волновые функции (10), определяются решениями $k = k_n$ уравнения для нечетных уровней одномерной задачи с симметричным потенциалом (см. формулы (2) и (4) в задаче 4.9):

$$-k/q \;=\; \operatorname{tg} ka, \tag{11}$$

где k и q связаны соотношением $k^2 + q^2 = 2mU_0/\hbar^2$.

Рассмотрим два предельных случая, соответствующих бесконечно глубокой и мелкой ямам. В первом случае ($U_0 \to \infty$) физический смысл имеет последовательность состояний, начинающаяся с основного состояния, так что отсчет конечных значений энергии ε_n следует вести от дна ямы: $\varepsilon_n = \hbar^2 k_n^2 / 2m$. В силу того, что $q \to \infty$, экспоненциальная часть функций (9), (10) исчезает, нормировочный множитель $\sqrt{2}A_n$ стремится к $\sqrt{2/a}$, и в результате функции (9), как и должно быть, принимают вид хорошо известных волновых функций стационарных состояний в одномерной бесконечной прямоугольной потенциальной яме шириной a. Уравнение (11) сводится к $\operatorname{tg} ka = 0$ и дает спектр уровней энергии таких состояний:

$$\varepsilon_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(n+1)^2, \qquad n = 0,1,2,\ldots . \tag{12}$$

В то же время формула (12) описывает искомый спектр уровней в обсуждаемой здесь трехмерной задаче; указанное в (12) квантовое число n равно числу узлов волновой функции $\psi_n(r)$ и называется «радиальным числом».

Отметим, что, как и в задаче 4.7, можно рассмотреть случай с потенциальной ямой макроскопических размеров, соответствующий по сути дела свободному движению частицы. Спектр (12) при этом запишется в виде $\varepsilon(k) = \hbar^2 k^2 / 2m$, где волновое число k принимает «квазинепрерывные» значения $k = (\pi/a)(n+1)$ и становится непрерывным при $a \to \infty$. В этом пределе формула (10) сводится к $\psi_k(r) = C r^{-1} \sin kr$, где значение множителя C определяется выбором способа нормировки. Сферические волны $\psi_k(r)$ – разновидность волновых функций стационарных состояний свободной частицы; необходимо однако подчеркнуть, что функции $\psi_k(r)$ описывают лишь состояния с равным нулю моментом импульса и поэтому еще не образуют полного базисного набора (в отличие от плоских волн $\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$ или указанных в задаче 4.7 функций $\psi_{n_1 n_2 n_3}(\mathbf{r})$, которые в соответствующих условиях составляют полную систему базисных функций).

Перейдем к случаю мелкой ямы. По-прежнему исходим из наличия соответствия уровней в потенциальной яме, показанной на рис. 4.6, нечетным уровням в симметричной одномерной яме, изображенной на рис. 4.4. Примем во внимание, что с увеличением $U_0 a^2$ нечетный уровень впервые появляется при выполнении условия, найденного в задаче 4.9:

$$U_0 a^2 > \pi^2\hbar^2 / 8m. \tag{13}$$

Таким образом, если условие (13) не выполнено, то в трехмерной яме нет ни одного связанного состояния.

Выясним, как энергия связи частицы $|\varepsilon_0|$ при возникновении уровня ε_0 в мелкой яме зависит от глубины ямы U_0. Обозначим посредством U_c

«критическое» значение глубины ямы, определяемое условием (13) (то есть $U_c = \pi^2\hbar^2/8ma^2$). Если U_0 лишь немного превышает U_c, то уравнение (11) можно заменить приближенным уравнением, из которого читатель далее в качестве упражнения выведет, что

$$|\varepsilon_0| \approx \frac{\pi^2}{16}\frac{(U_0 - U_c)^2}{U_c}. \qquad (14)$$

График зависимости $|\varepsilon_0|$ от U_0 *начинается* при $U_0 = U_c$, причем в этой точке он касается оси абсцисс.

4.12. Частица движется в однородном силовом поле $F = qE$, которому соответствует потенциальная энергия

$$U(x) = -Fx. \qquad (1)$$

Уравнение Шредингера с потенциалом (1) имеет вид

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(\varepsilon + Fx)\psi(x) = 0. \qquad (2)$$

Воспользуемся масштабом длины

$$x_0 = (\hbar^2/2mF)^{1/3}$$

и перейдем к безразмерной координатной переменой ξ следующим образом:

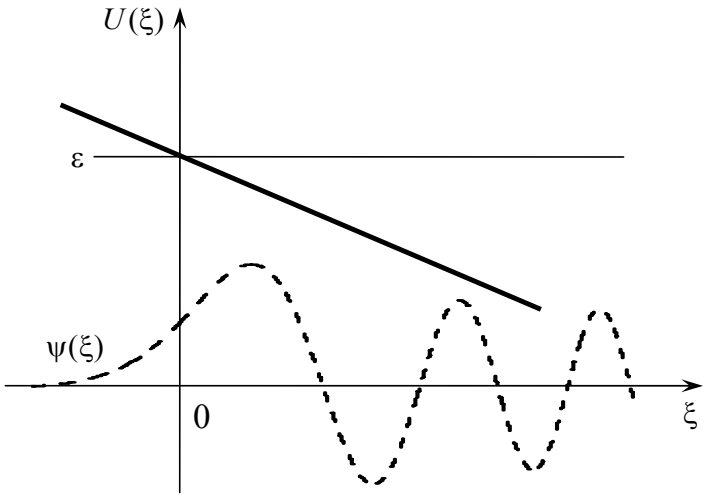

Рис. 4.7

$$\xi = \frac{1}{x_0}\left(x + \frac{\varepsilon}{F}\right). \qquad (3)$$

Поскольку (1) не является потенциальной ямой, энергетический спектр должен быть непрерывным. Координата (3) выбрана так, что при любом заранее заданном значении энергии ε в точке $\xi = 0$ имеем $U = \varepsilon$

(см. рис. 4.7).

Уравнение (2) принимает вид

$$\psi''(\xi) + \xi\psi(\xi) = 0. \qquad (4)$$

Общее решение $\varphi(\xi)$ уравнения (4), как известно из литературы по специальным функциям, можно представить линейной комбинацией функций Эйри $\mathrm{Ai}(z)$ и $\mathrm{Bi}(z)$:

$$\varphi(\xi) = C_1\mathrm{Ai}(-\xi) + C_2\mathrm{Bi}(-\xi). \qquad (5)$$

Функция $\mathrm{Ai}(-\xi)$ конечна при $-\infty < \xi < \infty$; она монотонно убывает при устремлении координаты ξ в область значений $\xi < 0$ и осциллирует в области $\xi > 0$. Именно такого поведения мы ждем от волновой функции стационарного состояния частицы в поле, показанном на рис. 4.7 (график ψ схематично изображен пунктирной линией). Функция же $\mathrm{Bi}(-\xi)$ неограниченно возрастает при $\xi \to -\infty$, и поэтому коэффициент C_2 в (5) следует выбрать равным нулю.

Таким образом, искомые волновые функции стационарных состояний имеют вид:

$$\psi(x) = C\ \mathrm{Ai}\left(-(x + \varepsilon/F)/x_0\right), \qquad (6)$$

где C – нормировочная постоянная. Более детальное обсуждение рассмотренной задачи читатель может найти в [1,7].

4.13. Потенциал имеет вид:

$$U(x) = \begin{cases} Fx, & x > 0 \\ \infty, & x < 0 \end{cases}. \qquad (1)$$

Следует считать, что $\psi(x) = 0$ при $x < 0$, причем в точке $x = 0$ не требуется непрерывности производной волновой функции, а лишь налагается граничное условие, обеспечивающее непрерывность самой волновой функции $\psi(x)$:

$$\psi(0) = 0. \qquad (2)$$

С помощью новой координатной переменной

$$\xi = \frac{1}{x_0}\left(x - \frac{\varepsilon}{F}\right), \tag{3}$$

где

$$x_0 = (\hbar^2 / 2mF)^{1/3},$$

уравнение Шредингера приводится к виду

$$\psi''(\xi) \; - \; \xi\psi(\xi) \; = \; 0. \tag{4}$$

Общее решение уравнения (4) представляется линейной комбинацией функций Эйри $\mathrm{Ai}(\xi)$ и $\mathrm{Bi}(\xi)$. Однако последняя из указанных функций неограниченно возрастает при $\xi \to \infty$, так что, в силу условия ограниченности искомых решений уравнения Шредингера, необходимо коэффициент при $\mathrm{Bi}(\xi)$ выбрать равным нулю. Таким образом, конечное при всех значениях x решение уравнения (4) имеет вид

$$\psi(x) \; = \; C\,\mathrm{Ai}\big((x - \varepsilon / F)/x_0\big). \tag{5}$$

Граничное условие (2) с учетом (5) играет роль уравнения, которым определяется энергетический спектр частицы в поле (1):

$$\mathrm{Ai}\big(-\varepsilon / F x_0\big) = 0. \tag{6}$$

Из (6) следует, что уровни энергии ε_n даются формулой

$$\varepsilon_n \; = \; -F x_0\, \xi_n \; = \; (\hbar^2 F^2 / 2m)^{1/3}(-\xi_n), \tag{7}$$

где ξ_0, ξ_1, ξ_2, … – корни уравнения $\mathrm{Ai}(\xi) = 0$ (нули функции Эйри). Значения ξ_n отрицательны, так как функция $\mathrm{Ai}(\xi)$ имеет осциллирующий характер при $\xi < 0$. Подставляя допустимые значения энергии (7) в (5), получаем последовательность волновых функций стационарных состояний частицы в поле (1):

$$\psi_n(x) \; = \; C\,\mathrm{Ai}\big((x - \varepsilon_n / F)/x_0\big). \tag{8}$$

Постоянная C определяется из условия нормировки волновой функции на единицу.

5. БАРЬЕРЫ. СОСТОЯНИЯ С НЕПРЕРЫВНЫМ СПЕКТРОМ ЭНЕРГИИ

В данной главе мы продолжаем изучать примеры решений уравнения Шредингера. Здесь приведено несколько задач об одномерном движении частицы в поле $U(x)$, имеющем вид резких ступенек. Основной шаг в решении подобных задач – использование условий непрерывности волновой функции и ее производной по обе стороны от точки x, в которой потенциальная энергия частицы претерпевает скачок. Громоздкость этой процедуры при наличии у потенциала нескольких ступенек легко преодолевается с помощью так называемого метода матриц переноса.

5.1. ЗАДАЧИ

5.1. Вероятности отражения R и прохождения D частицы, падающей из области 1 на потенциальную стенку, изображенную на рис. 5.1, определяются равенствами

$$R = j_{отр} \big/ j_{пад}\,, \qquad D = j_{прош} \big/ j_{пад}\,,$$

где

$$j_{пад} = \frac{\hbar k_1}{m} \left|A_1\right|^2, \qquad j_{отр} = \frac{\hbar k_1}{m} \left|B_1\right|^2, \qquad j_{прош} = \frac{\hbar k_2}{m} \left|A_2\right|^2;$$

A_n, B_n – коэффициенты, характеризующие в n-ой области волновую функцию $\psi(x)$ стационарного состояния частицы с энергией $\varepsilon = \hbar^2 k_1^2 / 2m$

$$\psi(x) = A_n\, e^{ik_n x} + B_n\, e^{-ik_n x}, \qquad n = 1, 2\,.$$

Это позволяет рассматривать величины

$$a_n(x) = \sqrt{k_n}\; A_n\, e^{ik_n x} \qquad \text{и} \qquad b_n(x) = \sqrt{k_n}\; B_n\, e^{-ik_n x}$$

как определенные с точностью до нормировочного множителя амплитуды вероятности движения частицы в n-ой области вдоль или против оси x, соответственно.

а) Определить *матрицу переноса* $\hat{t}$, связывающую значения $a_2(x_0)$, $b_2(x_0)$ с $a_1(x_0)$, $b_1(x_0)$.

б) Найти матрицу $\hat{U}$, связывающую $b_1(x_0)$ и $a_2(x_0)$ с $a_1(x_0)$ и $b_2(x_0)$.

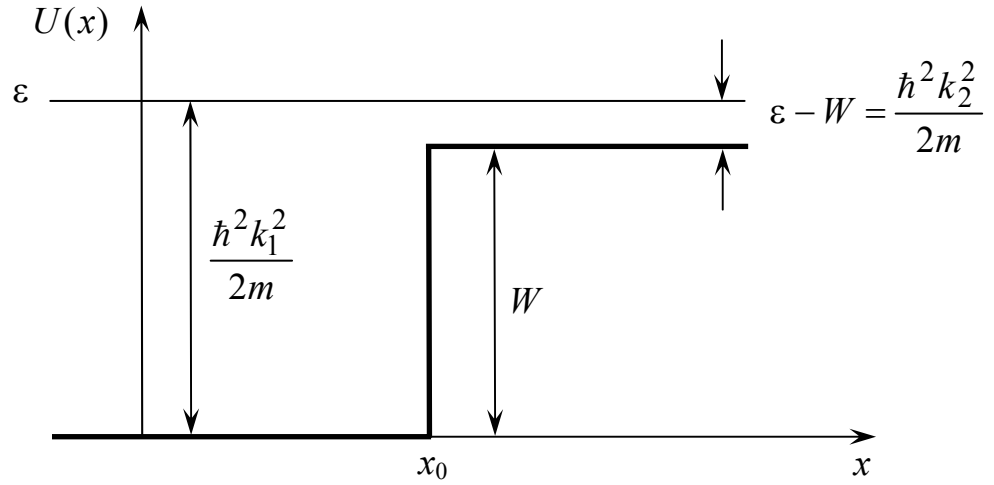

Рис. 5.1

5.2. Найти вероятность прохождения D и вероятность отражения R при одномерном движении частицы над потенциальным барьером протяженностью d (рис. 5.2).

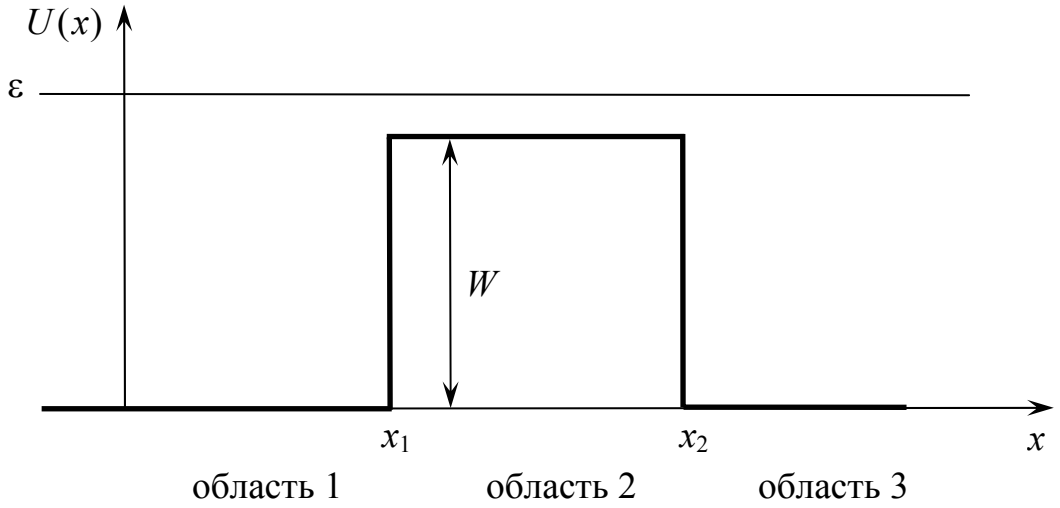

Рис. 5.2

5.3. а) Найти коэффициент прохождения D частицы, совершающей одномерное движение над симметричной потенциальной ямой $U(x)$, изображенной на рис. 5.3.

б) Для стационарных состояний частицы в указанном поле $U(x)$, принадлежащих *непрерывной* части энергетического спектра, найти волновые функции, обладающие определенной четностью по отношению к преобразованию $x \to -x$.

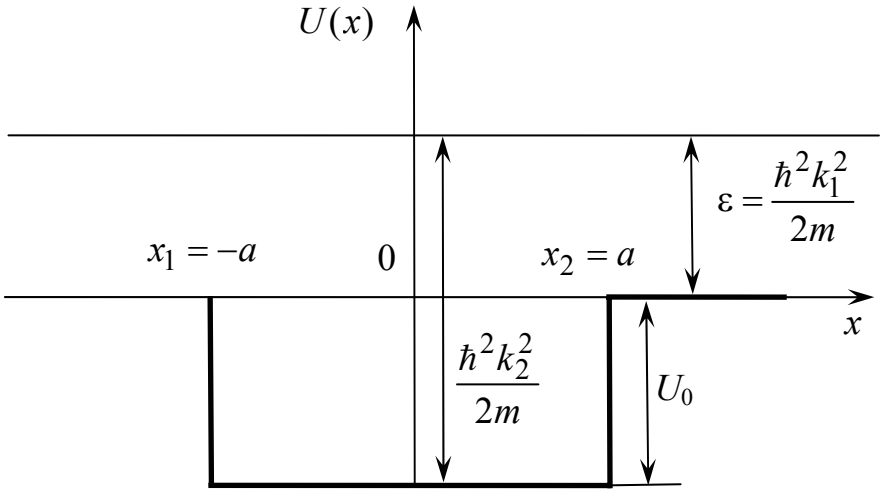

Рис. 5.3

5.4. Найти коэффициент прохождения D частицы через потенциальный барьер протяженностью d, изображенный на рис. 5.4, при условии, что энергия частицы ε меньше высоты барьера W.

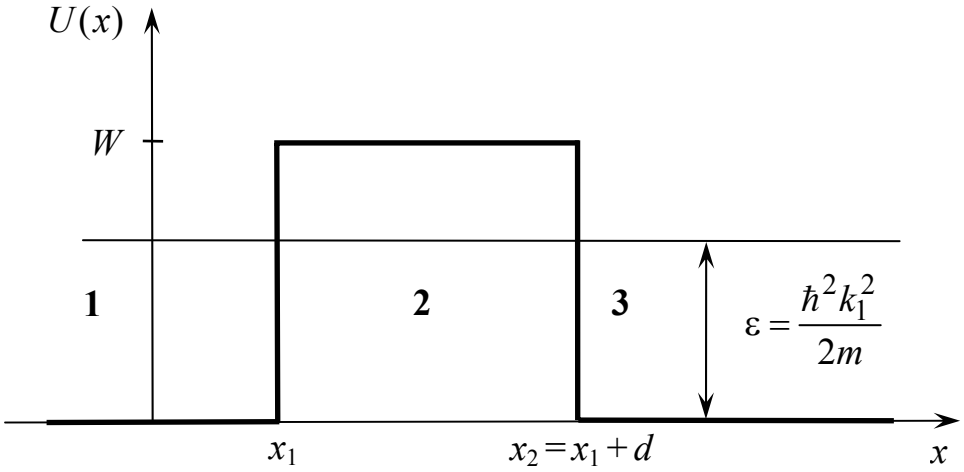

Рис. 5.4

5.5. Получить уравнение для энергетического спектра $\varepsilon(q)$ частицы в периодическом потенциале с периодом a, изображенном на рис. 5.5. *Указания.* Воспользоваться представлением о состояниях с определенным квазиимпульсом (см. задачу 3.8). Ограничиться случаем $\varepsilon < W$, где W – высота потенциальных барьеров.

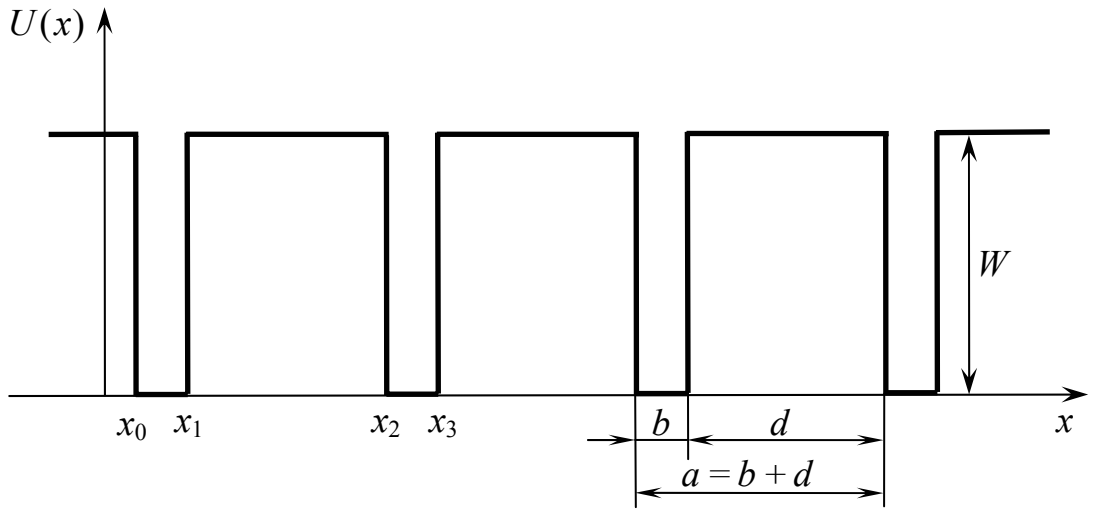

Рис. 5.5

5.2. РЕШЕНИЯ

5.1. а) Решение уравнения Шредингера с указанным в условии задачи ступенчатым потенциалом имеет вид:

$$\psi(x) = \begin{cases} A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}, & x < x_0; \\ A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}, & x > x_0. \end{cases}$$

Поскольку потенциал нигде не обращается в бесконечность, то сама волновая функция $\psi(x)$ и ее первая производная должны на всей оси x обладать свойством непрерывности. Условия непрерывности $\psi(x)$ и $\psi'(x)$ в точке $x = x_0$, разграничивающей области 1 и 2, имеют вид

$$A_1 e^{ik_1 x_0} + B_1 e^{-ik_1 x_0} = A_2 e^{ik_2 x_0} + B_2 e^{-ik_2 x_0},$$

$$ik_1 (A_1 e^{ik_1 x_0} - B_1 e^{-ik_1 x_0}) = ik_2 (A_2 e^{ik_2 x_0} - B_2 e^{-ik_2 x_0}). \qquad (1)$$

Отсюда для значений «амплитуд вероятности»

$$a_n(x) = \sqrt{k_n}\, A_n\, e^{ik_n x}, \qquad b_n(x) = \sqrt{k_n}\, B_n\, e^{-ik_n x} \tag{2}$$

в точке $x = x_0$ получаем

$$a_2(x_0) = \frac{k_2 + k_1}{2\sqrt{k_2 k_1}} a_1(x_0) + \frac{k_2 - k_1}{2\sqrt{k_2 k_1}} b_1(x_0),$$

$$b_2(x_0) = \frac{k_2 - k_1}{2\sqrt{k_2 k_1}} a_1(x_0) + \frac{k_2 + k_1}{2\sqrt{k_2 k_1}} b_1(x_0).$$

Таким образом, точке $x = x_0$, в которой потенциал $U(x)$ претерпевает скачок, можно сопоставить элементы $t_{jj'}$ матрицы $\hat{t}$:

$$a_2(x_0) = t_{11}\, a_1(x_0) + t_{12}\, b_1(x_0),$$

$$b_2(x_0) = t_{21}\, a_1(x_0) + t_{22}\, b_1(x_0), \tag{3}$$

где

$$t_{11} = t_{22} = \frac{k_2 + k_1}{2\sqrt{k_2 k_1}}, \qquad t_{12} = t_{21} = \frac{k_2 - k_1}{2\sqrt{k_2 k_1}}. \tag{4}$$

Отметим, что указанная матрица $\hat{t}$ унимодулярна,

$$t_{11}\, t_{22} - t_{12}\, t_{21} = 1, \tag{5}$$

а обратная матрица дается заменой в (4) величин k_1, k_2 на k_2, k_1.

б) Физическая картина отражения или прохождения частицы через потенциальную ступеньку здесь напоминает ситуацию, рассмотренную в задаче 2.6. С этой точки зрения независимыми амплитудами являются a_1 и b_2, а амплитуды b_1 и a_2 должны быть с ними связаны посредством некоторой унитарной матрицы $\hat{U}$:

$$b_1 = U_{11}\, a_1 + U_{12}\, b_2,\ a_2 = U_{21}\, a_1 + U_{22}\, b_2. \tag{6}$$

Переписав соотношения (3) в форме (6), находим с учетом (5):

$$U_{11} = -t_{21}/t_{22}, \quad U_{22} = t_{12}/t_{22}, \quad U_{12} = U_{21} = 1/t_{22}. \tag{7}$$

Величина $|U_{21}|^2$ – это коэффициент (вероятность) прохождения D при движении частицы из области 1 в область 2, а $|U_{12}|^2$ – коэффициент

прохождения при противоположном направлении движения. Из соотношений (7) видно, что значение D не зависит от направления падения частиц на потенциальную ступеньку:

$$D = \left|U_{12}\right|^2 = \left|U_{21}\right|^2 = \frac{1}{\left|t_{22}\right|^2}. \tag{8}$$

С учетом (4) находим, что коэффициент (вероятность) отражения R также не зависит от направления падения частиц на потенциальную ступеньку:

$$R = \left|U_{11}\right|^2 = \left|U_{22}\right|^2 = \left|t_{12}/t_{22}\right|^2. \tag{9}$$

Подставив в (8), (9) выражения для элементов $\hat{t}$-матрицы (4), получаем:

$$D = \frac{4k_2k_1}{(k_2+k_1)^2}, \qquad R = \frac{(k_2-k_1)^2}{(k_2+k_1)^2}. \tag{10}$$

Как и должно быть, выдерживается равенство $D+R=1$, подтверждающее допустимость вероятностной интерпретации величин D и R.

5.2. Воспользуемся формализмом матрицы переноса – формулами (2)–(9), приведенными в решении задачи 5.1. Движению частицы над потенциальным барьером, показанным на рис. 5.2 , можно сопоставить следующие линейные соотношения:

$$\begin{aligned} a_3(x_2) &= t_{11}\,a_1(x_1) + t_{12}\,b_1(x_1), \\ b_3(x_2) &= t_{21}\,a_1(x_1) + t_{22}\,b_1(x_1), \end{aligned} \tag{1}$$

где $t_{jj'}$ – элементы матрицы $\hat{t}$, имеющей вид произведения трех унимодулярных матриц и в силу этого также являющейся унимодулярной:

$$\hat{t} = \begin{pmatrix} \dfrac{k_3+k_2}{2\sqrt{k_3k_2}} & \dfrac{k_3-k_2}{2\sqrt{k_3k_2}} \\ \dfrac{k_3-k_2}{2\sqrt{k_3k_2}} & \dfrac{k_3+k_2}{2\sqrt{k_3k_2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ik_2d} & 0 \\ 0 & e^{-ik_2d} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dfrac{k_2+k_1}{2\sqrt{k_2k_1}} & \dfrac{k_2-k_1}{2\sqrt{k_2k_1}} \\ \dfrac{k_2-k_1}{2\sqrt{k_2k_1}} & \dfrac{k_2+k_1}{2\sqrt{k_2k_1}} \end{pmatrix}. \tag{2}$$

Волновые числа $k_1 = k_3$ и k_2 определяются величиной ε энергии частицы и высотой потенциального барьера W:

$$k_1 = \sqrt{2m\varepsilon/\hbar^2}\,, \tag{3}$$

$$k_2 = \sqrt{2m(\varepsilon - W)/\hbar^2}\,. \tag{4}$$

Диагональная матрица с элементами $e^{\pm ik_2(x_2-x_1)} = e^{\pm ik_2 d}$ описывает изменение величин $a_2(x)$ и $b_2(x)$ от точки x_1 к точке x_2 внутри области 2; два других матричных сомножителя в (2) отвечают изменению таких величин при «переносе» через граничные точки x_1 и x_2. Вычислив указанное произведение матриц, получим:

$$\hat{t} = \frac{1}{4k_1k_2}\begin{pmatrix} e^{ik_2d}(k_1+k_2)^2 - e^{-ik_2d}(k_2-k_1)^2, & e^{ik_2d}(k_2^2-k_1^2) + e^{-ik_2d}(k_1^2-k_2^2) \\ e^{ik_2d}(k_1^2-k_2^2) + e^{-ik_2d}(k_2^2-k_1^2)^2, & e^{-ik_2d}(k_1+k_2)^2 - e^{ik_2d}(k_2-k_1)^2 \end{pmatrix}. \tag{5}$$

Коэффициенты прохождения D и отражения R находим по формулам (8) и (9) задачи 5.1:

$$D = \frac{1}{|t_{22}|^2} = \left| \frac{4k_1k_2}{e^{-ik_2d}(k_1+k_2)^2 - e^{ik_2d}(k_1-k_2)^2} \right|^2, \tag{6}$$

$$R = \left| \frac{t_{12}}{t_{22}} \right|^2 = \left| \frac{(k_2^2-k_1^2)(e^{ik_2d} - e^{-ik_2d})}{e^{-ik_2d}(k_1+k_2)^2 - e^{ik_2d}(k_1-k_2)^2} \right|^2. \tag{7}$$

Окончательный результат можно записать так:

$$D = \left(1 + \frac{(k_1^2-k_2^2)^2}{4k_1^2k_2^2} \sin^2 k_2 d \right)^{-1}, \tag{8}$$

$$R = 1 - D\,. \tag{9}$$

Отметим, что для целочисленных значений параметра $k_2 d/\pi$ коэффициент прохождения, как видно из формулы (8), равен единице – надбарьерное отражение частицы отсутствует. На качественном уровне это объясняется интерференцией дебройлевских волн, отраженных в одну и ту же сторону границами областей 1,2 и 2,3: когда на удвоенной длине

потенциального барьера дебройлевская длина волны частицы $\lambda = 2\pi / k_2$ укладывается целое число раз, такие волны гасят друг друга. При заданной энергии частицы коэффициент прохождения D как функция протяженности барьера d периодически меняется от значения $D_{\min} = 4k_1^2 k_2^2 / (k_1^2 + k_2^2)^2$ до $D_{\max} = 1$ с периодом, равным $\lambda / 2$.

5.3. а) Определив волновые числа формулами

$$k_1 = k_3 = \sqrt{2m\varepsilon / \hbar^2}\,, \qquad k_2 = \sqrt{2m(\varepsilon + U_0) / \hbar^2}\,, \tag{1}$$

где ε – энергия частицы, U_0 – глубина потенциальной ямы (с шириной $d = 2a$), можем непосредственно воспользоваться результатами (8), (9) задачи 5.2:

$$D = \left(1 + \frac{(k_1^2 - k_2^2)^2}{4k_1^2 k_2^2} \sin^2 2k_2 a\right)^{-1}, \tag{2}$$

$$R = 1 - D\,. \tag{3}$$

При целочисленных значениях параметра $2k_2 a / \pi$ коэффициент прохождения (2) становится равным единице.

б) Значения ε, принадлежащие области непрерывного энергетического спектра и отвечающие инфинитному движению частицы в обоих направлениях оси x, двукратно вырождены [1]. Действительно, в рассматриваемом примере решение $\psi(x)$ уравнения Шредингера

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\big(\varepsilon - U(x)\big)\psi = 0$$

с потенциалом, показанным на рис. 5.3, записывается в виде

$$\psi(x) = \begin{cases} A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}, & x < -a \\ A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}, & -a < x < a \\ A_3 e^{ik_3 x} + B_3 e^{-ik_3 x}, & x > a \end{cases}. \tag{4}$$

Условия непрерывности волновой функции $\psi(x)$ и ее производной $\psi'(x)$ в точке $x = x_1$ приводят к линейной связи коэффициентов A_1, B_1 с A_2, B_2;

эту связь легко выразить посредством матрицы $\sqrt{k_2/k_1}\,\hat{t}^{-1}$, где $\hat{t}$ – матрица (4) в задаче 5.1:

$$\begin{pmatrix} A_1\, e^{i k_1 x_1} \\ B_1\, e^{-i k_1 x_1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (k_1+k_2)/2k_1 & (k_1-k_2)/2k_1 \\ (k_1-k_2)/2k_1 & (k_1+k_2)/2k_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_2\, e^{i k_2 x_1} \\ B_2\, e^{-i k_2 x_1} \end{pmatrix}. \qquad (5)$$

Условия непрерывности $\psi(x)$ и $\psi'(x)$ в точке $x = x_2$ аналогично ведут к линейной связи A_3, B_3 с A_2, B_2:

$$\begin{pmatrix} A_3\, e^{i k_1 x_2} \\ B_3\, e^{-i k_1 x_2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (k_1+k_2)/2k_1 & (k_1-k_2)/2k_1 \\ (k_1-k_2)/2k_1 & (k_1+k_2)/2k_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_2\, e^{i k_2 x_2} \\ B_2\, e^{-i k_2 x_2} \end{pmatrix}. \qquad (6)$$

Таким образом, удовлетворяющее необходимым требованиям непрерывности решение (4) допускает представление в виде суперпозиции *двух линейно независимых решений* вида $\psi_A(x)$ и $\psi_B(x)$, получающихся при выборе в (4) значений коэффициентов $A_2 = 1$, $B_2 = 0$, или $A_2 = 0$, $B_2 = 1$, соответственно:

$$\psi(x) \;=\; A_2\, \psi_A(x) + B_2\, \psi_B(x). \qquad (7)$$

Это и означает наличие двукратного вырождения значений ε.

Произвольные коэффициенты A_2 и B_2 становятся вполне определенными, если волновую функцию (4) подчинить условию нормировки и некоторому дополнительному граничному условию; последнее, как правило, вытекает из физического контекста рассматриваемой задачи. Например, для нахождения плотности потока частиц j_{omp}, отражающихся от потенциального барьера в область 1, следует выбрать условие $B_3 = 0$, означающее отсутствие потока частиц, направленного к барьеру из области 3; при этом двукратному вырождению соответствует возможность рассматривать аналогичную задачу с условием $A_1 = 0$ – об отражении частиц в область 3 при отсутствии частиц, падающих на барьер из области 1. Встречаются задачи и другого типа. Так, при описании процессов возбуждения частицы из состояния с дискретным уровнем энергии в симметричной яме в состояния непрерывного спектра существенны решения, обладающие определенной четностью

относительно замены $x \to -x$. В силу двукратного вырождения значений ε, принадлежащих непрерывной части энергетического спектра, каждому такому ε можно сопоставить одно четное ($\psi_{чет}$) и одно нечетное ($\psi_{неч}$) решения вида (4).

Для построения нечетной волновой функции положим $A_2 = -B_2$. Воспользуемся обозначением

$$A_2 = -B_2 = C/2i, \tag{8}$$

где C – вещественная постоянная. Тогда искомая $\psi_{неч}(x)$ в области $-a < x < a$ примет вид вещественной функции $C \sin k_2 x$. Подставив (8) в соотношения (5), (6) и выразив таким образом все коэффициенты A_n и B_n в (4) через нормировочную постоянную C, получим:

$$\psi_{неч}(x) = \begin{cases} A e^{i k_1 x} + A^* e^{-i k_1 x}, & x < -a \\ C \sin k_2 x \quad , & -a < x < a \\ -A^* e^{i k_1 x} - A e^{-i k_1 x}, & x > a \end{cases}, \tag{9}$$

где

$$A = -e^{ik_1 a} \frac{C}{2} \left(\sin k_2 a + i \frac{k_2}{k_1} \cos k_2 a \right). \tag{10}$$

Для построения четной волновой функции примем вместо (8) условие

$$A_2 = B_2 = C/2 \ . \tag{11}$$

Действуя как и в предыдущем случае, получим

$$\psi_{чет}(x) = \begin{cases} B e^{i k_1 x} + B^* e^{-i k_1 x}, & x < -a \\ C \cos k_2 x \quad , & -a < x < a \\ B^* e^{i k_1 x} + B e^{-i k_1 x}, & x > a \end{cases}, \tag{12}$$

где

$$B = e^{ik_1 a} \frac{C}{2} \left(\cos k_2 a - i \frac{k_2}{k_1} \sin k_2 a \right). \tag{13}$$

Найденные функции вещественны, их графики изображены на рис. 5.6 и 5.7.

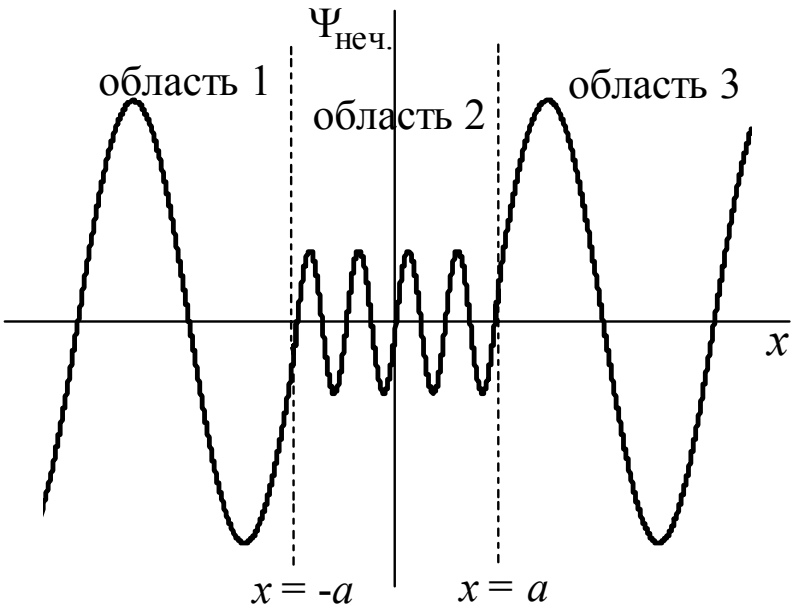

Рис. 5.6

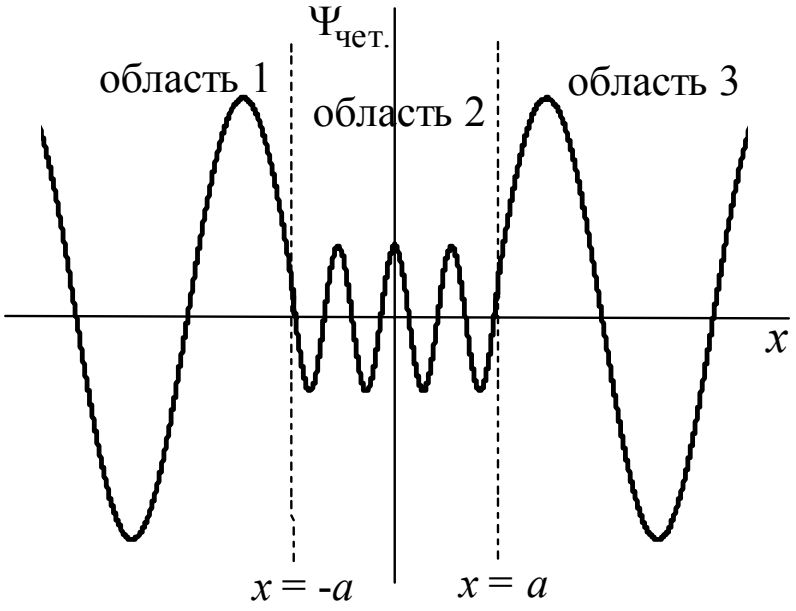

Рис. 5.7

Отметим, что при фиксированном каким-либо нормировочным условием размахе осцилляций волновой функции вне области 2 значения волновой функции внутри области 2 в общем случае имеют заметно меньшую величину. Указанное различие особенно существенно при $k_1 << k_2$, когда в (10) или (13) доминирует член, пропорциональный k_2 / k_1. Это означает, что при малой энергии ($\varepsilon = \hbar^2 k_1^2 / 2m \ << U_0$) плотность

вероятности обнаружения частицы в области потенциальной ямы в общем случае существенно меньше, чем вне ямы. Соответственно, из выражений (2) и (3) следует, что коэффициент прохождения через область 2 при $k_1 \to 0$ стремится к нулю, а коэффициент отражения частицы от стенок потенциальной ямы стремится к единице.

Исключение представляют случаи, в которых производная волновой функции на границах ямы обращается в нуль, так что размах осцилляций волновой функции оказывается одним и тем же во всех областях оси x. В этих случаях член с k_2 / k_1 в (10) или (13) равен нулю. Для состояния с нечетной волновой функцией так происходит при выполнении условия

$$\cos k_2 a = 0, \tag{14}$$

то есть при условии, что на длине потенциальной ямы $d = 2a$ половина дебройлевской длины волны $\lambda / 2 = \pi / k_2$ укладывается нечетное число раз. Для состояния с четной волновой функцией подобный «резонанс» наступает в случае

$$\sin k_2 a = 0, \tag{15}$$

то есть при условии, что на длине ямы величина $\lambda / 2$ укладывается четное число раз. Именно в случаях (14) и (15) коэффициент прохождения D становится равным единице.

В завершение рассмотрим некоторые из возможных способов нормировки волновой функции, относящейся к непрерывному энергетическому спектру.

Обозначив посредством δ фазу комплексной величины (10), запишем нечетную волновую функцию (9) в виде

$$\psi_{неч}(x) = \begin{cases} 2|A|\cos(k_1 x + \delta), & x < -a \\ C \sin k_2 x \quad , & -a < x < a \\ -2|A|\cos(k_1 x - \delta), & x > a \end{cases}. \tag{16}$$

Нормировочный интеграл для $\psi_{неч}(x)$ представляет собой сумму вкладов от трех областей оси x:

$$\langle \psi | \psi \rangle = 4|A|^2 \int_{-\infty}^{-a} dx \cos^2(k_1 x + \delta) + |C|^2 \int_{-a}^{a} dx \sin^2 k_2 x + 4|A|^2 \int_{a}^{\infty} dx \cos^2(k_1 x - \delta). \tag{17}$$

Два из трех указанных вкладов расходятся при $x \to \pm\infty$. Пренебрегая конечным вкладом области 2 по сравнению с бесконечно большими вкладами областей 1, 3 и считая, что волновые функции рассматриваются на интервале $-L/2 < x < L/2$, где L – стремящаяся к бесконечности длина суммарного интервала интегрирования в (17), можно записать вместо правой части (17) более простое выражение

$$\langle\psi|\psi\rangle = 4|A|^2 \int_{-L/2}^{0} dx \cos^2(k_1 x + \delta) + 4|A|^2 \int_{0}^{L/2} dx \cos^2(k_1 x - \delta).$$

Заменив в каждом из этих интегралов квадрат косинуса его средним значением, равным $1/2$, получим

$$\langle\psi|\psi\rangle = 2|A|^2 L. \tag{18}$$

Один из возможных способов нормировки сводится к наложению условия $\langle\psi|\psi\rangle = 1$; это *нормировка на единицу в интервале* L. С учетом (18) указанное условие дает:

$$|A|^2 = 1/2L. \tag{19}$$

В этом случае волновая функция содержит нормировочный параметр L (она пропорциональна $1/\sqrt{L}$), однако в окончательных выражениях для величин, имеющих непосредственный физический смысл, зависимость от произвольного параметра L должна исчезать.

Более предпочтительной может быть *нормировка на дельта-функцию от волнового числа* k_1:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi_{k_1}(x)^* \psi_{k_1'}(x) = 2\pi\, \delta(k_1 - k_1'). \tag{20}$$

Здесь волновым функциям приписан индекс k_1, поскольку рассматриваемые состояния характеризуются определенными значениями волнового числа k_1 наряду с определенными значениями энергии:

$$\varepsilon = \hbar^2 k_1^2 / 2m. \tag{21}$$

При $k_1' \neq k_1$ правая сторона равенства (20) обращается в нуль, что

обусловлено взаимной ортогональностью функций $\psi_{k_1'}$ и ψ_{k_1}. При $k_1' = k_1$ интеграл в левой части (20) представляет собой нормировочный интеграл, и его можно отождествить с выражением (18), а правая часть равенства (20) есть $2\pi\delta(0) = L$ – согласно пояснениям к формуле (10) в задаче 4.3. Таким образом, для выполнения нормировочного условия (20) следует принять, что $2|A|^2 L = L$, то есть

$$|A|^2 = 1/2 . \qquad 22)$$

Рассмотрим также условие *нормировки на дельта-функцию от энергии*:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi_{k_1}(x)^* \psi_{k_1'}(x) \;=\; \delta(\varepsilon - \varepsilon') . \qquad (23)$$

Разложим ε в аргументе дельта-функции в ряд по степеням $k_1 - k_1'$,

$$\varepsilon \;=\; \varepsilon' \;+\; \left.\frac{d\varepsilon}{dk_1}\right|_{k_1 = k_1'} (k_1 - k_1') \;+ \ldots ,$$

и удержим только первые два члена ряда. Получаем

$$\delta(\varepsilon - \varepsilon') \;=\; \delta\left(\frac{d\varepsilon}{dk_1}(k_1 - k_1')\right) \;=\; \frac{1}{|d\varepsilon / dk_1|}\,\delta(k_1 - k_1') ,$$

так что условие (23) принимает вид

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi_{k_1}(x)^* \psi_{k_1'}(x) \;=\; \frac{m}{\hbar^2 k_1}\,\delta(k_1 - k_1') . \qquad (24)$$

Сравнивая (24) с (20), видим, что для перехода к (24) достаточно правую сторону равенства (22), полученного из нормировочного условия (20), умножить на $m / 2\pi\hbar^2 k_1$. Таким образом, нормировка на δ-функцию от энергии имеет место при

$$|A|^2 = \frac{m}{2\pi\hbar^2 k_1} . \qquad (25)$$

После того как для $|A|^2$ будет принято одно из нормировочных значений (19), (22) или (25), вещественный коэффициент C в (9) определится в соответствии с (10) равенством

$$C^2 = \frac{4|A|^2 k_1^2}{k_1^2 \sin^2 k_2 a \; + \; k_2^2 \cos^2 k_2 a}. \tag{26}$$

Аналогично производится нормировка четного решения (12). Одно из значений (19), (22) или (25) в этом случае следует приписать величине $|B|^2$, после чего коэффициент C в (12) определится в соответствии с (13) равенством

$$C^2 = \frac{4|B|^2 k_1^2}{k_1^2 \cos^2 k_2 a \; + \; k_2^2 \sin^2 k_2 a}. \tag{27}$$

5.4. При $\varepsilon < W$ решение уравнения Шредингера имеет вид

$$\psi(x) = \begin{cases} A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}, & x < x_1 \\ A_2 e^{-\kappa x} + B_2 e^{\kappa x}, & x_1 < x < x_2 \\ A_3 e^{ikx} + B_3 e^{-ikx}, & x > x_2 \end{cases}, \tag{1}$$

где

$$k = \sqrt{2m\varepsilon/\hbar^2}, \qquad \kappa = \sqrt{2m(W-\varepsilon)/\hbar^2}. \tag{2}$$

Поскольку на волновую функцию здесь налагаются те же условия непрерывности, что и в задаче 5.2, можно воспользоваться формулами (5)–(9) указанной задачи, положив в этих формулах

$$k_1 = k, \qquad k_2 = i\kappa. \tag{3}$$

Так, для матрицы «переноса» из точки $x_1 - 0$ в точку $x_2 + 0$ получим

$$\hat{t} = \begin{pmatrix} -\dfrac{k^2-\kappa^2}{2ik\kappa}\,\mathrm{sh}\,\kappa d + \mathrm{ch}\,\kappa d & \dfrac{k^2+\kappa^2}{2ik\kappa}\,\mathrm{sh}\,\kappa d \\ -\dfrac{k^2+\kappa^2}{2ik\kappa}\,\mathrm{sh}\,\kappa d & \dfrac{k^2-\kappa^2}{2ik\kappa}\,\mathrm{sh}\,\kappa d + \mathrm{ch}\,\kappa d \end{pmatrix}. \tag{4}$$

Искомая вероятность прохождения частицы D принимает вид:

$$D = \left(1 + \frac{(k^2 + \kappa^2)^2}{4k^2\kappa^2} \operatorname{sh}^2 \kappa d \right)^{-1} . \qquad 5)$$

Проникновение частицы с энергией ε через потенциальный барьер W при условии $\varepsilon < W$ называется *туннельным эффектом*. Из (5) следует, что в случае достаточно широкого или высокого барьера, когда выполняется неравенство $\kappa d >> 1$, вероятность туннелирования D мала и экспоненциально убывает с ростом параметра κd :

$$D \approx \frac{16k^2\kappa^2}{\left(k^2 + \kappa^2\right)^2} e^{-2\kappa d} . \qquad (6)$$

5.5. Воспользуемся методом матрицы переноса (см. предыдущие примеры, начиная с задачи 5.1). Обозначим показанные на рис.5.5 интервалы $(x_0, x_1), (x_1, x_2)$ и (x_2, x_3) как n-, $(n+1)$- и $(n+2)$-области оси x. Тогда, в силу непрерывности волновой функции и ее производной на границах областей, должно иметь место равенство:

$$\begin{pmatrix} a_{n+2}(x_3) \\ b_{n+2}(x_3) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_n(x_1) \\ b_n(x_1) \end{pmatrix} . \qquad (1)$$

Здесь a_n и b_n – функции, связанные с решением уравнения Шредингера в области n согласно формулам (2) задачи 5.1, $T_{jj'}$ – элементы унимодулярной матрицы $\hat{T}$, имеющей вид

$$\hat{T} = \begin{pmatrix} e^{ikb} & 0 \\ 0 & e^{-ikb} \end{pmatrix} \hat{t} , \qquad (2)$$

$\hat{t}$ – матрица из формулы (4) задачи 5.4, соответствующая «переносу» из точки $x_1 - 0$ в точку $x_2 + 0$. Диагональная матрица в (2) сопоставлена переносу из точки $x_2 + 0$ в точку $x_3 - 0$, так что матрица $\hat{T}$ описывает изменение значений волновой функции при изменении x на величину,

равную периоду a потенциала $U(x)$. Выполнив указанное в (2) перемножение матриц, получим:

$$T_{11} = -e^{ikb}\,\frac{k^2-\kappa^2}{2ik\kappa}\,\mathrm{sh}\,\kappa d + e^{ikb}\,\mathrm{ch}\,\kappa d\,, \tag{3}$$

$$T_{12} = e^{ikb}\,\frac{k^2+\kappa^2}{2ik\kappa}\,\mathrm{sh}\,\kappa d\,, \tag{4}$$

$$T_{21} = T_{12}^*, \tag{5}$$

$$T_{22} = T_{11}^*, \tag{6}$$

где k и κ связаны с энергией ε формулами (2) задачи 5.4.

Следует ожидать, что в силу трансляционной симметрии стационарными состояниями частицы в периодическом поле являются состояния $|q\rangle$ с определенным квазиимпульсом q, а допустимые значения энергии представляются некоторой функцией $\varepsilon(q)$, периодической с периодом $2\pi\hbar/a$. Подобная картина была рассмотрена нами в задаче 3.8. Основываясь на том рассмотрении покажем теперь, что

$$\langle x+a|q\rangle = e^{iqa/\hbar}\,\langle x|q\rangle. \tag{7}$$

Скалярно умножив вектор состояния с определенным квазиимпульсом $|q\rangle$ на вектор состояния с определенной координатой $|x+a\rangle = \hat{T}_1|x\rangle$, где $\hat{T}_1$ – унитарный оператор переноса квантовых состояний на расстояние $\Delta x = a$, и учитывая, что состояния с определенным квазиимпульсом являются собственными для оператора $\hat{T}_1$,

$$\hat{T}_1|q\rangle = e^{-iqa/\hbar}\,|q\rangle,$$

получаем

$$\langle x+a|q\rangle = \langle \hat{T}_1 x|q\rangle = \langle x|\hat{T}_1^{-1}|q\rangle = e^{iqa/\hbar}\,\langle x|q\rangle.$$

Таким образом, справедливо соотношение (7).

Согласно этому соотношению волновая функция $\psi_q(x)$ состояния с

определенным квазиимпульсом при изменении координаты x на величину, равную периоду трансляционной симметрии a, приобретает фазовый множитель $\exp(iqa/\hbar)$:

$$\psi_q(x+a) \;=\; e^{iqa/\hbar}\,\psi_q(x). \tag{8}$$

Отсюда следует, что

$$\psi_q(x) \;=\; u_q(x)\,e^{iqx/\hbar}\;,$$

где $u_q(x)$ – периодическая функция координаты x с периодом a. Это утверждение (и его обобщения на случаи двумерных или трехмерных систем, подробно рассматриваемые в курсе квантовой теории твердого тела) называют *теоремой Блоха*.

Вследствие (8) величины $a_{n+2}(x_3)$ и $b_{n+2}(x_3)$ в левой стороне равенства (1) должны совпадать с умноженными на $e^{iqa/\hbar}$ величинами $a_n(x_1)$ и $b_n(x_1)$:

$$\begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_n \\ b_n \end{pmatrix} \;=\; e^{iqa/\hbar}\begin{pmatrix} a_n \\ b_n \end{pmatrix}. \tag{9}$$

Другими словами, a_n и b_n удовлетворяют системе однородных линейных уравнений

$$\begin{pmatrix} T_{11}-e^{iqa/\hbar} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22}-e^{iqa/\hbar} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_n \\ b_n \end{pmatrix} \;=\; \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{10}$$

Условие существования нетривиального решения такой системы имеет вид:

$$\det\begin{pmatrix} T_{11}-e^{iqa/\hbar} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22}-e^{iqa/\hbar} \end{pmatrix} \;=\; 0,$$

или, с учетом унимодулярности $\hat{T}$-матрицы ($T_{11}T_{22}-T_{12}T_{21}=1$),

$$e^{2iqa/\hbar}-(T_{11}+T_{22})\,e^{iqa/\hbar}+1 \;=\; 0. \tag{11}$$

Разделив обе стороны уравнения (11) на $e^{iqa/\hbar}$, получаем:

$$\frac{1}{2}(T_{11}+T_{22}) \;=\; \cos(qa/\hbar). \qquad (12)$$

Это и есть искомое уравнение для $\varepsilon(q)$; его можно представить в виде

$$F(\varepsilon) \;=\; \cos(qa/\hbar), \qquad (13)$$

где, с учетом (3) и (6),

$$F(\varepsilon) \;\equiv\; \frac{1}{2}(T_{11}+T_{22}) \;=\; \frac{\kappa^2-k^2}{2k\kappa}\sin kb\,\mathrm{sh}\,\kappa d \;+\; \cos kb\,\mathrm{ch}\,\kappa d, \qquad (14)$$

$$k=\sqrt{2m\varepsilon/\hbar^2}, \qquad \kappa=\sqrt{2m(W-\varepsilon)/\hbar^2}. \qquad (15)$$

Характер решений уравнения (13) сравнительно легко пояснить в случае потенциала с достаточно широкими барьерами, когда $\kappa d >> 1$. При этом (14) заменяется приближенным выражением

$$F(\varepsilon) \;\approx\; \frac{\kappa^2-k^2}{4k\kappa}\sin kb\;e^{\kappa d} \;+\; \frac{1}{2}\cos kb\;e^{\kappa d} \;=$$

$$=\; \cos^2\frac{kb}{2}\left(\mathrm{tg}\frac{kb}{2}+\frac{k}{\kappa}\right)\left(\frac{\kappa}{k}-\mathrm{tg}\frac{kb}{2}\right)\frac{1}{2}\,e^{\kappa d},$$

и уравнение (13) принимает вид

$$\cos^2\frac{kb}{2}\left(\mathrm{tg}\frac{kb}{2}+\frac{k}{\kappa}\right)\left(\frac{\kappa}{k}-\mathrm{tg}\frac{kb}{2}\right) \;=\; 2e^{-\kappa d}\cos\frac{qa}{\hbar}. \qquad (16)$$

Поскольку $e^{-\kappa d}\to 0$ при $\kappa d\to\infty$, уравнение (16) в пределе бесконечно широких барьеров ($d\to\infty$) сводится к условию

$$\left(\mathrm{tg}\frac{kb}{2}+\frac{k}{\kappa}\right)\left(\frac{\kappa}{k}-\mathrm{tg}\frac{kb}{2}\right) \;=\; 0. \qquad (17)$$

Таким условием, согласно формулам (1) и (2) задачи 4.9, определяется дискретный спектр энергетических уровней ε_n в одиночной прямоугольной потенциальной яме глубиной W и шириной b. Считая теперь $e^{-\kappa d}$ малой, но конечной величиной, заключаем, что решения $\varepsilon_n(q)$ уравнения (16) образуют на оси энергии *зоны* – не перекрывающиеся

друг с другом интервалы, лежащие вблизи энергетических уровней ε_n одиночной ямы.

Зоны оказываются «узкими» в меру малости величины $e^{-\kappa d}$, и поэтому *закон дисперсии* в них – зависимость энергии от q – легко установить, заменив функцию $F(\varepsilon)$ первыми членами ее разложения в ряд Тейлора по степеням $(\varepsilon - \varepsilon_n)$:

$$F(\varepsilon) \approx F(\varepsilon_n) + F'(\varepsilon_n)(\varepsilon - \varepsilon_n).$$

Учитывая равенство $F(\varepsilon_n) = 0$, обусловленное тем, что уровни ε_n, по существу, и определяются уравнением $F(\varepsilon) = 0$, имеем в рассматриваемом приближении:

$$\varepsilon_n(q) = \varepsilon_n + \frac{1}{F'(\varepsilon_n)} \cos\frac{qa}{\hbar}. \qquad (18)$$

В случае широких и высоких барьеров ($\kappa d >> 1$, $\kappa / k >> 1$) несложное вычисление дает:

$$\frac{1}{F'(\varepsilon_n)} \approx (-1)^{n+1} \frac{2\varepsilon_n}{kb} \sqrt{D}, \qquad (19)$$

где величина

$$D \approx 16(k/\kappa)^2 e^{-2\kappa d} \qquad (20)$$

представляет собой вероятность туннельного проникновения частицы через высокий потенциальный барьер; значения k и κ берутся при $\varepsilon = \varepsilon_n$. Видно, что коэффициент (19), определяющий энергетическую ширину n-ой зоны, отрицателен для четных зон (порожденных уровнями ε_0, ε_2, …, где ε_0 – уровень основного состояния в одиночной яме) и положителен для нечетных зон. Энергетическая ширина n-ой зоны имеет порядок $\varepsilon_n D^{1/2}$; она растет с ростом номера зоны, так как экспоненциально малый коэффициент подбарьерного прохождения D с повышением энергии частицы существенно увеличивается. Полученные результаты находятся в качественном соответствии с картиной, рассматривавшейся в задаче 3.8.

В общем случае решение уравнения (13) также имеет «зонный» характер. Отмеченные выше черты такого решения схематически представлены на рис.5.8.

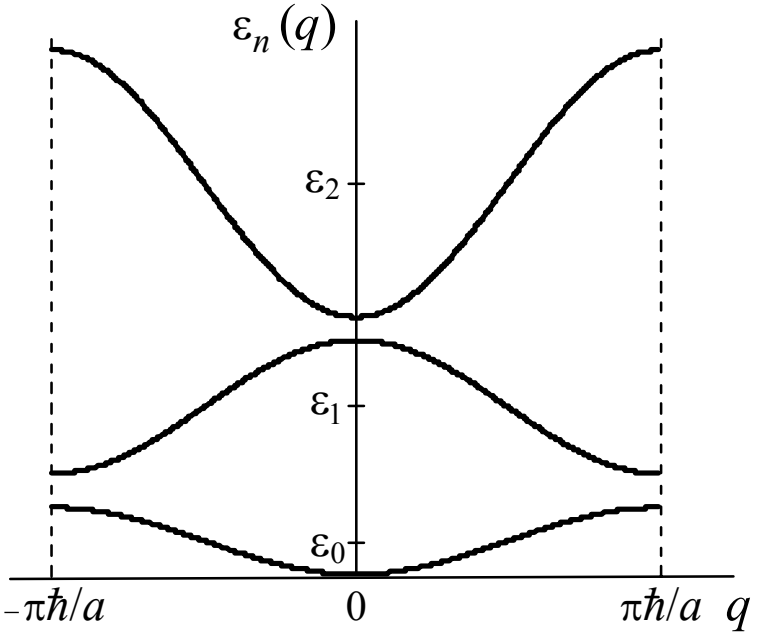

Рис. 5.8

6. ЗАДАЧИ ОБ ОСЦИЛЛЯТОРАХ

К представлению о гармоническом осцилляторе приводит рассмотрение динамики физической системы вблизи ее положения устойчивого равновесия. В точке равновесия потенциальная энергия системы имеет минимум. Поэтому зависимость потенциальной энергии от координаты x, характеризующей отклонение от положения равновесия, в первом приближении по степеням такой координаты является квадратичной:

$$U(x) = Kx^2/2, \qquad K > 0. \tag{I}$$

В случае частицы массы m ее одномерное движение с потенциальной энергией (I) в классической механике представляет собой гармоническое колебание с частотой

$$\omega_0 = \sqrt{K/m}. \tag{II}$$

В связи с этим выражение (I) называют потенциалом гармонического *осциллятора* (oscillate – на английском означает колебаться, вибрировать). В классической механике полная энергия осциллятора ε – сумма кинетической энергии и потенциальной – может принимать любое значение, что соответствует возможности задать произвольную величину амплитуды колебаний (при этом для применимости приближения (I) амплитуда колебаний осциллятора, конечно, должна быть достаточно малой). В квантовой же механике все стационарные состояния осциллятора принадлежат дискретным уровням энергии:

$$\varepsilon_n = \hbar\omega_0(n+1/2), \qquad n = 0, 1, 2, \ldots. \tag{III}$$

Отличительной чертой энергетического спектра гармонического осциллятора в квантовой механике является то, что уровни энергии (III) расположены через равные интервалы $\hbar\omega_0$. Этот факт играет фундаментальную роль во многих задачах о динамике сложных систем вблизи точки минимума энергии, позволяя ввести представление о «квазичастицах» – квантах энергии $\hbar\omega_k$, отвечающих различным колебательным модам системы (k – номер моды).

В квантовой механике классическая картина колебаний осциллятора $x(t)$ утрачивает смысл. Когда говорят о колебаниях квантового осциллятора, например, вдоль оси x, то обычно имеют ввиду стационарные состояния, описываемые волновыми функциями $\psi_n(x)$. Явный вид таких функций указан ниже в решениях задач.

6.1. ЗАДАЧИ

6.1. Линейный осциллятор с электрическим зарядом q помещен в однородное электрическое поле $\mathbf{E}$, направленное вдоль оси колебаний.

а) Определить энергетический спектр и волновые функции стационарных состояний.

б) Найти поляризуемость стационарных состояний. *Указание*. Поляризуемостью β определяется в линейном приближении по слабому внешнему полю $\mathbf{E}$ индуцированный этим полем дипольный электрический момент $(\mathbf{d} = \beta\mathbf{E})$, а также, в квадратичном приближении, – сдвиг энергетического уровня: $\Delta\varepsilon = -\beta E^2/2$.

6.2. а) Найти уровни энергии и волновые функции $\psi(x, y, z)$ стационарных состояний частицы массы m, совершающей трехмерное движение в поле

$$U(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}\left(K_1 x^2 + K_2 y^2 + K_3 z^2\right),$$

где K_j – заданные положительные параметры. Имеют ли волновые функции определенную четность по отношению к преобразованию $\mathbf{r} \to -\mathbf{r}$?

б) Определить кратность вырождения энергетических уровней в случае, когда указанное поле $U(\mathbf{r})$ обладает осью вращательной симметрии: $K_1 = K_2 \neq K_3$.

в) Определить кратность вырождения также в том случае, когда указанное поле обладает сферической симметрией: $K_1 = K_2 = K_3$.

6.3. Найти уровни энергии и волновые функции стационарных состояний частицы в поле

$$U(x,y,z) = \frac{m\omega_0^2}{2}\left(x^2 + \frac{y^2+z^2}{2} + yz \right).$$

6.4. Найти распределение вероятности для значений импульса в стационарных состояниях линейного осциллятора.

6.5. Найти энергетический спектр и волновые функции $\psi(x,y,z)$ стационарных состояний бесспиновой частицы с электрическим зарядом q в однородном магнитном поле $\mathbf{B}$. Поле задано посредством векторного потенциала $\mathbf{A}$ с компонентами $A_x = -yB$, $A_y = A_z = 0$.

6.6. Убедиться в том, что решения уравнения Шредингера для частицы в однородном магнитном поле, задаваемом потенциалом $\mathbf{A}$ с компонентами

$$A_x = -yB, \qquad A_y = A_z = 0,$$

могут быть получены посредством калибровочного преобразования решений, отвечающих потенциалу $\widetilde{\mathbf{A}}$ с компонентами

$$\widetilde{A}_y = xB, \qquad \widetilde{A}_x = \widetilde{A}_z = 0.$$

6.7. Для линейного осциллятора с массой m и частотой ω_0 введем в рассмотрение операторы $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$, определяемые равенствами:

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}}\left(\hat{x} + \frac{i\hat{p}}{m\omega_0} \right), \qquad \hat{a}^+ = \sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}}\left(\hat{x} - \frac{i\hat{p}}{m\omega_0} \right),$$

где $\hat{x}$ и $\hat{p}$ – операторы координаты и импульса.

а) Вычислить коммутатор операторов $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$.

б) Построить систему собственных векторов и найти спектр собственных значений оператора $\hat{a}^+\hat{a}$, пользуясь коммутатором операторов $\hat{a}$, $\hat{a}^+$.

в) Выразить гамильтониан осциллятора через оператор $\hat{a}^+\hat{a}$.

6.8. Пусть $|n\rangle$ – нормированные стационарные состояния линейного осциллятора с массой m и собственной частотой ω_0. Найти:

а) Матричные элементы $\langle n'|\hat{x}|n\rangle$ оператора координаты осциллятора.

б) Среднее значение квадрата координаты в стационарном состоянии.

6.9. В начальный момент времени ($t = 0$) состояние гармонического осциллятора задано в виде следующей суперпозиции всех его стационарных состояний $|n\rangle$:

$$|\alpha\rangle|_{t=0} = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle,$$

где α – произвольное комплексное число. Принято называть $|\alpha\rangle$ когерентным состоянием.

а) Определить зависимость от времени среднего значения координаты осциллятора в когерентном состоянии.

б) Найти распределение вероятности W_n для числа n квантов энергии в когерентном состоянии осциллятора, вычислить средние значения n и n^2.

6.2. РЕШЕНИЯ

6.1. а) Как известно, потенциальная энергия обычного линейного осциллятора равна

$$U(x) = \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2 \equiv \frac{1}{2} K x^2, \qquad (1)$$

где m – масса частицы, ω_0 – собственная частота колебаний. При этом уравнение Шредингера

$$\hat{H}\,\psi(x) = \varepsilon\,\psi(x) \qquad (2)$$

с гамильтонианом

$$\hat{H} = \hat{H}_{осц} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2 \qquad (3)$$

дает спектр энергетических уровней

$$\varepsilon_n = \hbar\omega_0(n+1/2), \qquad n = 0, 1, 2, \ldots, \qquad (4)$$

и волновые функции стационарных состояний осциллятора:

$$\psi_n^{осц}(x) \equiv \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \exp\left(-\frac{x^2}{2}\frac{m\omega_0}{\hbar}\right) H_n\left(x\sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}}\right), \qquad (5)$$

где $H_n(\xi)$ – полиномы Эрмита ($H_0(\xi) = 1$, $H_1(\xi) = 2\xi$, $H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2$, …). Функции (5) вещественны, нормированы на единицу и взаимно ортогональны:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi_n^{осц}(x)\, \psi_{n'}^{осц}(x) = \delta_{nn'}. \qquad (6)$$

При наложении на заряженный осциллятор электрического поля $\mathbf{E}$, направленного вдоль оси x, к потенциальной энергии (1) добавляется вклад $-qEx$, соответствующий наличию внешней силы $\mathbf{F} = q\mathbf{E}$. Гамильтониан принимает вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2 - qEx. \qquad (7)$$

Поскольку при добавлении линейного по x члена характер *квадратичной* зависимости потенциала от x сохраняется, уравнение Шредингера с гамильтонианом (7) должно заменой переменной $x = \tilde{x} + x_0$ сводиться к уравнению Шредингера для обычного линейного осциллятора. Произведя в (7) указанную замену и выбрав постоянную x_0 так, чтобы слагаемое, линейное относительно новой переменной $\tilde{x}$, исчезло, имеем:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{d\tilde{x}^2} + \frac{1}{2}m\omega_0^2\tilde{x}^2 - \frac{q^2E^2}{2m\omega_0^2}, \qquad (8)$$

где

$$\widetilde{x} = x - \frac{qE}{m\omega_0^2}. \qquad (9)$$

Сравнивая (8) с (3), заключаем, что искомыми собственными функциями для (7) или (8) являются

$$\psi_n(x) \;=\; \psi_n^{осц}(\widetilde{x}) \;=\; \psi_n^{осц}\left(x - qE/m\omega_0^2\right), \qquad (10)$$

а энергетический спектр имеет вид:

$$\varepsilon_n \;=\; \hbar\omega_0\left(n+\frac{1}{2}\right) \;-\; \frac{q^2E^2}{2m\omega_0^2},\; n = 0, 1, 2, \ldots, \qquad (11)$$

Отметим, что в классической механике в задаче о линейном осцилляторе включение постоянной силы F также приводит лишь к смещению положения равновесия осциллятора на величину $x_0 = F/m\omega_0^2$ и к сдвигу минимума потенциальной энергии на $\Delta\varepsilon = -F^2/2m\omega_0^2$.

б) Формула (11) показывает, что вызванный электрическим полем сдвиг энергетических уровней квантового осциллятора ε_n характеризуется не зависящей от n величиной

$$\Delta\varepsilon \;=\; -\;\frac{q^2E^2}{2m\omega_0^2}. \qquad (12)$$

Таким образом, поляризуемость β, определяемая из формулы $\Delta\varepsilon = -\beta E^2/2$, для всех стационарных состояний осциллятора одинакова и равна $q^2/m\omega_0^2$. В данном случае выражение для поляризуемости не содержит постоянной Планка и, следовательно, имеет классический характер.

Определив оператор электрического дипольного момента (точнее говоря, оператор его проекции на ось x) формулой $\hat{d} = q\hat{x}$, для среднего значения этого оператора будем иметь:

$$\langle d\rangle = q\langle x\rangle = q\int_{-\infty}^{\infty} dx\; x\left|\psi_n(x)\right|^2. \qquad (13)$$

Перейдем к интегрированию по переменной $\widetilde{x} = x - x_0$, где $x_0 = qE / m\omega_0^2$:

$$\langle d \rangle = q\langle x \rangle = q \int\limits_{-\infty}^{\infty} d\widetilde{x}\ \widetilde{x} \left| \psi_n^{осц}(\widetilde{x}) \right|^2 + q\, x_0 \int\limits_{-\infty}^{\infty} d\widetilde{x} \left| \psi_n^{осц}(\widetilde{x}) \right|^2 . \qquad (14)$$

Первое слагаемое в правой части (14) обращается в нуль, поскольку, как можно видеть из (5), функции $\psi_n^{осц}$ обладают определенной четностью (равной $(-1)^n$) и, следовательно, подынтегральное выражение нечетно относительно замены $\widetilde{x} \to -\widetilde{x}$. Второе слагаемое в (14) с учетом нормировки функций $\psi_n^{осц}$ на единицу равно qx_0. Таким образом,

$$\langle d \rangle = qx_0 = \frac{q^2}{m\omega_0^2} E . \qquad (15)$$

Видно, что формула $\langle d \rangle = \beta E$ дает для поляризуемости β уже известный нам результат:

$$\beta = q^2 / m\omega_0^2 . \qquad (16)$$

6.2. а) В данной задаче гамильтониан частицы можно записать в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}_3 . \qquad (1)$$

Здесь каждый из операторов

$$\hat{H}_k = \frac{\hat{p}_k^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega_k^2 x_k^2 , \qquad \omega_k \equiv \sqrt{\frac{K_k}{m}} , \qquad (2)$$

представляет собой гамильтониан линейного осциллятора и связан только с одной из трех координатных переменных (x_k означает x, y или z соответственно значениям $k = 1, 2, 3$). Следовательно, пользуясь методом разделения переменных, мы найдем, что собственные функции гамильтониана (1) равны произведению волновых функций линейных осцилляторов:

$$\psi_{n_1 n_2 n_3}(x, y, z) = \psi_{n_1}^{осц}(x)\, \psi_{n_2}^{осц}(y)\, \psi_{n_3}^{осц}(z) , \qquad (3)$$

где функции $\psi_{n_k}^{осц}(x_k)$ определяются формулой (5) в задаче 6.1. Функции (3) обладают четностью $(-1)^{n_1+n_2+n_3}$. Они образуют ортонормированную систему:

$$\int d^3\mathbf{r}\ \psi_{n_1n_2n_3}(\mathbf{r})\ \psi_{n_1'n_2'n_3'}(\mathbf{r}) = \delta_{n_1n_1'}\ \delta_{n_2n_2'}\ \delta_{n_3n_3'}\,. \qquad (4)$$

Стационарные состояния нумеруются совокупностью квантовых чисел n_1, n_2, n_3, независимо друг от друга принимающих значения 0, 1, 2, …. Энергия стационарного состояния равна сумме трех вкладов, каждый из которых отвечает одномерному колебанию осциллятора вдоль x, y или z с соответствующими частотами ω_k:

$$\varepsilon_{n_1n_2n_3} = \hbar\omega_1(n_1+1/2) + \hbar\omega_2(n_2+1/2) + \hbar\omega_3(n_3+1/2). \qquad (5)$$

б) В случае с $\omega_1 = \omega_2 \equiv \omega_0$ энергетические уровни

$$\varepsilon_{n_1n_2n_3} = \hbar\omega_0(n_1+n_2+1) + \hbar\omega_3(n_3+1/2) \qquad (6)$$

со всевозможными значениями n_1 и n_2, при которых постоянна сумма n_1+n_2, оказываются вырожденными. При заданном $N \equiv n_1+n_2$ можем полагать n_1 равным 0, … ,N (всего $N+1$ значений), а n_2 будет определяться однозначно – как $N-n_1$. Таким образом, энергетический спектр (6) характеризуется $(N+1)$-кратным вырождением и может быть записан в виде:

$$\varepsilon_{N,n_3} = \hbar\omega_0(N+1) + \hbar\omega_3(n_3+1/2), \quad N, n_3 = 0, 1, 2, \ldots . \qquad (7)$$

в) Случаю с $\omega_1 = \omega_2 = \omega_3 \equiv \omega_0$ отвечает «сферический» осциллятор (частица в сферически симметричном поле $U(\mathbf{r}) = m\omega_0^2 r^2/2$). Формула (5) принимает вид

$$\varepsilon_n = \hbar\omega_0(n+3/2), \qquad (8)$$

где $n = n_1+n_2+n_3$. При заданном n можем полагать n_1 равным 0, … ,n, число n_2 будет принимать значения 0, …, $n-n_1$ (всего $n-n_1+1$ значений), а число n_3 определится однозначно – как $n-n_1-n_2$. Следовательно, кратность вырождения уровней энергии (8) равна

$$\sum_{n_1=0}^{n} (n - n_1 + 1) \;=\; \frac{1}{2}(n+1)(n+2). \qquad (9)$$

6.3. По отношению к координатным переменным потенциал

$$U(x,y,z) \;=\; \frac{m\,\omega_0^2}{2}\left(x^2 + \frac{y^2+z^2}{2} + y\,z \right) \qquad (1)$$

представляет собой квадратичную форму, но не имеет «осцилляторного» вида из-за наличия члена yz. Сделаем замену переменных, в результате которой U будет содержать одни лишь квадраты новых координатных переменных. Целесообразно применить ортогональное преобразование координат (отвечающее некоторому повороту координатной системы); такое преобразование не изменяет форму оператора кинетической энергии в уравнении Шредингера.

В рассматриваемом примере требуемое преобразование координат $x, y, z \to X, Y, Z$ легко подбирается. Действительно, так как $(y^2 + z^2)/2 + yz = (y+z)^2/2$, мы заключаем, что

$$X = x, \qquad Y = \frac{y+z}{\sqrt{2}}, \qquad Z = \frac{-y+z}{\sqrt{2}}. \qquad (2)$$

Переменные (2) – это координаты в декартовой системе, образующейся при повороте первоначальных декартовых осей на угол $\pi/4$ в плоскости y, z. В новой системе координат потенциал (1) принимает вид:

$$U(X,Y,Z) \;=\; \frac{1}{2}\,m\,\omega_0^2\,X^2 + \frac{1}{2}\,m\,\omega_0^2\,Y^2. \qquad (3)$$

Напомним читателю, как в случае квадратичного потенциала общего вида получать подобные результаты систематическим путем. Скалярная квадратичная форма $U(x_1, x_2, x_3)$ представляется в виде

$$U(x_1,x_2,x_3) \;=\; \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3} K_{ij}\,x_i x_j\,, \qquad (4)$$

где $K_{ij} = K_{ji}$ – вещественные коэффициенты, образующие симметричный

тензор второго ранга, x_1, x_2, x_3 – координаты x, y, z. Приведение формы (4) к сумме квадратов или, иными словами, приведение тензора K_{ij} к диагональному виду связано с задачей отыскания собственных значений K и собственных векторов C_j матрицы K_{ij}:

$$\sum_j (K_{ij} - K\,\delta_{ij})\,C_j = 0\,. \tag{5}$$

Система однородных уравнений (5) относительно величин C_j, представляющих собой компоненты ортов новой системы координат X_1, X_2, X_3, имеет нетривиальные решения при условии:

$$\det(K_{ij} - K\,\delta_{ij}) = 0\,. \tag{6}$$

В системе координат X_1, X_2, X_3 тензор K_{ij} примет диагональный вид, причем его диагональными элементами будут корни K_1, K_2, K_3 уравнения (6). Таким образом в новой системе координат

$$U(X_1, X_2, X_3) \;=\; \frac{1}{2}\left(K_1\,X_1^2 + K_2\,X_2^2 + K_3\,X_3^2\right). \tag{7}$$

Решениями системы уравнений (5) определяется положение новых координатных осей относительно первоначальных осей и тем самым устанавливаются формулы перехода от x_1, x_2, x_3 к X_1, X_2, X_3:

$$X_n \;=\; \sum_j C_j^{(n)}\,x_j\,, \tag{8}$$

где $C_j^{(n)}$ – собственный вектор, принадлежащий собственному значению K_n, нормированный условием

$$\left(C_1^{(n)}\right)^2 + \;\left(C_2^{(n)}\right)^2 + \;\left(C_3^{(n)}\right)^2 \;=\; 1\;\;. \tag{9}$$

Для потенциала (1) указанный метод дает $K_1 = K_2 = m\,\omega_0^2,\; K_3 = 0$, и ведет к результатам (2), (3).

Потенциал (3) соответствует двумерному осцилляторному движению в направлениях, перпендикулярных оси z, и свободному движению частицы вдоль оси z. Применив к уравнению Шредингера с потенциалом

(3) процедуру разделения переменных, получим волновые функции стационарных состояний частицы в виде

$$\psi_{n_1 n_2 p_z}(X,Y,Z) = \psi^{осц}_{n_1}(X)\,\psi^{осц}_{n_2}(Y)\,\psi_{p_z}(Z), \qquad (10)$$

где функции $\psi^{осц}_n$ даются формулой (5) задачи 6.1, ψ_{p_z} – плоская волна:

$$\psi_{p_z}(Z) \;=\; C e^{i p_z Z/\hbar}. \qquad (11)$$

Энергия частицы в стационарном состоянии (10) складывается из дискретных уровней энергии двумерного осцилляторного движения и энергии одномерного свободного движения с импульсом $-\infty < p_z < \infty$:

$$\varepsilon_{n_1 n_2 p_z} \;=\; \hbar\omega_0(n_1 + n_2 + 1) + p_z^2/2m. \qquad (12)$$

6.4. Для того чтобы найти распределение вероятности значений импульса,

$$dW(p) = \frac{\left|a_n(p)\right|^2}{2\pi\hbar}dp, \qquad (1)$$

в стационарных состояниях $\psi_n(x)$ линейного осциллятора,

$$\psi_n(x) = \psi^{осц}_n(x) \;=\; C_n\, e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{b}\right)^2} H_n\!\left(\frac{x}{b}\right), \qquad (2)$$

где

$$C_n = \left(\frac{1}{\pi b^2}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}, \qquad b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}}, \qquad (3)$$

вычислим компоненты Фурье функции $\psi_n(x)$, то есть – коэффициенты $a_n(p)$ разложения волновой функции (2) по собственным функциям импульса:

$$a_n(p) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} dx\; e^{-ipx/\hbar}\,\psi_n(x). \qquad (4)$$

Обозначив

$$x/b = \xi, \qquad pb/\hbar = q, \tag{5}$$

имеем:

$$a_n = C_n b \int_{-\infty}^{\infty} d\xi\, e^{-\xi^2/2}\, e^{-iq\xi}\, H_n(\xi). \tag{6}$$

Для вычисления интеграла (6) можно воспользоваться, например, следующим тождеством, применимым к произведению экспоненциальной функции $e^{-iq\xi}$ и произвольного полинома $A_0 + A_1\xi + ... + A_n\xi^n$:

$$e^{-iq\xi}(A_0 + A_1\xi + ... + A_n\xi^n) = (A_0 + A_1 i\frac{d}{dq} + ... + A_n\left(i\frac{d}{dq}\right)^n)\, e^{-iq\xi}.$$

Меняя очередность интегрирования по ξ и дифференцирований по q, и, кроме того, пользуясь формулой (3) из задачи 4.1, получим:

$$a_n = C_n b\, \hat{H}_n\left(i\frac{d}{dq}\right) \int_{-\infty}^{\infty} d\xi\, e^{-\xi^2/2}\, e^{-iq\xi} = C_n b \sqrt{2\pi}\, \hat{H}_n\left(i\frac{d}{dq}\right) e^{-q^2/2}. \tag{7}$$

Непосредственное вычисление с учетом явного вида полиномов Эрмита H_n дает:

$$\hat{H}_0\left(i\frac{d}{dq}\right) e^{-q^2/2} = e^{-q^2/2} = e^{-q^2/2}\, H_0(q),$$

$$\hat{H}_1\left(i\frac{d}{dq}\right) e^{-q^2/2} = -2iq\, e^{-q^2/2} = -i\, e^{-q^2/2}\, H_1(q),$$

$$\hat{H}_2\left(i\frac{d}{dq}\right) e^{-q^2/2} = (2-4q^2) e^{-q^2/2} = -e^{-q^2/2}\, H_2(q),$$

и так далее. Мы приходим к заключению, что зависимость от p (или, что то же самое, от $q = pb/\hbar$) компонент Фурье (4) в случае функций $\psi_n^{осц}(x)$ аналогична по функциональной форме зависимости $\psi_n^{осц}$ от x:

$$a_n = (-i)^n \sqrt{2\pi}\, b C_n\, e^{-q^2/2}\, H_n(q). \tag{8}$$

Подставляя (8) в (1) и учитывая (3), получаем искомое распределение вероятности:

$$dW(p) \;=\; \frac{1}{2^n n!\sqrt{\pi m\,\omega_0\hbar}}\; e^{-p^2/m\omega_0\hbar}\; H_n^2\!\left(\frac{p}{\sqrt{m\,\omega_0\hbar}}\right) dp\,. \qquad (9)$$

6.5. Гамильтониан бесспиновой частицы с электрическим зарядом q в присутствии векторного потенциала $\mathbf{A}$ имеет вид:

$$\hat{H} \;=\; \frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c}\mathbf{A}\right)^2, \qquad (1)$$

где $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$. Раскрыв скобки с учетом заданного в условии задачи явного вида компонент векторного потенциала,

$$A_x = -yB\,, \qquad A_y = A_z = 0\,, \qquad (2)$$

получим

$$\hat{H} \;=\; \frac{\hat{p}_x^2}{2m} \;-\; \frac{q}{2mc}\left(\hat{p}_x A_x + A_x\hat{p}_x\right) \;+\; \frac{q^2}{2mc^2}A_x^2 \;+\; \frac{\hat{p}_y^2}{2m} \;+\; \frac{\hat{p}_z^2}{2m} \;=$$

$$= \frac{\hat{p}_x^2}{2m} \;+\; \frac{\hat{p}_z^2}{2m} \;+\; \frac{\hat{p}_y^2}{2m} \;+\; \frac{qB}{mc}\,y\hat{p}_x \;+\; \frac{m}{2}\left(\frac{qB}{mc}\right)^2 y^2\,. \qquad (3)$$

Это выражение коммутативно с операторами $\hat{p}_x$ и $\hat{p}_z$, так как оно не содержит координат x и z. Следовательно, в данном случае волновые функции стационарных состояний целесообразно искать как такие функции, которые являются собственными одновременно для $\hat{p}_x$, $\hat{p}_z$ и $\hat{H}$:

$$\psi(x,y,z) \;=\; C\,e^{ip_x x/\hbar \,+\, ip_z z/\hbar}\,\Phi(y)\,. \qquad (4)$$

Здесь $\Phi(y)$ – неизвестная функция.

После подстановки (4) в уравнение Шредингера

$$\hat{H}\,\psi \;=\; \varepsilon\,\psi \qquad (5)$$

с гамильтонианом (3) операторные члены в $\hat{H}$, содержащие $\hat{p}_x$ и $\hat{p}_z$, заменяются соответствующими числовыми величинами. С помощью такой замены и применения обозначений

$$\omega_0 = \frac{qB}{mc}, \tag{6}$$

$$y_0 = -\frac{c p_x}{B q}, \tag{7}$$

$$E = \varepsilon - \frac{p_z^2}{2m} \tag{8}$$

уравнение Шредингера (5) приводится к уравнению для линейного осциллятора, совершающего колебания вдоль оси y относительно начальной точки $y = y_0$:

$$\left(\frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega_0^2 (y - y_0)^2 \right) \Phi(y) = E\,\Phi(y). \tag{9}$$

Следовательно, допустимые значения энергии (8) и отвечающие им функции $\Phi(y)$ имеют следующий вид:

$$E_n = \hbar\omega_0 (n + 1/2), \qquad n = 0,1,2, ..., \tag{10}$$

$$\Phi_n(y) = \psi_n^{осц}(y - y_0). \tag{11}$$

Таким образом, те решения нашей исходной задачи, которые допускают представление в форме (4), найдены:

$$\psi_{p_x, p_z, n}(x, y, z) = C\, e^{i p_x x/\hbar + i p_z z/\hbar}\, \psi_n^{осц}(y + c p_x / qB). \tag{12}$$

Квантовыми числами найденных стационарных состояний служат величины p_x, p_z с непрерывным спектром значений и число n, принимающее только дискретные значения 0, 1, 2, … Энергия стационарного состояния,

$$\varepsilon_{p_z, n} = \frac{p_z^2}{2m} + \hbar\omega_0 (n + 1/2), \tag{13}$$

имеет вид суммы энергии свободного движения частицы вдоль оси z с импульсом p_z и дискретных энергетических уровней (10), называемых *уровнями Ландау*.

Уровни (13) не зависят от величины p_x и, следовательно, имеют бесконечную кратность вырождения. Это означает, что решением уравнения Шредингера, принадлежащим определенной энергии (13), является не только функция (12), но и любая линейная комбинация таких функций со всевозможными значениями p_x. Поскольку спектр p_x непрерывен, указанная линейная комбинация в общем случае запишется в виде интеграла по p_x

$$\psi_{p_z,n}(\mathbf{r}) = e^{ip_z z/\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dp_x\, C(p_x)\, e^{ip_x x/\hbar}\, \psi_n^{осц}(y + cp_x/qB), \qquad (14)$$

где $C(p_x)$ – произвольная функция.

Отметим, что векторным потенциалом (1) описывается магнитное поле $\mathbf{B} = \mathrm{rot}\,\mathbf{A}$ с компонентами

$$B_x = B_y = 0, \qquad B_z = B. \qquad (15)$$

В классической механике движение заряженной частицы в однородном магнитном поле, параллельном оси z, представляется как результат наложения равномерного прямолинейного движения с импульсом p_z вдоль оси z и вращения с частотой $\omega_0 = qB/mc$ в плоскости x, y по окружности радиуса $\rho = cp_\perp/qB$, где $p_\perp = \sqrt{p_x^2 + p_y^2}$ – поперечная относительно направления $\mathbf{B}$ составляющая импульса частицы; ρ называют радиусом *ларморовской орбиты*. Как видно из (13), в квантовой механике классическому вращению частицы по ларморовским орбитам можно сопоставить уровни Ландау – набор дискретных значений энергии, характерный для гармонического осциллятора с собственной частотой $\omega_0 = qB/mc$.

6.6. Прежде всего, выпишем волновую функцию стационарного состояния для частицы в присутствии векторного потенциала

$$\widetilde{A}_y = xB, \qquad \widetilde{A}_x = \widetilde{A}_z = 0. \qquad (1)$$

Это легко сделать, заметив, что (1) можно рассматривать как компоненты поля

$$A_x = -yB\,, \qquad A_y = A_z = 0 \tag{2}$$

в новой системе координат, получающейся в результате поворота исходных осей на угол $\pi/2$ вокруг оси z. Не решая заново уравнение Шредингера, достаточно произвести замену $x \to -y$, $y \to x$ (а также $p_x \to -p_y$) в выражении (12) задачи 6.5. Опустив для упрощения записи нормировочный множитель C, получаем:

$$\widetilde{\psi}_{p_y, p_z, n}(x, y, z) \;=\; e^{ip_z z/\hbar}\, e^{ip_y y/\hbar}\, \psi_n^{\text{осц}}(x - cp_y/qB)\,, \tag{3}$$

Теперь будем применять формулы калибровочного преобразования, которые, как известно, имеют вид

$$\mathbf{A} = \widetilde{\mathbf{A}} - \nabla f\,, \qquad \varphi = \widetilde{\varphi} + \frac{1}{c}\frac{\partial f}{\partial t}\,, \tag{4}$$

$$\psi = e^{-ifq/\hbar c}\,\widetilde{\psi}\,. \tag{5}$$

Сравнив (1) и (2), находим ∇f :

$$\frac{\partial f}{\partial x} = yB\,, \quad \frac{\partial f}{\partial y} = xB\,, \quad \frac{\partial f}{\partial z} = 0\,. \tag{6}$$

Следовательно, калибровочную функцию f можно выбрать в форме:

$$f(\mathbf{r}) = B\,xy\,, \tag{7}$$

и при этом, согласно (5), волновая функция вида

$$\psi_{p_y, p_z, n}(\mathbf{r}) \;=\; e^{-i\frac{qB}{\hbar c}xy + i(p_z z + p_y y)/\hbar}\, \psi_n^{\text{осц}}(x - cp_y/qB) \tag{8}$$

должна оказаться одним из решений уравнения Шредингера с векторным потенциалом (2).

Допустимые выражения для решений указанного уравнения Шредингера приведены в формулах (12) и (14) задачи 6.5. Таким образом, нам необходимо убедиться в том, что последняя из упомянутых формул включает в качестве частного случая и найденную здесь функцию (8).

Пользуясь представлением $\psi_n^{осц}(x)$ в виде разложения в интеграл Фурье по плоским волнам,

$$\psi_n^{осц}(x) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_x}{2\pi\hbar}\, a_n(p_x)\, e^{i p_x x/\hbar}\,, \tag{9}$$

и учитывая в (8) вытекающее из (9) соотношение

$$\psi_n^{осц}(x - cp_y/qB) \;=\; \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_x}{2\pi\hbar}\, a_n(p_x)\, e^{i p_x x/\hbar - i\frac{c p_x p_y}{qB\hbar}}\,, \tag{10}$$

имеем:

$$\psi_{p_y,p_z,n}(\mathbf{r}) \;=\; e^{i\frac{p_z}{\hbar}z} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_x}{2\pi\hbar}\; a_n(p_x)\; e^{i\frac{p_x x + p_y y}{\hbar} - i\frac{c p_x p_y}{qB\hbar} - i\frac{qB}{\hbar c}xy}\,. \tag{11}$$

Замена (сдвиг) переменной интегрирования $p_x \to p_x + qBy/c$ приводит к взаимному сокращению некоторых экспоненциальных множителей под знаком интеграла в (11), и мы получаем:

$$\psi_{p_y,p_z,n}(\mathbf{r}) \;=\; e^{i p_z z/\hbar} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_x}{2\pi\hbar}\; a_n(p_x + qBy/c)\; e^{i p_x x/\hbar - i\frac{c p_x p_y}{qB\hbar}}\,. \tag{12}$$

По ходу решения задачи 6.4 было показано, что функции $a_n(q)$ и $\psi_n^{осц}(\xi)$ аналогичны друг другу. Другими словами, в силу соотношения (8) задачи 6.4 справедливо равенство

$$a_n(p_x + qBy/c) \;=\; (-i)^n \sqrt{2\pi}\, b\, \frac{(\pi b^2)^{-1/4}}{\sqrt{2^n n!}}\, e^{-(\frac{cp_x}{qB} + y)^2/2b^2}\; H_n\!\left(\frac{cp_x/qB + y}{b}\right) =$$

$$= \;(-i)^n \sqrt{2\pi}\, b\; \psi_n^{осц}(y + cp_x/qB)\,, \tag{13}$$

где

$$b = \sqrt{\hbar/m\omega_0}\,, \qquad \omega_0 = qB/mc\,.$$

Ведем в рассмотрение зависящую от p_x и p_y величину $C(p_x, p_y)$:

$$C(p_x, p_y) \;=\; (-i)^n \,\frac{b}{\sqrt{2\pi}\,\hbar}\; e^{-ic\,p_x p_y\,/\,qB\hbar}\,. \qquad (14)$$

Учитывая в (12) равенства (13) и (14), мы находим, таким образом, что рассматриваемая здесь волновая функция (8) и в самом деле допускает представление в виде

$$\psi_{p_y,p_z,n}(\mathbf{r}) \;=\; e^{i p_z z/\hbar} \int\limits_{-\infty}^{\infty} dp_x\, C(p_x, p_y)\; e^{i p_x x/\hbar}\; \psi_n^{\text{осц}}(y + cp_x\,/\,qB)\,, \quad (15)$$

соответствующее формуле (14) задачи 6.5. Эта волновая функция, следовательно, описывает одно из стационарных состояний принадлежащих вырожденному с бесконечной кратностью уровню

$$\varepsilon_{p_z,n} \;=\; \frac{p_z^2}{2m} \;+\; \frac{qB\hbar}{mc}\left(n + \frac{1}{2}\right). \qquad (16)$$

Для более полного анализа следует начинать не с частного решения (3), а с общего решения $\widetilde{\psi}_{p_z,n}(\mathbf{r})$, получаемого умножением (3) на произвольный коэффициент $N(p_y)$ с последующим интегрированием по p_y:

$$\widetilde{\psi}_{p_z,n}(\mathbf{r}) \;=\; e^{i p_z z/\hbar} \int\limits_{-\infty}^{\infty} dp_y\, N(p_y)\, e^{i p_y y/\hbar}\; \psi_n^{\text{осц}}(x - cp_y\,/\,qB)\,. \qquad (17)$$

Произведя затем калибровочное преобразование (5) и выполнив применительно к построенной так волновой функции $\psi_{p_z,n}(\mathbf{r})$ те же действия, что и выше (на этот раз – под знаком интеграла по p_y), мы снова придем к формуле (14) задачи 6.5. В такой формуле коэффициент $C(p_x)$ будет иметь вид функции $C(p_x, p_y)\; N(p_y)$, проинтегрированной по p_y.

Обсудим основные черты плотности вероятности $|\psi|^2$ для рассматриваемых стационарных состояний частицы. Интерес представляет зависимость этой величины от координат x и y, оси которых перпендикулярны направлению магнитного поля $\mathbf{B}$.

Состоянию $\psi_{p_x,p_z,n}(\mathbf{r})$ (формула (12) задачи 6.5) отвечает однородное распределение «электронной плотности» вдоль оси x и характерное для линейного осциллятора распределение вида $\left|\psi_n^{осц}(y-y_0)\right|^2$ вдоль y. При $y\to\pm\infty$ вероятность обнаружения частицы резко убывает; это убывание характеризуется пространственным масштабом

$$b=\sqrt{\hbar/m\omega_0}=\sqrt{\hbar c/qB}\,. \tag{18}$$

Величину $\sqrt{\hbar c/qB}$ называют *магнитной длиной*.

Если бы волновая функция $\psi_{p_x,p_z,n}(\mathbf{r})$ являлась единственным решением, то подобная выделенность одной из двух координат x и y, конечно, вызывала бы удивление. В действительности каждому уровню энергии (16) соответствует бесконечное множество волновых функций (формула (14) задачи 6.5), среди которых, как мы уже убедились, имеется и решение (8). Это решение восстанавливает «равноправие» осей x и y, поскольку оно дает однородное распределение вероятности обнаружения частицы вдоль y и характерное для осциллятора распределение вида $\left|\psi_n^{осц}(x-x_0)\right|^2$ вдоль x. Убывание этой вероятности вдоль x характеризуется магнитной длиной (18). Такая же картина соответствует решению (3) уравнения Шредингера с векторным потенциалом (1).

6.7. а) Подставив в правую часть равенства $[\hat a,\hat a^+]\equiv\hat a\hat a^+-\hat a^+\hat a$ указанные в условии задачи операторные выражения

$$\hat a=\sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}}\left(\hat x+\frac{i\hat p}{m\omega_0}\right),\qquad \hat a^+=\sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}}\left(\hat x-\frac{i\hat p}{m\omega_0}\right), \tag{1}$$

имеем:

$$[\hat a,\hat a^+]=-\frac{i}{\hbar}(\hat x\hat p-\hat p\hat x)=-\frac{i}{\hbar}[\hat x,\hat p]\,.$$

С учетом известного коммутационного соотношения для операторов координаты и импульса,

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar\,, \tag{2}$$

находим коммутатор операторов $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$:

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1. \tag{3}$$

б) Оператор $\hat{a}^+\hat{a}$ эрмитов; он должен иметь вещественные собственные значения (мы их временно обозначим как λ) и взаимно ортогональные собственные векторы $|\lambda\rangle$. Предположим, что для какого-либо собственного значения λ существует нормированный собственный вектор $|\lambda\rangle$:

$$\hat{a}^+\hat{a}\,|\lambda\rangle \;=\; \lambda|\lambda\rangle, \tag{4}$$

$$\langle\lambda|\lambda\rangle = 1. \tag{5}$$

Рассмотрим результат действия оператора $\hat{a}^+\hat{a}$ на вектор $\hat{a}|\lambda\rangle$, учитывая равенства (3) и (4):

$$\hat{a}^+\hat{a}\;\hat{a}|\lambda\rangle = (\hat{a}\hat{a}^+ - 1)\;\hat{a}|\lambda\rangle = \hat{a}(\hat{a}^+\hat{a}|\lambda\rangle) - \hat{a}|\lambda\rangle = (\lambda - 1)\,\hat{a}|\lambda\rangle. \tag{6}$$

Видно, что $\hat{a}|\lambda\rangle$ – также собственный вектор оператора $\hat{a}^+\hat{a}$ (если только $\hat{a}|\lambda\rangle \neq 0$), причем отвечающее этому вектору собственное значение на единицу меньше первоначального: $\lambda - 1$. Другими словами, $\hat{a}$ – «понижающий» оператор.

Скалярно умножив обе стороны равенства (4) на $|\lambda\rangle$ и приняв во внимание (5), получим:

$$\langle\lambda|\hat{a}^+\hat{a}|\lambda\rangle = \lambda\,,$$

или

$$\langle\hat{a}\lambda|\hat{a}\lambda\rangle = \lambda\,. \tag{7}$$

Следовательно, если $\hat{a}|\lambda\rangle \neq 0$, то $\lambda > 0$ (поскольку левая сторона в (7) представляет собой квадрат нормы вектора), и вектор $\hat{a}|\lambda\rangle$ можно нормировать на единицу: нормированный собственный вектор, принадлежащий собственному значению $\lambda - 1$, есть

$$|\lambda-1\rangle=\frac{1}{\sqrt{\lambda}}\hat{a}|\lambda\rangle. \qquad (8)$$

Последовательно действуя m раз оператором $\hat{a}$ на определяемые формулой (8) нормированные собственные векторы, получаем ряд собственных векторов, отвечающий убывающей последовательности собственных значений $\lambda, \lambda-1, \ldots, \lambda-m$. Однако данный процесс построения собственных векторов заведомо не может продолжаться до бесконечности. В самом деле, на каждом шаге мы будем иметь равенство, аналогичное (7),

$$\langle\hat{a}(\lambda-m)|\hat{a}(\lambda-m)\rangle=\lambda-m, \qquad (9)$$

и, следовательно, при $\hat{a}|\lambda-m\rangle\neq 0$ должно выполняться неравенство $\lambda-m>0$, но, с другой стороны, число повторений указанной выше процедуры m можно взять сколь угодно большим, мы заключаем, что λ принимает только *целочисленные* значения:

$$\lambda=n, \qquad n=0, 1, 2, \ldots . \qquad (10)$$

Действительно, лишь в этом случае на некотором шаге ($m=n$) мы придем к нулевому собственному значению, $\lambda-n=0$, причем, как видно из (9), собственный вектор $|0\rangle$, отвечающий нулевому собственному значению, будет удовлетворять равенству:

$$\hat{a}|0\rangle=0. \qquad (11)$$

Повторное действие оператора $\hat{a}$ на обе стороны этого равенства уже не дает новых собственных векторов, то есть последовательность (8), как и должно быть, обрывается.

Рассмотрим результат действия оператора $\hat{a}^{+}\hat{a}$ на вектор $\hat{a}^{+}|\lambda\rangle$, снова принимая во внимание соотношения (3) и (4):

$$\hat{a}^{+}\hat{a}\ \hat{a}^{+}|\lambda\rangle=\hat{a}^{+}(\hat{a}^{+}\hat{a}+1)|\lambda\rangle=(\lambda+1)\hat{a}^{+}|\lambda\rangle.$$

Видно, что $\hat{a}^{+}|\lambda\rangle$ – собственный вектор оператора $\hat{a}^{+}\hat{a}$, принадлежащий собственному значению $\lambda+1$, то есть $\hat{a}^{+}$ – «повышающий» оператор.

Найдем квадрат нормы этого вектора, причем, учитывая (10), будем теперь обозначать нормированные собственные векторы $|\lambda\rangle$ как $|n\rangle$; имеем:

$$\left\langle \hat{a}^+ n \middle| \hat{a}^+ n \right\rangle = \langle n | \hat{a}\hat{a}^+ | n \rangle = \langle n | (\hat{a}^+\hat{a} + 1) | n \rangle = n + 1 .$$

Следовательно,

$$\hat{a}^+ | n \rangle \; = \; \sqrt{n+1}\, | n+1 \rangle . \qquad (12)$$

Этой формулой характеризуется действие оператора $\hat{a}^+$ на нормированные собственные векторы оператора $\hat{a}^+\hat{a}$. Аналогичная формула для оператора $\hat{a}$ следует из (8):

$$\hat{a} | n \rangle \; = \; \sqrt{n}\, | n-1 \rangle . \qquad (13)$$

Итак, мы нашли спектр (10) оператора $\hat{a}^+\hat{a}$ и, кроме того, убедились, что начав с нормированного основного состояния $|0\rangle$, удовлетворяющего уравнению (11), можно с помощью формулы (12) получить все остальные собственные для $\hat{a}^+\hat{a}$ нормированные векторы $|n\rangle$:

$$|1\rangle = \hat{a}^+ |0\rangle , \qquad |2\rangle = \frac{(\hat{a}^+)^2}{\sqrt{2!}} |0\rangle , \qquad \ldots , \qquad |n\rangle = \frac{(\hat{a}^+)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle , \qquad \ldots \qquad (14)$$

Поскольку спектр (10) не вырожден (каждому значению n принадлежит только один собственный вектор) состояния (14) взаимно ортогональны:

$$\langle n | n' \rangle = \delta_{n n'} . \qquad (15)$$

Покажем, как найти волновые функции $\psi_n(x)$ состояний $|n\rangle$ в координатном представлении.

Учитывая, что в координатном представлении $\hat{x} = x$, $\hat{p} = -i\hbar\, d / d x$, и переходя к безразмерной координатной переменной

$$\xi = x \sqrt{m\omega_0 / \hbar} , \qquad (16)$$

запишем операторы (1) в виде

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right), \qquad \hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right). \qquad (17)$$

Равенство (11) приобретает смысл уравнения для волновой функции $\psi_0(x)$ состояния $|0\rangle$:

$$\hat{a}\,\psi_0(x) = 0,$$

то есть

$$\frac{d\psi_0(\xi)}{d\xi} + \xi\psi_0(\xi) = 0. \qquad (18)$$

Непосредственной проверкой легко убедиться, что решением этого дифференциального уравнения первого порядка является функция

$$\psi_0(x) = C\,e^{-\xi^2/2}, \qquad (19)$$

где C – постоянная. Чтобы определить C, вычислим нормировочный интеграл:

$$\langle 0|0\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\,|\psi_0|^2 = |C|^2\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}}\int_{-\infty}^{\infty} d\xi\; e^{-\xi^2/2} = |C|^2\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}}\,\sqrt{\pi}.$$

Полагая $\langle 0|0\rangle = 1$, находим:

$$C = \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar}\right)^{1/4}. \qquad (20)$$

Теперь воспользуемся формулой, вытекающей из (12):

$$|n\rangle = \frac{\hat{a}^+}{\sqrt{n}}\,|n-1\rangle, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots, \qquad (21)$$

которая в координатном представлении означает, что

$$\psi_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2n}}\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)\psi_{n-1}(\xi). \qquad (22)$$

Рекуррентное соотношение (22) позволяет шаг за шагом определить волновые функции $\psi_n(x)$, начав с уже известной функции $\psi_0(x)$. Можно получить и явное выражение для $\psi_n(x)$. С этой целью заметим, что в силу тождества, справедливого для произвольной функции $f(\xi)$,

$$\left(\xi-\frac{d}{d\xi}\right) f(\xi) \;=\; (-1)\, e^{\xi^2/2}\, \frac{d}{d\xi}\left(e^{-\xi^2/2}\, f(\xi)\right), \qquad (23)$$

соотношение (22) принимает вид:

$$\psi_n(\xi) \;=\; \frac{(-1)}{\sqrt{2n}}\, e^{\xi^2/2}\, \frac{d}{d\xi}\left(e^{-\xi^2/2}\, \psi_{n-1}(\xi)\right).$$

Применим в правой стороне этого соотношения аналогичное равенство для $\psi_{n-1}(\xi)$,

$$\psi_{n-1}(\xi) \;=\; \frac{(-1)}{\sqrt{2(n-1)}}\, e^{\xi^2/2}\, \frac{d}{d\xi}\left(e^{-\xi^2/2}\, \psi_{n-2}(\xi)\right).$$

Повторим подобную процедуру еще $n-2$ раз. На последнем шаге в правой стороне появится функция (19), и мы придем к формуле:

$$\psi_n(\xi) \;=\; C\, \frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n n!}}\, e^{\xi^2/2}\, \frac{d^n}{d\xi^n}(e^{-\xi^2}).$$

С помощью полиномов Эрмита $H_n(\xi)$,

$$H_n(\xi) \;=\; (-1)^n\, e^{\xi^2}\, \frac{d^n}{d\xi^n}(e^{-\xi^2}), \qquad (24)$$

окончательное выражение для волновых функций состояний $|n\rangle$ запишется в виде

$$\psi_n(\xi) \;=\; \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\, e^{-\xi^2/2}\, H_n(\xi). \qquad (25)$$

Функции (25) совпадают с волновыми функциями стационарных состояний линейного осциллятора (см. (5) в задаче 6.1).

в) Обращая равенства (1), выразим операторы $\hat{x}$, $\hat{p}$ через $\hat{a}$, $\hat{a}^+$:

$$\hat{x} \;=\; \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}\, \left(\hat{a}+\hat{a}^+\right), \qquad (26)$$

$$\hat{p} = -i\sqrt{\frac{m\hbar\omega_0}{2}}\left(\hat{a}-\hat{a}^+\right). \qquad (27)$$

Подстановка (26), (27) в гамильтониан линейного осциллятора

$$\hat{H}_{осц} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2\hat{x}^2 \qquad (28)$$

приводит его к виду

$$\hat{H}_{осц} = \frac{\hbar\omega_0}{2}\left(\hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a}\right). \qquad (29)$$

Поскольку из коммутационного соотношения (3) следует равенство $\hat{a}\hat{a}^+ = \hat{a}^+\hat{a} + 1$, целесообразно гамильтониан (29) выразить полностью через рассматривавшийся выше оператор $\hat{a}^+\hat{a}$, для которого спектром собственных значений служат числа $n = 0, 1, 2, \ldots$ (для оператора $\hat{a}\hat{a}^+$ собственные значения равны $n+1$):

$$\hat{H}_{осц} = \hbar\omega_0\,\hat{a}^+\hat{a} + \frac{\hbar\omega_0}{2}. \qquad (30)$$

Гамильтониан является одним из основных средств описания кантовой системы. Результат (30) примечателен тем, что здесь описание системы не включает таких величин, как масса и координата осциллятора (в гамильтониан (30), в отличие от (28), входит только собственная частота системы). Это позволяет применять гамильтонианы вида (30) для «квантования» систем, отличных от одиночной частицы, движущейся в поле упругих сил. По существу, любая система, в которой с классической точки зрения возможно возбуждение какого-либо гармонического колебательного процесса (моды с определенной частотой ω_0) в квантовой теории рассматривается как осциллятор с гамильтонианом (30). Энергия системы, отсчитываемая от уровня основного состояния $\varepsilon_0 = \hbar\omega_0/2$, дается формулой:

$$\varepsilon_n - \varepsilon_0 = \hbar\omega_0 n, \quad n = 0, 1, 2, \ldots . \qquad (31)$$

При таком подходе величина $\hbar\omega_0$ трактуется как «квант энергии» моды с собственной частотой ω_0, число n интерпретируется как число не

взаимодействующих друг с другом квантов энергии в стационарном состоянии системы, $\hat{a}^{+}\hat{a}$ служит оператором числа квантов.

С точки зрения статистической физики указанные кванты энергии можно рассматривать как бозоны – частицы, подчиняющиеся статистике Бозе–Эйнштейна. Для этого типа статистики характерно отсутствие ограничений на максимально допустимое число частиц n (в случае же фермионов, то есть – частиц, подчиняющихся статистике Ферми–Дирака, в формуле (31) допускались бы лишь значения $n=0$ и 1; см. задачу 3.10). Операторы $\hat{a}^{+}$ и $\hat{a}$, характеризующиеся коммутационным соотношением (3), принято называть бозонными операторами рождения и уничтожения.

6.8. а) Наиболее экономно вычисление матричных элементов

$$x_{n'n} = \langle n' | \hat{x} | n \rangle \tag{1}$$

производится с помощью операторов $\hat{a}$ и $\hat{a}^{+}$, рассмотренных в задаче 6.7. Пользуясь формулами (26), (12) и (13) задачи 6.7, имеем:

$$x_{n'n} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} \langle n' | \hat{a} | n \rangle + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} \langle n' | \hat{a}^{+} | n \rangle =$$

$$= \sqrt{\frac{\hbar n}{2m\omega_0}} \langle n' | n-1 \rangle + \sqrt{\frac{\hbar (n+1)}{2m\omega_0}} \langle n' | n+1 \rangle .$$

С учетом равенства $\langle n' | n'' \rangle = \delta_{n'n''}$, выражающего свойство ортонормированности стационарных состояний, получаем:

$$x_{n'n} = \sqrt{\frac{\hbar n}{2m\omega_0}} \delta_{n',\,n-1} + \sqrt{\frac{\hbar (n+1)}{2m\omega_0}} \delta_{n',\,n+1} . \tag{2}$$

Таким образом, отличные от нуля матричные элементы координаты можно записать в виде

$$x_{n-1,\,n} = x_{n,\,n-1} = \sqrt{\frac{\hbar n}{2m\omega_0}} . \tag{3}$$

б) Соотношение (2) позволяет легко определять матричные элементы операторов $\hat{x}^{m}$. В частности, для среднего значения квадрата координаты

находим, что

$$\left\langle x^2 \right\rangle = \left\langle n \left| \hat{x}^2 \right| n \right\rangle = \sum_{n'} \left\langle n \left| \hat{x} \right| n' \right\rangle \left\langle n' \left| \hat{x} \right| n \right\rangle =$$

$$= \left\langle n \left| \hat{x} \right| n-1 \right\rangle \left\langle n-1 \left| \hat{x} \right| n \right\rangle + \left\langle n \left| \hat{x} \right| n+1 \right\rangle \left\langle n+1 \left| \hat{x} \right| n \right\rangle = \frac{\hbar}{m\omega_0} \left(n + \frac{1}{2} \right). \qquad (4)$$

Проверим (4) с помощью формулы (7) задачи 3.13**.** С этой целью представим собственные значения $\hbar\omega_0(n+1/2)$ гамильтониана $\hat{H}_{осц}$ как его матричные элементы в базисе, образованном стационарными состояниями:

$$\left\langle n \left| \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega_0^2 \hat{x}^2 \right) \right| n \right\rangle = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right). \qquad (5)$$

Дифференцируя левую и правую стороны этого равенства по ω_0, получаем соотношение

$$m\omega_0 \left\langle n \left| \hat{x}^2 \right| n \right\rangle = \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right),$$

подтверждающее справедливость формулы (4):

$$\left\langle x^2 \right\rangle = \frac{\hbar}{m\omega_0} \left(n + \frac{1}{2} \right). \qquad (6)$$

Отметим, что $\left\langle x \right\rangle = 0$ (так как диагональные матричные элементы (2) равны нулю), и поэтому найденная величина $\left\langle x^2 \right\rangle$ совпадает со среднеквадратичной неопределенностью $(\delta x)^2$ координаты осциллятора. Иными словами, неопределенность координаты равна

$$\delta x = \left(\frac{\hbar}{m\omega_0} (n + \frac{1}{2}) \right)^{1/2}. \qquad (7)$$

С учетом формул (5), (6) и равенства $\left\langle p \right\rangle = 0$ (обоснование которому читатель, несомненно, найдет в качестве самостоятельного упражнения), имеем:

$$\delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle} = \left(m \hbar \omega_0 \, (n + \frac{1}{2}) \right)^{1/2} . \qquad (8)$$

Видно, что

$$\delta x \, \delta p \; = \; \hbar (n + 1/2) \; \geq \; \hbar / 2 , \qquad (9)$$

в согласии с соотношением неопределенности Гейзенберга.

6.9. а) Рассматриваемое состояние осциллятора имеет вид суперпозиции стационарных состояний $|n\rangle$,

$$|\alpha\rangle|_{t=0} = \sum_{n=0}^{\infty} A_n |n\rangle , \qquad (1)$$

с коэффициентами

$$A_n \; = \; e^{-|\alpha|^2/2} \; \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} . \qquad (2)$$

Экспоненциальный множитель в (2) обеспечивает нормировку вектора состояния (1) на единицу. Для того чтобы получить состояние $|\alpha\rangle$, отнесенное к произвольному моменту времени t, достаточно умножить A_n на $e^{-i \varepsilon_n t / \hbar}$, где $\varepsilon_n = \hbar \omega_0 (n + 1/2)$ – энергия стационарного состояния $|n\rangle$:

$$|\alpha\rangle \; = \; \sum_{n=0}^{\infty} A_n(t) \, |n\rangle , \qquad (3)$$

$$A_n(t) \; = \; e^{-|\alpha|^2/2} \; \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \; e^{-i \varepsilon_n t / \hbar} . \qquad (4)$$

Приступим к вычислению $\langle x(t) \rangle = \langle \alpha | \hat{x} | \alpha \rangle$, пользуясь формулой (2) задачи 6.8:

$$\langle \alpha | \hat{x} | \alpha \rangle \; = \; \sum_{n'} \sum_{n} A_{n'}(t)^* \, A_n(t) \, \langle n' | \hat{x} | n \rangle \; =$$

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{2 m \omega_0}} \sum_{n=0}^{\infty} A_{n-1}(t)^* \, A_n(t) \, \sqrt{n} \; + \; \sqrt{\frac{\hbar}{2 m \omega_0}} \sum_{n=0}^{\infty} A_{n+1}(t)^* \, A_n(t) \, \sqrt{n+1} . \qquad (5)$$

В правой стороне (5) в первой из двух сумм член с $n = 0$ равен нулю, так что здесь n можно заменить на $n+1$; это дает:

$$\langle \alpha | \hat{x} | \alpha \rangle \;=\; \sqrt{\frac{\hbar}{2\,m\,\omega_0}} \sum_{n=0}^{\infty} A_n(t)^{*}\, A_{n+1}(t)\, \sqrt{n+1} \;+\; к.с., \qquad (6)$$

где «*к.с.*» означает выражение, комплексно сопряженное по отношению к предыдущему выражению, выписанному явно. С учетом (4) имеем:

$$\sum_{n=0}^{\infty} A_n(t)^{*}\, A_{n+1}(t)\, \sqrt{n+1} \;=\; e^{-|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha^{*})^n\, \alpha^{n+1}}{n!}\, e^{i(\varepsilon_n - \varepsilon_{n+1})t/\hbar} \;=$$

$$= \alpha\, e^{-|\alpha|^2 - i\omega_0 t} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} \;=\; \alpha\, e^{-i\omega_0 t}. \qquad (7)$$

Подставив (7) в (6), получим:

$$\langle \alpha | \hat{x} | \alpha \rangle \;=\; \sqrt{\frac{\hbar}{2\,m\,\omega_0}} \left(\alpha\, e^{-i\,\omega_0 t} + \alpha^{*}\, e^{i\,\omega_0 t} \right). \qquad (8)$$

Запишем комплексную величину α в форме $\alpha = |\alpha| e^{i\,\delta}$ и обозначим

$$\sqrt{\frac{2\hbar}{m\,\omega_0}}\,|\alpha| \;=\; C. \qquad (9)$$

Это позволяет представить результат (8) в виде

$$\langle x(t) \rangle \;=\; C \cos(\omega_0 t - \delta). \qquad (10)$$

Таким образом, среднее значение координаты осциллятора в когерентном состоянии $|\alpha\rangle$ испытывает гармоническое колебание с частотой ω_0, амплитуда C и начальная фаза δ которого определяются комплексным параметром α.

б) Из (3) следует, что для осциллятора, находящегося в когерентном состоянии $|\alpha\rangle$, вероятность W_n обнаружить состояние $|n\rangle$ есть

$$W_n \;=\; |A_n(t)|^2 \;=\; \frac{|\alpha|^{2n}}{n!}\, e^{-|\alpha|^2}. \qquad (11)$$

Найдем среднее значение «числа квантов» n в когерентном состоянии $|\alpha\rangle$:

$$\langle n\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} n W_n = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{(n-1)!} e^{-|\alpha|^2} = |\alpha|^2 e^{-|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} = |\alpha|^2.$$

Итак,

$$\langle n\rangle = |\alpha|^2, \tag{12}$$

и поэтому распределение вероятности (11) можно записать в виде

$$W_n = \frac{\langle n\rangle^n}{n!} e^{-\langle n\rangle}. \tag{13}$$

Выражение (13) называют распределением Пуассона.

Найдем среднее значение квадрата числа квантов:

$$\langle n^2\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} n^2 W_n = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n\langle n\rangle^n}{(n-1)!} e^{-\langle n\rangle} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(n+1)\langle n\rangle^{n+1}}{n!} e^{-\langle n\rangle} =$$

$$= \langle n\rangle \sum_{n=0}^{\infty} n W_n + \langle n\rangle \sum_{n=0}^{\infty} W_n = \langle n\rangle^2 + \langle n\rangle.$$

Таким образом,

$$\langle n^2\rangle = \langle n\rangle^2 + \langle n\rangle. \tag{14}$$

Отметим, что неопределенность δn оказывается равной корню квадратному из среднего значения n:

$$\delta n = \sqrt{\langle n^2\rangle - \langle n\rangle^2} = \sqrt{\langle n\rangle}. \tag{15}$$

Эта величина растет с увеличением $\langle n\rangle$, однако относительная флуктуация числа квантов убывает:

$$\frac{\delta n}{\langle n\rangle} = \frac{1}{\sqrt{\langle n\rangle}} << 1 \quad \text{при} \quad \langle n\rangle >> 1. \tag{16}$$

С величиной $\langle n \rangle$ связано среднее значение энергии осциллятора $\langle \varepsilon \rangle$. Действительно, заметим, что

$$\langle \varepsilon \rangle = \langle \alpha | \hat{H} | \alpha \rangle = \sum_{n'} \sum_{n} A_{n'}(t)^{*} A_{n}(t) \langle n' | \hat{H} | n \rangle, \tag{17}$$

и учтем равенство

$$\langle n' | \hat{H} | n \rangle = \hbar\omega_0 (n + 1/2) \delta_{n'n}. \tag{18}$$

В итоге (17) принимает вид

$$\langle \varepsilon \rangle = \hbar\omega_0 \langle n \rangle + \hbar\omega_0 / 2. \tag{19}$$

С учетом (9) и (12) соотношение (19) можно записать так:

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{1}{2} m \omega_0^2 C^2 + \frac{\hbar\omega_0}{2}. \tag{20}$$

Первое слагаемое в правой стороне (20) имеет вид выражения для энергии классического осциллятора, колеблющегося с амплитудой C. Если $|\alpha| >> 1$, то C велика по сравнению с квантово-механической амплитудой «нулевых колебаний» $\sqrt{\hbar / m\omega_0}$, и вторым слагаемым в (20) можно пренебречь. При этом $\langle n \rangle >> 1$, так что относительные величины квантовых флуктуаций числа n и, следовательно, энергии ε малы. Все это, в совокупности с результатом (10), позволяет сказать, что в когерентном состоянии $|\alpha\rangle$ с $|\alpha| >> 1$ поведение квантового осциллятора в наибольшей степени напоминает картину гармонического колебания в классической механике.

7. МОМЕНТ ИМПУЛЬСА

Понятие момента импульса в квантовой теории полностью связано с результатами математического исследования так называемой группы вращений (совокупности преобразований симметрии сферы). Применению в квантовой механике методов теории групп посвящена обширная учебная литература; ниже приводится лишь небольшой перечень основных формул.

Эрмитовыми *операторами проекций момента импульса* $\hbar\hat{J}_x$, $\hbar\hat{J}_y$ и $\hbar\hat{J}_z$ определяются унитарные операторы $\hat{R}(\boldsymbol{\alpha})$ поворотов на произвольные углы α_x, α_y и α_z вокруг координатных осей:

$$\hat{R}(\alpha_x\mathbf{e}_x)=e^{-i\alpha_x\hat{J}_x}, \quad \hat{R}(\alpha_y\mathbf{e}_y)=e^{-i\alpha_y\hat{J}_y}, \quad \hat{R}(\alpha_z\mathbf{e}_z)=e^{-i\alpha_z\hat{J}_z}. \qquad \text{(I)}$$

Векторный оператор момента импульса имеет вид

$$\hat{\mathbf{J}} = \mathbf{e}_x\hat{J}_x + \mathbf{e}_y\hat{J}_y + \mathbf{e}_z\hat{J}_z. \qquad \text{(II)}$$

Скалярный *оператор квадрата момента* определен формулой

$$\hat{\mathbf{J}}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2. \qquad \text{(III)}$$

Важную роль играют операторы $\hat{J}_+$ и $\hat{J}_-$, эрмитово сопряженные по отношению друг к другу,

$$\hat{J}_+ = \hat{J}_x + i\hat{J}_y, \qquad \hat{J}_- = \hat{J}_x - i\hat{J}_y. \qquad \text{(IV)}$$

Справедливы следующие коммутационные соотношения:

$$[\hat{J}_x, \hat{J}_y]=i\hat{J}_z, \quad [\hat{J}_y, \hat{J}_z]=i\hat{J}_x, \quad [\hat{J}_z, \hat{J}_x]=i\hat{J}_y; \qquad \text{(V)}$$

$$[\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_x]=0, \quad [\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_y]=0, \quad [\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_z]=0. \qquad \text{(VI)}$$

Из (V) следует, что не существует квантовых состояний, в которых при не равном нулю моменте все три проекции момента имели бы определенное значение; величины J_x, J_y и J_z одновременно не измеримы. Поэтому состояниями *с определенным моментом* называют

векторы состояний $|j,m\rangle$, являющиеся собственными векторами не для оператора момента $\hat{\mathbf{J}}$, а для коммутирующих друг с другом операторов квадрата момента $\hat{\mathbf{J}}^2$ и проекции момента $\hat{J}_z$:

$$\hat{\mathbf{J}}^2 |j,m\rangle = j(j+1)\,|j,m\rangle, \qquad \text{(VII)}$$

$$\hat{J}_z |j,m\rangle = m\,|j,m\rangle, \qquad \text{(VIII)}$$

где $j(j+1)$ – собственные значения квадрата момента. Если в качестве момента рассматривается только орбитальный момент импульса или полный момент (с учетом спина) при условии, что частицы имеют целочисленный спин, то допустимыми значениями j являются лишь целые числа:

$$j = 0,\ 1,\ 2,\ldots\ . \qquad \text{(IX)}$$

Если же частицы имеют полуцелый спин, то спектр значений полного момента j содержит как целые так и полуцелые числа:

$$j = 0,\ \frac{1}{2},\ 1,\ \frac{3}{2},\ 2,\ldots\ . \qquad \text{(X)}$$

Величина j называется *абсолютной величиной момента* в состояниях $|j,m\rangle$. При заданном значении j проекция момента J_z (ее принято обозначать буквой m) принимает $2j+1$ значений с шагом, равным единице:

$$m = j,\ j-1,\ \ldots\ ,\ -j\ . \qquad \text{(XI)}$$

В базисе, образованном состояниями $|j,m\rangle$ с заданным j, матрица оператора $\hat{J}_z$ диагональна; ее диагональными элементами являются указанные выше значения m. При этом не равные нулю матричные элементы операторов $\hat{J}_x$ и $\hat{J}_y$ можно найти по формулам

$$\langle m+1|\hat{J}_x|m\rangle = \langle m|\hat{J}_x|m+1\rangle = (1/2)\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\ ,$$

$$\langle m+1|\hat{J}_y|m\rangle = -\langle m|\hat{J}_y|m+1\rangle = (-i/2)\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\ , \qquad \text{(XII)}$$

а матрицы операторов $\hat{J}_+$ и $\hat{J}_-$ определяются из соотношений

$$\hat{J}_+ \left| j,m \right\rangle = \sqrt{(j-m)(j+m+1)}\, \left| j,m+1 \right\rangle,$$

$$\hat{J}_- \left| j,m+1 \right\rangle = \sqrt{(j-m)(j+m+1)}\, \left| j,m \right\rangle. \qquad \text{(XIII)}$$

Орбитальный момент импульса частицы описывается векторным оператором $\hat{\mathbf{l}}$, действующим на волновую функцию. В координатном представлении он имеет вид (в единицах $\hbar$):

$$\hat{\mathbf{l}} = (\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}})/\hbar = -i\, \mathbf{r} \times \nabla, \qquad \text{(XIV)}$$

или, в сферической системе координат (r, θ, φ),

$$\hat{\mathbf{l}} = -i\, \mathbf{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + i\, \mathbf{e}_\theta \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}. \qquad \text{(XV)}$$

Операторы проекций орбитального момента

$$\hat{l}_x = -i\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y} \right),\ \hat{l}_y = -i\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z} \right),\ \hat{l}_z = -i\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x} \right) = -i\frac{\partial}{\partial \varphi} \qquad \text{(XVI)}$$

удовлетворяют коммутационным соотношениям (V), (VI). Оператор квадрата орбитального момента

$$\hat{\mathbf{l}}^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2 = -\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \qquad \text{(XVII)}$$

может быть выражен через угловую часть оператора Лапласа, так как в сферической системе координат оператор Лапласа имеет следующий вид:

$$\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} =$$

$$= \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2}\hat{\mathbf{l}}^2. \qquad \text{(XVIII)}$$

Собственными значениями оператора $\hat{\mathbf{l}}^2$ являются числа $l(l+1)$ где l – абсолютная величина орбитального момента импульса. Эта величина принимает только целочисленные значения:

$$l = 0, 1, 2, \ldots .$$

В случае движения частицы в сферически симметричном поле, $U(\mathbf{r}) = U(r)$, гамильтониан $\hat{H}$ коммутирует с операторами $\hat{\mathbf{l}}^2$, $\hat{l}_z$, $\hat{l}_y$, $\hat{l}_x$. Следовательно, орбитальный момент является сохраняющейся величиной – вектор усредненного орбитального момента $\langle \mathbf{l} \rangle$ сохраняется в любом состоянии частицы $|\psi(t)\rangle$, удовлетворяющем волновому уравнению Шредингера со сферически симметричным потенциалом $U(r)$.

Операторы $\hat{l}_z$, $\hat{l}_y$, $\hat{l}_x$ не коммутативны, но операторы $\hat{H}$, $\hat{\mathbf{l}}^2$, $\hat{l}_z$ коммутативны друг с другом. Поэтому решения ψ уравнения Шредингера со сферически симметричным потенциалом,

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(r) \right) \psi(\mathbf{r}) \; = \; \varepsilon \, \psi(\mathbf{r}) ,$$

могут быть найдены в виде волновых функций стационарных состояний с определенной величиной l и проекцией орбитального момента $\hat{l}_z \equiv m = l, \, l-1, \, \ldots \, , \, -l$:

$$\psi(\mathbf{r}) = \; R(r) \, Y_{lm}(\theta, \varphi) , \qquad \text{(XIX)}$$

где

$$R(r) = \frac{\chi(r)}{r} ,$$

причем вспомогательная функция $\chi(r)$ – решение уравнения, по форме совпадающего с одномерным уравнением Шредингера:

$$\frac{d^2\chi(r)}{dr^2} \; + \; \frac{2m}{\hbar^2} \left(\varepsilon - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - U(r) \right) \chi(r) \; = \; 0 . \qquad \text{(XX)}$$

Функции $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ определяются (с точностью до фазового множителя) формулой

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} \, (-1)^m \, P_l^{(m)}(\cos\theta) \, e^{i m \varphi} , \qquad \text{(XXI)}$$

где $P_l^{(m)}(\cos\theta)$ – присоединенные полиномы Лежандра:

$$P_l^{(m)}(\cos\theta) = \frac{1}{2^l l!}\sin^m\theta\frac{d^{\,l+m}}{(d\cos\theta)^{\,l+m}}\left(\cos^2\theta - 1\right)^l. \qquad \text{(XXII)}$$

Приведем явные выражения нескольких первых функций $Y_{lm}(\theta,\varphi)$:

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}},\ Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta,\ Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}\left(3\cos^2\theta - 1\right),$$

$$Y_{1,\pm1} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{\pm i\varphi},\ Y_{2,\pm1} = \mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\cos\theta\sin\theta e^{\pm i\varphi},$$

$$Y_{2,\pm2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta\, e^{\pm 2i\varphi}.$$

Во многих задачах потенциал $U(r)$ обладает свойством

$$\lim\, r^2U(r) = 0 \quad \text{при } r \to 0.$$

В таких случаях требование ограниченности волновой функции (XIX) приводит к тому, что «радиальная» функция $R(r)$ вблизи начала координат обладает следующим поведением:

$$R_l(r) \sim r^l, \qquad r \to 0. \qquad \text{(XXIII)}$$

При этом $\chi(r)$ удовлетворяет граничному условию вида

$$\chi(0) = 0. \qquad \text{(XXIV)}$$

При $r \to \infty$ поведение $R(r)$ определяется тем, к какой части энергетического спектра относятся рассматриваемые состояния. Если решения χ уравнения (XX) принадлежат дискретным уровням энергии ε, то для них справедлива так называемая *осцилляционная теорема*. Согласно этой теореме низшему уровню ε принадлежит функция χ, не имеющая ни одного узла, а каждому следующему уровню в порядке возрастания ε соответствует решение с большим на единицу числом узлов. Очевидно, функции $R(r) = \chi(r)/r$ и $\chi(r)$ имеют одно и то же число узлов; это число n_r называется радиальным квантовым числом. Функция $R(r) \equiv R_{n_r l}(r)$,

принадлежащая дискретному уровню энергии $\varepsilon = \varepsilon_{n_r l}$, при увеличении r от нуля до бесконечности совершает n_r осцилляций и затем монотонно убывает, так что нормировочный интеграл для волновой функции оказывается сходящимся и может быть выбран равным единице:

$$\int d^3\mathbf{r} \left|\psi_{n_r lm}\right|^2 = \int\limits_0^\infty dr\, r^2 \left|R_{n_r l}\right|^2 \int d\Omega \left|Y_{lm}\right|^2 = \int\limits_0^\infty dr\, r^2 \left|R_{n_r l}\right|^2 = 1 .$$

Функции же $R(r) \equiv R_{kl}(r)$, принадлежащие значениям $\varepsilon = \hbar^2 k^2 / 2m$ в непрерывной части энергетического спектра, убывают на бесконечности не монотонно и не столь быстро, их нормировочные интегралы расходятся. Эти функции имеют бесконечно много узлов, причем осцилляции $R_{kl}(r)$ при $r \to \infty$ характеризуются длиной волны λ, которая, как обычно, связана с волновым числом k равенством $\lambda = 2\pi / k$.

7.1. ЗАДАЧИ

7.1. Для состояния $\left|j,m\right\rangle$ с определенным значением величины момента импульса j и проекции момента $J_z = m$ найти средние значения квадратов проекций момента на декартовы координатные оси.

7.2. Для состояния $\left|j,m\right\rangle$ найти среднее значение проекции момента $J_{\mathbf{n}}$ на произвольное направление, задаваемое единичным вектором $\mathbf{n}$.

7.3. Пусть $\left|j,\tilde{m}\right\rangle$ – состояние с определенной величиной момента и проекцией момента $J_{\mathbf{n}} = m$ на некоторое направление, заданное единичным вектором $\mathbf{n}$. Найти усредненный вектор момента $\left\langle \mathbf{J} \right\rangle$.

7.4. Частица находится в состоянии $\left|1,m\right\rangle$ с определенной проекцией момента $J_z = m$; величина момента $j = 1$. Найти вероятности различных значений проекции момента на новую ось $\tilde{z}$, составляющую с первоначальной осью z заданный угол θ.

7.5. Для свободно движущейся частицы найти волновые функции стационарных состояний с определенной величиной орбитального момента и определенной проекцией момента.

7.6. Свободная частица движется с определенным импульсом $p = \hbar k$ в положительном направлении оси z.

а) Определить возможные значения проекции орбитального момента на ось z.

б) Как зависит от k вероятность того, что частица будет обладать моментом l (относительно начала координат)?

7.7. Частица движется в сферически симметричном поле $U(\mathbf{r}) = m\omega_0^2 r^2/2$ (пространственный осциллятор). Для стационарных состояний вида $\psi_{n_1 n_2 n_3}(x, y, z)$, принадлежащих уровню энергии, ближайшему к основному энергетическому уровню, найти:

а) Усредненный вектор орбитального момента $\langle \mathbf{l} \rangle$.

б) Вероятность W_{lm} значений величины орбитального момента l и проекции момента $l_z \equiv m$.

7.8. Частица движется в двумерном «кулоновском» поле

$$U(\mathbf{r}) = -\frac{\alpha}{r}, \qquad r = \sqrt{x^2 + y^2}, \qquad \alpha > 0.$$

Найти энергетический спектр связанных состояний частицы при любом допустимом значении проекции момента l_z.

7.2. РЕШЕНИЯ

7.1. Исходим из того, что под действием операторов

$$\hat{J}_\pm = \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y \tag{1}$$

вектор состояния $|j,m\rangle$ превращается в $C|j,m\pm1\rangle$ и поэтому, с учетом взаимной ортогональности состояний $|j,m\rangle$ с различающимися значениями m, имеют место два равенства:

$$\langle j,m|(\hat{J}_x \pm i\,\hat{J}_y)|j,m\rangle = 0. \tag{2}$$

Выделив в (2) вещественную и мнимую части, имеем:

$$\langle J_x\rangle = \langle J_y\rangle = 0. \tag{3}$$

В силу упомянутого обстоятельства справедливы также равенства

$$\langle j,m|(\hat{J}_x \pm i\,\hat{J}_y)^2|j,m\rangle = 0,$$

то есть

$$\langle j,m|(\hat{J}_x^2 \pm i\,(\hat{J}_x\hat{J}_y + \hat{J}_y\hat{J}_x) - \hat{J}_y^2)|j,m\rangle = 0. \tag{4}$$

Отсюда следует, что

$$\langle j,m|\,(\hat{J}_x\hat{J}_y + \hat{J}_y\hat{J}_x)\,|j,m\rangle = 0 \tag{5}$$

и

$$\langle j,m|(\hat{J}_x^2 - \hat{J}_y^2)|j,m\rangle = 0,$$

то есть

$$\langle J_x^2\rangle = \langle J_y^2\rangle. \tag{6}$$

Заметим теперь, что с учетом (6)

$$\langle J_x^2 + J_y^2\rangle = 2\langle J_x^2\rangle = 2\langle J_y^2\rangle. \tag{7}$$

С другой стороны,

$$\langle J_x^2 + J_y^2\rangle = \langle j,m|(\hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{J}_z^2)|j,m\rangle = j(j+1) - m^2. \tag{8}$$

Таким образом,

$$\langle J_x^2\rangle = \langle J_y^2\rangle = \frac{1}{2}\left(j(j+1) - m^2\right). \tag{9}$$

Отметим, что при $m = \pm j$ усредненные квадраты проекций момента (9) достигают наименьшего значения; оно равно $j/2$ и не обращается в нуль при всех $j > 0$. Поскольку этот факт имеет место наряду с равенствами (3), он указывает на присутствие «квантовых флуктуаций» величин J_x, J_y. Другими словами, в состояниях $|j,m\rangle$, характеризующихся определенными значениями $\mathbf{J}^2$ и J_z, величины J_x и J_y не имеют определенных значений.

Действуя $n-1$ раз оператором $\hat{J}_z$ на обе стороны равенства

$$\hat{J}_z |j,m\rangle = m |j,m\rangle \tag{10}$$

и скалярно умножая результат на $|j,m\rangle$, придем к соотношению

$$\left\langle J_z^n \right\rangle = m^n = \langle J_z \rangle^n. \tag{11}$$

Подобные соотношения между средними значениями (при любом n) характерны для не флуктуирующей величины.

7.2. Оператор проекции момента $J_{\mathbf{n}}$ на направление, задаваемое единичным вектором $\mathbf{n}$, имеет вид

$$\hat{J}_{\mathbf{n}} = \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{J}} = n_x \hat{J}_x + n_y \hat{J}_y + n_z \hat{J}_z. \tag{1}$$

Среднее значение этого оператора есть

$$\langle J_{\mathbf{n}} \rangle = n_x \langle J_x \rangle + n_y \langle J_y \rangle + n_z \langle J_z \rangle. \tag{2}$$

Для состояния $|j,m\rangle$ справедливы соотношения

$$\langle J_x \rangle = \langle J_y \rangle = 0 \quad , \qquad \langle J_z \rangle = m. \tag{3}$$

Учитывая также равенство $n_z = \cos\theta$, окончательно запишем искомое среднее значение (2) следующим образом:

$$\langle J_{\mathbf{n}} \rangle = m \cos\theta, \tag{4}$$

где θ – угол между направлением вектора $\mathbf{n}$ и направлением оси z, по отношению к которой определены базисные состояния $|j,m\rangle$. Отметим,

что равенства (3) теперь можно трактовать как частные случаи формулы (4) при $\theta = \pi/2$ и $\theta = 0$.

7.3. В общем случае справедливо равенство

$$\langle \mathbf{J} \rangle = \langle \psi | (\mathbf{e}_x \hat{J}_x + \mathbf{e}_y \hat{J}_y + \mathbf{e}_z \hat{J}_z) | \psi \rangle =$$

$$= \mathbf{e}_x \langle J_x \rangle + \mathbf{e}_y \langle J_y \rangle + \mathbf{e}_z \langle J_z \rangle . \qquad (1)$$

Здесь направление ортов $\mathbf{e}_x$, $\mathbf{e}_y$, $\mathbf{e}_z$ декартовой системы координат не конкретизировано и может быть выбрано произвольным образом. Выберем систему координат так, чтобы ось z была направлена вдоль заранее заданного единичного вектора $\mathbf{n}$, то есть положим

$$\mathbf{e}_z = \mathbf{n} . \qquad (2)$$

По отношению к такой системе координат указанное в условии задачи состояние $|\psi\rangle = |j, \tilde{m}\rangle$ является обычным состоянием $|j, m\rangle$ и поэтому характеризуется равенствами

$$\langle J_x \rangle = \langle J_y \rangle = 0 \quad , \quad \langle J_z \rangle = m . \qquad (3)$$

Учитывая (2) и (3) в (1), получаем искомый усредненный вектор момента импульса

$$\langle \mathbf{J} \rangle = m \mathbf{n} . \qquad (4)$$

Таким образом, в состоянии с определенной проекцией m момента импульса на заданное направление $\mathbf{n}$ усредненный вектор момента $\langle \mathbf{J} \rangle$ в зависимости от знака m параллелен или антипараллелен $\mathbf{n}$ (либо равен нулю, если $m = 0$).

7.4. Обозначим посредством $|j = 1, \tilde{m}'\rangle$ состояния с определенными значениями $J_{\tilde{z}} = m'$ проекции момента на ось $\tilde{z}$, составляющую с исходной осью z заданный угол θ. Амплитуда вероятности обнаружить значение $J_{\tilde{z}} = m'$ у частицы в состоянии $|j = 1, m\rangle$ равна скалярному произведению $\langle j = 1, \tilde{m}' | j = 1, m \rangle$, а сама вероятность равна квадрату

модуля этой амплитуды. Заметим, что любое из трех ($m' = 1, 0, -1$) состояний $\left| j = 1, \tilde{m}' \right\rangle$ можно рассматривать как результат действия оператора поворота $\hat{R}(\theta \mathbf{e}_y)$ на состояние $\left| j = 1, m' \right\rangle$ с тем же самым значением проекции момента, $J_z = J_{\tilde{z}} = m'$:

$$\left| j, \tilde{m}' \right\rangle = \hat{R}(\theta \mathbf{e}_y) \left| j, m' \right\rangle. \qquad (1)$$

Поэтому интересующие нас амплитуды вероятности будут найдены, если удастся определить матричные элементы оператора поворота $\hat{R}(-\theta \mathbf{e}_y)$ в базисе $\left| j = 1, m \right\rangle$:

$$\left\langle j, \tilde{m}' \middle| j, m \right\rangle = \left\langle \hat{R}(\theta \mathbf{e}_y) j, m' \middle| j, m \right\rangle = \left\langle j, m' \middle| \hat{R}^{+}(\theta \mathbf{e}_y) \middle| j, m \right\rangle =$$

$$= \left\langle j, m' \middle| \hat{R}^{-1}(\theta \mathbf{e}_y) \middle| j, m \right\rangle = \left\langle j, m' \middle| \hat{R}(-\theta \mathbf{e}_y) \middle| j, m \right\rangle. \qquad (2)$$

Требуемую матрицу можно получить несколькими способами (в общем случае результаты окажутся различными из-за произвола в выборе фазовых множителей у базисных векторов состояния, но такое различие не отразится на значениях квадратов модулей матричных элементов). Рассмотрим подробно два способа, тем самым иллюстрируя на данном примере ряд общих соотношений квантово-механической теории момента импульса.

Первый способ основан на определении с помощью элементарных геометрических соображений матрицы $\hat{R}'$ поворота на угол θ вокруг оси y в базисе, образованном состояниями с «линейной поляризацией» $\left| x \right\rangle$, $\left| y \right\rangle$, $\left| z \right\rangle$. Такие состояния рассматривались в задаче 3.11 применительно к массивной частице с собственным моментом импульса $j = 1$. Матрица указанного поворота $\hat{R}$ в базисе $\left| j, m \right\rangle$ будет связана с матрицей $\hat{R}'$ формулой

$$\left\langle m' \middle| \hat{R} \middle| m \right\rangle = \sum_{k'} \sum_{k} \left\langle m' \middle| k' \right\rangle \left\langle k' \middle| \hat{R} \middle| k \right\rangle \left\langle k \middle| m \right\rangle, \qquad (3)$$

где $k', k = x, y, z$, состояния $\left| j = 1, m \right\rangle$ сокращенно обозначены посредством $\left| m \right\rangle$. Элементами матрицы $\hat{R}'$ являются величины

$(\hat{R}')_{k'k} = \langle k'|\hat{R}|k\rangle$, присутствующие в правой стороне равенства (3). Рассматривая величины $\langle k|m\rangle$ как элементы некоторой унитарной матрицы $\hat{U}$ (причем мы условимся нумеровать состояния $|m\rangle$ в порядке убывания значений $m = 1,0,-1$, так что, например, $U_{13} = \langle x|m=-1\rangle$), можно представить формулу (3) в виде матричного равенства:

$$\hat{R} = \hat{U}^{+}\hat{R}'\hat{U}\,. \tag{4}$$

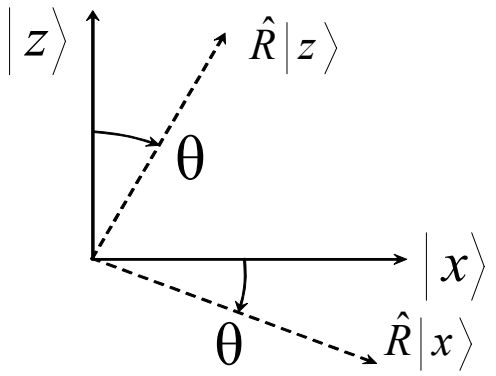

Рис. 7.1

Будем определять матрицу $\hat{R}'(\theta\mathbf{e}_y)$, исходя из предположения, что состояния $|x\rangle$, $|y\rangle$, $|z\rangle$ под действием поворотов преобразуются как обычные орты $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$. Такое преобразование при повороте на угол θ вокруг оси y схематически показано на рис. 7.1 (ось y перпендикулярна плоскости рисунка и направлена «от нас»).

Спроецировав векторы $\hat{R}|k\rangle$ на исходные направления $|k\rangle$, имеем:

$$\begin{aligned}
\hat{R}|x\rangle &= \cos\theta|x\rangle - \sin\theta|z\rangle,\\
\hat{R}|y\rangle &= |y\rangle,\\
\hat{R}|z\rangle &= \sin\theta|x\rangle + \cos\theta|z\rangle.
\end{aligned} \tag{5}$$

Скалярно умножая равенства (5) на базисные векторы $|x\rangle$, $|y\rangle$, $|z\rangle$ и учитывая свойство ортонормированности этих базисных состояний, находим матрицу $\hat{R}'(\theta\mathbf{e}_y)$:

$$\hat{R}' = \begin{pmatrix} \cos\theta & 0 & \sin\theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\theta & 0 & \cos\theta \end{pmatrix}. \tag{6}$$

Согласно пояснениям в задаче 3.11 состояние $|j=1,\, m=0\rangle$ совпадает с $|z\rangle$, а два других состояния с определенной проекцией

момента представляют собой линейные комбинации векторов состояния $|x\rangle$ и $|y\rangle$, так что:

$$|j=1, m=1\rangle = \frac{-1}{\sqrt{2}}\left(|x\rangle + i|y\rangle\right),$$
$$|j=1, m=0\rangle = |z\rangle,$$
$$|j=1, m=-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|x\rangle - i|y\rangle\right). \qquad (7)$$

В первой из этих формул введен дополнительный (по сравнению с (6) в задаче 3.11) фазовый множитель -1, который позволит нам избежать упоминавшегося выше различия выражений для матрицы $\hat{R}$, получаемых разными способами. Скалярно умножая равенства (7) на базисные векторы $|x\rangle$, $|y\rangle$, $|z\rangle$, находим величины $\langle k|m\rangle$, составляющие матрицу $\hat{U}$:

$$\hat{U} = \begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2} \\ -i/\sqrt{2} & 0 & -i/\sqrt{2} \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \qquad (8)$$

Эта матрица, как легко проверить, унитарна. Эрмитово сопряженная матрица имеет вид

$$\hat{U}^{+} = \begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} & i/\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1/\sqrt{2} & i/\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}. \qquad (9)$$

Подставив (6), (8) и (9) в (4) и перемножив указанные матрицы, получаем искомую матрицу $\hat{R}$, элементами которой являются величины $\langle j, m'|\,\hat{R}(\theta\mathbf{e}_y)\,|j, m\rangle$ при $j=1$:

$$\hat{R}(\theta\mathbf{e}_y) = \begin{pmatrix} \frac{1+\cos\theta}{2} & \frac{-1}{\sqrt{2}}\sin\theta & \frac{1-\cos\theta}{2} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta & \cos\theta & \frac{-1}{\sqrt{2}}\sin\theta \\ \frac{1-\cos\theta}{2} & \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta & \frac{1+\cos\theta}{2} \end{pmatrix}. \qquad (10)$$

Выведем формулу (10) другим способом, не опираясь на результаты предшествующих задач. Согласно равенствам (XII) из введения к данной главе матрица оператора $\hat{J}_y$ в базисе, образованном состояниями $|j, m\rangle$, имеет вид:

$$\hat{J}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i/\sqrt{2} & 0 \\ i/\sqrt{2} & 0 & -i/\sqrt{2} \\ 0 & i/\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}. \qquad (11)$$

Воспользуемся определением (I) для оператора поворота вокруг оси y и разложим присутствующую в формуле (I) экспоненту в ряд Тейлора по степеням угла поворота:

$$\hat{R}(\theta \mathbf{e}_y) = e^{-i\theta\hat{J}_y} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}(-i\theta)^n \hat{J}_y^n. \qquad (12)$$

Вычисляя с помощью (11) различные степени матрицы $\hat{J}_y$, имеем:

$$\hat{J}_y^2 = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & -1/2 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1/2 & 0 & 1/2 \end{pmatrix}, \qquad (13)$$

$$\hat{J}_y^3 = \hat{J}_y. \qquad (14)$$

Следовательно,

$$\hat{J}_y^n = \begin{cases} \hat{J}_y^2, & n = 2, 4, 6, \ldots \\ \hat{J}_y, & n = 1, 3, 5, \ldots \end{cases} \qquad (15)$$

С учетом (15) степенной ряд (12) принимает вид:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}(-i\theta)^n \hat{J}_y^n = \hat{1} + \hat{J}_y^2\left(-\frac{\theta^2}{2!} + \frac{\theta^4}{4!} - \ldots\right) - i\hat{J}_y\left(\theta - \frac{\theta^3}{3!} + \ldots\right) =$$

$$= \hat{1} + \hat{J}_y^2(\cos\theta - 1) - i\hat{J}_y \sin\theta. \qquad (16)$$

Подставив в правую сторону этого равенства явные выражения для матриц (11), (13) и для единичной матрицы $\hat{1}$, получаем результат (10).

Для нахождения вероятностей, требуемых условием задачи, достаточно в соответствии с формулой (2) произвести в (10) замену $\theta \to -\theta$ и возвести элементы получившейся матрицы в квадрат. Указанное изменение знака θ, как видно, не будет влиять на окончательный результат. В состоянии $\left| j=1,\, m=1 \right\rangle$ вероятности значений $J_{\tilde{z}} = 1, 0, -1$ равны, соответственно, квадратам элементов первого столбца матрицы (10):

$$\frac{1}{4}(1+\cos\theta)^2, \qquad \frac{1}{2}\sin^2\theta, \qquad \frac{1}{4}(1-\cos\theta)^2. \tag{17}$$

В состоянии $\left| j=1,\, m=0 \right\rangle$ вероятности значений $J_{\tilde{z}} = 1, 0, -1$ равны квадратам элементов второго столбца матрицы (10):

$$\frac{1}{2}\sin^2\theta, \qquad \cos^2\theta, \qquad \frac{1}{2}\sin^2\theta. \tag{18}$$

Наконец, в состоянии $\left| j=1,\, m=-1 \right\rangle$ вероятности значений $J_{\tilde{z}} = 1, 0, -1$ равны, соответственно, квадратам элементов третьего столбца матрицы (10):

$$\frac{1}{4}(1-\cos\theta)^2, \qquad \frac{1}{2}\sin^2\theta, \qquad \frac{1}{4}(1+\cos\theta)^2. \tag{19}$$

В качестве проверки можно, пользуясь формулами (17)–19, подсчитать средние значения $\left\langle J_{\tilde{z}} \right\rangle$ в состояниях $\left| j=1,\, m \right\rangle$ и убедиться в том, что для рассматриваемого здесь случая ($j=1$) найденное в задаче 7.2 соотношение

$$\left\langle J_{\tilde{z}} \right\rangle = m\cos\theta, \tag{20}$$

как и должно быть, выполняется.

7.5. Согласно формулам (XIX)–(XXI) введения к данной главе решение уравнения Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi = \varepsilon\psi, \tag{1}$$

характеризующееся определенной величиной орбитального момента l и проекцией момента m (не путать с массой частицы!), будем искать в виде

$$\psi(\mathbf{r}) \;=\; \frac{\chi(r)}{r}\, Y_{lm}(\theta,\varphi)\,. \tag{2}$$

Вспомогательная функция $\chi(r)$ должна удовлетворять уравнению

$$\frac{d^2\chi(r)}{dr^2} \;+\; \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)\chi(r) \;=\; 0 \tag{3}$$

и граничному условию

$$\chi(0) = 0\,. \tag{4}$$

Волновое число $k = \sqrt{2m\varepsilon}/\hbar$, как обычно, определяется значением энергии частицы ε.

Разделим обе стороны уравнения (3) на k^2 и перейдем к безразмерной координатной переменной

$$\xi = kr\,. \tag{5}$$

Выполнив в (3) подстановку

$$\chi(\xi) \;=\; \xi^{\alpha}\, w(\xi) \tag{6}$$

и выбрав затем $\alpha = 1/2$, можно представить (3) в форме уравнения Бесселя для новой вспомогательной функции $w(\xi)$:

$$\frac{d^2 w(\xi)}{d\xi^2} \;+\; \frac{1}{\xi}\,\frac{dw(\xi)}{d\xi} \;+\; \left(1 - \frac{(l+1/2)^2}{\xi^2}\right) w(\xi) \;=\; 0\,. \tag{7}$$

В качестве двух линейно независимых решений уравнения (7) достаточно рассматривать функцию Бесселя $J_{\nu}(\xi)$ и функцию Неймана $N_{\nu}(\xi)$ порядка $\nu = l + 1/2$. Общее решение тогда будет иметь вид линейной комбинации этих функций:

$$w(\xi) \;=\; C_1\, J_{l+1/2}(\xi) \;+\; C_2\, N_{l+1/2}(\xi)\,, \tag{8}$$

где $l = 0,1,2,\ldots$. Постоянные C_1 и C_2 в (8) необходимо выбрать так, чтобы выполнялось граничное условие (4), то есть следует требовать, чтобы

$$\xi^{1/2} w(\xi) \to 0 \quad \text{при } \xi \to 0. \tag{9}$$

Известно, что при малом значении аргумента функция $J_\nu(\xi)$ ведет себя как ξ^ν, а функция $N_\nu(\xi)$ порядка $\nu \neq 0$ – как $\xi^{-\nu}$ (если $\nu = 0$, то функция Неймана ведет себя как $\ln\xi$). Таким образом, поскольку в рассматриваемой задаче $\nu \geq 1/2$, для выполнения условия (9) мы должны постоянную C_2 положить равной нулю. В результате искомые волновые функции (2) запишутся в виде

$$\psi_{klm}(\mathbf{r}) \;=\; C_1 \frac{1}{\sqrt{kr}}\, J_{l+1/2}(kr)\, Y_{lm}(\theta,\varphi), \tag{10}$$

где C_1 – нормировочная постоянная.

Учитывая асимптотическое поведение функций Бесселя

$$J_\nu(\xi) \;\approx\; \left(\frac{\xi}{2}\right)^\nu \frac{1}{\Gamma(\nu+1)} \quad \text{при} \quad \xi << 1, \tag{11}$$

$$J_\nu(\xi) \;\approx\; \left(\frac{2}{\pi\xi}\right)^{1/2} \cos\left(\xi - \frac{\pi\nu}{2} - \frac{\pi}{4}\right) \quad \text{при} \quad \xi \to \infty, \tag{12}$$

мы видим, что вблизи начала координат зависимость найденной волновой функции ψ_{klm} от r имеет вид r^l, а на больших расстояниях от начала координат волновая функция асимптотически приближается к виду так называемой сферической волны $r^{-1}\sin(kr-\delta)$:

$$\psi_{klm}(\mathbf{r}) \;\approx\; C_1 \sqrt{\frac{2}{\pi}}\, \frac{1}{kr} \sin\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right) Y_{lm}(\theta,\varphi), \qquad kr \to \infty. \tag{13}$$

Эти результаты согласуются с общими утверждениями о поведении волновой функции ψ_{klm}, указанными во введении к данной главе.

Рассмотрим некоторые из возможных способов нормировки волновой функции (10). Мы воспользуемся соображениями, аналогичными изложенным в решении задачи 5.3 (пункт *б*). Поскольку нормировочный интеграл для функции (10) расходится в области $r \to \infty$, можно считать

вклад этой области основным, и заменить под знаком интеграла функцию (10) ее асимптотическим выражением (13). Это дает:

$$\int_0^\infty dr\, r^2 \int d\Omega \left|\psi_{klm}\right|^2 = \left|C_1\right|^2 \frac{2}{\pi} \int_0^\infty dr\, r^2 \left(\frac{1}{kr} \sin(kr - \pi l/2)\right)^2$$

«Обрежем» верхний предел интегрирования, заменив ∞ произвольно большой величиной a. Величина a имеет смысл радиуса сферической полости, внутри которой рассматривается свободное движение частицы. Заменив также квадрат синуса его средним значением $1/2$, получаем нормировочный интеграл в виде:

$$\int d^3\mathbf{r} \left|\psi_{klm}\right|^2 = \left|C_1\right|^2 \frac{a}{\pi k^2}, \qquad a >> 1/k. \tag{14}$$

Для нормировки волновой функции на единицу в шаре радиуса a приравняем выражение (14) единице:

$$\left|C_1\right|^2 \frac{a}{\pi k^2} = 1. \tag{15}$$

Тогда $C_1 = \sqrt{\pi k^2 / a}$, и волновая функция (10) принимает вид

$$\psi_{klm}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{\pi k^2}{a}} \frac{1}{\sqrt{kr}} J_{l+1/2}(kr)\, Y_{lm}(\theta,\varphi). \tag{16}$$

В случае нормировки на δ-функцию от волнового числа правую часть равенства (14) следует понимать как величину $2\pi\delta(k-k')$ при $k-k'=0$. Эта величина, с учетом представления δ-функции в интегральной форме

$$2\pi\,\delta(k-k') = \int_{-\infty}^{\infty} dr\, e^{i(k-k')r},$$

может быть приравнена $2a$, где $a \to \infty$. Таким образом, заменив в правой стороне (15) единицу величиной $2a$, получаем $C_1 = \sqrt{2\pi k^2}$, и

$$\psi_{klm}(\mathbf{r}) \;=\; \sqrt{\frac{2\pi k}{r}}\; J_{l+1/2}(kr)\, Y_{lm}(\theta,\varphi)\,. \qquad (17)$$

Функции (17) удовлетворяют следующим условиям нормировки и взаимной ортогональности:

$$\int d^3\mathbf{r}\;\psi^*_{k'l'm'}\,\psi_{klm} \;=\; 2\pi\,\delta(k'-k)\,\delta_{l'l}\,\delta_{m'm}\,. \qquad (18)$$

Наконец, убедимся в том, что при $l=0$ полученные волновые функции принимают вид сферических волн, которые обсуждались в задаче 4.11. Функции Бесселя полуцелого порядка, как известно, могут быть выражены через элементарные функции:

$$J_{l+1/2}(\xi) \;=\; \sqrt{\frac{2}{\pi}}\;\xi^{l+1/2}\left(-\frac{1}{\xi}\,\frac{d}{d\xi}\right)^{l}\frac{\sin\xi}{\xi}\,. \qquad (19)$$

Это позволяет выписывать волновые функции $\psi_{klm}(\mathbf{r})$ в более развернутой форме. В частности, при $l=0$ с учетом равенства $Y_{00}=1/\sqrt{4\pi}$ формула (16) дает:

$$\psi_{klm}(\mathbf{r})\big|_{l=0} \;=\; \sqrt{\frac{\pi k^2}{a}}\,\frac{1}{\sqrt{kr}}\,J_{1/2}(kr)\,\frac{1}{\sqrt{4\pi}} \;=\; \frac{\chi_k(r)}{r}\,\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\,, \qquad (20)$$

где

$$\chi_k(r) \;=\; \sqrt{\frac{2}{a}}\,\sin kr\,. \qquad (21)$$

Таким образом, здесь воспроизводится найденное в задаче 4.11 описание свободного движения частицы с равным нулю моментом импульса.

7.6. а) Согласно условию задачи волновую функцию частицы $\phi(\mathbf{r})$ можно записать (без учета нормировочного множителя) в виде:

$$\phi_k(\mathbf{r}) = e^{ikz} = e^{ikr\cos\theta}\,. \qquad (1)$$

Функция (1) не зависит от угловой координаты φ и, следовательно, под действием оператора поворотов вокруг оси z остается неизменной. Это

означает, что в состоянии (1) частица обладает равной нулю проекцией момента импульса на ось z.

б) Для того чтобы найти вероятность различных значений величины момента l, разложим волновую функцию (1) по волновым функциям ψ_{klm}, отвечающим свободному движению с определенными значениями величины импульса $\hbar k$, момента импульса l и проекции момента $l_z = m$. В такое разложение войдут только состояния с $l_z = 0$:

$$\phi_k(\mathbf{r}) \;=\; \sum_{l=0}^{\infty} A_l\, \psi_{kl0}(\mathbf{r}). \qquad (2)$$

Прежде чем приступить к вычислению коэффициентов разложения A_l, рассмотрим нормировочный интеграл для плоской волны (1), записав его в виде:

$$\int d^3\mathbf{r}\; \phi_{k'}(\mathbf{r})^*\, \phi_k(\mathbf{r}) \;=\; \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dz\; e^{i(k-k')z} \;=\; L^2\, 2\pi\, \delta(k'-k). \qquad (3)$$

Здесь посредством L^2 обозначена бесконечная величина площади в плоскости xy, перпендикулярной направлению движения частицы. Наличие в (3) δ-функции указывает на целесообразность выбора в роли ψ_{klm} тех функций, которые удовлетворяют условию нормировки на δ-функцию от волнового числа (см. формулы (17) и (18) задачи 7.5):

$$\psi_{kl0}(\mathbf{r}) \;=\; \sqrt{2\pi k^2}\; \frac{1}{\sqrt{kr}}\; J_{l+1/2}(kr)\, Y_{l0}(\theta)$$

При этом подстановка разложения (2) в левую часть равенства (3) дает:

$$\int d^3\mathbf{r}\; \phi_{k'}(\mathbf{r})^*\, \phi_k(\mathbf{r}) \;=\; \sum_{l'}\sum_{l} A_{l'}^*\, A_l \int d^3\mathbf{r}\; \psi_{k'l'0}^*\; \psi_{kl0} \;=$$

$$= \sum_{l'}\sum_{l} A_{l'}^*\, A_l\; \delta_{l'l}\; 2\pi\; \delta(k'-k) \;=\; \sum_{l=0}^{\infty} \left|A_l\right|^2 2\pi\, \delta(k'-k). \qquad (4)$$

Сравнивая (3) и (4), получаем:

$$\sum_{l=0}^{\infty} |A_l|^2 = L^2 , \qquad L \to \infty . \tag{5}$$

Из равенства (5) видно, что «вероятность» $|A_l|^2$ будет иметь размерность площади и может быть наглядно истолкована как «прицельная площадь» в плоскости xy, на которую должна попасть частица, движущаяся параллельно оси z, если ее момент равен l. Следуя [1], обозначим эту величину посредством σ_l:

$$\sigma_l = |A_l|^2 . \tag{6}$$

Перейдем к вычислению амплитуд вероятности A_l. Запишем разложение (2) в явной форме:

$$e^{ikr\cos\theta} = \sum_{l'=0}^{\infty} A_{l'} \sqrt{2\pi k^2}\, \frac{1}{\sqrt{kr}}\, J_{l'+1/2}(kr)\, Y_{l'0}(\theta) . \tag{7}$$

Умножим обе стороны (7) на сферическую функцию

$$Y_{l0}(\theta)^* = Y_{l0}(\theta) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\, P_l(\cos\theta) \tag{8}$$

и проинтегрируем по угловым координатам с учетом ортонормировки сферических функций,

$$\int d\Omega\, Y_{lm}^*\, Y_{l'm'} = \delta_{ll'}\, \delta_{m m'} . \tag{9}$$

Получаем равенство:

$$\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\, 2\pi \int_0^{\pi} d\theta\, \sin\theta\, e^{ikr\cos\theta}\, P_l(\cos\theta) = A_l \sqrt{2\pi k^2}\, \frac{1}{\sqrt{kr}}\, J_{l+1/2}(kr) . \tag{10}$$

Интеграл в (10) можно вычислить методом, аналогичным примененному нами в задаче 6.4. Перейдя к интегрированию по $\eta = \cos\theta$ и обозначив

$$kr = \xi , \tag{11}$$

имеем:

$$\int_0^{\pi} d\theta\, \sin\theta\, e^{ikr\cos\theta}\, P_l(\cos\theta) \;=\; \int_{-1}^{1} d\eta\, e^{i\xi\eta}\, P_l(\eta) \;=\; \hat{P}_l\!\left(-i\frac{d}{d\xi}\right)\int_{-1}^{1} d\eta\, e^{i\xi\eta} \;=$$

$$= 2\hat{P}_l\!\left(-i\frac{d}{d\xi}\right)\frac{\sin\xi}{\xi}. \qquad (12)$$

Здесь $\hat{P}_l(-id/d\xi)$ – дифференциальный оператор, получающийся в результате замены переменной η в выражении для полинома Лежандра $P_l(\eta)$,

$$P_l(\eta) \;=\; \frac{1}{2^l\, l!}\,\frac{d}{d\eta^l}(\eta^2-1)^l,$$

оператором дифференцирования $-id/d\xi$. Непосредственное вычисление для нескольких первых значений l показывает, что

$$\hat{P}_l\!\left(-i\frac{d}{d\xi}\right)\frac{\sin\xi}{\xi} \;=\; i^l\sqrt{\frac{\pi}{2\xi}}\,J_{l+1/2}(\xi). \qquad (13)$$

С учетом (11)–(13) находим из (10) искомые амплитуды A_l:

$$A_l \;=\; i^l\sqrt{\pi(2l+1)}/k. \qquad (14)$$

Для величины (6), характеризующей зависимость от l и k вероятности того, что у частицы в состоянии (1) будет обнаружен момент импульса l, имеем:

$$\sigma_l \;=\; \frac{\pi}{k^2}\,(2l+1). \qquad (15)$$

Отметим, что при $l >> 1$ выражение (15) переходит в $\sigma_l \approx 2\pi l/k^2$ и может быть интерпретировано как площадь $2\pi\rho\,\Delta\rho$ кольца радиуса $\rho = \hbar l/p$ шириной $\Delta\rho = \hbar/p$. Величина ρ представляет собой прицельное расстояние, которым определялось бы значение момента импульса $\hbar l$ частицы с импульсом $\hbar k = p$ в классической механике: $\hbar l = \rho p$.

В литературе вместо функций Бесселя полуцелого порядка часто применяют так называемые сферические функции Бесселя j_l:

$$j_l(\xi) = \sqrt{\frac{\pi}{2\xi}}\, J_{l+1/2}(\xi). \qquad (16)$$

С учетом определения (16) рассмотренное в данной задаче разложение плоской волны по собственным функциям момента импульса принимает следующий вид:

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1)\, j_l(kr)\, P_l(\cos\theta). \qquad (17)$$

7.7. а) Уровень энергии сферического осциллятора, ближайший к основному энергетическому уровню, трехкратно вырожден. Принадлежащие этому уровню возбужденные состояния осциллятора согласно условию задачи выберем в виде

$$\psi_{100}(\mathbf{r}) = f(r)\,x, \;\; \psi_{010}(\mathbf{r}) = f(r)\,y, \;\; \psi_{001}(\mathbf{r}) = f(r)\,z, \qquad (1)$$

где функция $f(r)$ зависит от координат только через радиальную переменную $r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$. Обозначим состояния, описываемые тремя волновыми функциями (1), как $|1\rangle$, $|2\rangle$ и $|3\rangle$, соответственно. Эти векторы состояний нормированы и взаимно ортогональны, поскольку подобными же свойствами обладают волновые функции(1).

Подействуем на функции (1) оператором $\hat{l}_z = -i(x\,\partial/\partial y - y\,\partial/\partial x)$. В ходе вычислений можно множитель $f(r)$ выносить из под знака $\hat{l}_z$, так как в результате действия операторов орбитального момента на функцию, зависящую от координат только через радиальную переменную r, получается нуль. Имеем:

$$\hat{l}_z|1\rangle = i|2\rangle, \;\; \hat{l}_z|2\rangle = -i|1\rangle, \;\; \hat{l}_z|3\rangle = 0. \qquad (2)$$

Скалярно умножив (2) на каждый из векторов состояния $|1\rangle$, $|2\rangle$, $|3\rangle$, получаем матричное представление для оператора $\hat{l}_z$ в базисе, образованном состояниями $|1\rangle$, $|2\rangle$ и $|3\rangle$:

$$\hat{l}_z = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \qquad (3)$$

Аналогичным образом вычисляются матрицы $\hat{l}_y$ и $\hat{l}_x$:

$$\hat{l}_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \hat{l}_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Диагональные элементы перечисленных матриц равны нулю, следовательно,

$$\langle \mathbf{l} \rangle = 0 \qquad (4)$$

для любого из трех состояний (1).

б) Поскольку в результате действия операторов проекций момента на состояния (1) не образуются новые функции, линейно независимые по отношению к (1), можно утверждать, что эти три состояния составляют мультиплет, соответствующий значению орбитального момента $l = 1$ (согласно равенству $2l + 1 = 3$). Такой вывод подтверждается вычислением матрицы квадрата момента:

$$\hat{\mathbf{l}}^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2 = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}.$$

В базисе, образованном состояниями с определенной величиной момента l, матрица квадрата момента должна иметь вид $l(l+1)\hat{1}$, так что из равенства $l(l+1) = 2$ мы вновь получаем значение $l = 1$.

Обратим внимание на совпадение матрицы (3) с матрицей проекции момента (9) в задаче 3.11. Такое совпадение говорит нам о том, что рассматриваемые здесь состояния осциллятора (1) можно охарактеризовать как «линейно поляризованные колебания» частицы, преобразующиеся при поворотах вокруг оси z подобно ортам декартовой системы координат. Состояние $|3\rangle$ инвариантно по отношению к таким поворотам и,

следовательно, принадлежит равному нулю значению проекции момента $l_z \equiv m$:

$$|3\rangle = |l=1,\, m=0\rangle. \qquad (5)$$

Состояния $|1\rangle$ и $|2\rangle$ не имеют определенного значения m; они могут быть записаны в форме линейных комбинаций «циркулярно поляризованных колебаний» с $m=\pm 1$, то есть – в виде суперпозиции состояний $|l=1, m=\pm 1\rangle$. В свою очередь, состояния $|l=1, m=\pm 1\rangle$ можно разложить по базисным векторам $|1\rangle$ и $|2\rangle$ с помощью формул, аналогичных (7) в задаче 7.4:

$$|l=1,\, m=1\rangle = \frac{-1}{\sqrt{2}}\left(|1\rangle + i|2\rangle\right),\ |l=1,\, m=-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1\rangle - i|2\rangle\right). \qquad (6)$$

Искомая вероятность W_{lm} значений l и m в состояниях $|k\rangle$ (где $k=1,2,3$) равна квадрату модуля амплитуды вероятности $\langle l, m|k\rangle$. Таким образом,

$$W_{10}=1 \text{ в состоянии } |3\rangle,\ W_{11}=W_{1,-1}=1/2 \text{ в состояниях } |1\rangle \text{ и } |2\rangle. \qquad (7)$$

Вероятности W_{lm} для других значений l и m в рассматриваемых состояниях равны нулю.

Те же результаты легко получить и не обращаясь к решениям предшествующих задач. Например, пользуясь данными о действии операторов $\hat{l}_x$ и $\hat{l}_y$ на базисное состояние $|3\rangle$, можно применить к (5) операторы

$$\hat{l}_+ = \hat{l}_x + i\hat{l}_y, \quad \hat{l}_- = \hat{l}_x - i\hat{l}_y.$$

Такое вычисление с учетом соотношений (XIII) из введения к данной главе при $j=l$ непосредственно ведет к формулам (6). Еще один способ получения (6) заключается в сравнении (1) с явными выражениями для $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ после того как функции (1) будут записаны в сферической системе координат.

7.8. Уравнение Шредингера для частицы массы μ

$$\Delta\psi \; + \; \frac{2\mu}{\hbar^2}\left(\varepsilon - U(\mathbf{r})\right)\psi = 0 \qquad (1)$$

с указанным в условии задачи потенциалом запишем в цилиндрической системе координат (см. задачу 4.10):

$$\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi \; + \; \frac{2\mu}{\hbar^2}\left(\varepsilon+\frac{\alpha}{r}\right)\psi = 0\,. \qquad (2)$$

При двумерном движении частицы в направлениях, перпендикулярных к оси z, волновая функция $\psi(r,\varphi)$ не зависит от координаты z. Если такую функцию искать в виде

$$\psi(r,\varphi) \; = \; \frac{\eta(r)}{\sqrt{r}}\,e^{im\varphi}, \qquad (3)$$

то для вспомогательной функции $\eta(r)$ получим следующее уравнение:

$$\frac{d^2\eta}{dr^2} \; + \; \left(\frac{2\mu\varepsilon}{\hbar^2} \; - \; \frac{m^2-1/4}{r^2} \; + \; \frac{\mu\alpha}{\hbar^2}\frac{2}{r}\right)\eta \; = \; 0\,. \qquad (4)$$

Известно, что уравнение Шредингера (1) с трехмерным кулоновским потенциалом $U=-\alpha/r$ подстановкой $\psi = r^{-1}\chi(r)\,Y_{lm}(\theta,\varphi)$ приводится к виду

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} \; + \; \left(\frac{2\mu\varepsilon}{\hbar^2} \; - \; \frac{l(l+1)}{r^2} \; + \; \frac{\mu\alpha}{\hbar^2}\frac{2}{r}\right)\chi \; = \; 0\,. \qquad (5)$$

При условии ограниченности искомой функции χ уравнение (5) дает «водородоподобный» спектр энергетических уровней:

$$\varepsilon_n \; = \; -\,\frac{\mu\alpha^2}{2\hbar^2}\,\frac{1}{n^2}, \qquad (6)$$

где

$$n \equiv n_r + l + 1 = 1, 2, 3, \ldots\,. \qquad (7)$$

Заметим, что при замене l на $|m|-1/2$ уравнение (5) переходит в уравнение (4), интересующее нас в связи с аналогичной двумерной задачей

о связанных состояниях. Следовательно, искомые уровни энергии ε можно найти непосредственно по формулам (6) и (7), заменив в (7) величину l на $|m|-1/2$:

$$\varepsilon_{n_r,m} = -\frac{\mu\alpha^2}{2\hbar^2}\,\frac{1}{(n_r+|m|+1/2)^2}. \qquad (8)$$

Согласно осцилляционной теореме, n_r представляет собой число узлов волновой функции (3) по переменной r и, следовательно, принимает значения 0, 1, 2, … . Спектр значений m определяется условием однозначности волновой функции (3), в силу которого $\psi(r,\varphi)$ по переменной φ должна быть периодической функцией с периодом 2π. Из этого следует, что

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots . \qquad (9)$$

Энергетический спектр (8) вырожден: состояния с различными значениями n_r и m, но с одним и тем же значением суммы $n_r+|m|$ имеют одинаковую энергию. Целесообразно, по аналогии с (7), ввести в рассмотрение «главное» квантовое число N, нумерующее различные уровни энергии (8) и принимающее целочисленные значения:

$$N = n_r + |m| + 1. \qquad (10)$$

Тогда (8) окончательно запишется в виде

$$\varepsilon_N = -\frac{\mu\alpha^2}{2\hbar^2}\,\frac{1}{(N-1/2)^2}, \qquad N = 1, 2, 3, \ldots . \qquad (11)$$

Кратность вырождения энергетического уровня ε_N равна $2N-1$.

Физический смысл квантового числа m виден из того, что при замене $\varphi \to \varphi - \alpha$, соответствующей действию оператора поворота

$$\hat{R}(\alpha\mathbf{e}_z) = e^{-i\alpha\hat{l}_z}$$

на волновую функцию (3), последняя лишь приобретает фазовый множитель $e^{-i\alpha m}$. Таким образом, волновая функция вида (3) является собственной функцией оператора проекции орбитального момента $\hat{l}_z$ и характеризуется определенным значением $l_z = m$.

8. СПИН

Спин частицы – это ее собственный момент импульса, непосредственно не связанный с перемещением частицы в **r** -пространстве и, следовательно, не выражающийся через координаты и импульс. Частица со спином s может находиться в $2s+1$ спиновых состояниях $|\sigma\rangle$ с определенными значениями проекции спина $s_z \equiv \sigma$,

$$\sigma = s, s-1, ..., -s. \qquad \text{(I)}$$

Такие векторы состояния образуют ортонормированный базис в $(2s+1)$-мерном пространстве спиновых состояний частицы.

Из опыта известно, что для частиц каждого вида величина спина s является неизменной характеристикой наряду с массой и электрическим зарядом. Спин электрона, протона, нейтрона и ряда других микрочастиц равен 1/2. При $s = 1/2$ (ниже речь идет, в основном, об этом случае) проекция спина σ принимает два противоположных значения, равных по абсолютной величине самому спину. В связи с этим говорят, что электрон может находиться в состоянии со спином вдоль оси z или в состоянии со спином против оси z, и применяют обозначения $|\uparrow\rangle$, $|\downarrow\rangle$ для состояний $|\sigma = 1/2\rangle$, $|\sigma = -1/2\rangle$. Однако следует иметь ввиду, что отдельно взятой частице невозможно приписать классически понимаемый вектор собственного механического момента **s**, так что, в частности, иногда упоминаемой образной «модели» электрона в виде вращающегося волчка нельзя придать точного смысла. Действительно, вследствие некоммутативности операторов проекций спина,

$$[\hat{s}_x, \hat{s}_y] = i\hat{s}_z, \qquad [\hat{s}_y, \hat{s}_z] = i\hat{s}_x, \qquad [\hat{s}_z, \hat{s}_x] = i\hat{s}_y, \qquad \text{(II)}$$

электрон с определенной проекцией $s_z = \sigma$ не имеет определенных значений s_y, s_z и, таким образом, не обладает определенным вектором спина **s**. Но усредненный по квантовому ансамблю вектор спина $\langle \mathbf{s} \rangle$ имеет четкий смысл – для электрона в любом нормированном спиновом состоянии $|\chi\rangle$,

$$|\chi\rangle = \chi_\uparrow |\uparrow\rangle + \chi_\downarrow |\downarrow\rangle, \qquad \text{(III)}$$

усредненный вектор спина вычисляется как среднее значение векторного оператора спина:

$$\langle \mathbf{s} \rangle = \langle \chi | \hat{\mathbf{s}} | \chi \rangle, \qquad \text{(IV)}$$

где

$$\hat{\mathbf{s}} = \mathbf{e}_x \hat{s}_x + \mathbf{e}_y \hat{s}_y + \mathbf{e}_z \hat{s}_z, \qquad \text{(V)}$$

$$\hat{s}_x = \frac{1}{2}\hat{\sigma}_x, \quad \hat{s}_y = \frac{1}{2}\hat{\sigma}_y, \quad \hat{s}_z = \frac{1}{2}\hat{\sigma}_z, \qquad \text{(VI)}$$

$\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z$ – *матрицы Паули*:

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \qquad \text{(VII)}$$

Указанное матричное представление операторов проекций спина следует из формул (XII) введения к главе 7 при $j = s = 1/2$. В развернутой форме компоненты усредненного вектора спина (IV) даются выражениями:

$$\langle s_x \rangle = (1/2)\,(\,\chi_\uparrow^* \chi_\downarrow + \chi_\downarrow^* \chi_\uparrow\,),$$

$$\langle s_y \rangle = (-i/2)\,(\,\chi_\uparrow^* \chi_\downarrow - \chi_\downarrow^* \chi_\uparrow\,),$$

$$\langle s_z \rangle = (1/2)\,(\,|\chi_\uparrow|^2 - |\chi_\downarrow|^2\,). \qquad \text{(VIII)}$$

Величина вектора спина с компонентами (VIII) при учете условия нормировки,

$$|\chi_\uparrow|^2 + |\chi_\downarrow|^2 = 1, \qquad \text{(IX)}$$

равна 1/2, поэтому усредненный вектор спина можно представить в форме

$$\langle \mathbf{s} \rangle = \frac{1}{2}\mathbf{n},$$

где $\mathbf{n} = \langle \chi | \hat{\sigma} | \chi \rangle$ – единичный вектор: $\mathbf{n} \cdot \mathbf{n} = 1$. Спиновое состояние $|\chi\rangle$ является состоянием с определенным значением проекции спина на

направление $\mathbf{n}$, равным $s_{\mathbf{n}} = 1/2$; при этом проекция спина на противоположное направление равна $-1/2$. Существование для любого спинового состояния $|\chi\rangle$ такого направления, на которое проекция спина в данном состоянии имеет определенное значение (равное $1/2$), представляет собой характерное свойство спина $s = 1/2$.

Операторы поворотов, действующие на спиновые состояния с $s = 1/2$, в базисе $|\uparrow\rangle$, $|\downarrow\rangle$, связанном с осью z, имеют следующий вид:

$$\hat{R}(\alpha\mathbf{e}_x) = \begin{pmatrix} \cos(\alpha/2) & -i\sin(\alpha/2) \\ -i\sin(\alpha/2) & \cos(\alpha/2) \end{pmatrix},$$

$$\hat{R}(\alpha\mathbf{e}_y) = \begin{pmatrix} \cos(\alpha/2) & -\sin(\alpha/2) \\ \sin(\alpha/2) & \cos(\alpha/2) \end{pmatrix},$$

$$\hat{R}(\alpha\mathbf{e}_z) = \begin{pmatrix} \exp(-i\alpha/2) & 0 \\ 0 & \exp(i\alpha/2) \end{pmatrix}. \qquad \text{(X)}$$

Сюда входит угол поворота α, деленный на два, так что при $\alpha = 2\pi$ эти матрицы равны $-\hat{1}$, а не единичной матрице $\hat{1}$. Другими словами, спиновое состояние $|\chi\rangle$ при повороте на угол 2π вокруг любой оси переходит в $-|\chi\rangle$. Поскольку такой закон преобразования существенно отличается от правил преобразования при вращениях обычных векторов, для спинового состояния $|\chi\rangle$ принят специальный термин – *спинор*. В указанной неоднозначности спиноров по отношению к вращениям на угол 2π сказывается тот факт, что спин является внутренней степенью свободы частицы и не описывается волновой функцией в координатном представлении; именно поэтому здесь не возникает требования однозначности, которое в применении к волновой функции $\psi(\mathbf{r})$ ведет к допустимости лишь целочисленных значений орбитального момента импульса. Можно показать, что при преобразованиях спинора посредством матриц (X) компоненты усредненного вектора спина (VIII) преобразуются как проекции обычного трехмерного вектора.

Спин – одно из наиболее фундаментальных понятий в квантовой теории. Ярким подтверждением тому служит так называемая *связь спина*

со статистикой: частицы с полуцелым спином – фермионы, а с целочисленным спином – бозоны. Бозонами называют частицы одного и того же вида (тождественные частицы), подчиняющиеся статистике Бозе–Эйнштейна. Они характеризуются тем, что их квантовые состояния симметричны по отношению к перестановке полных наборов квантовых чисел частиц (или условно вводимых номеров частиц); для двух частиц с квантовыми числами a и b указанное требование симметрии имеет вид:

$$|b,a\rangle = |a,b\rangle. \qquad \text{(XI)}$$

Фермионами называют тождественные частицы, подчиняющиеся статистике Ферми–Дирака. Они характеризуются тем, что их квантовые состояния антисимметричны:

$$|b,a\rangle = -|a,b\rangle. \qquad \text{(XII)}$$

Существенное различие статистических свойств бозонов и фермионов состоит 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 (XII) следует, что $|a,a\rangle = -|a,a\rangle$, то есть $|a,a\rangle = 0$. Другими словами, в любой системе тождественных фермионов не могут одновременно находиться в одинаковых состояниях две (или более) частицы; это утверждение называется *принципом Паули*.

8.1. ЗАДАЧИ

8.1. Для частицы со спином 1/2 найти состояния с определенной проекцией спина на ось x, пользуясь базисными спиновыми состояниями с определенными значениями проекции спина на ось z.

8.2. В случае частицы со спином 1/2 найти: а) состояния с определенной проекцией спина s_y; б) вероятность различных значений s_x в состояниях с определенным значением s_y.

8.3. Для задания произвольного положения декартовой системы координат $\tilde{x},\tilde{y},\tilde{z}$ относительно первоначальных декартовых осей x,y,z необходимо указать три угла. Определим такие углы следующим образом: пусть θ и φ являются угловыми координатами оси $\tilde{z}$ в сферической системе координат, связанной с x,y,z, а угол γ задает положение осей $\tilde{x},\tilde{y}$ в плоскости перпендикулярной оси $\tilde{z}$ (см. рис. 8.1.).

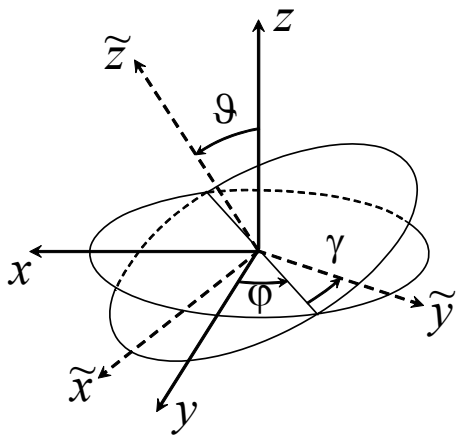

Рис. 8.1

а) Выписать в спинорном базисе $\left|s=1/2, s_z=\pm 1/2\right\rangle$ матрицу вращения $\hat{R}$, соответствующую последовательности трех поворотов на углы γ,θ,φ, в результате которых оси x,y,z переходят в $\tilde{x},\tilde{y},\tilde{z}$.

б) Найти усредненный вектор спина $\langle \mathbf{s} \rangle$ в состоянии, образующемся из состояния со спином вдоль оси z под действием указанного выше вращения $\hat{R}$.

8.4. Гамильтониан частицы с электрическим зарядом q, спином s и спиновым магнитным моментом μ_0 в присутствии магнитного поля $\mathbf{B}$ имеет вид (в нерелятивистской квантовой теории):

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla - \frac{q}{c}\mathbf{A}\right)^2 + U(\mathbf{r}) - \frac{\mu_0}{s}\hat{\mathbf{s}}\cdot\mathbf{B},$$

где $\mathbf{B}=\nabla\times\mathbf{A}$, m – масса частицы. Оператор $\hat{H}$ этого вида называют *гамильтонианом Паули*. Показать, что в однородном магнитном поле $\mathbf{B}$ допускается раздельное описание орбитальных и спиновых состояний частицы.

8.5. Частица со спином $s=1/2$ и магнитным моментом μ_0 находится в однородном магнитном поле $\mathbf{B}$. В начальный момент времени спиновое состояние частицы имело вид

$$|\chi(0)\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|\uparrow\rangle + \sin\frac{\theta}{2}|\downarrow\rangle,$$

где $|\uparrow\rangle$ и $|\downarrow\rangle$ – состояния со спином вдоль и против направления $\mathbf{B}$, соответственно. Найти:

а) Спиновое состояние частицы $|\chi(t)\rangle$ для произвольного момента времени.

б) Зависимость от времени усредненного вектора спина.

в) Стационарные спиновые состояния частицы.

8.6. Для системы из двух частиц со спином $s_1 = s_2 = 1/2$ найти состояния $|S, S_z\rangle$ с определенными значениями суммарного спина S и проекции суммарного спина S_z; воспользоваться базисными состояниями вида $|\sigma_1\rangle \otimes |\sigma_2\rangle$.

8.7. а) Для электрона в состояниях с различными значениями орбитального момента l перечислить возможные состояния с определенным значением полного момента j, представляющего собой квантово-механическую сумму орбитального и спинового моментов электрона. б) Найти собственные значения оператора энергии «спин-орбитального взаимодействия» вида $A\hat{\mathbf{l}}\cdot\hat{\mathbf{s}}$, где $A > 0$ – некоторая постоянная с размерностью энергии.

8.8. Оператор энергии взаимодействия магнитных моментов электрона и протона в $1s$-состоянии атома водорода определяется только спиновыми моментами электрона и атомного ядра (так как орбитальный момент электрона в s-состоянии равен нулю) и может быть записан в виде $C\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}_2$, где $C > 0$ – постоянная с размерностью энергии, зависящая от значений магнитных моментов электрона и ядра, $\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1$ и $\hat{\boldsymbol{\sigma}}_2$ – матрицы Паули, относящиеся к спинам электрона и ядра, соответственно. Найти для указанного оператора собственные значения и собственные состояния.

8.9. Для системы из двух электронов, находящихся в состоянии с суммарным спином $S=0$, записать орбитальную волновую функцию $\psi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)$ в предположении, что существуют одноэлектронные орбитальные состояния $\varphi_p(\mathbf{r})$ и $\varphi_q(\mathbf{r})$. *Указания*: учесть принцип неразличимости одинаковых частиц (требование антисимметрии полной волновой функции тождественных фермионов); для системы частиц считать применимым раздельное описание орбитального и спинового состояний.

8.10. Применительно к системе из двух электронов с одночастичными орбитальными состояниями $\varphi_p(\mathbf{r})$ и $\varphi_q(\mathbf{r})$ записать выражение для среднего значения не зависящей от спинов частиц энергии взаимодействия $U(|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|)$ в двух случаях: а) суммарный спин системы $S=0$, б) суммарный спин системы $S=1$.

8.2. РЕШЕНИЯ

8.1. Оператор проекции спина на ось x в базисе $|\uparrow_z\rangle$, $|\downarrow_z\rangle$ имеет вид матрицы

$$\hat{s}_x=\frac{1}{2}\hat{\sigma}_x=\begin{pmatrix}0 & 1/2\\ 1/2 & 0\end{pmatrix}. \qquad (1)$$

Состояния $|\chi\rangle$ с определенной проекцией спина s_x должны удовлетворять уравнению

$$\hat{s}_x|\chi\rangle=s_x|\chi\rangle. \qquad (2)$$

Записав спинор $|\chi\rangle$ в форме разложения по базисным состояниям с определенной проекцией спина s_z,

$$|\chi\rangle = \chi_\uparrow|\uparrow_z\rangle + \chi_\downarrow|\downarrow_z\rangle, \qquad (3)$$

представим уравнение (2) в виде системы однородных линейных уравнений для неизвестных коэффициентов $\chi_\uparrow$ и $\chi_\downarrow$:

$$\begin{cases} -s_x \chi_\uparrow + (1/2)\chi_\downarrow = 0 \\ (1/2)\chi_\uparrow - s_x \chi_\downarrow = 0 \end{cases}. \qquad (4)$$

Такая система имеет нетривиальные решения при условии

$$\det(\hat{s}_x - s_x \hat{1}) = 0,$$

то есть

$$s_x^2 - 1/4 = 0. \qquad (5)$$

Отсюда мы находим два собственных значения оператора $\hat{s}_x$; они являются допустимыми значениями проекции спина на ось x:

$$s_x = 1/2,\ -1/2. \qquad (6)$$

Конечно, этот результат заранее очевиден, так как здесь идет речь о спектре значений проекции момента импульса $(j, j-1, ..., -j)$ при величине момента $j = s = 1/2$; спектр значений проекции момента не зависит от выбора направления, по отношению к которому определяется рассматриваемая проекция.

Подставив в (4) первое из собственных значений (6), получим: $\chi_\uparrow = \chi_\downarrow$. Это означает, что нормированное на единицу спиновое состояние $|\chi\rangle \equiv |\uparrow_x\rangle$ с проекцией спина $s_x = 1/2$ можно записать в виде:

$$|\uparrow_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow_z\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\downarrow_z\rangle. \qquad (7)$$

Второе собственное значение, $s_x = -1/2$, после подстановки в (4) дает: $\chi_\uparrow = -\chi_\downarrow$.Следовательно, нормированный спинор, принадлежащий этому собственному значению, имеет вид:

$$|\downarrow_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow_z\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|\downarrow_z\rangle. \qquad (8)$$

Отметим, что спиноры (7) и (8) взаимно ортогональны и могут быть выбраны в качестве новой пары базисных состояний для описания спиновой степени свободы частицы со спином $s = 1/2$. В каждом из этих состояний вероятность обнаружения любого из значений $s_z = \pm 1/2$

составляет 50%. Подобную связь между двумя парами базисных состояний мы обсуждали в задаче 2.5.

8.2. а) В базисе, образованном состояниями с определенной проекцией спина s_z, оператор $\hat{s}_y$ представляется матрицей

$$\hat{s}_y = \frac{1}{2}\,\hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i/2 \\ i/2 & 0 \end{pmatrix}. \qquad (1)$$

Найдя (как в задаче 8.1) собственные значения s_y и нормированные собственные векторы оператора (1), имеем:

$$s_y = 1/2,\ -1/2; \qquad (2)$$

$$\left|\uparrow_y\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left|\uparrow_z\right\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}}\left|\downarrow_z\right\rangle,\ \left|\downarrow_y\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left|\uparrow_z\right\rangle - \frac{i}{\sqrt{2}}\left|\downarrow_z\right\rangle. \qquad (3)$$

Состояния (3) можно также получить с помощью поворотов базисного спинора $\left|\uparrow_z\right\rangle$ на углы $\pm\pi/2$ вокруг оси x:

$$\left|\uparrow_y\right\rangle = \hat{R}\left(-\frac{\pi}{2}\mathbf{e}_x\right)\left|\uparrow_z\right\rangle, \qquad \left|\downarrow_y\right\rangle = \hat{R}\left(\frac{\pi}{2}\mathbf{e}_x\right)\left|\uparrow_z\right\rangle. \qquad (4)$$

Пользуясь формулами (7) и (8) задачи 8.1, находим вероятности различных значений s_x в состояниях с определенной проекцией s_y:

$$\left|\left\langle\uparrow_x\middle|\uparrow_y\right\rangle\right|^2 = \left|(1+i)/2\right|^2 = 1/2, \qquad \left|\left\langle\downarrow_x\middle|\uparrow_y\right\rangle\right|^2 = \left|(1-i)/2\right|^2 = 1/2,$$

$$\left|\left\langle\uparrow_x\middle|\downarrow_y\right\rangle\right|^2 = \left|(1-i)/2\right|^2 = 1/2, \qquad \left|\left\langle\downarrow_x\middle|\downarrow_y\right\rangle\right|^2 = \left|(1+i)/2\right|^2 = 1/2. \qquad (5)$$

Вообще, при сравнении двух спиновых состояний (со спином 1/2) существенным может быть только угол θ между направлениями обоих спинов, потому для вычисления вероятностей достаточно полагать, что второе состояние получено поворотом первого состояния на угол θ вокруг, например, оси y и, следовательно, имеет вид:

$$\left|\chi\right\rangle = \cos\frac{\theta}{2}\left|\uparrow\right\rangle + \sin\frac{\theta}{2}\left|\downarrow\right\rangle, \qquad (6)$$

где $\left|\uparrow\right\rangle$ – первое состояние, $\left|\downarrow\right\rangle$ – состояние с противоположным направлением спина. Тогда вероятности «событий» $\uparrow$ и $\downarrow$ в состоянии (6) есть

$$W_{\uparrow} = \cos^2\frac{\theta}{2}, \qquad W_{\downarrow} = \sin^2\frac{\theta}{2}. \tag{7}$$

Найденные выше значения вероятностей (5) согласуются с формулами (7).

8.3. а) Из приведенного в условии задачи рисунка можно видеть, что для перевода координатных осей в новое положение $\tilde{x},\tilde{y},\tilde{z}$, характеризуемое углами γ,θ,φ, следует произвести три поворота координатной системы вокруг первоначальных осей x,y,z: поворот на угол γ вокруг оси z, затем – на угол θ вокруг оси y, и, наконец, – на угол φ снова вокруг оси z. Перемножив в соответствии с указанной последовательностью вращений спинорные матрицы поворотов, получим искомую матрицу $\hat{R}$:

$$\hat{R} = \hat{R}(\varphi\mathbf{e}_z)\,\hat{R}(\theta\mathbf{e}_y)\,\hat{R}(\gamma\mathbf{e}_z) = \begin{pmatrix} e^{-i(\varphi+\gamma)/2}\cos\dfrac{\theta}{2} & -e^{-i(\varphi-\gamma)/2}\sin\dfrac{\theta}{2} \\ e^{i(\varphi-\gamma)/2}\sin\dfrac{\theta}{2} & e^{i(\varphi+\gamma)}\cos\dfrac{\theta}{2} \end{pmatrix}. \tag{1}$$

б) Обозначим базисные состояния $\left|s=1/2, s_z=\pm 1/2\right\rangle$ как $\left|\uparrow_z\right\rangle$, $\left|\downarrow_z\right\rangle$. Элементы первого столбца матрицы (1) представляют собой компоненты спинора $\hat{R}\left|\uparrow_z\right\rangle$:

$$\left\langle\uparrow_z\middle|\hat{R}\middle|\uparrow_z\right\rangle = e^{-i(\varphi+\gamma)/2}\cos(\theta/2),\ \left\langle\downarrow_z\middle|\hat{R}\middle|\uparrow_z\right\rangle = e^{i(\varphi-\gamma)/2}\sin(\theta/2). \tag{2}$$

Такой спинор, очевидно, должен описывать спиновое состояние $\left|\uparrow_{\tilde{z}}\right\rangle$ со спином вдоль оси $\tilde{z}$, поскольку рассматриваемый поворот преобразует направление оси z в направление $\tilde{z}$. В этом состоянии усредненный вектор спина будет иметь направление оси $\tilde{z}$. Проверим справедливость данных утверждений непосредственным вычислением компонент усредненного вектора спина.

Так как в квантовой механике два вектора состояния, различающиеся лишь фазовым множителем, описывают одно и то же состояние физического объекта, упростим выражения (2), рассматривая вместо $\hat{R}\left|\uparrow_z\right\rangle$ физически эквивалентный спинор

$$\left|\chi\right\rangle = e^{i(\varphi+\gamma)/2}\,\hat{R}\left|\uparrow_z\right\rangle. \tag{3}$$

Его компоненты имеют вид:

$$\chi_\uparrow = \cos(\theta/2), \qquad \chi_\downarrow = e^{i\varphi}\sin(\theta/2). \tag{4}$$

Произведя с использованием (4) вычисление проекций усредненного вектора спина по формулам (VIII) введения к данной главы, получим

$$\left\langle s_x\right\rangle = \frac{1}{2}\sin\theta\cos\varphi, \qquad \left\langle s_y\right\rangle = \frac{1}{2}\sin\theta\sin\varphi, \qquad \left\langle s_z\right\rangle = \frac{1}{2}\cos\theta. \tag{5}$$

Видно, что величина вектора $\left\langle \mathbf{s}\right\rangle$ равна $1/2$, а направление по отношению к осям x, y, z характеризуется теми же углами, что и направление оси $\tilde{z}$. Отметим также, что квадраты модулей величин (4) или (2) имеют смысл соответствующих вероятностей; они, как и должно быть, совпадают с вероятностями (7) в задаче 8.2.

8.4. Гамильтониан Паули представляется суммой двух операторов:

$$\hat{H} = \hat{H}_{орб} + \hat{H}_{сп}, \tag{1}$$

где

$$\hat{H}_{орб} = \frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla - \frac{q}{c}\mathbf{A}\right)^2 + U(\mathbf{r}), \tag{2}$$

$$\hat{H}_{сп} = -\frac{\mu_0}{s}\hat{\mathbf{s}}\cdot\hat{\mathbf{B}} = -\hat{\boldsymbol{\mu}}_{сп}\cdot\mathbf{B}. \tag{3}$$

Пусть вектор спинового состояния $\left|\chi_{сп}\right\rangle$ удовлетворяет волновому уравнению Шредингера со спиновой частью полного гамильтониана:

$$i\hbar\frac{\partial\left|\chi_{сп}\right\rangle}{\partial t} = \hat{H}_{сп}\left|\chi_{сп}\right\rangle. \tag{4}$$

В случае однородного магнитного поля **B** (может быть зависящего от времени) уравнение (4) не содержит координат **r** и поэтому решение этого уравнения $\left|\chi_{сп}\right\rangle$ по отношению к координатным переменным и орбитальной части гамильтониана $\hat{H}_{орб}$ допустимо считать постоянной величиной. В свою очередь, вектор орбитального состояния частицы $\left|\psi_{орб}\right\rangle$, удовлетворяющий уравнению

$$i\hbar\frac{\partial\left|\psi_{орб}\right\rangle}{\partial t} = \hat{H}_{орб}\left|\psi_{орб}\right\rangle, \qquad (5)$$

можно считать постоянной величиной по отношению к оператору $\hat{H}_{сп}$, то есть можно рассматривать $\left|\psi_{орб}\right\rangle$ как величину, не принадлежащую пространству спиновых состояний. Тогда результат действия гамильтониана Паули на вектор состояния вида

$$\left|\Phi\right\rangle = \left|\psi_{орб}\right\rangle\otimes\left|\chi_{сп}\right\rangle \qquad (6)$$

запишется в форме

$$\hat{H}\left|\Phi\right\rangle = (\hat{H}_{орб}\left|\psi_{орб}\right\rangle)\otimes\left|\chi_{сп}\right\rangle + \left|\psi_{орб}\right\rangle\otimes\hat{H}_{сп}\left|\chi_{сп}\right\rangle. \qquad 7)$$

Учитывая формулу

$$\frac{\partial}{\partial t}(\left|\psi_{орб}\right\rangle\otimes\left|\chi_{сп}\right\rangle) = \frac{\partial\left|\psi_{орб}\right\rangle}{\partial t}\otimes\left|\chi_{сп}\right\rangle + \left|\psi_{орб}\right\rangle\otimes\frac{\partial\left|\chi_{сп}\right\rangle}{\partial t} \qquad (8)$$

и равенства (4), (5), (7), заключаем, что состояние (6) удовлетворяет волновому уравнению Шредингера с гамильтонианом Паули:

$$i\hbar\frac{\partial\left|\Phi\right\rangle}{\partial t} = \hat{H}\left|\Phi\right\rangle.$$

Следовательно, описание состояний частицы в форме (6) является допустимым.

Перейдя на язык волновых функций, можно убедиться, что в указанном описании координатные и спиновые переменные полностью разделены. С этой целью введем в рассмотрение базисные состояния

частицы $|\xi\rangle$, соответствующие определенным координатам $\mathbf{r}$ и определенным значениям проекции спина $s_z \equiv \sigma$:

$$|\xi\rangle = |\mathbf{r}\rangle \otimes |\sigma\rangle . \qquad (9)$$

Скалярно умножив (6) на (9), получим:

$$\langle \xi | \Phi(t) \rangle \; = \; \langle \mathbf{r} | \psi_{орб}(t) \rangle \, \langle \sigma | \chi_{сп}(t) \rangle , \qquad (10)$$

или

$$\Phi(\xi, t) \; = \; \psi(\mathbf{r}, t) \, \chi_\sigma(t) . \qquad (11)$$

Здесь ξ означает совокупность переменных $\mathbf{r}, \sigma$, так что $\Phi(\xi, t)$ представляет собой волновую функцию, квадратом модуля которой определяется одновременно вероятность значений $\mathbf{r}$ и проекции спина частицы σ. Вероятность найти частицу в элементе объема dV с координатами $\mathbf{r}$ и при этом обнаружить у частицы значение проекции спина $s_z = \sigma$ есть

$$W_{\mathbf{r},\sigma} \; = \; dV \, |\Phi(\xi, t)|^2 .$$

Поскольку волновая функция (11) имеет вид произведения орбитальной и спиновой функций, плотность вероятности координат $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ и распределение вероятности $|\chi_\sigma(t)|^2$ для проекции спина в данном случае не связаны друг с другом.

При $\mathbf{B} = 0$ из уравнения (4) следует, что спиновая часть вектора состояния не меняется со временем и ее роль может выполнять, в частности, любое из базисных спиновых состояний $|\sigma\rangle$. Пусть для определенности речь идет о частице со спином $1/2$, например, – об электроне в атоме. В качестве орбитальных состояний обычно рассматриваются стационарные состояния электрона $|n\rangle$ (это понятие может быть с некоторой степенью точности определено даже в многоэлектронном атоме, несмотря на существенную роль кулоновского взаимодействия между всеми электронами); n – совокупность квантовых чисел стационарного состояния без учета спина. Тогда полный вектор

состояния частицы, выступающий в данном контексте как вектор базисного состояния электрона, запишется согласно (6) в виде

$$\left|\Phi_{n,\sigma}\right\rangle = \left|n\right\rangle \otimes \left|\sigma\right\rangle .$$

Если скалярно умножить обе стороны этого равенства на $\left|\mathbf{r}\right\rangle$, то получим символическое выражение

$$\Phi_{n,\sigma}(\mathbf{r}) = \psi_n(\mathbf{r}) \otimes \left|\sigma\right\rangle ,$$

обозначающее стационарное состояние электрона с орбитальной волновой функцией $\psi_n(\mathbf{r})$ и определенной проекцией спина σ. Такие выражения при $\sigma = 1/2, -1/2$ в литературе иногда записываются как

$$\psi_n(\mathbf{r})\,\alpha , \qquad \psi_n(\mathbf{r})\,\beta .$$

Следует однако помнить, что при этом величины α и β не принимают числовых значений, а лишь символизируют спиновые состояния $\left|\uparrow\right\rangle$ и $\left|\downarrow\right\rangle$.

В общем случае, при наличии неоднородного магнитного поля $\mathbf{B}(\mathbf{r})$, решение $\left|\Phi(t)\right\rangle$ волнового уравнения Шредингера с гамильтонианом Паули также может быть разложено по базисным состояниям (9):

$$\left|\Phi(t)\right\rangle = \sum_{\mathbf{r}} \sum_{\sigma} \Phi_{\mathbf{r},\sigma}(t)\, \left|\mathbf{r}\right\rangle \otimes \left|\sigma\right\rangle .$$

Но амплитуда вероятности $\Phi_{\mathbf{r},\sigma}(t)$ или, что практически то же самое, волновая функция $\Phi(\mathbf{r},\sigma;t)$ уже не сводится к произведению (11), поскольку имеющаяся в общем случае корреляция значений $\mathbf{r}$ и σ проявляется в том, что различным значениям σ отвечают разные формы зависимости волновой функции от $\mathbf{r}$. Можно сказать, что волновая функция частицы со спином s имеет $2s+1$ компонент:

$$\Phi(\mathbf{r},s;t), \quad \Phi(\mathbf{r},s-1;t), \quad \ldots \quad , \Phi(\mathbf{r},-s;t).$$

Пример подобной корреляции дает картина, соответствующая опыту Штерна–Герлаха с частицами спина $1/2$. В начальный момент времени, до вхождения волнового пакета в прибор с неоднородным магнитным полем, еще допустимо считать координатную часть волновой функции величиной, не зависящей от спинового состояния частицы. Однако затем в результате

взаимодействия с неоднородным магнитным полем образуются два пространственно разнесенных «облака вероятности»: в зависимости от значения проекции спина $\sigma = \pm 1/2$ частица будет обнаруживаться либо в одной либо в другой области $\mathbf{r}$-пространства.

8.5. а) Воспользуемся раздельным описанием орбитальных и спиновых переменных, обсуждавшимся в задаче 8.4. Для частицы со спином $s = 1/2$ имеем $\hat{\mathbf{s}} = \hat{\boldsymbol{\sigma}}/2$, так что спиновая часть гамильтониана есть

$$\hat{H}_{cn} = -\mu_0 \, \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{B}. \tag{1}$$

Направим ось z вдоль магнитного поля; тогда

$$\hat{H}_{cn} \;=\; -\mu_0 B \, \hat{\sigma}_z \;=\; \begin{pmatrix} -\mu_0 B & 0 \\ 0 & \mu_0 B \end{pmatrix}. \tag{2}$$

Решение $\left|\chi(t)\right\rangle$ уравнения

$$i\hbar \frac{\partial \left|\chi(t)\right\rangle}{\partial t} \;=\; \hat{H}_{cn} \left|\chi(t)\right\rangle \tag{3}$$

с не зависящим от времени магнитным полем следует искать в виде

$$\left|\chi(t)\right\rangle \;=\; e^{-i\hat{H}_{cn} t/\hbar} \left|\chi(0)\right\rangle. \tag{4}$$

Подставив в (4) явное выражение для начального спинового состояния,

$$\left|\chi(0)\right\rangle \;=\; \cos\frac{\theta}{2}\left|\uparrow\right\rangle \;+\; \sin\frac{\theta}{2}\left|\downarrow\right\rangle, \tag{5}$$

получим

$$\left|\chi(t)\right\rangle \;=\; \cos\frac{\theta}{2}\; e^{-i\hat{H}_{cn} t/\hbar}\left|\uparrow\right\rangle \;+\; \sin\frac{\theta}{2}\; e^{-i\hat{H}_{cn} t/\hbar}\left|\downarrow\right\rangle. \tag{6}$$

Поскольку базисные спиновые состояния $\left|\uparrow\right\rangle$ и $\left|\downarrow\right\rangle$ являются собственными для оператора (2),

$$\hat{H}_{cn}\left|\uparrow\right\rangle = -\mu_0 B\left|\uparrow\right\rangle, \qquad \hat{H}_{cn}\left|\downarrow\right\rangle = \mu_0 B\left|\downarrow\right\rangle, \tag{7}$$

то

$$e^{-i\hat{H}_{cn}t/\hbar}\left|\uparrow\right\rangle = e^{i\mu_0 Bt/\hbar}\left|\uparrow\right\rangle, \quad e^{-i\hat{H}_{cn}t/\hbar}\left|\downarrow\right\rangle = e^{-i\mu_0 Bt/\hbar}\left|\downarrow\right\rangle. \qquad (8)$$

Таким образом,

$$\left|\chi(t)\right\rangle = \cos\frac{\theta}{2}\; e^{i\mu_0 Bt/\hbar}\left|\uparrow\right\rangle + \sin\frac{\theta}{2}\; e^{-i\mu_0 Bt/\hbar}\left|\downarrow\right\rangle. \qquad (9)$$

б) При вычислении средних значений проекций спина можно воспользоваться как вектором состояния (9), так и любым вектором состояния, отличающимся от (9) произвольным фазовым множителем. В частности, удобно взять вектор состояния $e^{-i\mu_0 Bt/\hbar}\left|\chi(t)\right\rangle$; такой спинор обладает компонентами

$$\chi_\uparrow = \cos(\theta/2), \quad \chi_\downarrow = e^{i\varphi(t)}\sin(\theta/2), \qquad (10)$$

где

$$\varphi(t) = -\frac{2\mu_0 B}{\hbar}t. \qquad (11)$$

Согласно результату задачи 8.3 в указанном здесь спиновом состоянии направление усредненного вектора спина $\left\langle \mathbf{s}(t)\right\rangle$ по отношению к осям x, y, z определяется углами θ и $\varphi(t)$. Поскольку угол $\varphi(t)$ изменяется со скоростью

$$\omega = \frac{d\varphi}{dt} = -\frac{2\mu_0 B}{\hbar}, \qquad (12)$$

мы заключаем, что вектор $\left\langle \mathbf{s}(t)\right\rangle$ прецессирует (вращается) вокруг направления $\mathbf{B}$ с частотой (12). При этом угол между направлениями $\left\langle \mathbf{s}(t)\right\rangle$ и $\mathbf{B}$ имеет постоянное значение, равное θ; оно определяется начальным условием.

При $\theta = 0$ спиновое состояние (9) является стационарным, это есть состояние со спином вдоль $\mathbf{B}$. Ему отвечает собственное значение оператора $\hat{H}_{cn}$

$$\varepsilon_\uparrow = -\mu_0 B. \qquad (13)$$

При $\theta = \pi$ спиновое состояние частицы также оказывается стационарным – это будет состояние со спином в направлении, противоположном $\mathbf{B}$, принадлежащее уровню энергии

$$\varepsilon_{\downarrow} = \mu_0 B. \tag{14}$$

Частота прецессии спина (12) соответствует разности значений энергии (13) и (14).

Отметим, что спиновый магнитный момент электрона ($\mu_0 \equiv \mu_e$) есть величина отрицательная. По абсолютной величине спиновый магнитный момент электрона приблизительно равен (с точностью 0,1%) магнетону Бора: $\mu_e \approx -(1{,}00116)\,|e|\hbar / 2mc$.

8.6. Спиновые состояния $|\sigma_1\rangle \otimes |\sigma_2\rangle$ являются собственными векторами для оператора проекции суммарного спина $\hat{S}_z = \hat{s}_{z1} + \hat{s}_{z2}$ с собственными значениями $S_z = \sigma_1 + \sigma_2$:

$$(\hat{s}_{z1} + \hat{s}_{z2})\,(|\sigma_1\rangle \otimes |\sigma_2\rangle) \;=\; (\hat{s}_{z1}|\sigma_1\rangle) \otimes |\sigma_2\rangle \;+\; |\sigma_1\rangle \otimes \hat{s}_{z2}|\sigma_2\rangle \;=$$

$$=\; \sigma_1 |\sigma_1\rangle \otimes |\sigma_2\rangle \;+\; |\sigma_1\rangle \otimes \sigma_2 |\sigma_2\rangle \;=\; (\sigma_1 + \sigma_2)\,(|\sigma_1\rangle \otimes |\sigma_2\rangle). \tag{1}$$

Однако для оператора квадрата суммарного спина,

$$\hat{\mathbf{S}}^2 = (\hat{\mathbf{s}}_1 + \hat{\mathbf{s}}_2)^2 = \hat{\mathbf{s}}_1^2 + \hat{\mathbf{s}}_2^2 + 2\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2, \tag{2}$$

не все из рассматриваемых базисных состояний будут собственными векторами, хотя для $\hat{\mathbf{s}}_1^2 + \hat{\mathbf{s}}_2^2$ все они являются собственными векторами с собственным значением

$$s_1(s_1+1) + s_2(s_2+1) \;=\; 3/2.$$

Для того чтобы найти собственные векторы оператора (2), построим и диагонализуем матрицу $\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2 = 4\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2$.

Пронумеруем базисные состояния, например, следующим образом:

$$|1\rangle = |\uparrow\rangle_1 \otimes |\downarrow\rangle_2,\; |2\rangle = |\downarrow\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle_2,\; |3\rangle = |\uparrow\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle_2,\; |4\rangle = |\downarrow\rangle_1 \otimes |\downarrow\rangle_2. \tag{3}$$

Пользуясь известными значениями элементов матриц Паули, имеем:

$$\hat{\sigma}_{x1}\hat{\sigma}_{x2}|1\rangle = \hat{\sigma}_x\left|\uparrow\right\rangle_1 \otimes \hat{\sigma}_x\left|\downarrow\right\rangle_2 = \left|\downarrow\right\rangle_1 \otimes \left|\uparrow\right\rangle_2 = |2\rangle,$$

$$\hat{\sigma}_{y1}\hat{\sigma}_{y2}|1\rangle = \hat{\sigma}_y\left|\uparrow\right\rangle_1 \otimes \hat{\sigma}_y\left|\downarrow\right\rangle_2 = -i\left|\downarrow\right\rangle_1 \otimes i\left|\uparrow\right\rangle_2 = |2\rangle,$$

$$\hat{\sigma}_{z1}\hat{\sigma}_{z2}|1\rangle = \hat{\sigma}_z\left|\uparrow\right\rangle_1 \otimes \hat{\sigma}_z\left|\downarrow\right\rangle_2 = \left|\uparrow\right\rangle_1 \otimes (-1)\left|\downarrow\right\rangle_2 = -|1\rangle.$$

Суммируя эти равенства и учитывая, что

$$\hat{\sigma}_{x1}\hat{\sigma}_{x2} + \hat{\sigma}_{y1}\hat{\sigma}_{y2} + \hat{\sigma}_{z1}\hat{\sigma}_{z2} = \hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2,$$

получаем

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2 \left|1\right\rangle = 2\left|2\right\rangle - \left|1\right\rangle. \tag{4}$$

Аналогично вычисляется результат действия оператора $\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2$ на остальные три состояния (3):

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2 \left|2\right\rangle = 2\left|1\right\rangle - \left|2\right\rangle, \tag{5}$$

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2 \left|3\right\rangle = \left|3\right\rangle, \tag{6}$$

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2 \left|4\right\rangle = \left|4\right\rangle. \tag{7}$$

Скалярно умножив (4)–(7) на каждое из базисных состояний (3), получаем искомую матрицу:

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2 = \begin{pmatrix} -1 & 2 & 0 & 0 \\ 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{8}$$

«Блочно-диагональный» вид матрицы (8) соответствует тому обстоятельству, что состояния $\left|3\right\rangle$ и $\left|4\right\rangle$, как видно из (6) и (7), уже являются собственными векторами оператора (8) с собственным значением 1. Следовательно, для определения остальных двух собственных векторов достаточно диагонализовать только верхний блок в (8), относящийся к двумерному подпространству спиновых состояний с базисом $\left|1\right\rangle$, $\left|2\right\rangle$. Из уравнения

$$\det\begin{pmatrix} -1-\lambda & 2 \\ 2 & -1-\lambda \end{pmatrix} = 0 \qquad (9)$$

находим собственные значения: $\lambda = 1$ и $\lambda = -3$. Им отвечают нормированные собственные векторы

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\big(|1\rangle + |2\rangle\big), \qquad \frac{1}{\sqrt{2}}\big(|1\rangle - |2\rangle\big). \qquad (10)$$

Таким образом, для системы из двух частиц со спином $1/2$ оператор (2) имеет трехкратно вырожденное собственное значение $S(S+1) = 2$ и невырожденное собственное значение $S(S+1) = 0$. Этим собственным значениям соответствуют три состояния с суммарным спином $S = 1$ и синглетное состояние с суммарным спином $S = 0$:

$$\begin{cases} |S=1, S_z=1\rangle = |\uparrow\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle_2 \\ |S=1, S_z=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow\rangle_1 \otimes |\downarrow\rangle_2 + \frac{1}{\sqrt{2}}|\downarrow\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle_2 . \\ |S=1, S_z=-1\rangle = |\downarrow\rangle_1 \otimes |\downarrow\rangle_2 \end{cases} \qquad (11)$$

$$|S=0, S_z=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow\rangle_1 \otimes |\downarrow\rangle_2 - \frac{1}{\sqrt{2}}|\downarrow\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle_2 . \qquad (12)$$

Значительно более быстрые способы решения подобных задач основываются на использовании *закона сложения моментов*. Для двух произвольных значений спина s_1 и s_2 закон сложения моментов гласит, что суммарный спин S должен с шагом, равным -1, пробегать все значения от $s_1 + s_2$ до $|s_1 - s_2|$. Применительно к $s_1 = s_2 = 1/2$ мы, таким образом, немедленно находим допустимые значения суммарного спина: $S = 1, 0$. Спектр допустимых значений S_z в каждом из двух мультиплетов с определенным значением S заранее известен, так что можно сразу же указать на принадлежность состояний $|3\rangle$ и $|4\rangle$ триплету с $S = 1$.

Недостающее состояние триплета, принадлежащее значению $S_z = 0$, легко получить, применяя повышающий оператор

$$\hat{S}_+ = \hat{s}_{+1} + \hat{s}_{+2} \tag{13}$$

к вектору состояния $|4\rangle = |S = 1, S_z = -1\rangle$:

$$\hat{S}_+ |1,-1\rangle = \left(\hat{s}_+ |\downarrow\rangle_1\right) \otimes |\downarrow\rangle_2 + |\downarrow\rangle_1 \otimes \hat{s}_+ |\downarrow\rangle_2 . \tag{14}$$

Действие повышающего оператора характеризуется формулой

$$\hat{s}_+ |s, s_z\rangle = \sqrt{(s - s_z)(s + s_z + 1)}\ |s, s_z + 1\rangle . \tag{15}$$

С учетом этой формулы левая сторона соотношения (14) равна $\sqrt{2}|1,0\rangle$, а правая сторона представляет собой сумму $|1\rangle + |2\rangle$. Следовательно, мы приходим к результату (11). Явный вид состояния (12) определяется из условия его ортогональности состоянию $|1,0\rangle$.

8.7. а) Согласно квантово-механическому закону сложения моментов сумма j орбитального момента l и спина s с шагом -1 принимает значения от $l + s$ до $|l - s|$. При $s = 1/2$ это правило дает два допустимых значения полного момента j для каждого заданного значения $l \geq 1$:

$$j = l \pm 1/2 . \tag{1}$$

Для $l = 0$ имеется одно значение полного момента: $j = 1/2$.

Число состояний вида $|l, l_z\rangle \otimes |s = 1/2, s_z\rangle$ с заданным l равно $2(2l + 1)$. Из линейных комбинаций таких состояний образуются мультиплеты состояний $|j, m\rangle$ с определенными значениями j, m, l (и $s = 1/2$). Мультиплет с заданным j включает $2j + 1$ членов. Указанные мультиплеты условимся обозначать символом орбитального момента электрона (s, p, d, ...) с нижним индексом, равным полному моменту j. Тогда перечисление электронных состояний представится в следующем виде.

Два s-состояния ($l = 0$) с различающимися значениями проекции спина образуют дублет $s_{1/2}$ с $j = 1/2$. Шесть p-состояний ($l = 1$)

образуют дублет $p_{1/2}$ с $j=1/2$ и квартет $p_{3/2}$ с $j=3/2$. Десять d-состояний аналогичным образом «расщепляются» на четыре состояния $d_{3/2}$ и шесть состояний $d_{5/2}$. И так далее.

б) В силу соотношения

$$\hat{\mathbf{J}}^2 = (\hat{\mathbf{l}}+\hat{\mathbf{s}})^2 = \hat{\mathbf{l}}^2+\hat{\mathbf{s}}^2+2\hat{\mathbf{l}}\cdot\hat{\mathbf{s}} \tag{2}$$

для оператора

$$2\hat{\mathbf{l}}\cdot\hat{\mathbf{s}} = \hat{\mathbf{J}}^2-\hat{\mathbf{l}}^2-\hat{\mathbf{s}}^2 \tag{3}$$

собственными векторами являются состояния с определенными значениями j,l,s. Как раз такие состояния были перечислены выше. Собственные значения оператора (3) при $s=1/2$ и $j=l\pm1/2$ равны величине

$$j(j+1)-l(l+1)-s(s+1) = \begin{cases} l, & j=l+1/2; \\ -l-1, & j=l-1/2. \end{cases} \tag{4}$$

Соответственно, при $s=1/2$ оператор «спин-орбитального взаимодействия» $A\hat{\mathbf{l}}\cdot\hat{\mathbf{s}}$ имеет два собственных значения $\delta\varepsilon_j$, которые относятся к мультиплетам состояний с различными значениями полного момента j:

$$\delta\varepsilon_{j=l+1/2} = Al/2, \qquad \delta\varepsilon_{j=l-1/2} = -A(l+1)/2. \tag{5}$$

При $l=0$ имеется лишь один мультиплет – дублет состояний $s_{1/2}$ с $j=1/2$; оба состояния в нем обладают одной и той же энергией.

Эти результаты отражают некоторые черты достаточно сложной теории энергетических уровней атома водорода, основанной на релятивистском описании движения электрона с помощью уравнения Дирака. Энергия спин-орбитального взаимодействия появляется в такой теории как одна из релятивистских поправок. В результате учета релятивистских поправок в энергетическом спектре атома возникает так называемая *тонкая структура* уровней – расщепление энергетических уровней ε_n с различными значениями полного момента j. Порядок величины этого расщепления оценивается выражением $A\sim\alpha^2 Ry$, где $\alpha=e^2/\hbar c$ – постоянная тонкой структуры.

Дальнейшее уточнение картины уровней атома водорода связано с *радиационными поправками*, возникающими вследствие квантования электромагнитного поля, и, кроме того, – с учетом магнитного поля, создаваемого спиновым магнитным моментом ядра. Взаимодействие электрона с магнитным полем ядра приводит к возникновению так называемой *сверхтонкой структуры* энергетических уровней. В частности, это взаимодействие ответственно за расщепление электронного уровня $1s_{1/2}$ на два близких по энергии подуровня, что следует рассматривать как существенный эффект в тех случаях, когда речь идет о точной картине основного и ближайшего к нему возбужденного состояний атома водорода (см. задачу 8.8).

8.8. Указанный в условии задачи оператор энергии взаимодействия магнитных моментов электрона и протона можно записать в виде

$$C\,\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2 = 4C\,\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2 . \qquad (1)$$

Согласно закону сложения моментов допустимые значения суммарного спина электрона и протона S равны 1 и 0, причем состояния с определенным значением S являются собственными для оператора (1), так как

$$2\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2 \;=\; \hat{\mathbf{S}}^2 - \hat{\mathbf{s}}_1^2 - \hat{\mathbf{s}}_1^2 . \qquad (2)$$

Собственные значения оператора (2) при $s_1 = s_2 = 1/2$ равны величине

$$S(S+1) - s_1(s_1+1) - s_2(s_2+1) \;=\; \begin{cases} 1/2\,, & S=1\,; \\ -3/2\,, & S=0\,. \end{cases} \qquad (3)$$

Триплет спиновых состояний (со спином $S=1$) электрона и ядра, рассматриваемых в качестве единой спиновой подсистемы атома, принадлежит собственному значению энергии взаимодействия C, а синглет ($S=0$) соответствует собственному значению $-3C$. Таким образом, уровень энергии $1s$-состояния атома водорода имеет сверхтонкую структуру – испытывает расщепление на два уровня, разделенных энергетическим интервалом $4C$.

Оценим масштаб величины C как значение энергии взаимодействия магнитного момента электрона $\mu_e = -\mu_B$ с магнитным полем $B = \mu_p / r^3 \sim \mu_p / a_B^3$, создаваемым магнитным полем протона на расстояниях от ядра порядка размера электронной «орбиты»; получаем:

$$C \sim \mu_B B \sim \frac{\mu_B \mu_p}{a_B^3} \sim \frac{\mu_B^2}{a_B^3}\frac{m_e}{m_p} \sim \alpha^2 Ry \frac{m_e}{m_p}, \qquad (4)$$

где $\alpha = e^2/\hbar c \approx 1/137$ – постоянная тонкой структуры, $m_e/m_p \sim 5\cdot 10^{-4}$ – отношение массы электрона к массе протона.

Удается также провести точное квантово-механическое вычисление энергии сверхтонкого расщепления $1s$-уровня атома водорода (см., например, [8]). Результаты расчета хорошо согласуются с экспериментальными данными. В единицах частоты это расщепление составляет 1420 МГц, что соответствует электромагнитному излучению с длиной волны 21 см. Наблюдение такого излучения сыграло важную роль в становлении радиоастрономии; по наблюдаемой интенсивности приходящего из космоса излучения на длине волны 21 см и его доплеровскому сдвигу были изучены распределения плотности и скорости движения водорода в Галактике.

8.9. Система двух электронов, находящихся в синглетном спиновом состоянии $\left|S=0, S_z=0\right\rangle$, в координатном представлении для орбитальной части полного вектора состояния описывается символическим равенством

$$\left|\Phi_{12}\right\rangle = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\left|S=0, S_z=0\right\rangle, \qquad (1)$$

где двухэлектронная волновая функция $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ должна быть выражена через одноэлектронные функции $\varphi_p(\mathbf{r})$, $\varphi_q(\mathbf{r})$, а вектор спинового состояния имеет вид:

$$\left|S=0, S_z=0\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left|\uparrow\right\rangle_1 \otimes \left|\downarrow\right\rangle_2 - \frac{1}{\sqrt{2}}\left|\downarrow\right\rangle_1 \otimes \left|\uparrow\right\rangle_2. \qquad (2)$$

Электроны являются фермионами и потому, в соответствии с принципом неразличимости одинаковых частиц, состояние (1) должно

быть антисимметричным по отношению к перестановке номеров частиц 1 и 2 (или – по отношению к перестановке совокупностей квантовых чисел каждой из частиц, например $a=(p,\uparrow)$ и $b=(q,\downarrow)$). Поскольку спиновое состояние (2) уже антисимметрично по номерам 1 и 2, то орбитальная часть в (1) должна быть симметричной:

$$\psi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) \;=\; \psi(\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_1)\,. \tag{3}$$

В случае различимых частиц 1 и 2 (например, электрона и протона), находящихся в состояниях $\varphi_p(\mathbf{r}_1)$ и $\varphi_q(\mathbf{r}_2)$, орбитальная волновая функция системы имела бы вид произведения $\varphi_p(\mathbf{r}_1)\,\varphi_q(\mathbf{r}_2)$. Для системы же одинаковых частиц при условии (3) орбитальная волновая функция должна быть равна симметризованному «произведению» одночастичных функций:

$$\psi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) \;=\; \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\varphi_p(\mathbf{r}_1)\,\varphi_q(\mathbf{r}_2) \;+\; \varphi_p(\mathbf{r}_2)\,\varphi_q(\mathbf{r}_1)\Big). \tag{4}$$

Множитель $1/\sqrt{2}$ здесь введен для сохранения нормировки – если функции φ_p и φ_q нормированы на единицу, то функция (4) также удовлетворяет условию нормировки на единицу:

$$\int d^3\mathbf{r}_1 \int d^3\mathbf{r}_2 \,\Big|\psi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)\Big|^2 \;=\; 1. \tag{5}$$

8.10. а) Среднее значение энергии взаимодействия частиц $U(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)=U(\mathbf{r}_2-\mathbf{r}_1)$ в состоянии с определенным суммарным спином S,

$$\big|\Phi_{12}\big\rangle \;=\; \psi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)\,\big|S\big\rangle, \tag{1}$$

с учетом нормировки спинового состояния на единицу имеет вид интеграла по координатам частиц:

$$\begin{aligned}\big\langle U\big\rangle \;&=\; \big\langle\Phi_{12}\big|\hat{U}\big|\Phi_{12}\big\rangle \;=\; \int d^3\mathbf{r}_1 \int d^3\mathbf{r}_2 \;\psi^* U\,\psi \;\big\langle S\big|S\big\rangle \;= \\ &=\; \int d^3\mathbf{r}_1 \int d^3\mathbf{r}_2 \;\psi^*(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)\,\psi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)\,U(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)\,.\end{aligned} \tag{2}$$

Суммарному спину $S=0$ отвечает симметричная по номерам частиц 1,2 орбитальная часть волновой функции системы (так как электроны

являются фермионами, а спиновая часть состояния системы при $S = 0$ уже антисимметрична):

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \;=\; \frac{1}{\sqrt{2}} \Big(\varphi_p(\mathbf{r}_1)\, \varphi_q(\mathbf{r}_2) \;+\; \varphi_p(\mathbf{r}_2)\, \varphi_q(\mathbf{r}_1) \Big). \qquad (3)$$

Подставив (3) в (2) и произведя в некоторых слагаемых замену переменных интегрирования $\mathbf{r}_1 \leftrightarrow \mathbf{r}_2$, получим

$$\langle U \rangle = A + J\,, \qquad (4)$$

где

$$A \;=\; \int d^3\mathbf{r}_1 \int d^3\mathbf{r}_2 \left|\varphi_p(\mathbf{r}_1)\right|^2 \left|\varphi_q(\mathbf{r}_2)\right|^2 U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\,, \qquad (5)$$

$$J \;=\; \int d^3\mathbf{r}_1 \int d^3\mathbf{r}_2 \; \varphi_p(\mathbf{r}_1)^* \varphi_q(\mathbf{r}_1)\, \varphi_q(\mathbf{r}_2)^* \varphi_p(\mathbf{r}_2)\, U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\,. \qquad (6)$$

Величина $U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ представляет собой энергию кулоновского взаимодействия электронов: $U = \dfrac{e^2}{\left|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2\right|}$.

б) Спиновое состояние $\left|S\right\rangle$ системы двух электронов при суммарном спине $S = 1$ может совпадать с одним из состояний триплета $\left|S = 1, S_z\right\rangle$ или иметь вид их линейной комбинации. В любом из этих случаев состояние $\left|S = 1\right\rangle$ симметрично по номерам частиц 1 и 2, так как такой симметрией обладает каждый из членов триплета (см. формулы (11) в задаче 8.6). Следовательно, требованию антисимметрии двухфермионного состояния $\left|\Phi_{12}\right\rangle$ теперь отвечает антисимметризованное произведение орбитальных функций φ_p и φ_q:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \;=\; \frac{1}{\sqrt{2}} \Big(\varphi_p(\mathbf{r}_1)\, \varphi_q(\mathbf{r}_2) \;-\; \varphi_p(\mathbf{r}_2)\, \varphi_q(\mathbf{r}_1) \Big). \qquad (7)$$

Подставив (7) в (2), получим

$$\langle U \rangle = A - J\,, \qquad (8)$$

где величины A и J даются формулами (5), (6). Как видим, слагаемое J входит в (4) и в (8) с различным знаком.

Величину J называют *обменным* интегралом, а о том обстоятельстве, что энергия системы одинаковых частиц $\langle U \rangle$ зависит от значения суммарного спина (даже при не зависящем от спина частиц операторе взаимодействия U), говорят как об *обменном взаимодействии*. В случае различимых частиц орбитальная часть волновой функции системы была бы равна обычному произведению $\varphi_p(\mathbf{r}_1)\,\varphi_q(\mathbf{r}_2)$, и вместо (4) или (8) мы имели бы соотношение $\langle U \rangle = A$, не содержащее обменного интеграла.

9. ВОЗМУЩЕНИЕ, ПЕРЕХОДЫ

Для приближенного решения сложных квантово-механических задач применяют методы теории возмущений. В теории возмущений гамильтониан системы $\hat{H}$ представляется в форме

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}\,, \qquad \text{(I)}$$

где $\hat{H}_0$ соответствует уравнению Шредингера, допускающему точное решение, а оператор $\hat{V}$, называемый *возмущением*, рассматривается как малая величина по отношению к $\hat{H}_0$.

Различают стационарные и нестационарные задачи. В стационарном случае операторы $\hat{H}_0$ и $\hat{V}$ не зависят от времени, так что квантовая система с гамильтонианом (I) обладает стационарными состояниями $|\varepsilon_n\rangle$ и соответствующим энергетическим спектром ε_n. Эти векторы состояний и уровни энергии (в дискретной части энергетического спектра) записываются в виде рядов по степеням малого параметра, определяющего малость оператора возмущения $\hat{V}$ по отношению к невозмущенному гамильтониану $\hat{H}_0$; степень малости членов ряда теории возмущений принято указывать вверху в скобках:

$$|\varepsilon_n\rangle = \sum_k C_{kn} |k\rangle^{(0)}\,, \qquad C_{kn} = C_{kn}^{(0)} + C_{kn}^{(1)} + C_{kn}^{(2)} + \ldots\,; \qquad \text{(II)}$$

$$\varepsilon_n = \varepsilon_n^{(0)} + \varepsilon_n^{(1)} + \varepsilon_n^{(2)} + \ldots\ . \qquad \text{(III)}$$

Как правило, в важных для практики задачах ряды теории возмущений просуммировать не удается. В связи с этим основной интерес представляет отыскание лишь нескольких первых членов ряда. Если эти члены малы по сравнению с соответствующими величинами нулевого порядка и последовательно убывают, то их можно трактовать как поправки, обусловленные оператором возмущения. Иногда прибегают к выборочному суммированию рядов или к перестройке ряда по степеням нового малого параметра, но в нашем изложении подобные вопросы не будут затронуты.

Уравнение Шредингера с гамильтонианом (I), определяющее стационарные состояния (II) и уровни энергии (III), сводится к системе уравнений для коэффициентов C_{kn} разложения искомых точных векторов состояния $|\varepsilon_n\rangle$ по собственным векторам $|k\rangle^{(0)}$ невозмущенного гамильтониана:

$$(\varepsilon_n - \varepsilon_k^{(0)})\, C_{kn} \;=\; \sum_{k'} V_{kk'}\, C_{k'n}\,, \qquad \text{(IV)}$$

где $V_{kk'}$ – матричные элементы оператора возмущения, вычисленные в базисе $|k\rangle^{(0)}$. В результате подстановки в (IV) величин C_{kn} и ε_n в форме рядов теории возмущений и приравнивания друг другу величин одного и того же порядка малости из левой и правой частей (IV) определяются искомые поправки $C_{kn}^{(m)}$ и $\varepsilon_n^{(m)}$. При этом формулы для случаев, в которых невозмущенный уровень $\varepsilon_n^{(0)}$ не вырожден, существенно отличаются от соответствующих результатов в случаях с вырождением.

В отсутствие вырождения уровня $\varepsilon_n^{(0)}$ коэффициенты, которыми определяются поправки первого приближения к собственным функциям гамильтониана, даются формулами:

$$C_{kn}^{(0)} = \delta_{kn}\,, \quad C_{nn}^{(1)} = 0\,, \quad C_{kn}^{(1)} = \frac{V_{kn}}{\varepsilon_n^{(0)} - \varepsilon_k^{(0)}}\,, \text{ при } k \neq n\,. \qquad \text{(V)}$$

Поправки первого и второго порядка к невырожденному уровню энергии $\varepsilon_n^{(0)}$ имеют вид:

$$\varepsilon_n^{(1)} = V_{nn}\,, \qquad \text{(VI)}$$

$$\varepsilon_n^{(2)} \;=\; \sum_k{}' \; \frac{\left|V_{nk}\right|^2}{\varepsilon_n^{(0)} - \varepsilon_k^{(0)}}\,, \qquad \text{(VII)}$$

где штрих у знака суммы означает, что слагаемое с $k = n$ должно быть исключено из данного выражения (суммирование ведется по $k \neq n$). Указанные формулы применимы при условии, что матричные элементы

оператора возмущения малы по сравнению с соответствующими разностями невозмущенных уровней энергии:

$$\left|V_{kn}\right| << \left|\varepsilon_n^{(0)} - \varepsilon_k^{(0)}\right|. \qquad \text{(VIII)}$$

При наличии вырождения уровня $\varepsilon_n^{(0)}$ с какой-либо кратностью g данному уровню принадлежат g невозмущенных ортонормированных состояний $\left|k\right\rangle^{(0)}$ (где $k = n_1,...,n_g$). Всякая линейная комбинация этих состояний, с произвольными коэффициентами $C_k^{(0)}$, также является собственным вектором невозмущенного гамильтониана, принадлежащим тому же самому вырожденному уровню энергии. Возмущение $\hat{V}$ порождает поправки к уровню $\varepsilon_n^{(0)}$ и тем самым частично или полностью снимает вырождение. В первом приближении теории возмущений возникшему указанным образом семейству уровней энергии отвечают так называемые *правильные* состояния – линейные комбинации g состояний $\left|k\right\rangle^{(0)}$ с коэффициентами $C_k^{(0)}$, удовлетворяющими системе g однородных линейных уравнений:

$$\sum_{k'} (V_{kk'} - \varepsilon^{(1)} \delta_{kk'})\, C_{k'}^{(0)} = 0, \qquad \text{(IX)}$$

где $k, k' = n_1,...,n_g$; $\varepsilon^{(1)}$ – параметр, значениями которого определяются сдвиги уровней энергии. Система уравнений (IX) имеет нетривиальные решения при условии

$$\det(V_{kk'} - \varepsilon^{(1)} \delta_{kk'}) = 0, \qquad \text{(X)}$$

называемом *секулярным* (или *вековым*) уравнением. Это есть уравнение степени g для $\varepsilon^{(1)}$. Его корни представляют собой искомые поправки первого приближения к вырожденному уровню энергии.

В нестационарном случае оператор возмущения $\hat{V}(t)$ зависит от времени. Решение волнового уравнения Шредингера с гамильтонианом (I)

представляется в форме разложения по невозмущенным стационарным состояниям с зависящими от времени коэффициентами $C_k(t)$:

$$\left|\psi(t)\right\rangle \;=\; \sum_k C_k(t)\, e^{-i\varepsilon_k^{(0)} t/\hbar}\, \left|k\right\rangle^{(0)} . \qquad \text{(XI)}$$

Неизвестные функции $C_k(t)$ удовлетворяют системе дифференциальных уравнений:

$$i\hbar\, \frac{dC_k(t)}{dt} \;=\; \sum_{k'} \widetilde{V}_{kk'}(t)\; C_{k'}(t)\,, \qquad \text{(XII)}$$

где $\widetilde{V}_{kk'}(t)$ – матричные элементы оператора возмущения в так называемом *представлении взаимодействия*. Такие матричные элементы вычисляются по невозмущенным стационарным состояниям $\left|k\right\rangle^{(0)}$ и имеют следующий вид:

$$\widetilde{V}_{kk'}(t) \;=\; \left\langle k\right|\, e^{i\hat{H}_0\, t/\hbar}\; \hat{V}(t)\; e^{-i\hat{H}_0\, t/\hbar}\left|k'\right\rangle \;=\; e^{i(\varepsilon_k^{(0)}-\varepsilon_{k'}^{(0)})t/\hbar}\; V_{kk'}(t)\,. \qquad \text{(XIII)}$$

Подстановка в (XII) величин $C_k(t)$ в форме рядов теории возмущений,

$$C_k(t) = C_k^{(0)} + C_k^{(1)}(t) + C_k^{(2)}(t) + \ldots\,, \qquad \text{(XIV)}$$

позволяет решать уравнения (XII) методом последовательных итераций. При этом должны быть заданы начальные условия.

Сформулируем результат, получающийся указанным выше путем. Если в начальный момент времени t' квантовое состояние системы совпадало с одним из невозмущенных стационарных состояний, например,

$$\left|\psi(t=t')\right\rangle \;=\; e^{-i\varepsilon_{n'}^{(0)}t'/\hbar}\left|n'\right\rangle^{(0)},$$

то

$$C_k^{(0)} = \delta_{kn'},\; C_k^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar}\int_{t'}^{t} dt_1\; \widetilde{V}_{kn'}(t_1)\,, \qquad \text{(XV)}$$

$$C_k^{(2)}(t) \;=\; \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_{k_1} \int_{t'}^{t} dt_2 \int_{t'}^{t_2} dt_1\; \widetilde{V}_{kk_1}(t_2)\; \widetilde{V}_{k_1n'}(t_1)\,. \qquad \text{(XVI)}$$

Общая формула для $C_k^{(m)}(t)$ при этом имеет вид

$$C_k^{(m)}(t) = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^m \sum_{k_{m-1}} \cdots \sum_{k_1} \int_{t'}^{t} dt_m \int_{t'}^{t_m} dt_{m-1} \cdots \int_{t'}^{t_2} dt_1 \; \widetilde{V}_{k k_{m-1}}(t_m) \cdots \widetilde{V}_{k_1 n'}(t_1). \quad \text{(XVII)}$$

Величина $\left|C_k(t)\right|^2$ представляет собой *вероятность перехода* системы за время $t - t'$ из начального состояния n' в конечное невозмущенное состояние k под влиянием возмущения $\hat{V}(t)$. В первом приближении для вероятности такого перехода при $k \neq n'$ имеем:

$$W_{kn'}^{(1)} = \left| C_k^{(1)}(t) \right|^2, \qquad k \neq n' \quad \text{(XVIII)}$$

Если для данного перехода матричный элемент оператора возмущения равен нулю, то вероятность перехода следует вычислять во втором порядке теории возмущений – как $\left|C_k^{(2)}(t)\right|^2$. Критерием применимости получаемых таким образом результатов является малость значений вероятности перехода по сравнению с единицей. В случаях, когда это условие не выполняется, для решения задачи о вероятности перехода $n' \to k$ следует вернуться к точным уравнениям (XII) и попытаться найти иной приближенный метод отыскания функций $C_k(t)$.

При рассмотрении переходов сложной квантовой системы в состояния, принадлежащие непрерывному спектру энергии, применяют *золотое правило* Ферми для вероятности w переходов *за единицу времени*:

$$w = \frac{2\pi}{\hbar} \left| M_{fi} \right|^2 \rho_f(\varepsilon_i), \quad \text{(XIX)}$$

где i и f – совокупности квантовых чисел системы в целом в начальном (initial) и конечном (final) состояниях; $\rho_f(\varepsilon_i)$ – плотность конечных состояний с энергией, равной энергии начального состояния; M_{fi} – матричный элемент перехода, определенным образом сопоставляемый оператору возмущения $\hat{V}(t)$.

Золотое правило применимо, в частности, к описанию рассеяния частицы в не зависящем от времени потенциальном поле $U(\mathbf{r})$. Если невозмущенные волновые функции частицы выбрать в виде плоских волн (состояния с определенным импульсом, отвечающие свободному движению), а в качестве матричных элементов перехода в первом приближении по $U(\mathbf{r})$ использовать величины $\langle \mathbf{p}|\hat{U}|\mathbf{p}'\rangle$, то результат можно записать в виде *формулы Борна* (первое *борновское приближение*) для сечения рассеяния $d\sigma$ частицы в телесный угол $d\Omega_{\mathbf{p}}$:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{\mathbf{p}}} = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2 \left|u(\mathbf{q})\right|^2. \qquad \text{(XX)}$$

Здесь m – масса частицы, $\mathbf{q} = (\mathbf{p} - \mathbf{p}')/\hbar$,

$$u(\mathbf{q}) = \int d^3\mathbf{r}\ e^{-i\,\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\ U(\mathbf{r}). \qquad \text{(XXI)}$$

Условием применимости приближения Борна является выполнение хотя бы одного из неравенств

$$U_0 << \frac{\hbar^2}{ma^2}, \qquad U_0 << \frac{\hbar^2}{ma^2}ka, \qquad \text{(XXII)}$$

где U_0 – характерная величина потенциала, a – его радиус, $k = \sqrt{2m\varepsilon}/\hbar = p/\hbar$.

9.1. ЗАДАЧИ

9.1. Выписать поправку первого порядка $\varepsilon_n^{(1)}$ к энергетическим уровням частицы в бесконечной прямоугольной одномерной потенциальной яме шириной a для произвольного возмущения $V(x)$.

9.2. Для частицы массы m с электрическим зарядом q, находящейся в основном состоянии в бесконечной прямоугольной потенциальной яме шириной a, найти в первых двух порядках теории возмущений сдвиг энергетического уровня, вызванный однородным электрическим полем E.

9.3. Найти уровни энергии ангармонического линейного осциллятора с гамильтонианом

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2 + \alpha x^3 + \beta x^4,$$

рассматривая члены $\alpha x^3 + \beta x^4$ как возмущение.

9.4. Стационарным состояниям электрона в сферически симметричной потенциальной яме $U(r)$ соответствуют уровни энергии $\varepsilon^{(0)}_{n_r l}$. В общем случае поле $U(r)$ не является кулоновским, так что уровни энергии не вырождены по азимутальному квантовому числу l. Рассмотреть изменение этих энергетических уровней, возникающее под действием внешнего достаточно слабого однородного электрического поля $\mathbf{E}$ (эффект Штарка).

9.5. Рассмотреть изменение первого из уровней энергии возбужденных состояний атома водорода, возникающее в линейном приближении по внешнему электрическому полю (линейный эффект Штарка на примере $2s, 2p$-состояний атома водорода).

9.6. Для электрона в сферически симметричной потенциальной яме $U(r)$ обсудить расчет изменения энергетических уровней под действием внешнего однородного магнитного поля $\mathbf{B}$ (эффект Зеемана).

Указания. Воспользоваться гамильтонианом Паули с учетом энергии спин-орбитального взаимодействия вида $\alpha(r)\hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{s}}$. Определить линейный и квадратичный по магнитному полю операторы возмущения.

9.7. Рассмотреть эффект Зеемана применительно к $1s$-уровню атома водорода с учетом сверхтонкой структуры этого уровня.

9.8. На примере состояний электрона $p_{1/2}$ и $p_{3/2}$ рассмотреть с помощью теории возмущений эффект Зеемана при произвольном отношении магнитной энергии к энергии спин-орбитального расщепления.

9.9. На линейный осциллятор с зарядом q начиная с момента времени $t_0 = 0$ и до момента времени t_1 действовало однородное электрическое поле $E(t)$, изменявшееся во времени по произвольному закону. При $t < t_0$ осциллятор находился в n-м стационарном состоянии. Найти в первом порядке теории возмущений вероятности переходов в различные состояния для $t > t_1$.

9.10. Квантовая система, имеющая два стационарных состояния $|1\rangle$, $|2\rangle$ с невырожденными уровнями энергии ε_1, ε_2 (двухуровневая система), подвергается периодическому возмущению вида

$$\hat{V}(t) = \hat{M}\, e^{-i\omega t} + \hat{M}^{+} e^{i\omega t}$$

с частотой ω, близкой к $(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)/\hbar$:

$$\omega = (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)/\hbar - \Delta,$$

где Δ – малая величина по сравнению с $(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)/\hbar$. В начальный момент времени система находилась в одном из стационарных состояний: $|\psi(t=0)\rangle = |1\rangle$. Найти состояние системы $|\psi(t)\rangle$ для произвольного момента времени.

Указания. Воспользоваться уравнениями (XII) введения к данной главе, опустив в них быстро осциллирующие слагаемые. В более общей постановке подобную задачу см. в [1,8].

9.11. Атом водорода, находящийся в основном состоянии, подвергается действию линейно поляризованной монохроматической электромагнитной волны высокой частоты: $\hbar\omega >> Ry$. Если при этом длина волны велика по сравнению с размером атома (что имеет место при $\hbar\omega << 4\pi Ry/\alpha$, где $\alpha = e^2/\hbar c$), то электрическое поле волны можно считать однородным. Найти в первом порядке теории возмущений вероятность ионизации атома электрическим полем такой волны.

Указания. Условие $\hbar\omega >> Ry$ позволяет принять упрощающее предположение, что конечное состояние электрона, вылетевшего из атома,

приближенно описывается плоской волной. Считать, что однородное электрическое поле с частотой ω и векторной амплитудой $\mathbf{E}$ задано посредством потенциалов

$$\varphi = 0, \qquad \mathbf{A}(t) = -(c\mathbf{E}/\omega)\sin\omega t .$$

9.12. В условиях предыдущей задачи, но для случая с циркулярно поляризованной электромагнитной волной, распространяющейся в направлении оси z, найти угловую зависимость вероятности ионизации атома электрическим полем волны.

9.13. Рассмотреть в борновском приближении дифференциальное сечение рассеяния электрона на двух одинаковых силовых центрах, расположенных на расстоянии $\mathbf{d}$ друг от друга.

9.14. Пользуясь формулой Борна, найти дифференциальное сечение рассеяния частицы с зарядом $Z_1 e$ в кулоновском поле неподвижного центра с зарядом $Z_2 e$.

9.15. Обсудить расчет в борновском приближении дифференциального сечения упругого рассеяния быстрых электронов атомом [1,8,10]. Результат выразить через *атомный формфактор* $F(\mathbf{q})$,

$$F(\mathbf{q}) = \int d^3\mathbf{r}\; n(\mathbf{r})\, e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} ,$$

где функция $n(\mathbf{r})$ определяется плотностью $en(\mathbf{r})$ электронного заряда в атоме.

9.2. РЕШЕНИЯ

9.1. Волновые функции невозмущенных стационарных состояний частицы в данной задаче имеют вид:

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{2/a}\,\sin(\pi n x/a); & 0 \le x \le a, \\ 0; & x < 0,\ x > a, \end{cases} \qquad (1)$$

где $n = 1, 2, 3, \ldots$. Подставив (1) в выражение для поправки первого порядка к энергии частицы

$$\varepsilon_n^{(1)} = \langle n|\hat{V}|n\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi_n^*(x)\, V(x)\, \psi_n(x), \qquad (2)$$

получаем:

$$\varepsilon_n^{(1)} = \frac{2}{a}\int_0^a dx\, V(x) \sin^2 \frac{\pi n x}{a}. \qquad (3)$$

Отметим, что при достаточно больших n квадрат синуса быстро осциллирует, и его можно заменить средним значением, равным $1/2$; тогда:

$$\varepsilon_n^{(1)} \approx \frac{1}{a}\int_0^a dx\, V(x) = \overline{V}, \qquad n >> 1. \qquad (4)$$

Видно, что при $n >> 1$ поправка $\varepsilon_n^{(1)}$ не зависит от номера уровня и равна усредненной вдоль потенциальной ямы величине возмущающего потенциала.

9.2. Возмущением является энергия взаимодействия частицы с внешним электрическим полем E:

$$V(x) = -qE\,x. \qquad (1)$$

Поправка первого порядка к n-му энергетическому уровню равна

$$\varepsilon_n^{(1)} = \langle n|\hat{V}|n\rangle = -\frac{2qE}{a}\int_0^a dx\, x \sin^2 \frac{\pi n x}{a} = -\frac{1}{2}\, qE\,a. \qquad (2)$$

Эта величина не зависит от номера уровня и, следовательно, характеризует сдвиг энергетического спектра как целого.

Поправка второго порядка к энергии $\varepsilon_1^{(0)}$ основного состояния определяется формулой

$$\varepsilon_1^{(2)} = \sum_{n=2}^{\infty} \frac{\left|\langle n|\hat{V}|1\rangle\right|^2}{\varepsilon_1^{(0)} - \varepsilon_n^{(0)}} = q^2E^2 \sum_{n=2}^{\infty} \frac{\left|\langle n|\hat{x}|1\rangle\right|^2}{\varepsilon_1^{(0)} - \varepsilon_n^{(0)}}, \qquad (3)$$

где

$$\varepsilon_1^{(0)} - \varepsilon_n^{(0)} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} - \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} n^2 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(1-n^2), \tag{4}$$

$$\langle n|\hat{x}|1\rangle = \frac{2}{a}\int_0^a dx\, x \sin\frac{\pi n x}{a} \sin\frac{\pi x}{a}. \tag{5}$$

Не приводя здесь деталей вычисления матричных элементов (5), выпишем результат для $n \geq 2$:

$$\langle n|\hat{x}|1\rangle = \begin{cases} -\dfrac{8an}{\pi^2(n-1)^2(n+1)^2}; & n = 2, 4, 6, \ldots, \\ 0; & n = 3, 5, 7, \ldots. \end{cases} \tag{6}$$

Используя (4) и (6) в (3), получаем:

$$\varepsilon_1^{(2)} = -\frac{128}{\pi^6}\frac{ma^4q^2E^2}{\hbar^2} \sum_{n=2,4,6,\ldots} \frac{n^2}{(n-1)^4(n+1)^4(n^2-1)} \equiv -\frac{1}{2}\beta E^2. \tag{7}$$

Ряд (7) быстро сходится, поэтому величина $\varepsilon_1^{(2)}$ приблизительно равна первому члену этого ряда; в таком приближении значение коэффициента β есть

$$\beta \approx 4{,}4 \cdot 10^{-3} ma^4q^2/\hbar^2. \tag{8}$$

9.3. Прежде всего, поясним происхождение слагаемых

$$\hat{V} = \alpha x^3 + \beta x^4 \tag{1}$$

в гамильтониане

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2 + \alpha x^3 + \beta x^4. \tag{2}$$

В общем случае задача заключается в определении энергетических уровней частицы вблизи дна потенциальной ямы $U(x)$ достаточно произвольного вида. Если функция $U(x)$ в окрестности своего минимума и ее производные не имеют особенностей, то можно представить $U(x)$ в

форме ряда Тейлора по степеням отклонения координаты x от точки минимума x_0. Удобно выбрать эту точку x_0 в качестве начала координат, и считать значение потенциала U в точке минимума равным нулю. Учтем также, что первая производная функции $U(x)$ в точке минимума обращается в нуль. Тогда указанный степенной ряд запишется в виде

$$U(x) = \frac{1}{2}U''(0)\,x^2 + \frac{1}{3!}U'''(0)\,x^3 + \frac{1}{4!}U^{IV}(0)\,x^4 + \ldots\ . \qquad (3)$$

Здесь первое слагаемое, очевидно, соответствует потенциалу *гармонического* осциллятора с квадратом собственной частоты $\omega_0^2 = U''(0)/m$, а следующие слагаемые в той области значений x, где они достаточно малы по сравнению с первым членом, можно рассматривать как *ангармонические* поправки к потенциалу осциллятора. Обозначив $U'''(0)/3! = \alpha$, $U^{IV}(0)/4! = \beta$, и отбросив члены ряда (3) высокой степени, приходим к задаче с гамильтонианом (2).

В нулевом приближении по отношению к возмущению (1) энергетические уровни осциллятора известны:

$$\varepsilon_n^{(0)} = \hbar\omega_0(n+1/2), \qquad n = 0, 1, 2, \ldots\ . \qquad (4)$$

Поправка к энергии первого порядка по α обращается в нуль,

$$\varepsilon_n^{(1)} = \alpha\langle n|\hat{x}^3|n\rangle = \alpha\int_{-\infty}^{\infty} dx\; x^3\psi_n^2(x) = 0, \qquad (5)$$

так как под знаком интеграла с симметричными пределами в (5) присутствует нечетная функция переменной интегрирования. Здесь и ниже $|n\rangle$ – невозмущенные стационарные состояния гармонического осциллятора. Для вычисления поправки к энергии второго порядка по α найдем сначала матричные элементы оператора $\hat{x}^3$. Проще всего это делается с помощью представления оператора координаты в форме

$$\hat{x} = \sqrt{\hbar/2m\omega_0}\,(\hat{a} + \hat{a}^+), \qquad (6)$$

где $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$ – «бозонные» операторы уничтожении и рождения (см. задачу 6.7), характеризующиеся соотношениями:

$$\hat{a}\,|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle, \qquad \hat{a}^{+}\,|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle. \tag{7}$$

Несложное вычисление с использованием равенств (7) дает:

$$(2m\omega_0/\hbar)^{3/2}\hat{x}^3|n\rangle = \sqrt{n(n-1)(n-2)}\,|n-3\rangle + 3n^{3/2}|n-1\rangle +$$

$$+ 3(n+1)^{3/2}|n+1\rangle + \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)}\,|n+3\rangle. \tag{8}$$

Скалярно умножая (8) на $|n'\rangle$ и учитывая условие $\langle n'|n\rangle = \delta_{n'n}$, имеем:

$$\langle n-3|\hat{x}^3|n\rangle = (\hbar/2m\omega_0)^{3/2}\sqrt{n(n-1)(n-2)},$$

$$\langle n-1|\hat{x}^3|n\rangle = (\hbar/2m\omega_0)^{3/2}\,3n^{3/2},$$

$$\langle n+1|\hat{x}^3|n\rangle = (\hbar/2m\omega_0)^{3/2}\,3(n+1)^{3/2},$$

$$\langle n+3|\hat{x}^3|n\rangle = (\hbar/2m\omega_0)^{3/2}\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)}\,. \tag{9}$$

Лишь перечисленные здесь матричные элементы оператора $\hat{x}^3$ могут быть отличны от нуля.; в этом перечне отсутствуют диагональные элементы, что согласуется с (5). Используя (4) и (9) в формуле для поправки к энергии второго порядка по α, получаем (сумма содержит четыре слагаемых):

$$\sum_{n'\neq n}\frac{\left|\langle n'|\alpha\hat{x}^3|n\rangle\right|^2}{\varepsilon_n^{(0)}-\varepsilon_{n'}^{(0)}} = -\frac{15}{4}\,\frac{\alpha^2}{\hbar\omega_0}\left(\frac{\hbar}{m\omega_0}\right)^3\left(n^2+n+\frac{11}{30}\right). \tag{10}$$

Для вычисления поправки к энергии первого порядка по β надо найти диагональные матричные элементы оператора $\beta\hat{x}^4$. Применяя к обеим сторонам равенства (8) оператор (6) и следя теперь только теми членами, которые могут дать вклад в диагональный матричный элемент оператора $\hat{x}^4$, в итоге найдем:

$$\beta\langle n|\hat{x}^4|n\rangle = \frac{3\beta}{2}\left(\frac{\hbar}{m\omega_0}\right)^2\left(n^2+n+1/2\right). \tag{11}$$

Суммируя (4), (10) и (11), получаем следующее приближенное выражение для уровней энергии ангармонического осциллятора:

$$\varepsilon_n = \hbar\omega_0\left(n+\frac{1}{2}\right) - \frac{15}{4}\,\frac{\alpha^2}{\hbar\omega_0}\left(\frac{\hbar}{m\omega_0}\right)^3\left(n^2+n+\frac{11}{30}\right) + \frac{3\beta}{2}\left(\frac{\hbar}{m\omega_0}\right)^2\left(n^2+n+\frac{1}{2}\right).$$

9.4. Энергию частицы с зарядом q в однородном электрическом поле $\mathbf{E}$ будем рассматривать как оператор возмущения $\hat{V}$:

$$\hat{V} = -q\mathbf{E}\cdot\hat{\mathbf{r}}\,. \tag{1}$$

Направим ось z вдоль $\mathbf{E}$; тогда

$$\hat{V} = -qE\,\hat{z}\,. \tag{2}$$

Стационарные состояния частицы в невозмущенном потенциальном поле $U(r)$ характеризуются квантовыми числами n_r, l, m:

$$\psi_{n_r lm}(\mathbf{r}) \;=\; R_{n_r l}(r)\,Y_{lm}(\theta,\varphi)\,. \tag{3}$$

Сначала рассмотрим диагональные матричные элементы оператора возмущения (2):

$$\left\langle n_r lm\middle|\hat{V}\middle|n_r lm\right\rangle \;=\; -qE\left\langle n_r lm\middle|\hat{z}\middle|n_r lm\right\rangle. \tag{4}$$

Эти матричные элементы обращаются в нуль:

$$\left\langle n_r lm\middle|\hat{z}\middle|n_r lm\right\rangle \;=\; \int d^3\mathbf{r}\; z\left|\psi_{n_r lm}(\mathbf{r})\right|^2 \;=\; 0\,. \tag{5}$$

В том, что интеграл (5) равен нулю, проще всего убедиться с помощью следующих соображений. Как известно, по отношению к инверсии координатных переменных ($\mathbf{r}\to-\mathbf{r}$) состояния с определенной величиной орбитального момента l обладают определенной четностью, $(-1)^l$, и, следовательно, функция $\left|\psi_{n_r lm}\right|^2$ четна. Так как z меняет свой знак при замене в (5) переменных интегрирования $\mathbf{r}\to-\mathbf{r}$, то имеющаяся под интегралом функция $z\left|\psi_{n_r lm}\right|^2$ нечетна, и интеграл должен обратиться в нуль.

Невозмущенные уровни энергии частицы $\varepsilon_{n_r,l}$ обладают $(2l+1)$-кратным вырождением по магнитному квантовому числу m. Поэтому

теперь необходимо найти недиагональные по m матричные элементы возмущения и выяснить, не следует ли использовать методы теории возмущений с вырождением. Учитывая равенства, связывающие друг с другом декартовы и сферические координаты,

$$x = r\sin\theta\cos\varphi, \qquad y = r\sin\theta\sin\varphi, \quad z = r\cos\theta, \tag{6}$$

заметим, что

$$x \pm iy \;=\; r\sin\theta e^{\pm i\varphi} \;=\; \mp r\sqrt{8\pi/3}\,Y_{1,\pm 1},\; z \;=\; r\sqrt{4\pi/3}\,Y_{1,0}. \tag{7}$$

В силу (7) угловая часть функции $z\psi_{n_r lm}$ равна $Y_{1,0}\,Y_{lm}$ и ее можно формально рассматривать как величину, аналогичную волновой функции произведения состояний вида

$$\left|1,0\right\rangle \otimes \left|l,m\right\rangle \equiv \left|1,0;\,l,m\right\rangle.$$

Подобная аналогия основывается на том, что указанное произведение векторов состояния и функция $z\psi_{n_r lm}$ обладают одинаковым поведением по отношению к операторам вращений. Тогда должно иметь место следующее соотношение пропорциональности

$$\left\langle n_r' l' m' \middle| \hat{z} \middle| n_r l m \right\rangle \;\sim\; \left\langle l', m' \middle| 1,0;\,l,m \right\rangle. \tag{8}$$

Согласно правилу сложения моментов вектор состояния $\left|1,0;\,l,m\right\rangle$ является одним из базисных векторов в разложении состояний $\left|l',m'\right\rangle$ с суммарным моментом l', то есть – состояний с проекцией момента

$$m' = m_1 + m_2 \tag{9}$$

и величиной момента

$$l' \;=\; l_1 + l_2,\; l_1 + l_2 - 1, \ldots, \left|l_1 - l_2\right|. \tag{10}$$

Следовательно, состояние $\left|1,0;\,l,m\right\rangle$, в свою очередь, допускает разложение по состояниям $\left|l',m'\right\rangle$ со значениями l' и m', указанными в (10) и (9). Положив $m_1 = 0$, $m_2 = m$, $l_1 = 1$, $l_2 = l$, мы заключаем, таким образом, что правая сторона соотношения (8) может быть отлична от нуля только при $m' = m$ и $l' = l+1, l, l-1$. Этот вывод сделан лишь с учетом свойств

состояний по отношению к вращениям, но еще следует принять во внимание четность состояний, характеризующую их поведение при инверсии координат (операция инверсии является дискретной и не сводится к какой-либо последовательности вращений). Четность состояний $|l',m'\rangle$ и $|l_1,m_1\rangle\otimes|l_2,m_2\rangle=|l_1,m_1;l_2,m_2\rangle$ есть $(-1)^{l'}$ и $(-1)^{l_1+l_2}$, соответственно. Состояния с различной четностью взаимно ортогональны, поэтому правая сторона (8) обращается в нуль при $l'=l$. Другими словами, матричный элемент (8) может быть не равен нулю только для состояний с противоположной четностью.

Таким образом, мы приходим к следующим *правилам отбора* для матричных элементов оператора координаты z:

$$z: \qquad m'=m, \qquad l' \;=\; l+1,\; l-1. \tag{11}$$

Заодно отметим, что угловая часть произведения $(x\pm iy)\psi_{n_r lm}$ равна $Y_{1,\pm1}\,Y_{lm}$. Поэтому аналогичным путем легко придти и к правилам отбора для матричных элементов $\langle l',m'|(\hat{x}\pm i\hat{y})|l,m\rangle$:

$$x+iy: \qquad m'=m+1, \;\; l' \;=\; l+1,\; l-1, \tag{12}$$

$$x-iy: \qquad m'=m-1, \;\; l' \;=\; l+1,\; l-1. \tag{13}$$

Правила отбора – это необходимые условия, при которых матричные элементы могут быть отличны от нуля. Можно показать [1,10], что правила отбора (11)–(13) верны не только для операторов координат, но и для операторов любой векторной величины, проекции которой при поворотах и инверсии преобразуются аналогично компонентам радиус-вектора **r** (такие векторы называют полярными).

Согласно (11) недиагональные по m матричные элементы возмущения (2) равны нулю, и поэтому вырождение уровней энергии $\varepsilon_{n_r,l}$ по m в данной задаче не ведет к необходимости использовать теорию возмущений с вырождением. Кроме того, в условии задачи предполагается отсутствие вырождения по l. С учетом (5) мы заключаем, что в первом приближении поправки к энергии равны нулю.

Таким образом, изменение энергетических уровней $\varepsilon_{n_r,l}$ следует рассматривать во втором порядке по электрическому полю. Поправки к

энергии второго порядка определяются формулой

$$\varepsilon_k^{(2)} = \sum_{k' \neq k} \frac{\left|\langle k'|\hat{V}|k\rangle\right|^2}{\varepsilon_k^{(0)} - \varepsilon_{k'}^{(0)}} \equiv -\frac{1}{2}\beta_k E^2, \tag{14}$$

где

$$\beta_k = -2q^2 \sum_{k' \neq k} \frac{\left|\langle k'|\hat{z}|k\rangle\right|^2}{\varepsilon_k^{(0)} - \varepsilon_{k'}^{(0)}}, \tag{15}$$

k означает совокупность квантовых чисел n_r, l, m; роль невозмущенных значений энергии $\varepsilon_k^{(0)}$ играют уровни $\varepsilon_{n_r,l}$. Коэффициент β_k представляет собой *поляризуемость* k-го стационарного состояния рассматриваемой здесь атомной системы (частицы в поле $U(r)$, создаваемом закрепленным в начале координат центром притяжения). Действительно, определим дипольный электрический момент системы формулой $\mathbf{d} = q\mathbf{r}$, так что

$$\hat{d}_z = q\hat{z} \tag{16}$$

и

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - E\hat{d}_z. \tag{17}$$

Тогда

$$\frac{\partial \hat{H}}{\partial E} = -\hat{d}_z,$$

и в соответствии с результатом (7) задачи 3.13 имеем:

$$-\langle k|\hat{d}_z|k\rangle = \partial\varepsilon_k / \partial E. \tag{18}$$

Подставив в правую часть (18) найденное во втором порядке теории возмущений выражение для собственных значений ε_k гамильтониана $\hat{H}$

$$\varepsilon_k = \varepsilon_k^{(0)} - \frac{1}{2}\beta_k E^2, \tag{19}$$

найдем, что в k-ом стационарном состоянии индуцируемый направленным вдоль z полем $\mathbf{E}$ усредненный дипольный момент системы есть

$$\langle d_z \rangle = \beta_k E \,. \tag{20}$$

Это равенство и характеризует величину β_k как поляризуемость системы.

Для основного состояния ($n_r = 0$, $l = 0$, $m = 0$) знаменатель в (15) отрицателен и, следовательно, поляризуемость β_0 основного состояния положительна, уровень энергии основного состояния во внешнем электрическом поле смещается вниз. Конечно, поправка к энергии основного состояния во втором порядке теории возмущений отрицательна при любом виде возмущения.

В выражении (15) для поляризуемости состояния с квантовыми числами n_r, l, m отличны от нуля, согласно (11), матричные элементы $\langle n_r', l \pm 1, m | \hat{z} | n_r, l, m \rangle$ (если $l = 0$, то допустимым будет лишь $l' = 1$). Они зависят от квантовых чисел рассматриваемого состояния, поэтому от этих чисел, в частности от m, зависят поляризуемость и энергетический сдвиг (14). Следовательно, внешнее электрическое поле $\mathbf{E}$ снимает вырождение энергетических уровней по m. Однако такое снятие вырождения не может быть полным. Действительно, гамильтониан с потенциалом $U(r) - qEz$ инвариантен к отражению в любой плоскости, проходящей через ось z. Поэтому стационарные состояния, получающиеся друг из друга указанным отражением, физически эквивалентны и должны иметь одну и ту же энергию. Но поскольку момент импульса является аксиальным вектором, а не полярным, такие состояния обладают противоположными значениями проекции момента $l_z \equiv m$. Значит, уровни энергии возмущенных состояний, возникающие при расщеплении вырожденного по m уровня $\varepsilon_{n_r, l}$ под действием приложенного извне электрического поля, для противоположных значений m совпадают.

Изменение энергии стационарных состояний атомной системы под влиянием внешнего электрического поля получило название *эффекта Штарка*.

В задаче 3.4 упоминалось о притяжении на большом расстоянии R между атомом водорода H и ионом H^+ (протоном), которое возникает за счет индуцируемого у атома H электрического дипольного момента. Теперь мы можем обсудить этот вопрос с использованием полученных выше формул (15) и (19). Прежде всего заметим, что в случае водородоподобных атомов (то есть для частицы в кулоновском поле $U(r)$) имеется так называемое *случайное вырождение* энергетических уровней по квантовому числу l, и, следовательно, для этих уровней можно ожидать возникновения линейного по электрическому полю эффекта Штарка (см. задачу 9.5). Кроме того, при учете спин-орбитального взаимодействия в расчете эффекта Штарка следует принимать во внимание тонкую структуру уровней. Однако эти замечания не актуальны для основного состояния атома водорода ($1s$-состояние), поскольку $1s$-уровень не имеет орбитального вырождения и не испытывает спин-орбитального расщепления.

Электрическое поле

$$E = |e| / R^2, \tag{21}$$

создаваемое около пребывающего в основном состоянии атома H находящимся на большом расстоянии ($R >> a_B$) ионом H^+ можно считать практически однородным. Подставив (21) в (19), для энергии $u(R)$ взаимодействия H и H^+, представляющей собой поправку к энергии атома водорода в поле (21), получим:

$$u(R) = -\frac{\beta e^2}{2R^4}, \tag{22}$$

где β – поляризуемость атома водорода в основном состоянии. В силу неравенства $\beta > 0$ энергия (22) отрицательна, и, следовательно, соответствует притяжению между H и H^+. Формула (15) с $q = e$ для поляризуемости атома водорода в основном состоянии приводит к значению

$$\beta = \frac{9}{2} a_B^3. \tag{23}$$

Вывод результата (23) и подробный анализ эффекта Штарка в атоме водорода заинтересованный читатель найдет в [1].

9.5. Кратность вырождения уровня $\varepsilon_{n=2}$ атома водорода без учета спина электрона равна четырем: этому уровню принадлежат три $2p$-состояния ($l=1$) и одно $2s$-состояние ($l=0$). Пронумеруем указанные состояния, например, следующим образом:

$$|1\rangle = |n=2, l=0, m=0\rangle, \qquad |2\rangle = |n=2, l=1, m=0\rangle,$$
$$|3\rangle = |n=2, l=1, m=1\rangle, \qquad |4\rangle = |n=2, l=1, m=-1\rangle. \tag{1}$$

Для определения поправок $\varepsilon^{(1)}$ первого приближения к энергии состояний (1) при наличии возмущения

$$\hat{V} = -qE\,\hat{z} \tag{2}$$

в соответствии с формулами теории возмущений с вырождением следует найти матрицу $V_{kk'}$ оператора (2) в базисе (1) и решить секулярное уравнение

$$\det(V_{kk'} - \varepsilon^{(1)}\,\delta_{kk'}) = 0. \tag{3}$$

Воспользуемся правилами отбора, приведенными в задаче 9.4. Согласно формуле (11) указанной задачи можно утверждать, что не равными нулю могут быть лишь два из шестнадцати интересующих нас матричных элементов:

$$\langle 2|\hat{z}|1\rangle^* = \langle 1|\hat{z}|2\rangle \neq 0. \tag{4}$$

Вычислим величины (4). Напомним читателю вид нескольких первых радиальных функций $R_{nl}(r)$ в задаче о стационарных состояниях в дискретной части энергетического спектра атома водорода:

$$1s \qquad R_{10} = (2/\sqrt{a^3})\; e^{-\rho},$$

$$2s \qquad R_{20} = (1/\sqrt{2a^3})(1-\rho/2)\; e^{-\rho/2},$$

$$2p \qquad R_{21} = (1/2\sqrt{6a^3})\, e^{-\rho/2}\, \rho,$$

где $a = a_B$ – радиус Бора, $\rho = r/a$. Таким образом, волновая функция состояния $|1\rangle$ равна

$$R_{20}\, Y_{00} = (1/\sqrt{8\pi a^3})(1-\rho/2)\, e^{-\rho/2}. \tag{5}$$

Волновая функция для $\hat{z}|2\rangle$ с учетом равенства $z = r\cos\theta = r\sqrt{4\pi/3}\, Y_{10}$ имеет вид

$$r\sqrt{4\pi/3}\, Y_{10}\, R_{21}\, Y_{10} \;=\; \sqrt{\pi/18a}\; e^{-\rho/2}\; \rho^2\; (Y_{10})^2. \tag{6}$$

Перемножив (5) и (6) и интегрируя получившееся выражение по радиальной и угловым координатам, получим:

$$\langle 1|\hat{z}|2\rangle \;=\; \frac{a}{12} \int_0^\infty d\rho\, \rho^4\, (1-\rho/2)\; e^{-\rho} \int d\Omega\, (Y_{10})^2. \tag{7}$$

В силу вещественности величины Y_{10} и условия

$$\int d\Omega\, Y^*_{l'm'}\, Y_{lm} = \delta_{l'l}\, \delta_{m'm} \tag{8}$$

интеграл по углам в (7) равен единице. Радиальный интеграл в (7) вычисляется с помощью формулы

$$\int_0^\infty d\rho\, \rho^k\, e^{-\rho} \;=\; \Gamma(k+1) \;=\; k!; \tag{9}$$

он равен -36. Таким образом,

$$\langle 2|\hat{z}|1\rangle = \langle 1|\hat{z}|2\rangle = -3a \tag{10}$$

и

$$V_{21} = V_{12} = 3a\, eE, \;\; \text{остальные } V_{kk'} = 0. \tag{11}$$

Тот факт, что все матричные элементы оператора возмущения, связанные с состояниями $|3\rangle$ и $|4\rangle$, равны нулю, означает, что эти два состояния уже являются правильными состояниями, и соответствующее им значение энергии ($\varepsilon_{n=2}$) не испытывает изменения в первом приближении

по электрическому полю. Для определения поправок $\varepsilon^{(1)}$ к энергии состояний $|1\rangle$ и $|2\rangle$ решаем уравнение

$$\det\begin{pmatrix} -\varepsilon^{(1)} & 3aeE \\ 3aeE & -\varepsilon^{(1)} \end{pmatrix} = 0. \qquad (12)$$

Оно имеет два корня:

$$\varepsilon^{(1)} = \pm 3aeE. \qquad (13)$$

Таким образом, внешнее электрическое поле расщепляет четырехкратно вырожденный уровень атома водорода с главным квантовым числом $n = 2$ на три уровня. Один из этих уровней двукратно вырожден и в первом порядке теории возмущений равен своему невозмущенному значению; два других уровня отделены от него энергетическими интервалами (13), увеличивающимися пропорционально напряженности приложенного извне электрического поля (линейный эффект Штарка).

Этот результат применим для случая не слишком слабого поля, когда интервалы (13) намного превышают энергию спин-орбитального расщепления, так что последней можно пренебречь. Но поле не должно быть и слишком сильным, поскольку теория возмущений применима только до тех пор, пока определяемые ею поправки к уровням энергии малы по сравнению с исходными интервалами между уровнями. Кроме того, в очень сильном поле картина эффекта Штарка усложняется явлением ионизации атома за счет туннельного эффекта. Действительно, потенциал вида $-e^2/r - eEz$ в одном из направлений вдоль оси z имеет форму барьера. С некоторой вероятностью, исчезающе малой при $E \to 0$, электрон может проникнуть сквозь барьер, так что при наличии внешнего электрического поля ($E \neq 0$) каждый дискретный уровень атома, строго говоря, оказывается квазистационарным и характеризуется некоторой шириной Γ, малой в меру малости туннельной проницаемости барьера. Малой ширине уровня отвечает большое время жизни ($\tau \sim \hbar/\Gamma$) квазистационарного состояния, поэтому с практической точки зрения состояния атома в не слишком сильном поле можно с хорошей точностью считать стационарными. Однако с ростом напряженности внешнего поля

E высота и ширина потенциального барьера уменьшаются, и вероятность выхода электрона из атома посредством туннельного эффекта существенно увеличивается; проникнув сквозь барьер, электрон будет ускоряться внешним полем E и удалится от образовавшегося иона.

9.6. Гамильтониан рассматриваемой атомной системы в пренебрежении взаимодействием магнитных моментов электрона и «иона», создающего потенциал $U(r)$, имеет вид

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 + U(r) + \alpha(r)\hat{\mathbf{l}}\cdot\hat{\mathbf{s}} - \frac{\mu_e}{s}\hat{\mathbf{s}}\cdot\mathbf{B}. \qquad (1)$$

Здесь масса m, спин $s = 1/2$, магнитный момент $\mu_e = -1{,}00116\,\mu_B$ и электрический заряд $e < 0$ относятся к электрону.

Направим ось z вдоль $\mathbf{B}$. При этом векторный потенциал $\mathbf{A}$ однородного магнитного поля ($\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$) целесообразно выбрать в форме

$$A_x = -yB/2, \qquad A_y = xB/2, \qquad A_z = 0. \qquad (2)$$

Такой выбор векторного потенциала позволяет выделить в гамильтониане (1) слагаемое, пропорциональное оператору проекции орбитального момента импульса электрона

$$\hat{l}_z = -i(x\,\partial/\partial y - y\,\partial/\partial x). \qquad (3)$$

Действительно, раскрыв в (1) скобки и учитывая равенства (2),(3), получим:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(r) + \alpha(r)\hat{\mathbf{l}}\cdot\hat{\mathbf{s}} - \frac{e\hbar}{2mc}B\hat{l}_z - 2\mu_e B\hat{s}_z + \frac{e^2}{2mc^2}\mathbf{A}^2. \qquad (4)$$

Последнее слагаемое в (4) в случае достаточно слабого магнитного поля, очевидно, следует трактовать, как квадратичное по магнитному полю возмущение,

$$\frac{e^2}{2mc^2}\mathbf{A}^2 = \frac{e^2B^2}{8mc^2}(x^2 + y^2), \qquad (5)$$

а два предшествующих члена в (4) будут играть роль возмущения,

линейного по магнитному полю. Учитывая, что заряд электрона отрицателен ($e = -|e|$) и что $|\mu_e| \approx |e|\hbar/2mc \equiv \mu_B$, линейный по магнитному полю оператор возмущения можно представить в форме

$$\hat{V} = \mu_B B\left(\hat{l}_z + 2\frac{|\mu_e|}{\mu_B}\hat{s}_z\right) \approx \mu_B B(\hat{l}_z + 2\hat{s}_z). \qquad (6)$$

Сравним друг с другом величины отдельных слагаемых гамильтониана. Предположим, что спектр уровней невозмущенного гамильтониана, представляющего собой сумму первых трех членов в (4), характеризуется энергетическим масштабом $\sim Ry \sim 10^{-11}$ эрг. Пусть $B \sim 10^5$ Гс – порядок максимальных значений магнитного поля, доступных в обычных лабораторных условиях при измерении энергетических спектров атомов. Тогда $\mu_B B \sim 10^{-15}$ эрг $\sim 10^{-4} Ry$, причем величина квадратичного по полю члена (5) при $\langle x^2 + y^2 \rangle \sim a_B^2$ составит всего 10^{-20} эрг. Таким образом, оператор (6) действительно можно рассматривать как малое возмущение, а квадратичным по полю слагаемым (5) в рассматриваемых условиях следует вообще пренебречь.

Заметим в то же время, что найденный порядок величины энергии (6) оказывается сопоставимым с масштабом интервалов тонкой структуры ($Ry(e^2/\hbar c)^2 \sim 10^{-4} Ry$), обусловленной релятивистскими поправками к уровням энергии атома. В гамильтониане (4) такие поправки представлены оператором спин-орбитального взаимодействия $\alpha(r)\hat{\mathbf{l}}\cdot\hat{\mathbf{s}}$. В связи с этим необходимо различать два предельных случая: а) при слабом магнитном поле, когда энергия $\mu_B B$ мала по сравнению с интервалами тонкой структуры уровней, невозмущенными состояниями будут состояния $|j,m\rangle$ с определенным полным моментом j, равным квантово-механической сумме орбитального момента l и спина электрона $s = 1/2$; б) в сильных магнитных полях, когда энергия $\mu_B B$ велика по сравнению с интервалами тонкой структуры, можно пренебречь спин-орбитальным взаимодействием и в качестве невозмущенных состояний рассматривать состояния $|l,m_l\rangle \otimes |s = 1/2, m_s\rangle$, где m_l и m_s – проекции на ось z орбитального

момента электрона и его спина, соответственно. Обсудим для обоих случаев характер поправок к энергии, возникающих в первом порядке по возмущению (6).

а) *Слабое поле*: $\mu_B B << \left|\varepsilon_{nj} - \varepsilon_{nj'}\right|$, где $\left|\varepsilon_{nj} - \varepsilon_{nj'}\right|$ – разность соседних значений энергии в семействе уровней с одним и тем же радиальным квантовым числом n, расщепленных за счет спин-орбитального взаимодействия (предполагается, что такая разность существенно меньше интервала между уровнями с различными значениями n). Магнитное поле нарушает сферическую симметрию исходной системы (остается лишь аксиальная симметрия относительно оси z), поэтому следует ожидать, что каждый $(2j+1)$-кратно вырожденный по m уровень ε_{nj} испытывает расщепление, малое в меру малости $\mu_B B$, и вырождение по m снимается. Интересуясь именно этим расщеплением уровня ε_{nj}, мы должны найти матричные элементы оператора (6) по $(2j+1)$ состояниям $\left|j,m\right\rangle$ с заданным полным моментом j и всевозможными значениями проекции полного момента $m = m_l + m_s$, причем заданными являются также орбитальный момент l и спин $s = 1/2$. Каждое такое состояние имеет вид суммы

$$\left|j,m\right\rangle = \sum_{m_s} C^{jm}_{l\,m_l\,s\,m_s} \left|l,m_l\right\rangle \otimes \left|s,m_s\right\rangle \qquad (7)$$

по тем значениям m_s (и m_l), для которых $m_l + m_s$ равно значению m, указанному в левой стороне равенства (7).

Запишем присутствующую в (6) комбинацию операторов в форме

$$\hat{l}_z + 2\hat{s}_z = \hat{J}_z + \hat{s}_z \ , \qquad (8)$$

так что

$$\hat{V} = \mu_B B\,(\hat{J}_z + \hat{s}_z)\,. \qquad (9)$$

Матрица оператора проекции полного момента $\hat{J}_z = \hat{l}_z + \hat{s}_z$ в базисе (7) диагональна:

$$\left\langle j,m'\middle|\hat{J}_z\middle|j,m\right\rangle = m\,\delta_{m'm}\,. \qquad (10)$$

Покажем, что матрица оператора $\hat{s}_z$, определяемая по состояниям (7), также диагональна (то есть оператор $\hat{s}_z$ может иметь недиагональные элементы только для состояний с разными значениями j, но не для состояний с одинаковыми j и разными m). Скалярно умножив левую и правую стороны равенства

$$\hat{s}_z\big|j,m\big\rangle = \sum_{m_s} C^{j\,m}_{l\,m_l\,s\,m_s}\ \big|l,m_l\big\rangle\otimes\hat{s}_z\big|s,m_s\big\rangle = \sum_{m_s} C^{j\,m}_{l\,m_l\,s\,m_s}\ m_s\big|l,m_l\big\rangle\otimes\big|s,m_s\big\rangle$$

на вектор состояния

$$\big|j,m'\big\rangle = \sum_{m'_s} C^{j\,m'}_{l\,m'_l\,s\,m'_s}\ \big|l,m'_l\big\rangle\otimes\big|s,m'_s\big\rangle, \tag{11}$$

где $m'_l + m'_s = m'$, получим

$$\big\langle j,m'\big|\hat{s}_z\big|j,m\big\rangle = \sum_{m'_s}\sum_{m_s} C^{j\,m'\,*}_{l\,m'_l\,s\,m'_s}\ C^{j\,m}_{l\,m_l\,s\,m_s}\ m_s\big\langle l,m'_l\big|l,m_l\big\rangle\big\langle s,m'_s\big|s,m_s\big\rangle =$$

$$= \sum_{m'_s}\sum_{m_s} C^{j\,m'\,*}_{l\,m'_l\,s\,m'_s}\ C^{j\,m}_{l\,m_l\,s\,m_s}\ m_s\ \delta_{m'_l m_l}\ \delta_{m'_s m_s}. \tag{12}$$

Если $m' \neq m$, то произведения дельта-символов в правой стороне (12) не могут отличаться от нуля, и матричный элемент (12) исчезает. При $m' = m$ не равные нулю слагаемые с $m'_l = m_l$ и $m'_s = m_s$ в правой стороне (12) существуют, и мы получим:

$$\big\langle j,m\big|\hat{s}_z\big|j,m\big\rangle = \sum_{m_s}\big|C^{j\,m}_{l\,m_l\,s\,m_s}\big|^2\, m_s\ . \tag{13}$$

Итак, поскольку в базисе (7) с заданным j оператор (9) не имеет недиагональных матричных элементов, то для поправок первого приближения $\varepsilon^{(1)}$ к уровню ε_{nj} не возникает. Следовательно, эти поправки даются диагональными матричными элементами оператора возмущения (9):

$$\varepsilon^{(1)}_{jm} = \big\langle j,m\big|(\hat{J}_z + \hat{s}_z)\big|j,m\big\rangle = \mu_B B\,(m + \big\langle s_z\big\rangle). \tag{14}$$

Величина $\langle s_z \rangle$, в принципе, может быть вычислена по формуле (13), однако, как можно показать [1], для нее существует более простое выражение:

$$\langle s_z \rangle \;=\; m\,\frac{j(j+1)-l(l+1)+s(s+1)}{2j(j+1)}. \qquad (15)$$

С учетом (15) результат для энергии расщепления (14) запишется в виде:

$$\varepsilon^{(1)}_{jlm} \;=\; g\,\mu_B B\,m, \qquad m = j,\, j-1,\, ...,\, -j, \qquad (16)$$

где

$$g \;=\; 1 \;+\; \frac{j(j+1)-l(l+1)+s(s+1)}{2j(j+1)} \qquad (17)$$

есть так называемый *множитель Ланде*.

В s-состояниях ($l=0$) полный момент равен спину, и, согласно формуле (17), $g=2$. При $l \geq 1$ для случая $s=1/2$ полный момент принимает только два значения, $j = l \pm 1/2$, и формула (17) дает:

$$g = 1 \pm (2l+1)^{-1}. \qquad (18)$$

По аналогии с результатом (18) задачи 9.4, взятую с противоположным знаком производную от энергии атома по магнитному полю следует интерпретировать как среднее значение магнитного момента атома. Дифференцируя по B приведенное выше выражение (16), найдем, что атомная система, находящаяся в состоянии с определенным значением m проекции полного момента импульса на некоторое направление z, обладает магнитным моментом

$$\langle \mu_z \rangle = -g\,\mu_B\,m \qquad (19)$$

в указанном направлении.

б) В случае *сильного поля* ($\mu_B B >> \left|\varepsilon_{nj} - \varepsilon_{nj'}\right|$) можно пренебречь в нулевом приближении тонкой структурой уровней $\varepsilon_{n_r l}$, считая стационарными состояния

$$\left|n_r, l, m_l\right\rangle \otimes \left|s, m_s\right\rangle. \qquad (20)$$

В то же время мы предполагаем, что $\mu_B B << \left|\varepsilon_{n_r' l'} - \varepsilon_{n_r l}\right|$, и, следовательно, теория возмущений с оператором (6) все еще применима. В базисе (20) оператор возмущения (6) имеет только диагональные матричные элементы:

$$\langle V \rangle = \mu_B B \langle n_r, l, m_l | \hat{l}_z | n_r, l, m_l \rangle \langle s, m_s | s, m_s \rangle +$$

$$+ 2\mu_B B \langle n_r, l, m_l | n_r, l, m_l \rangle \langle s, m_s | \hat{s}_z | s, m_s \rangle = \mu_B B (m_l + 2m_s). \quad (21)$$

Они и являются поправками первого приближения по магнитному полю, определяющими расщепление уровня $\varepsilon_{n_r l}$:

$$\varepsilon^{(1)}_{m_l m_s} = \mu_B B (m_l + 2m_s). \quad (22)$$

К каждому из найденных значений энергии $\varepsilon_{n_r l} + \varepsilon^{(1)}_{m_l m_s}$ теперь можно добавить соответствующую поправку первого приближения по спин-орбитальному взаимодействию. Такие поправки представляют собой средние значения оператора $\alpha(r)\hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{s}}$ в состояниях (20). Поскольку волновая функция орбитального состояния $|n_r, l, m_l\rangle$ имеет вид произведения радиальной и угловой частей, $R_{n_r l}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$, то при усреднении оператора $\alpha(r)\hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{s}}$ по состояниям (20) или по любым нормированным линейным комбинациям таких состояний с неизменными квантовыми числами n_r, l происходит замена функции $\alpha(r)$ некоторой постоянной A, зависящей от квантовых чисел n_r, l:

$$A = \int_0^\infty dr\, r^2 \left|R_{n_r l}(r)\right|^2 \alpha(r). \quad (23)$$

Имея это ввиду, можно записывать оператор спин-орбитального взаимодействия в форме

$$A\hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{s}} = A(\hat{l}_x \hat{s}_x + \hat{l}_y \hat{s}_y + \hat{l}_z \hat{s}_z) \quad (24)$$

и при вычислении его средних значений (или матричных элементов по любым состояниям с заданными n_r, l) учитывать лишь угловую и

спиновую части рассматриваемых состояний. Таким образом, интересующее нас среднее значение энергии спин-орбитального взаимодействия есть

$$\left\langle \alpha(r)\hat{\mathbf{l}}\cdot\hat{\mathbf{s}}\right\rangle = A\langle l,m_l|\hat{l}_x|l,m_l\rangle\langle s,m_s|\hat{s}_x|s,m_s\rangle +$$

$$+ A\langle l,m_l|\hat{l}_y|l,m_l\rangle\langle s,m_s|\hat{s}_y|s,m_s\rangle +$$

$$+ A\langle l,m_l|\hat{l}_z|l,m_l\rangle\langle s,m_s|\hat{s}_z|s,m_s\rangle. \qquad (25)$$

Как известно, средние значения x- и y- проекций момента в состояниях с определенным значением z-проекции момента импульса равны нулю. Поэтому выражение (25) сводится только к вкладу последнего члена и равно Am_lm_s. Добавив эту поправку к (22), находим окончательно, что изменение уровня энергии $\varepsilon_{n_r l}$ в сильном магнитном поле определяется соотношением

$$\Delta\varepsilon_{n_r l} = \mu_B B\,(m_l + 2m_s) + Am_lm_s. \qquad (26)$$

В качестве простейшего примера рассмотрим эту формулу в применении к двукратно вырожденному по спину s-уровню электрона, то есть – к дублету $s_{1/2}$ состояний с $j = s = 1/2$, $l = 0$. В этом случае $m_l = 0$, проекция полного момента равна проекции спина ($m = m_s$), так что формула (26) и соотношения (16), (17) дают один и тот же результат:

$$s_{1/2}: \qquad \Delta\varepsilon = 2\mu_B B\,m, \qquad m = \pm 1/2. \qquad (27)$$

Таким образом, электронный s-уровень в магнитном поле B испытывает расщепление на два уровня энергии стационарных состояний, отделенных друг от друга энергетическим интервалом $\varepsilon_\uparrow - \varepsilon_\downarrow = 2\mu_B B$. Такая же картина была получена в задаче 8.5. Следует отметить, что при учете сверхтонкой структуры $s_{1/2}$-дублета мы придем к более сложному результату (см. задачу 9.7); в задаче 9.8 обсуждается еще один достаточно сложный пример – влияние магнитного поля на уровни энергии $p_{1/2}$- и $p_{3/2}$-состояний электрона.

Изменение энергетических уровней атома под действием внешнего магнитного поля называют *эффектом Зеемана*. В частности, такой термин применяют, говоря о расщеплении уровней, описываемом формулами (16), (17); при этом возникающее в сильных магнитных полях отклонение энергетического спектра от предсказываемого формулами (16), (17) называют *эффектом Пашена–Бака*.

Проведенное выше рассмотрение касалось модели атома с одним электроном, но аналогичные результаты удается получить и для сложных атомов, содержащих несколько электронов [1]. Несмотря на то, что электроны образуют сложную систему взаимодействующих друг с другом частиц, стационарные состояния системы электронов в атоме в силу сферической симметрии кулоновского поля ядра можно в определенном приближении характеризовать достаточно простым образом – суммарным орбитальным моментом L, суммарным спином электронов S и полным моментом импульса J. Не останавливаясь на обосновании этих утверждений, опишем лишь способ обозначения атомных уровней энергии (называемых также спектральными термами атома). Состояния с различными значениями полного орбитального момента $L = 0,1,2,3,4,...$ обозначаются в той же последовательности символами *S, P, D, F, G*, …. Слева вверху около такого символа указывают число $2S+1$ (называемое мультиплетностью терма и равное числу спиновых состояний атома при данном суммарном спине электронов), а справа внизу – значение полного момента J; например, символом $^2P_{1/2}$ обозначается уровень с $L=1$, $S=1/2$, $J=1/2$. Можно показать, что для сложных атомов в слабом магнитном поле будут справедливы формулы (16), (17), а в сильном поле – (26), если в этих формулах заменить «малые» буквы j, l, s и $m = m_l + m_s$ соответствующими «большими» буквами: J, L, S и $M = M_l + M_s$.

Существенно новый для нас аспект здесь заключается в том, что сложный атом может иметь состояние с равным нулю суммарным спином.

При $S = 0,\ L \neq 0$ множитель Ланде g равен единице. В этом случае расщепление уровня энергии атома магнитным полем называют *нормальным* эффектом Зеемана. При отличном от единицы множителе Ланде расщепление, описываемое формулами (16), (17), называют

аномальным эффектом Зеемана; такое название связано с тем, что до открытия спина электрона наблюдаемый в опытах эффект Зеемана с $g \neq 1$ не удавалось объяснить.

Сложный атом может не иметь ни спина ($S = 0$), ни орбитального момента ($L = 0$), так что и полный момент обращается в нуль ($J = 0$). Тогда линейный по магнитному полю оператор $\mu_B B(\hat{L}_z + 2\hat{S}_z)$, очевидно, не дает смещения уровней ни в каком порядке теории возмущений, поскольку все его матричные элементы исчезают. Для такого состояния атома смещение энергетического уровня в первом неисчезающем приближении равно среднему значению квадратичного по полю возмущения, которое имеет вид суммы вкладов от всех электронов в атоме (индекс i нумерует электроны):

$$\Delta\varepsilon = \frac{e^2}{8mc^2} H^2 \sum_i \left\langle x_i^2 + y_i^2 \right\rangle. \qquad (28)$$

Магнитное поле здесь обозначено посредством H. Поскольку усреднение операторов координат электронов в данном случае проводится в сферически симметричном состоянии атома, то $\left\langle x_i^2 + y_i^2 \right\rangle = \frac{2}{3}\left\langle r_i^2 \right\rangle$. Вычислив магнитный момент атома по формуле $\langle \mu_z \rangle = -\partial\Delta\varepsilon / \partial H$, получим $\langle \mu_z \rangle = \chi H$, где коэффициент χ, представляющий собой магнитную восприимчивость атома в рассматриваемом состоянии, как видно из (28), определяется следующим соотношением, называемым *формулой Ланжевена*:

$$\chi = -\frac{e^2}{6mc^2} \sum_i \left\langle r_i^2 \right\rangle. \qquad (29)$$

Согласно (29) величина χ отрицательна, то есть атомы с $L = S = 0$ диамагнитны [1].

9.7. При выборе оси z в направлении внешнего магнитного поля **B** оператор энергии взаимодействия спиновых магнитных моментов электрона и протона друг с другом и с внешним магнитным полем имеет вид

$$\hat{V} = C\,\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2 - \mu_e\,\hat{\sigma}_{z1}\,B - \mu_p \hat{\sigma}_{z2}\,B, \qquad (1)$$

где матрицы Паули с номерами 1 и 2 действуют на спиновые состояния электрона и протона, соответственно; $C > 0$ – постоянная, определяющая энергетический масштаб сверхтонкой структуры $1s$-уровня атома водорода (см. задачу 8.8).

Построим матрицу оператора (1) по спиновым состояниям с определенными значениями z-проекции спина обеих рассматриваемых частиц:

$$|1\rangle = \left|\uparrow\right\rangle_1 \otimes \left|\downarrow\right\rangle_2,\ |2\rangle = \left|\downarrow\right\rangle_1 \otimes \left|\uparrow\right\rangle_2,\ |3\rangle = \left|\uparrow\right\rangle_1 \otimes \left|\uparrow\right\rangle_2,\ |4\rangle = \left|\downarrow\right\rangle_1 \otimes \left|\downarrow\right\rangle_2. \qquad (2)$$

В базисе (2) второе и третье слагаемые оператора (1) обладают лишь диагональными матричными элементами, а матрица $\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2$ имеет уже известный нам блочно-диагональный вид (см. формулу (8) в задаче 8.6). Обозначив

$$a = -\mu_e + \mu_p, \qquad b = -\mu_e - \mu_p, \qquad (3)$$

получаем

$$\hat{V} = \begin{pmatrix} -C + aB & 2C & 0 & 0 \\ 2C & -C - aB & 0 & 0 \\ 0 & 0 & C + bB & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C - bB \end{pmatrix}. \qquad (4)$$

В пренебрежении взаимодействием, описываемым оператором (1), состояния (2) обладают одной и той же энергией, то есть в таком приближении $1s$-уровень энергии атома водорода четырехкратно вырожден по спиновым квантовым числам (по z-проекциям спина) электрона и протона. Полагая, что приложенное извне магнитное поле B является достаточно слабым, будем рассматривать оператор (1) в качестве возмущения. Тогда определяемые им поправки первого приближения к $1s$-уровню энергии следует найти как корни $\varepsilon^{(1)}$ секулярного уравнения

$$\det\left(V_{kk'} - \varepsilon^{(1)}\,\delta_{kk'}\right) = 0,$$

где $V_{kk'}$ – элементы матрицы (4). Это уравнение имеет четыре корня:

$$\varepsilon_1^{(1)} = -C + \sqrt{4C^2 + a^2 B^2}\,, \qquad \varepsilon_2^{(1)} = -C - \sqrt{4C^2 + a^2 B^2}\,,$$

$$\varepsilon_3^{(1)} = C + bB\,, \qquad \varepsilon_4^{(1)} = C - bB\,. \tag{5}$$

Таким образом, во внешнем магнитном поле, влияние которого учитывается одновременно с взаимодействием между магнитными моментами электрона и ядра атома, указанное выше вырождение $1s$-уровня энергии полностью снимается. Возникающее при этом расщепление уровня схематически изображено на рис. 9.1. В количественных оценках следует учитывать, что $-\mu_e \approx \mu_B >> \mu_p$ и $a = b + 2\mu_p \approx \mu_B$.

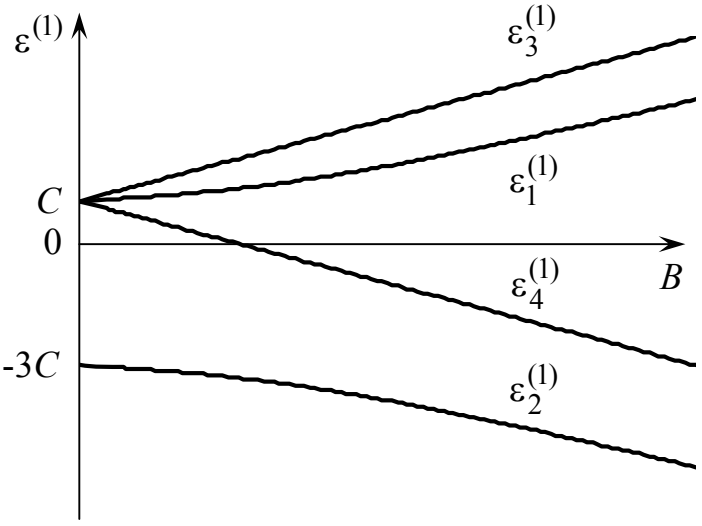

Рис. 9.1

Полученный результат можно пояснить следующим образом. В отсутствие внешнего магнитного поля взаимодействующие друг с другом спин электрона и спин ядра образуют единую спинновую подсистему атома, которая может находиться в синглетном состоянии (с равным нулю суммарным спином и энергией $-3C$) или в одном из вырожденных триплетных состояний (с равным единице суммарным спином и энергией C). В слабом внешнем поле, при $\mu_B B << C$, возникает линейное по полю расщепление энергетического уровня спинового триплета, а энергия синглетного спинового состояния почти не изменяется:

$$\text{триплет:} \quad \begin{cases} \varepsilon_3^{(1)} = C + bB, \\ \varepsilon_1^{(1)} = C, \\ \varepsilon_4^{(1)} = C - bB, \end{cases},$$

$$\text{синглет:} \quad \varepsilon_2^{(1)} = -3C\,, \qquad \mu_B B << C\,. \tag{6}$$

С увеличением магнитного поля, при $\mu_B B >> C$, связь электронного и ядерного магнитного моментов практически разрывается и роль стационарных состояний переходит к состояниям (2), характеризующимся отсутствием корреляции между электронным и ядерным спинами. Этим состояниям отвечают четыре уровня энергии, $-2(\mu_e\sigma_1 + \mu_p\sigma_2)B$, где σ_1 и σ_2 – проекции спинов электрона и протона на направление внешнего магнитного поля, независимо друг от друга принимающие значения $\pm 1/2$. К каждому из этих уровней добавляется поправка (ее достаточно взять в первом приближении), обусловленная взаимодействием магнитных моментов электрона и протона. Такая поправка определяется как диагональный матричный элемент оператора $C\,\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2$ в соответствующем состоянии (2) и равна просто $4C\sigma_1\sigma_2$. Легко видеть, что именно указанные четыре значения энергии и дают формулы (5) при $\mu_B B >> C$:

$$\varepsilon_1^{(1)} = -C + aB\,, \quad \varepsilon_2^{(1)} = -C - aB\,, \quad \varepsilon_3^{(1)} = C + bB\,, \quad \varepsilon_4^{(1)} = C - bB\,. \qquad (7)$$

9.8. Как показано в задаче 9.6, при выборе оси z вдоль направления приложенного извне магнитного поля $\mathbf{B}$ оператор возмущения, линейный по полю и включающий спин-орбитальное взаимодействие, имеет вид:

$$\hat{V} \;=\; A\hat{\mathbf{l}}\cdot\hat{\mathbf{s}} \;+\; \mu_B B(\hat{l}_z + 2\hat{s}_z) \;=\; A\hat{\mathbf{l}}\cdot\hat{\mathbf{s}} \;+\; \mu_B B(\hat{J}_z + \hat{s}_z). \qquad (1)$$

Состояния $p_{1/2}$ и $p_{3/2}$ можно представить в форме линейных комбинаций базисных векторов состояния вида $|l, m_l\rangle \otimes |s, m_s\rangle$:

$$|j, m\rangle \;=\; \sum_{m_s} C^{j\,m}_{l\,m_l\,s\,m_s} \;|l, m_l\rangle \otimes |s, m_s\rangle, \qquad (2)$$

где $s = 1/2$ – спин электрона, $l = 1$ – орбитальный момент электрона в p-состояниях, $m = m_l + m_s$ – проекция суммарного момента импульса электрона. Без учета возмущения (1) перечисленные базисные состояния и любые их линейные комбинации принадлежат одному и тому же шестикратно вырожденному (по m_l и m_s) p-уровню энергии. Для того чтобы найти поправки $\varepsilon^{(1)}$ первого приближения, обусловленные возмущением (1), следует решить секулярное уравнение

$$\det(V_{kk'} - \varepsilon^{(1)}\delta_{kk'}) = 0, \tag{3}$$

где $V_{kk'}$ – матрица 6×6, соответствующая оператору возмущения (1). Эту матрицу можно взять как в «$l m_l s m_s$-представлении» (с базисом $|l, m_l\rangle \otimes |s, m_s\rangle$), так и в «$jmls$-представлении» (с базисом (2)). В первом случае в недиагональную часть матрицы $\hat{V}$ дает вклад лишь член $A\hat{\mathbf{l}}\cdot\hat{\mathbf{s}}$, а во втором – $\mu_B B\hat{s}_z$, поскольку матрицы $\hat{\mathbf{l}}\cdot\hat{\mathbf{s}}$ и $\hat{J}_z$, как нам известно, диагональны в базисе (2). Выберем, например, второй вариант.

Явный вид состояний (2) легко получить с помощью закона сложения моментов, привлекая формулы, которыми определяется действие операторов

$$\hat{J}_\pm = \hat{l}_\pm + \hat{s}_\pm. \tag{4}$$

Так, согласно правилу сложения моментов, в состояние с суммарной проекцией момента $m = 3/2$ вклад может дать лишь $|l = 1, m_l = 1\rangle \otimes |s = 1/2, m_s = 1/2\rangle$ и, следовательно,

$$|j = 3/2, m = 3/2\rangle \;=\; |l = 1, m_l = 1\rangle \otimes |s = 1/2, m_s = 1/2\rangle. \tag{5}$$

Применив к обеим сторонам равенства (5) оператор $\hat{J}_- = \hat{l}_- + \hat{s}_-$, найдем состояние $|j = 3/2, m = 1/2\rangle$, а затем, повторяя подобную процедуру, получим и остальные члены квартета $p_{3/2}$. Состояние $|j = 1/2, m = 1/2\rangle$, как и $|j = 3/2, m = 1/2\rangle$, должно иметь вид линейной комбинации состояний с $m_l = 0, m_s = 1/2$ и $m_l = 1, m_s = -1/2$, так что оно вполне определяется условиями нормировки и ортогональности к предварительно найденному состоянию $|j = 3/2, m = 1/2\rangle$:

$$|1/2, 1/2\rangle \;=\; \frac{1}{\sqrt{3}}|m_l = 0\rangle \otimes |m_s = 1/2\rangle \;-\; \sqrt{\frac{2}{3}}\,|m_l = 1\rangle \otimes |m_s = -1/2\rangle. \tag{6}$$

Второе состояние дублета $p_{1/2}$, получаем из (6) с помощью понижающего оператора $\hat{J}_- = \hat{l}_- + \hat{s}_-$.

Выпишем определяемые указанным образом векторы состояний (2), обозначая для краткости состояния $\left|l=1,m_l\right\rangle\otimes\left|s=1/2,m_s\right\rangle$ как $\left|m_l\right\rangle\otimes\left|m_s\right\rangle$, где $m_l=1,0,-1$, $m_s=\uparrow,\downarrow$, и присваивая состояниям (2) номера k, которые ниже будут использованы для нумерации матричных элементов $V_{kk'}$:

$$p_{3/2}:\quad \begin{cases} \left|3/2,3/2\right\rangle = \left|1\right\rangle\otimes\left|\uparrow\right\rangle = \left|5\right\rangle \\ \left|3/2,1/2\right\rangle = \sqrt{\dfrac{2}{3}}\ \left|0\right\rangle\otimes\left|\uparrow\right\rangle + \dfrac{1}{\sqrt{3}}\ \left|1\right\rangle\otimes\left|\downarrow\right\rangle = \left|1\right\rangle \\ \left|3/2,-1/2\right\rangle = \dfrac{1}{\sqrt{3}}\ \left|-1\right\rangle\otimes\left|\uparrow\right\rangle + \sqrt{\dfrac{2}{3}}\left|0\right\rangle\otimes\left|\downarrow\right\rangle = \left|3\right\rangle \\ \left|3/2,-3/2\right\rangle = \left|-1\right\rangle\otimes\left|\downarrow\right\rangle = \left|6\right\rangle \end{cases} \tag{7}$$

$$p_{1/2}:\quad \begin{cases} \left|1/2,1/2\right\rangle = \dfrac{1}{\sqrt{3}}\ \left|0\right\rangle\otimes\left|\uparrow\right\rangle - \sqrt{\dfrac{2}{3}}\ \left|1\right\rangle\otimes\left|\downarrow\right\rangle = \left|2\right\rangle \\ \left|1/2,-1/2\right\rangle = \sqrt{\dfrac{2}{3}}\ \left|-1\right\rangle\otimes\left|\uparrow\right\rangle - \dfrac{1}{\sqrt{3}}\ \left|0\right\rangle\otimes\left|\downarrow\right\rangle = \left|4\right\rangle \end{cases} \tag{8}$$

В этом базисе оператор $A\hat{\mathbf{l}}\cdot\hat{\mathbf{s}}$ диагонален, причем его диагональные элементы определяются формулой (см. также (5) в задаче 8.7)

$$\frac{A}{2}\left(\,j(j+1)-l(l+1)-s(s+1)\,\right)_{l=1,\,s=1/2} = \begin{cases} A/2, & j=3/2; \\ -A, & j=1/2. \end{cases}$$

Оператор $\mu_B B\hat{J}_z$ также диагонален, его матричные элементы имеют вид

$$\mu_B B\left\langle J_z\right\rangle = \mu_B B\, m, \qquad m = j,\, j-1,\, ...,\, -j\,.$$

Диагональные матричные элементы оператора $\hat{s}_z$, представляющие собой средние значения для перечисленных выше состояний $\left|k\right\rangle$, находим с использованием равенств (7), (8):

$$\left\langle 1\right|\hat{s}_z\left|1\right\rangle = 1/6\,, \qquad \left\langle 2\right|\hat{s}_z\left|2\right\rangle = -1/6\,, \qquad \left\langle 3\right|\hat{s}_z\left|3\right\rangle = -1/6\,,$$

$$\left\langle 4\right|\hat{s}_z\left|4\right\rangle = 1/6\,, \qquad \left\langle 5\right|\hat{s}_z\left|5\right\rangle = 1/2\,, \qquad \left\langle 6\right|\hat{s}_z\left|6\right\rangle = -1/2\,. \tag{9}$$

Такие же значения $\langle s_z \rangle$ дает и формула (15) задачи 9.6 (эта формула в нашем изложении остается недоказанной). Наконец, замечаем, что будут не равны нулю лишь те недиагональные элементы оператора $\hat{s}_z$, которые связывают состояния $|k\rangle$ с различными j при одинаковых m:

$$\langle 1|\hat{s}_z|2\rangle = \langle 2|\hat{s}_z|1\rangle = \langle 3|\hat{s}_z|4\rangle = \langle 4|\hat{s}_z|3\rangle = \sqrt{2}/3.$$

Собрав все вместе и обозначив $\mu_B B = \varepsilon$, получаем

$$\hat{V} = \begin{pmatrix} A/2+2\varepsilon/3 & \varepsilon\sqrt{2}/3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \varepsilon\sqrt{2}/3 & -A+\varepsilon/3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A/2-2\varepsilon/3 & \varepsilon\sqrt{2}/3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon\sqrt{2}/3 & -A-\varepsilon/3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & A/2+2\varepsilon & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & A/2-2\varepsilon \end{pmatrix}.$$

Найденная матрица $\hat{V}$ имеет блочно-диагональное строение. Видно, что ее диагональные элементы V_{55} и V_{66} уже являются корнями (двумя из шести) секулярного уравнения (3), а остальные четыре корня $\varepsilon^{(1)}$ определяются из двух не связанных друг с другом уравнений второй степени:

$$(A/2+2\varepsilon/3-\varepsilon^{(1)})(-A+\varepsilon/3-\varepsilon^{(1)}) - 2\varepsilon^2/9 = 0,$$

$$(A/2-2\varepsilon/3-\varepsilon^{(1)})(-A-\varepsilon/3-\varepsilon^{(1)}) - 2\varepsilon^2/9 = 0.$$

Таким образом, искомые поправки к шестикратно вырожденному уровню энергии электронных p-состояний имеют следующий вид:

$$\varepsilon_1^{(1)} = \frac{1}{2}\left(-\frac{A}{2}+\mu_B B+\sqrt{9A^2/4+\mu_B B\,A+(\mu_B B)^2}\right),$$

$$\varepsilon_2^{(1)} = \frac{1}{2}\left(-\frac{A}{2}+\mu_B B-\sqrt{9A^2/4+\mu_B B\,A+(\mu_B B)^2}\right),$$

$$\varepsilon_3^{(1)} = \frac{1}{2}\left(-\frac{A}{2}-\mu_B B+\sqrt{9A^2/4+\mu_B B\,A+(\mu_B B)^2}\right),$$

$$\varepsilon_4^{(1)} = \frac{1}{2}\left(-\frac{A}{2} - \mu_B B - \sqrt{9A^2/4 + \mu_B B\, A + (\mu_B B)^2} \right),$$

$$\varepsilon_5^{(1)} = A/2 + 2\mu_B B \ ,$$

$$\varepsilon_6^{(1)} = A/2 - 2\mu_B B \, . \qquad (10)$$

Отвечающая соотношениям (10) картина расщепления p-уровня схематично показана на рис. 9.2.

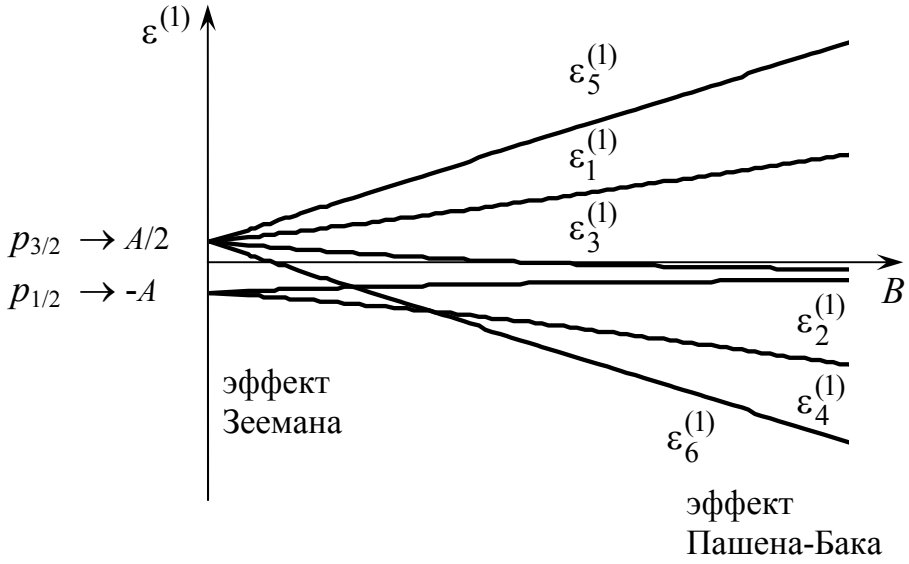

Рис. 9.2

При рассмотрении эффекта Зеемана в слабом поле ($\mu_B B << A$) формулы (10) приводят к тем же результатам, что и соотношения (16), (17) задачи 9.6 со значениями множителя Ланде $g = 2/3$ для $p_{1/2}$-состояний и $g = 4/3$ для $p_{3/2}$-состояний. В сильном поле ($\mu_B B >> A$) формулы (10) описывают эффект Пашена–Бака, в согласии с результатом (26) задачи 9.6.

9.9. В задаче о линейном осцилляторе, движущемся в присутствии внешней силы $F(t) = qE(t)$, оператор возмущения имеет вид

$$\hat{V}(t) = -F(t)\hat{x} \, . \qquad (1)$$

Для определения матричных элементов оператора (1) по невозмущенным стационарным состояниям осциллятора $|n\rangle$ удобно воспользоваться известным представлением оператора координаты $\hat{x}$ линейного

осциллятора (с массой m и собственной частотой ω_0) через операторы уничтожения и рождения $\hat{a}$, $\hat{a}^+$:

$$\hat{V}(t) = -\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}\, F(t)\,(\hat{a} + \hat{a}^+). \tag{2}$$

Поскольку

$$\hat{a}\,|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle, \qquad \hat{a}^+\,|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle, \tag{3}$$

то среди матричных элементов оператора (2) могут быть отличными от нуля лишь

$$V_{n-1,\,n} = -\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}\, F(t)\,\sqrt{n}\,, \qquad V_{n+1,\,n} = -\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}\, F(t)\,\sqrt{n+1}\,. \tag{4}$$

Поэтому в первом порядке теории возмущений возможны лишь следующие переходы: $n \to n-1$ (при $n \geq 1$), $n \to n+1$.

С учетом известного выражения для энергетического спектра линейного гармонического осциллятора ($\varepsilon_n = \hbar\omega_0(n+1/2)$, $n = 0, 1, 2, \ldots$) матричные элементы оператора возмущения (1) в представлении взаимодействия принимают вид:

$$\widetilde{V}_{n'n} \;=\; e^{i(\varepsilon_{n'} - \varepsilon_n)t/\hbar}\, V_{n'n} \;=\; e^{i(n'-n)\omega_0 t}\, V_{n'n}\,. \tag{5}$$

Согласно формуле (XV) введения к данной главе для амплитуд вероятности переходов $n \to n-1$ и $n \to n+1$ в первом приближении имеем:

$$C^{(1)}_{n-1,\,n} = i\sqrt{\frac{n}{2m\hbar\omega_0}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} dt\, F(t)\, e^{-i\omega_0 t}, \tag{6}$$

$$C^{(1)}_{n+1,\,n} = i\sqrt{\frac{n+1}{2m\hbar\omega_0}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} dt\, F(t)\, e^{i\omega_0 t}\,. \tag{7}$$

Пределы интегрирования здесь выбраны в виде $\pm\infty$, поскольку функция $F(t)$ может быть не равна нулю только в промежутке времени от t_0 до t_1, и этот промежуток в условиях рассматриваемой задачи полностью

содержится внутри интервала интегрирования, простирающегося от $t' < t_0$ до $t > t_1$.

Заметим, что величина

$$f(\omega_0) = \int_{-\infty}^{\infty} dt\, F(t)\, e^{i\omega_0 t} \tag{8}$$

представляет собой компоненту Фурье функции $F(t)$ на частоте $\omega = \omega_0$, и введем обозначение

$$\alpha = \frac{i f(\omega_0)}{\sqrt{2m\hbar\omega_0}}. \tag{9}$$

Тогда амплитуды вероятности (6) и (7) примут вид

$$C^{(1)}_{n-1,\,n} = \sqrt{n}\,(-\alpha^*), \qquad C^{(1)}_{n+1,\,n} = \sqrt{n+1}\,\alpha. \tag{10}$$

Возводя в квадрат модули амплитуд (10), находим искомые вероятности переходов:

$$W^{(1)}_{n-1,\,n} = n\,|\alpha|^2, \tag{11}$$

$$W^{(1)}_{n+1,\,n} = n\,|\alpha|^2 + |\alpha|^2. \tag{12}$$

Эти формулы применимы в случае «слабого» источника внешней силы, когда неравенство $|\alpha|^2 << 1$ выполняется с необходимым запасом.

Если интерпретировать число n как число частиц-квантов с энергией $\hbar\omega_0$, то формуле (11) можно дать простое объяснение: вероятность того, что источником возмущения будет поглощена энергия $\hbar\omega_0$, равна вероятности поглощения $|\alpha|^2$ единственного кванта, помноженной на число квантов n, имеющихся в начальном состоянии. При этом в формуле (12) второе слагаемое, не исчезающее при $n = 0$, представляет собой вероятность «спонтанного» рождения кванта энергии $\hbar\omega_0$ источником возмущения, а первое слагаемое, пропорциональное числу уже имеющихся квантов, следует истолковать как вероятность «стимулированного»

рождения кванта: имеющиеся в начальном состоянии частицы-кванты стимулируют рождение еще одной такой же частицы.

Согласно (4) все матричные элементы оператора возмущения $V_{n'n}$ с $n' \neq n \pm 1$ равны нулю. Переходы, для которых матричные элементы оператора возмущения равны нулю, в теории возмущений принято называть *запрещенными*. Этот термин однако не означает, что запрещенный переход вообще не возможен. Вероятность такого перехода исчезает лишь в первом порядке, а в высших порядках теории возмущений вероятность запрещенного перехода уже может отличаться от нуля. В этом легко убедиться на рассматриваемом здесь примере осциллятора, возмущаемого заданной внешней силой (упражнение для читателя).

Не обращаясь к теории возмущений можно показать [8], что если начальным состоянием осциллятора является основное состояние, то после окончания действия внешней силы осциллятор окажется в когерентном состоянии, характеризующемся комплексным параметром (9). Свойства такого состояния мы рассматривали в задаче 6.9.

9.10. Решение $\left|\psi(t)\right\rangle$ волнового уравнения Шредингера с гамильтонианом $\hat{H} + \hat{V}(t)$ в случае двухуровневой системы ищем в виде

$$\left|\psi(t)\right\rangle \;=\; C_1(t)\, e^{-i\varepsilon_1 t/\hbar}\left|1\right\rangle \;+\; C_2(t)\, e^{-i\varepsilon_2 t/\hbar}\left|2\right\rangle, \tag{1}$$

где функции $C_1(t)$ и $C_2(t)$ определяются уравнениями:

$$\begin{cases} i\hbar \dfrac{dC_1}{dt} \;=\; \widetilde{V}_{11}\, C_1 + \widetilde{V}_{12}\, C_2 \;, \\ i\hbar \dfrac{dC_2}{dt} \;=\; \widetilde{V}_{21}\, C_1 + \widetilde{V}_{22}\, C_2 \;. \end{cases} \tag{2}$$

Здесь $\widetilde{V}_{nn'} = e^{i(\varepsilon_n - \varepsilon_{n'})t/\hbar}\, V_{nn'}$ – матричные элементы оператора возмущения в представлении взаимодействия. Матричные элементы указанного в условии задачи оператора

$$V(t) \;=\; \hat{M}\, e^{-i\omega t} + \hat{M}^{+} e^{i\omega t}, \tag{3}$$

присутствующие в уравнениях (2), имеют вид:

$$\widetilde{V}_{11} = M_{11}\,e^{-i\omega t} + M_{11}^{*}\,e^{i\omega t},\ \widetilde{V}_{22} = M_{22}\,e^{-i\omega t} + M_{22}^{*}\,e^{i\omega t}, \qquad (4)$$

$$\widetilde{V}_{12} = \widetilde{V}_{21}^{*} = M_{12}\,e^{i(2(\varepsilon_1-\varepsilon_2)/\hbar+\Delta)t} + M_{21}^{*}\,e^{-i\Delta t}, \qquad (5)$$

где посредством Δ обозначена «расстройка» частоты возмущения по отношению к «частоте перехода» $(\varepsilon_2-\varepsilon_1)/\hbar$:

$$\Delta = (\varepsilon_2-\varepsilon_1)/\hbar - \omega. \qquad (6)$$

Согласно условию задачи, величина Δ мала в сравнении с частотами $(\varepsilon_2-\varepsilon_1)/\hbar$, ω.

Все величины (4), а также то слагаемое в (5), которое содержит в показателе экспоненты удвоенную частоту перехода, быстро осциллируют по сравнению с членами $e^{\pm i\Delta t}$. Предполагая, что при интегрировании уравнений (2) по интервалу времени $t >> 1/\omega$ быстро осциллирующие слагаемые дадут лишь малый вклад в искомые функции $C_1(t)$ и $C_2(t)$, отбросим все такие слагаемые. Перейдя указанным образом от системы точных уравнений (2) к приближенным уравнениям, имеем:

$$\begin{cases} \dfrac{dC_1}{dt} = -\dfrac{iM_{21}^{*}}{\hbar}\,e^{-i\Delta t}\,C_2\,, \\ \dfrac{dC_2}{dt} = -\dfrac{iM_{21}}{\hbar}\,e^{i\Delta t}\,C_1\,. \end{cases} \qquad (7)$$

Решим систему приближенных уравнений (7) точно. Исключим из этих уравнений одну из двух неизвестных функций, например, $C_1(t)$. Дифференцируя второе уравнение по t и избавляясь от C_1 и dC_1/dt с помощью обоих уравнений (7), получаем однородное линейное дифференциальное уравнение второго порядка для $C_2(t)$:

$$\frac{d^2C_2}{dt^2} = i\Delta\,\frac{dC_2}{dt} - \frac{\left|M_{21}\right|^2}{\hbar^2}\,C_2. \qquad (8)$$

Частные решения уравнения (8) ищем в виде

$$C_2(t) = A\,e^{i\nu t}, \qquad A \neq 0. \qquad (9)$$

Подставив (9) в (8), имеем уравнение для параметра ν:

$$\nu^2 - \nu\Delta - |M_{21}|^2/\hbar^2 = 0. \qquad (10)$$

Найдя его корни ν_1 и ν_2,

$$\nu_1 = \Delta/2 - \sqrt{\Delta^2/4 + |M_{21}|^2/\hbar^2}, \quad \nu_2 = \Delta/2 + \sqrt{\Delta^2/4 + |M_{21}|^2/\hbar^2}, \qquad (11)$$

получаем два линейно независимых решения вида (9). Общее решение уравнения (8) представляет собой линейную комбинацию найденных частных решений с произвольными постоянными коэффициентами A и B:

$$C_2(t) = Ae^{i\nu_1 t} + Be^{i\nu_2 t}. \qquad (12)$$

При этом второе уравнение системы (7) дает нам функцию $C_1(t)$:

$$C_1(t) = -\frac{\hbar}{M_{21}} e^{-it\Delta}\left(\nu_1 Ae^{i\nu_1 t} + \nu_2 Be^{i\nu_2 t}\right). \qquad (13)$$

Постоянные A и B определяются начальными данными, которые согласно условию задачи имеют вид:

$$C_1(0) = 1, \qquad C_2(0) = 0. \qquad (14)$$

С помощью (12)–(14) находим, что $A = -B = M_{21}/2\hbar\Omega$, где посредством Ω обозначена величина $(\nu_2 - \nu_1)/2$:

$$\Omega = \sqrt{\frac{\Delta^2}{4} + \frac{|M_{21}|^2}{\hbar^2}}. \qquad (15)$$

В результате, найденные функции $C_1(t)$ и $C_2(t)$ принимают следующий окончательный вид:

$$C_1(t) = e^{-it\Delta/2}\left(\cos\Omega t + \frac{i\Delta}{2\Omega}\sin\Omega t\right), \qquad (16)$$

$$C_2(t) = -\frac{iM_{21}}{\hbar\Omega} e^{it\Delta/2}\sin\Omega t. \qquad (17)$$

Таким образом, начальное стационарное состояние $|1\rangle$ двухуровневой системы под действием периодического возмущения с частотой ω, близкой к $(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)/\hbar$, переходит в суперпозицию

стационарных состояний $|1\rangle$ и $|2\rangle$ с коэффициентами (16) и (17). Квадраты модулей этих коэффициентов представляют собой вероятности $W_1(t)$ и $W_2(t)$ обнаружения системы к моменту времени t в состояниях $|1\rangle$ и $|2\rangle$, соответственно. Согласно (15)–(17) выражения для этих вероятностей имеют вид:

$$W_1(t) = \left| \cos\Omega t + \frac{i\Delta}{2\Omega} \sin\Omega t \right|^2 = 1 - W_2(t), \tag{18}$$

$$W_2(t) = \left| \frac{M_{21}}{\hbar\Omega} \sin\Omega t \right|^2 = \frac{|M_{21}|^2}{2\hbar^2\Omega^2} (1 - \cos 2\Omega t). \tag{19}$$

Из (19) видно, что вероятность перехода $1 \to 2$ – периодическая функция времени с частотой 2Ω. При точном резонансе (то есть при $\Delta = 0$) вероятность обнаружения системы в состоянии (2) принимает вид

$$W_2(t) = \frac{1}{2}\left(1 - \cos\frac{2|M_{21}|t}{\hbar}\right). \tag{20}$$

Тот факт, что вероятность (20) изменяется от нуля до единицы, означает, что система периодически с достоверностью переходит из состояния $|1\rangle$ в состояние $|2\rangle$ и возвращается из $|2\rangle$ в $|1\rangle$.

По ходу вывода формул (18), (19) не делалось предположения о малости матричного элемента M_{21}. Теперь сделаем такое предположение и убедимся в том, что если за достаточно большое время t вероятность перехода $1 \to 2$, описываемая выражением (19), за счет малости матричного элемента M_{21} остается малой в сравнении с единицей, то формула (19) приводит к известному результату первого приближения нестационарной теории возмущений.

При $|M_{21}| << \hbar\Delta$ имеем $\Omega \approx \Delta/2 = (\varepsilon_2 - \varepsilon_1 - \hbar\omega)/2\hbar$, так что в первом неисчезающем приближении по M_{21} выражение (19) принимает вид

$$W_2(t) = |M_{21}|^2 \frac{4\sin^2((\varepsilon_2 - \varepsilon_1 - \hbar\omega)t/2\hbar)}{(\varepsilon_2 - \varepsilon_1 - \hbar\omega)^2}. \tag{21}$$

Его можно записать также в другом виде:

$$W_2(t) \;=\; t\,\frac{2\pi}{\hbar}\,\left|M_{21}\right|^2\;F(t,\varepsilon_2-\varepsilon_1-\hbar\omega), \tag{22}$$

где функция

$$F(t,\varepsilon)\equiv\frac{1}{\pi}\frac{\sin^2(\varepsilon t/2\hbar)}{\varepsilon^2 t/2\hbar} \tag{23}$$

от аргумента ε ведет себя подобно «размытой» дельта-функции и обращается в дельта-функцию при $t\to\infty$:

$$F(t,\varepsilon)\to\delta(\varepsilon), \qquad\qquad t\to\infty. \tag{24}$$

Для каждого фиксированного значения интервала времени $t=\tau$ ширина $\delta\varepsilon$ размытой дельта-функции (23) по порядку величины составляет

$$\delta\varepsilon\sim\hbar/\tau. \tag{25}$$

Во многих практических задачах характерный интервал времени τ между актом приготовления начального состояния и регистрацией конечного состояния таков, что $\delta\varepsilon<<(\varepsilon_2-\varepsilon_1)\sim\hbar\omega$ и, следовательно, можно в (22) произвести замену (24). В результате мы получаем известную формулу для вероятности перехода $w_{21}=W_2(t)/t$ *за единицу времени*:

$$w_{21} \;=\; \frac{2\pi}{\hbar}\,\left|M_{21}\right|^2\;\delta(\varepsilon_2-\varepsilon_1-\hbar\omega). \tag{26}$$

Поясним роль дельта-функции в (26) следующим примером. Рассмотрим электрон в потенциальной яме с двумя уровнями энергии (двухуровневая модель атома). Пусть переход $1\to2$ обусловлен взаимодействием электрического дипольного момента атома $\hat{\mathbf{d}}=e\hat{\mathbf{r}}$ (где $\hat{\mathbf{r}}$ – оператор координат электрона) с электрическим полем

$$\mathbf{E}(t) \;=\; \mathbf{E}\cos\omega t \;=\; \frac{1}{2}\mathbf{E}\,e^{-i\omega t} \;+\; \frac{1}{2}\mathbf{E}\,e^{i\omega t} \tag{27}$$

линейно поляризованной монохроматической электромагнитной волны ($\mathbf{E}$ – амплитудный вектор волны). При этом оператор возмущения имеет вид:

$$\hat{V}(t) \;=\; -\hat{\mathbf{d}}\cdot\mathbf{E}(t) \;=\; -\frac{1}{2}\hat{\mathbf{d}}\cdot\mathbf{E}\,e^{-i\omega t} \;-\; \frac{1}{2}\hat{\mathbf{d}}\cdot\mathbf{E}\,e^{i\omega t}. \tag{28}$$

Зависимость поля от координат здесь не учтена, так как предполагается, что длина волны много больше размера атома.

При $\omega \approx \varepsilon_2 - \varepsilon_1 > 0$ после преобразования к представлению взаимодействия медленно осциллирующим становится первый член в правой стороне (28); одним этим членом и определяется матричный элемент перехода:

$$M_{21} = -\frac{1}{2}\langle 2|\hat{\mathbf{d}}\cdot\mathbf{E}|1\rangle = -\frac{1}{2}\,\mathbf{d}_{21}\cdot\mathbf{E} = -(\mathbf{d}_{21}\cdot\mathbf{e})\,E/2, \qquad (29)$$

где $\mathbf{e} = \mathbf{E}/E$ – единичный вектор направления поляризации электромагнитной волны, E – амплитудное значение напряженности электрического поля, $\mathbf{d}_{21}$ – матричный элемент оператора дипольного момента атома для перехода $1 \to 2$. Выразим множитель E^2 в

$$|M_{21}|^2 = |\mathbf{d}_{21}\cdot\mathbf{e}|^2 E^2/4$$

через усредненную за период интенсивность I электромагнитной волны (усредненная по времени плотность потока электромагнитной энергии),

$$I = \frac{c}{4\pi}\overline{|\mathbf{E}(t)\times\mathbf{B}(t)|} = \frac{cE^2}{4\pi}\,\overline{\cos^2\omega t} = \frac{c}{8\pi}E^2, \qquad (30)$$

и подставим результат в (26). Обозначая $(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)/\hbar = \omega_2 - \omega_1$ и учитывая, что $\delta(\varepsilon_2 - \varepsilon_1 - \hbar\omega) = (1/\hbar)\,\delta(\omega_2 - \omega_1 - \omega)$, получаем:

$$w_{21} = \frac{4\pi^2}{\hbar^2 c}\,|\mathbf{d}_{21}\cdot\mathbf{e}|^2 I\,\delta(\omega_2 - \omega_1 - \omega). \qquad (31)$$

Теперь откажемся от условия строгой монохроматичности волны (27). Будем считать, что энергия волны распределена по некоторому интервалу частот, включающему значение $\omega_2 - \omega_1$, и что интенсивность в (31) может быть записана как $I = J(\omega)\,d\omega$, где $J(\omega)$ – спектральная плотность интенсивности. В этом случае полная вероятность перехода за единицу времени, представляющая собой сумму вкладов от спектральных составляющих поля с близкими значениями частот, должна определяться путем интегрирования выражения (31) по ω:

$$w = \frac{4\pi^2}{\hbar^2 c} \left|\mathbf{d}_{21}\cdot\mathbf{e}\right|^2 \int d\omega J(\omega)\, \delta(\omega_2 - \omega_1 - \omega) = \frac{4\pi^2}{\hbar^2 c} \left|\mathbf{d}_{21}\cdot\mathbf{e}\right|^2 J(\omega_2 - \omega_1). \quad (32)$$

Таким образом, в рассматриваемом примере роль дельта-функции в (26) состоит в выделении из спектра частот возмущающего поля тех составляющих, частота которых достаточно близка к частоте перехода $\omega_2 - \omega_1 = (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)/\hbar$.

Другой пример применения формулы (26) связан с задачей о переходах возмущаемой системы с начальной энергией ε_1 в любое состояние среди множества конечных состояний с непрерывным распределением энергии ε_2. Пусть $\rho_f(\varepsilon_2)d\varepsilon_2$ – число таких состояний в интервале энергии $d\varepsilon_2$ вблизи значения $\varepsilon_2 = \varepsilon_1 + \hbar\omega$. Обозначим: $\varepsilon_2 = \varepsilon_f$, $\varepsilon_1 + \hbar\omega = \varepsilon_i$ (величину ε_i можно интерпретировать как энергию начального состояния с учетом имеющегося «кванта» возмущающего поля с энергией $\hbar\omega$, при поглощении которого система переходит в конечное состояние с энергией ε_f). В этом случае полная вероятность переходов за единицу времени, просуммированная по всем указанным конечным состояниям, определяется равенством:

$$w = \frac{2\pi}{\hbar} \int \left|M_{fi}\right|^2 \delta(\varepsilon_f - \varepsilon_i)\, \rho_f(\varepsilon_f)\, d\varepsilon_f = \frac{2\pi}{\hbar} \left|M_{fi}\right|^2 \rho_f(\varepsilon_i). \quad (33)$$

Формула (33) известна как золотое правило квантовой механики. Наличием дельта-функции в этом равенстве, очевидно, выражен закон сохранения энергии замкнутой системы.

9.11. Указанным в условии задачи потенциалам внешнего поля

$$\varphi = 0, \qquad \mathbf{A}(t) = -(c\mathbf{E}/\omega)\sin\omega t \quad (1)$$

соответствует электрическое поле

$$\mathbf{E}(t) = -\frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla\varphi = \mathbf{E}\cos\omega t. \quad (2)$$

С учетом энергии кулоновского взаимодействия электрона и ядра в атоме водорода, $U(r) = -e^2/r$, гамильтониан атома во внешнем поле (1) запишем

в форме

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A}(t)\right)^2 + U(r) = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(r) - \frac{e}{mc}\mathbf{A}(t)\cdot\hat{\mathbf{p}} + \frac{e^2}{2mc^2}\mathbf{A}^2(t). \quad (3)$$

Здесь $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$, причем в правой стороне (3) мы учли, что $\nabla\cdot\mathbf{A}(t) = 0$. В линейном по внешнему полю приближении последним слагаемым в (3) пренебрегаем. Тогда

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t), \quad (4)$$

где $\hat{H}_0 = \hat{\mathbf{p}}^2/2m + U(r)$ – невозмущенный гамильтониан атома, а оператор возмущения имеет вид

$$\hat{V}(t) = \frac{ie\hbar}{mc}\mathbf{A}(t)\cdot\nabla = \frac{e\hbar\,\mathbf{E}\cdot\nabla}{2m\omega}\,e^{-i\omega t} - \frac{e\hbar\,\mathbf{E}\cdot\nabla}{2m\omega}\,e^{i\omega t}. \quad (5)$$

При $\omega > 0$ переходы с поглощением атомом энергии внешнего поля вызываются возмущением, которому соответствует первое слагаемое в правой стороне равенства (5). Матричный элемент перехода есть

$$M_{fi} = \frac{e\hbar}{2m\omega}\left\langle\psi_f\left|\mathbf{E}\cdot\nabla\right|\psi_i\right\rangle. \quad (6)$$

В рассматриваемой задаче $\left|\psi_i\right\rangle$ – это $1s$-состояние электрона в атоме водорода; его волновая функция имеет вид:

$$\psi_i(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}\,e^{-r/a}, \qquad a = a_B = \hbar^2/me^2. \quad (7)$$

Конечное состояние $\left|\psi_f\right\rangle$ приближенно описывается как состояние свободно движущегося электрона с тем или иным импульсом $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$:

$$\psi_f(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}}\,e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \quad (8)$$

Направим ось z вдоль $\mathbf{E}$, то есть – параллельно направлению поляризации волны. Тогда $\mathbf{E}\cdot\nabla = E\,\partial/\partial z$, и матричный элемент (6) принимает вид

$$M_{fi} = \frac{e\hbar E}{2m\omega}\,\frac{1}{\sqrt{V\pi a^3}}\int d^3\mathbf{r}\,e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\,\frac{\partial}{\partial z}\,e^{-r/a}. \quad (9)$$

Обозначив $1/a = \gamma$, приступим к вычислению присутствующего в (9) интеграла:

$$\int d^3\mathbf{r}\, e^{-i\,\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\,\frac{\partial}{\partial z}\,e^{-\gamma r} \;=\; -\gamma\int d^3\mathbf{r}\, e^{-i\,\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\,\frac{z}{r}\,e^{-\gamma r} \;=$$

$$= -\gamma\, i\frac{\partial}{\partial k_z}\int d^3\mathbf{r}\, e^{-i\,\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\,\frac{1}{r}\,e^{-\gamma r}. \qquad (10)$$

Для вычисления интеграла в правой стороне (10) воспользуемся сферической системой координат с полярной осью, параллельной вектору $\mathbf{k}$. Учитывая, что в такой системе координат $\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} = kr\cos\theta'$, $d^3\mathbf{r} = r^2 dr\sin\theta' d\theta' d\varphi'$, и обозначая $\cos\theta' = \eta$, имеем:

$$\int d^3\mathbf{r}\, e^{-i\,\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\,\frac{1}{r}\,e^{-\gamma r} \;=\; 2\pi\int_0^\infty r\,dr\, e^{-\gamma r}\int_{-1}^{1} d\eta\, e^{-ikr\eta} \;=\; \frac{4\pi}{k^2+\gamma^2}. \qquad (11)$$

Полученное выражение зависит от квадрата волнового вектора ($k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$) и, следовательно, имеет один и тот же вид в любой системе координат. Подстановка (11) в правую часть равенства (10) дает:

$$\int d^3\mathbf{r}\, e^{-i\,\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\,\frac{\partial}{\partial z}\,e^{-r/a} \;=\; \frac{8\pi i}{a\,(k^2 + a^{-2})^2}\,k_z. \qquad (12)$$

Здесь $k_z = k\cos\theta$, θ – угол между направлениями импульса электрона $\hbar\mathbf{k}$ и внешнего электрического поля $\mathbf{E}$.

Равенство энергий конечного и начального состояния с учетом кванта $\hbar\omega$ энергии внешнего поля,

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \;=\; \hbar\omega - \frac{me^4}{2\hbar^2}, \qquad (13)$$

при условии $\hbar\omega >> Ry$ (напомним, что $Ry = me^4/2\hbar^2 = \hbar^2/2ma^2$) означает, что энергия электрона, вылетающего из атома под действием внешнего поля, очень велика в сравнении с порогом ионизации атома (Ry). Это позволяет с помощью равенства

$$k \approx \sqrt{2m\omega/\hbar} \qquad (14)$$

всюду переходить к приближенным выражениям и, кроме того, пренебречь в знаменателе (12) величиной a^{-2} по сравнению с k^2. В результате, для квадрата матричного элемента (9) получим:

$$\left|M_{fi}\right|^2 = \frac{2\pi}{V}\left(\frac{\hbar}{am\omega}\right)^5 e^2E^2\cos^2\theta. \qquad (15)$$

Найдем теперь плотность конечных состояний ρ_f в элементе $\mathbf{p}$-пространства

$$d^3\mathbf{p} = p^2dp\,d\Omega_{\mathbf{p}}, \qquad (16)$$

где $d\Omega_{\mathbf{p}}$ – телесный угол, в котором находится импульс $\hbar\mathbf{k} = \mathbf{p}$ электрона, вылетевшего из атома. Учитывая, что $dp = (m/p)d\varepsilon_f$, и приравнивая число состояний $\rho_f\,d\varepsilon_f$ в элементе (16) величине $Vd^3\mathbf{p}/(2\pi\hbar)^3$,

$$\rho_f\,d\varepsilon_f = \frac{Vd^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{V\hbar km}{(2\pi\hbar)^3}\,d\Omega_{\mathbf{p}}\,d\varepsilon_f, \qquad (17)$$

получим:

$$\rho_f = \frac{Vkm}{8\pi^3\hbar^2}\,d\Omega_{\mathbf{p}}. \qquad (18)$$

Подставим (15) и (18) в формулу золотого правила

$$dw = \frac{2\pi}{\hbar}\left|M_{fi}\right|^2\rho_f. \qquad (19)$$

Величина dw представляет собой вероятность перехода электрона за единицу времени из атомного $1s$-состояния в состояние движения вне атома с импульсом $\mathbf{p}$ в телесном угле $d\Omega_{\mathbf{p}}$. Пользуясь равенством (14), находим:

$$\frac{dw}{d\Omega_{\mathbf{p}}} = \frac{\omega_0}{\pi\sqrt{2}}\left(\frac{\omega_0}{\omega}\right)^{9/2}\left(\frac{Ea^2}{e}\right)^2\cos^2\theta, \qquad (20)$$

где $\omega_0 = me^4/\hbar^3$ – характерная атомная частота, e/a^2 – порядок величины

напряженности электрического поля ядра, действующего на электрон в атоме водорода. Интегрирование выражения (20) по углам вылета электрона из атома с учетом

$$\int d\Omega_{\mathbf{p}} \cos^2 \theta = 4\pi / 3 \tag{21}$$

дает полную вероятность ионизации атома за единицу времени:

$$w = \frac{2^{3/2}\omega_0}{3}\left(\frac{\omega_0}{\omega}\right)^{9/2}\left(\frac{Ea^2}{e}\right). \tag{22}$$

Полученные результаты можно рассматривать как приближенное описание *фотоэффекта* (ионизации атома светом) при полуклассическом подходе к задаче о взаимодействии в системе «атом + поле излучения». В полуклассическом подходе учитывается квантование лишь атомной системы, а электромагнитное поле рассматривается классическим образом. В последовательном же квантовом подходе учитывают и квантование поля (эти вопросы изучаются в курсах квантовой электродинамики и квантовой оптики). Применимость полуклассического метода к довольно широкому кругу задач о взаимодействии света с атомами обусловлена тем, что золотое правило квантовой механики для атомных переходов $|1\rangle \to |2\rangle$ включает закон сохранения энергии в такой форме, которая в случае поля излучения, характеризующегося определенной частотой $\omega > 0$, автоматически отвечает представлению о дискретных порциях энергии поля $\hbar\omega$:

$\varepsilon_2 = \varepsilon_1 + \hbar\omega$ (поглощение фотона)), $\varepsilon_2 + \hbar\omega = \varepsilon_1$ (испускание фотона).

С этой точки зрения мы можем рассматривать каждый акт ионизации атома периодическим полем $\mathbf{E}(t)$ как результат поглощения атомным электроном фотона с энергией $\hbar\omega$. Плотность потока фотонов j_{nad}, «падающих» на атом со стороны источника монохроматического электромагнитного излучения, разумно определить соотношением

$$j_{nad} = I / \hbar\omega, \tag{23}$$

где $I = cE^2 / 8\pi$ – усредненная по времени плотность потока

электромагнитной энергии. Тогда, разделив (20) и (22) на (23), найдем, соответственно, дифференциальное *сечение* процесса фотоионизации атома

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{\mathbf{p}}} = 2^6 a^2 \frac{e^2}{\hbar c}\left(\frac{Ry}{\hbar\omega}\right)^{7/2} \cos^2\theta, \tag{24}$$

а также – полное сечение

$$\sigma = \frac{2^8\pi}{3} a^2 \frac{e^2}{\hbar c}\left(\frac{Ry}{\hbar\omega}\right)^{7/2}. \tag{25}$$

Эти формулы получены в предположении, что $\hbar\omega >> Ry$, то есть – для случая, когда энергия фотона намного превышает красную границу фотоэффекта; при меньшем значении $\hbar\omega$ они дают завышенную величину вероятности. Для расчета сечения фотоэффекта вблизи красной границы необходимо конечные состояния электрона описывать не плоскими волнами, а точными волновыми функциями непрерывного энергетического спектра электрона в кулоновском поле ядра атома. Такой расчет дает при $\hbar\omega \geq Ry$ значение $\sigma \approx 31 a^2 e^2/\hbar c$ (см., например, [10]).

Еще один аспект приближений, использованных в проведенном рассмотрении, относится к формуле (6) для матричного элемента перехода. В ней не учтена зависимость внешнего поля от координат, которая должна была бы иметь вид $e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$, где $\mathbf{q}$ – волновой вектор электромагнитной волны. Это означает, что под интегралом в (9) величина $e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$ заменена единицей – первым членом ее ряда Тейлора по степеням $\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}$. Данное приближение оправдано при $qa << 1$ и называется *дипольным приближением*. Происхождение этого термина можно пояснить следующим образом.

Обозначим номерами 1 и 2 начальное и конечное состояния электрона, являющиеся собственными для невозмущенного гамильтониана атома $\hat{H}_0$. Учитывая, что в нулевом приближении по внешнему полю

$$-i\hbar\nabla = \hat{\mathbf{p}} = m\frac{d\hat{\mathbf{r}}}{dt} = \frac{im}{\hbar}[\hat{H}_0, \hat{\mathbf{r}}], \tag{26}$$

имеем равенство

$$\langle\psi_2|\hat{\mathbf{p}}|\psi_1\rangle = \frac{im}{\hbar}\left(\langle\hat{H}_0\psi_2|\hat{\mathbf{r}}|\psi_1\rangle - \langle\psi_2|\hat{\mathbf{r}}|\hat{H}_0\psi_1\rangle\right) = \frac{im(\varepsilon_2-\varepsilon_1)}{\hbar}\langle\psi_2|\hat{\mathbf{r}}|\psi_1\rangle,$$

то есть

$$\langle\psi_2|\hat{\mathbf{p}}|\psi_1\rangle = im\omega_{21}\langle\psi_2|\hat{\mathbf{r}}|\psi_1\rangle, \qquad \omega_{21} \equiv (\varepsilon_2-\varepsilon_1)/\hbar. \qquad (27)$$

Как нам известно, для рассматриваемого перехода $1 \to 2$ частота внешнего поля и значения энергии электрона связаны соотношением

$$\omega = (\varepsilon_2-\varepsilon_1)/\hbar = \omega_{21}.$$

Следовательно, пользуясь формулой (27) для преобразования выражения (6), получим:

$$M_{21} = \frac{ie}{2m\omega}\langle\psi_2|\mathbf{E}\cdot\hat{\mathbf{p}}|\psi_1\rangle = -\frac{1}{2}\langle\psi_2|\mathbf{E}\cdot e\hat{\mathbf{r}}|\psi_1\rangle = -\frac{1}{2}\mathbf{E}\cdot\mathbf{d}_{21}, \qquad (28)$$

где $\mathbf{d}_{21}$ – матричный элемент оператора электрического дипольного момента атомной системы для перехода $1 \to 2$ (см. также формулу (29) в задаче 9.10).

Отметим, что применять в подобных расчетах матричные элементы оператора координат следует с определенной осмотрительностью, так как равенство (27) справедливо лишь при использовании в качестве ψ_1 и ψ_2 точных собственных функций гамильтониана атома $\hat{H}_0$.

При обсуждении атомных переходов в рамках дипольного приближения полезно иметь ввиду правила отбора, сформулированные в задаче 9.4. Например, согласно правилу (11) указанной задачи следует ожидать, что из начального состояния s-типа ($l=0$, $m=0$) электрон под действием электромагнитной волны с линейной поляризацией в направлении $\mathbf{e}_z$ может перейти лишь в состояние с $l'=1$, $m'=0$, которое, как известно, характеризуется распределением вероятностей вида $|Y_{10}|^2 \sim \cos^2\theta$. Как раз такую угловую зависимость имеет величина (15), а с ней – и (20), (24).

9.12. Электрическое поле $\mathbf{E}(t)$, вращающееся с частотой ω вокруг оси z против часовой стрелки, можно представить в виде:

$$\mathbf{E}(t) \;=\; \mathbf{e}_x\, E\,\cos\omega t \;+\; \mathbf{e}_y\, E\,\sin\omega t \;=$$

$$=\; \frac{1}{2}(\mathbf{e}_x + i\,\mathbf{e}_y)\,E\,e^{-i\omega t} \;+\; \frac{1}{2}(\mathbf{e}_x - i\,\mathbf{e}_y)\,E\,e^{-i\omega t}\,. \qquad (1)$$

Матричный элемент M_{fi} перехода, сопровождающегося поглощением электроном в атоме кванта энергии $\hbar\omega$, связан с первым слагаемым в (1). Оно включает комплексный амплитудный вектор электрического поля

$$\mathbf{E} \;=\; (\mathbf{e}_x + i\,\mathbf{e}_y)\,E\,. \qquad (2)$$

В дипольном приближении должны выполняться соотношения пропорциональности

$$M_{fi} \;\sim\; \left\langle \psi_f \left| \mathbf{E}\cdot\hat{\mathbf{p}} \right| \psi_i \right\rangle \;\sim\; \left\langle \psi_f \left| \mathbf{E}\cdot\hat{\mathbf{d}} \right| \psi_i \right\rangle. \qquad (3)$$

С учетом (2) эти соотношения принимают вид

$$M_{fi} \;\sim\; E\left\langle \psi_f \left| (\partial/\partial x + i\,\partial/\partial y) \right| \psi_i \right\rangle \;\sim\; E\left\langle \psi_f \left| (x + i\,y) \right| \psi_i \right\rangle. \qquad (4)$$

Вычисление матричного элемента $\left\langle \psi_f \left| (\partial/\partial x + i\,\partial/\partial y) \right| \psi_i \right\rangle$ для случая, когда ψ_i представляет собой s-состояние электрона в атоме водорода, а ψ_f имеет вид плоской волны, приведет, очевидно, к выражению, подобному результату (12) в задаче 9.11, но вместо множителя k_z оно будет содержать множитель

$$k_x + ik_y = k\,(\sin\theta\cos\varphi + i\sin\theta\sin\varphi)\,, \qquad (5)$$

где θ и φ – углы вектора импульса $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ электрона, вылетающего из атома вследствие фотоэффекта. Эти углы отсчитываются в сферической системе координат с полярной осью z, параллельной направлению распространения электромагнитной волны. Таким образом, искомая угловая зависимость вероятности фотоэффекта в данных условиях определяется из соотношений:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{\mathbf{p}}} \sim \left|M_{fi}\right|^2 \sim \left|k_x + ik_y\right|^2 \sim \sin^2\theta\,. \qquad (6)$$

Найденная вероятность максимальна для направлений $\mathbf{p}$, параллельных плоскости, в которой вращается вектор электрического поля $\mathbf{E}(t)$ циркулярно поляризованной электромагнитной волны. При линейной поляризации волны вероятность фотоэффекта максимальна при $\mathbf{p}$, параллельном $\mathbf{E}$. Такая картина представляется вполне естественной.

Результат (6) соответствует правилу отбора (12), указанному в задаче 9.4. Исходя из этого правила следует ожидать, что электрон из начального состояния s-типа ($l = 0$, $m = 0$) под действием циркулярно поляризованной волны с амплитудным вектором (2) может переходить лишь в состояние с $l' = 1$, $m' = 1$, характеризующееся распределением вероятностей вида $\left|Y_{11}\right|^2 \sim \sin^2\theta$. В случае волны с циркулярной поляризацией противоположной ориентации справедливы соотношения

$$\mathbf{E} = (\mathbf{e}_x - i\mathbf{e}_y)E\,, \qquad \left|M_{fi}\right|^2 \sim \left|k_x - ik_y\right|^2 \sim \sin^2\theta\,. \qquad (7)$$

При этом согласно правилу отбора (13) задачи 9.4 ожидаемым конечным состоянием будет состояние с $l' = 1$, $m' = -1$; для этого состояния угловое распределение вероятности обнаружения электрона вне атома имеет прежний вид: $\left|Y_{1,-1}\right|^2 \sim \sin^2\theta$. Перечисленные правила отбора для квантового числа $m \equiv l_z$ электронных состояний находятся в согласии с представлением о том, что фотон в состояниях с циркулярной поляризацией обладает моментом импульса $J_z = \pm 1$ (где z – направление распространения фотона). Такое представление мы обсуждали в задаче 3.11.

9.13. Потенциал, создаваемый двумя одинаковыми силовыми центрами, находящимися на расстоянии $\mathbf{d}$ друг от друга есть

$$U(\mathbf{r}) = U_0(\mathbf{r}) + U_0(\mathbf{r} - \mathbf{d})\,, \qquad (1)$$

где $U_0(\mathbf{r})$ – потенциал одного центра. Обозначим компоненту Фурье для функции $U_0(\mathbf{r})$ посредством $u_0(\mathbf{q})$:

$$u_0(\mathbf{q}) = \int d^3\mathbf{r}\ e^{-i\,\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\ U_0(\mathbf{r}). \qquad (2)$$

Вычисляя компоненту Фурье для $U_0(\mathbf{r}-\mathbf{d})$, произведем замену переменных $\mathbf{r} \to \mathbf{r}+\mathbf{d}$:

$$\int d^3\mathbf{r}\ e^{-i\,\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\ U_0(\mathbf{r}-\mathbf{d}) \ = \ \int d^3\mathbf{r}\ e^{-i\,\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}+\mathbf{d})}\ U_0(\mathbf{r}) \ = \ e^{-i\,\mathbf{q}\cdot\mathbf{d}}\,u_0(\mathbf{q}). \qquad (3)$$

Фурье-компонента $u(\mathbf{q})$ суммарного потенциала (1) равна сумме компонент Фурье каждого из слагаемых этого потенциала:

$$u(\mathbf{q}) = \ u_0(\mathbf{q}) \ + \ e^{-i\,\mathbf{q}\cdot\mathbf{d}}\,u_0(\mathbf{q}) \ = \ u_0(\mathbf{q})\,(1 \ + \ e^{-i\,\mathbf{q}\cdot\mathbf{d}}). \qquad (4)$$

Подставив правую часть равенства (4) в формулу Борна (см. формулу (XX) введения к данной главе), найдем искомое сечение рассеяния:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{\mathbf{p}}} \ = \ \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2 \left|\,u_0(\mathbf{q})\,\right|^2 2\,(1+\cos\mathbf{q}\cdot\mathbf{d}\,), \qquad (5)$$

где $\hbar\mathbf{q} = \mathbf{p} - \mathbf{p}'$ – импульс, получаемый электроном в акте упругого рассеяния ($\mathbf{p}'$ и $\mathbf{p}$ – векторы импульса электрона в начальном и конечном состояниях, соответственно).

Имеющееся в (5) слагаемое, пропорциональное $\cos\mathbf{q}\cdot\mathbf{d}$, придает найденному сечению рассеяния *интерференционный* характер. Этот результат на качественном уровне уже был получен нами ранее с помощью наглядных соображений о «волновых свойствах» частиц (см. задачу 2.3). Теперь мы убеждаемся в его справедливости на основе последовательной квантовой теории. Кроме того, здесь мы находим количественное определение использованному в задаче 2.3 представлению об амплитуде рассеяния $f(\mathbf{q})$ (различие в знаке при выборе определения вектора $\mathbf{q}$ в обеих задачах не играет принципиальной роли). Согласно формуле Борна амплитуда рассеяния $f(\mathbf{q})$ с точностью до фазового множителя равна величине $(m/2\pi\hbar^2)\,u(\mathbf{q})$, связанной с рассеивающим потенциалом $U(\mathbf{r})$ преобразованием Фурье.

9.14. Для определения компоненты Фурье $u(\mathbf{q})$ кулоновского потенциала $U(r) = Z_1 Z_2\, e^2\,/\,r$ применим формулу (11) из задачи 9.11

$$\int d^3\mathbf{r}\, e^{-i\,\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\ \frac{1}{r}\, e^{-\gamma r}\ =\ \frac{4\pi}{q^2+\gamma^2}, \tag{1}$$

перейдя в ней к пределу при $\gamma \to 0$; получаем:

$$u(\mathbf{q})\ =\ \frac{4\pi Z_1 Z_2\, e^2}{q^2}. \tag{2}$$

Подставив (2) в формулу Борна

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}\ =\ \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2 \left|\, u(\mathbf{q})\,\right|^2, \tag{3}$$

находим:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}\ =\ \frac{4(Z_1 Z_2\, e^2)^2 m^2}{(\hbar q)^4}. \tag{4}$$

Выразим найденное сечение рассеяния через угол θ между начальным вектором импульса $\mathbf{p}'$ рассеиваемой частицы и конечным $\mathbf{p}$. С этой целью заметим, что

$$(\hbar\mathbf{q})^2 = (\mathbf{p}-\mathbf{p}')^2 = \mathbf{p}^2 + \mathbf{p}'^2 - 2\,\mathbf{p}\cdot\mathbf{p}'\ =$$

$$=\ p^2 + p'^2 - 2pp'\cos\theta. \tag{5}$$

При рассеянии частицы в не зависящем от времени поле условие равенства энергий начального и конечного состояний ($\varepsilon_{\mathbf{p}'} = \varepsilon_{\mathbf{p}}$) приводит к равенству $p' = p$. Поэтому выражение в правой стороне (5) есть

$$(\hbar q)^2 = 2p^2(1-\cos\theta) = 8m\varepsilon\sin^2(\theta/2), \tag{6}$$

где $\varepsilon = p^2/2m = p'^2/2m$ – энергия частицы «на бесконечности» (в области приближенно свободного движения). С учетом (6) формула (4) принимает вид:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}\ =\ \left(\frac{Z_1 Z_2\, e^2}{4\,\varepsilon}\right)^2 \frac{1}{\sin^4(\theta/2)}. \tag{7}$$

Можно показать [1], что при рассеянии частицы в кулоновском поле результат (7) справедлив и вне рамок борновского приближения, то есть он является точным. Формула (7) совпадает со знаменитой *формулой Резерфорда*, к которой приводит такая же задача о рассеянии в классической механике.

9.15. Гамильтониан рассматриваемой системы имеет вид:

$$\hat{H} = \hat{H}_a + \hat{H}_p + \hat{V}, \tag{1}$$

где $\hat{H}_a$ – гамильтониан атома (atom), содержащего Z электронов и ядро с зарядом $Z|e|$, $\hat{H}_p$ – гамильтониан свободной частицы (particle) – электрона, падающего на атом из внешнего источника, $\hat{V}$ – энергия кулоновского взаимодействия падающего на атом электрона с имеющимися внутри атома электронами и ядром. Эту энергию взаимодействия,

$$\hat{V} = \sum_{i=1}^{Z} \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|} - \frac{Z e^2}{|\mathbf{r}|}, \tag{2}$$

будем рассматривать в качестве возмущения. В выражении (2) $\mathbf{r}$ – координаты падающего на атом электрона, $\mathbf{r}_i$ – координаты электронов в атоме; ядро предполагается покоящимся в начале координат. Взаимодействием спинов мы пренебрегаем, так что спиновые состояния атома и рассеиваемого электрона считаются не изменяющимися в ходе взаимодействия, и в дальнейшем мы о спиновых состояниях упоминать не будем. Кроме того, пренебрежем обменными эффектами между падающим на атом быстрым электроном и атомными электронами (то есть в процессе расчета мы не будем проводить антисимметризацию многоэлектронного состояния системы в целом); это оправдывается тем, что когда дебройлевская длина волны рассеиваемого электрона мала в сравнении с размером атома, «обменные интегралы» из-за сильно осциллирующего характера волновой функции падающего электрона дают в вероятность переходов пренебрежимо малый вклад.

Пусть в начальном состоянии электрон, находящийся на большом расстоянии от атома, движется с импульсом $\mathbf{p}'$ по направлению к атому, пребывающему в стационарном состоянии n'. Строго говоря, такое состояние электрона следовало бы описывать волновым пакетом, однако при использовании вместо волнового пакета обычной плоской волны, как выясняется, те же самые результаты для вероятности переходов будут получены путем гораздо менее громоздких вычислений. Таким образом, запишем начальное состояние $|i\rangle$ всей системы в виде

$$|i\rangle = |\mathbf{p}'\rangle \otimes |n'\rangle, \tag{3}$$

где $|\mathbf{p}'\rangle$ – начальное состояние падающего на атом электрона с энергией $\varepsilon_{\mathbf{p}'} = p'^2/2m$, описываемое волновой функцией $V^{-1/2} e^{i\mathbf{p}'\cdot\mathbf{r}/\hbar}$; $|n'\rangle$ – начальное состояние атома, n' – полный набор квантовых чисел, характеризующих стационарное состояние электронной системы атома с энергией $E_{n'}$ и волновой функцией $\psi_{n'}(\mathbf{r}_1,...,\mathbf{r}_Z)$.

По прошествии некоторого времени рассеиваемый электрон испытывает взаимодействие с атомом и затем может быть обнаружен снова вдали от атома как частица, свободно движущаяся с тем или иным импульсом $\mathbf{p}$ и энергией $\varepsilon_{\mathbf{p}} = p^2/2m$. К этому же времени атом может быть обнаружен в стационарном состоянии $|n\rangle$, не обязательно совпадающем с начальным состоянием. Например, если начальным является основное состояние атома, то в результате взаимодействия с падающим извне электроном атом с определенной вероятностью перейдет в одно из возбужденных состояний, или будет ионизован, или так и останется в основном состоянии. Амплитуды вероятности $c_{\mathbf{p},n}(t)$ всех подобных событий определяются вектором состояния системы $|\psi(t)\rangle$. Его эволюция подчинена волновому уравнению Шредингера,

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

с гамильтонианом (1), включающим оператор взаимодействия (2), причем начальным условием служит равенство $|\psi(t_{нач})\rangle$ начальному вектору

состояния (3). Амплитуды вероятности $c_{\mathbf{p},n}(t)$ являются коэффициентами разложения конечного вектора состояния $\left|\psi(t)\right\rangle$,

$$\left|\psi(t)\right\rangle = \sum_{\mathbf{p}}\sum_{n} c_{\mathbf{p},n}(t)\ \left|\mathbf{p}\right\rangle\otimes\left|n\right\rangle,$$

по базисным состояниям вида

$$\left|f\right\rangle = \left|\mathbf{p}\right\rangle\otimes\left|n\right\rangle. \qquad (4)$$

Не повторяя известный вывод формул для вероятностей переходов в первом приближении теории возмущений, сразу воспользуемся золотым правилом, согласно которому вероятность перехода $i \to f$ за единицу времени есть

$$w = \frac{2\pi}{\hbar}\left|M_{fi}\right|^2 \rho_f(\varepsilon_i),\ \text{где}\ \ \varepsilon_i = \varepsilon_f. \qquad (5)$$

Условие равенства энергий конечного и начального состояний всей системы ($\varepsilon_f = \varepsilon_i$ – закон сохранения энергии) в рассматриваемой задаче имеет вид:

$$p^2/2m + E_n = p'^2/2m + E_{n'}. \qquad (6)$$

Матричный элемент перехода $i \to f$ в первом приближении теории возмущений вычисляется по волновым функциям состояний (3) и (4) с учетом выражения для оператора возмущения (2):

$$M_{fi} = \left\langle f\left|\hat{V}\right|i\right\rangle =$$

$$= \frac{1}{V}\int d^3\mathbf{r}\int\left(\prod_{i=1}^{Z} d^3\mathbf{r}_i\right)\psi_n^*(\mathbf{r}_1,...,\mathbf{r}_Z)\,\psi_{n'}(\mathbf{r}_1,...,\mathbf{r}_Z)\,e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\left(\sum_{i=1}^{Z}\frac{e^2}{\left|\mathbf{r}-\mathbf{r}_i\right|}-\frac{Ze^2}{r}\right). \qquad (7)$$

где

$$\mathbf{q} = (\mathbf{p}-\mathbf{p}')/\hbar. \qquad (8)$$

Ограничимся рассмотрением процессов упругого рассеяния. Столкновение частиц называется *упругим*, если в процессе столкновения не происходит превращения исходных частиц в новые частицы и не меняется внутреннее состояние сталкивающихся частиц. Применительно к

соударениям электрона с атомом это определение означает, что в акте упругого взаимодействия электрона и атома меняется только вектор импульса рассеиваемого электрона, а квантовое состояние атома остается неизменным:

$$n = n'. \tag{9}$$

Из равенства (6) при этом следует, что энергия электрона и величина его импульса не меняются при упругом рассеянии:

$$p = p'. \tag{10}$$

Изменяется лишь направление импульса рассеиваемого электрона.

Матричный элемент (7) можно представить в виде

$$M_{fi} = u(\mathbf{q})/V, \tag{11}$$

где с учетом (9)

$$u(\mathbf{q}) = \int d^3\mathbf{r}\; e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \int \left(\prod_{i=1}^{Z} d^3\mathbf{r}_i \right) \left|\psi_{n'}(\mathbf{r}_1,...,\mathbf{r}_Z)\right|^2 \left(\sum_{i=1}^{Z} \frac{e^2}{\left|\mathbf{r}-\mathbf{r}_i\right|} - \frac{Ze^2}{r} \right). \tag{12}$$

Плотность конечных состояний электрона с направлением импульса $\mathbf{p}$ внутри телесного угла $d\Omega_{\mathbf{p}}$ есть

$$\rho_f = \frac{V p m}{(2\pi\hbar)^3}\, d\Omega_{\mathbf{p}}. \tag{13}$$

Подставив (11) и (13) в (5), получим

$$w = \frac{1}{V} \frac{p m}{(2\pi\hbar^2)^2} \left|u(\mathbf{q})\right|^2 d\Omega_{\mathbf{p}}. \tag{14}$$

Поскольку это выражение содержит нормировочный объем V волновой функции электрона, целесообразно рассматривать вместо вероятности перехода в единицу времени дифференциальное сечение рассеяния $d\sigma = w/j_{nad}$, где j_{nad} – плотность потока падающих на атом электронов в состоянии, описываемом волновой функцией $\psi_{\mathbf{p}'} = V^{-1/2} e^{i\mathbf{p}'\cdot\mathbf{r}/\hbar}$:

$$j_{nad} = \frac{p'}{m}\left|\psi_{\mathbf{p}'}\right|^2 = \frac{p}{mV}. \qquad (15)$$

Разделив (14) на (15), приходим к формуле Борна

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{\mathbf{p}}} = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2 \left|u(\mathbf{q})\right|^2, \qquad (16)$$

показывающей, что сечение рассеяния в данной задаче определяется величиной (12). Рассмотрим эту величину внимательнее.

Используя условие нормировки волновой функции атомных электронов на единицу,

$$\int\left(\prod_{i=1}^{Z} d^3\mathbf{r}_i\right)\left|\psi_{n'}(\mathbf{r}_1,...,\mathbf{r}_Z)\right|^2 = 1,$$

и вспоминая известное выражение для компоненты Фурье кулоновского потенциала (см. формулу (2) задачи 9.14), можем сразу найти вклад последнего слагаемого под знаками интегралов в (12), соответствующего взаимодействию рассеиваемого электрона с ядром атома:

$$\int d^3\mathbf{r}\, e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\left(-\frac{Ze^2}{r}\right) = -\frac{4\pi e^2}{q^2}Z. \qquad (17)$$

Далее, заметим, что зависящая от $\mathbf{r}_j$ величина

$$\int\left(\prod_{i\neq j} d^3\mathbf{r}_i\right)\left|\psi_{n'}(\mathbf{r}_1,...,\mathbf{r}_j,...,\mathbf{r}_Z)\right|^2 \qquad (18)$$

представляет собой плотность вероятности обнаружить один из атомных электронов около точки $\mathbf{r}_j$. Введем в рассмотрение полную *плотность электронов* $n(\mathbf{r})$ атома в заданном состоянии $\left|n'\right\rangle$, определив эту функцию формулой

$$n(\mathbf{r}_j) = Z\int\left(\prod_{i\neq j} d^3\mathbf{r}_i\right)\left|\psi_{n'}\right|^2. \qquad (19)$$

Тогда (12) примет вид

$$u(\mathbf{q}) \;=\; -\frac{4\pi e^2}{q^2}\,Z \;+\; \int d^3\mathbf{r}\; e^{-i\,\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \sum_{j=1}^{Z} \frac{1}{Z} \int d^3\mathbf{r}_j\; \frac{e^2 n(\mathbf{r}_j)}{\left|\mathbf{r}-\mathbf{r}_j\right|} \;=$$

$$= -\frac{4\pi e^2}{q^2}\,Z \;+\; \int d^3\mathbf{r}\; e^{-i\,\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \int d^3\mathbf{r}'\; \frac{e^2\, n(\mathbf{r}')}{\left|\mathbf{r}-\mathbf{r}'\right|}, \qquad (20)$$

где мы учли, что интеграл по координатам электрона с номером j не зависит от этого номера. Воспользуемся снова выражением для компоненты Фурье кулоновского потенциала, поменяв в правой стороне (20) порядок интегрирования и сделав замену $\mathbf{r} \to \mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$:

$$\int d^3\mathbf{r}\; e^{-i\,\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\, \frac{1}{\left|\mathbf{r}-\mathbf{r}'\right|} \;=\; e^{-i\,\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'} \int d^3\mathbf{R}\; e^{-i\,\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}}\, \frac{1}{\left|\mathbf{R}\right|} \;=\; e^{-i\,\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'}\, \frac{4\pi}{q^2}. \qquad (21)$$

С учетом (21) выражение (20) запишется в форме

$$u(\mathbf{q}) \;=\; -\frac{4\pi e^2}{q^2}\,Z \;+\; \frac{4\pi e^2}{q^2} \int d^3\mathbf{r}'\; e^{-i\,\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'}\, n(\mathbf{r}'). \qquad (22)$$

Введем в рассмотрение компоненту Фурье $F(\mathbf{q})$ плотности атомных электронов $n(\mathbf{r})$:

$$F(\mathbf{q}) \;=\; \int d^3\mathbf{r}\; e^{-i\,\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\, n(\mathbf{r}). \qquad (23)$$

Величина (23) называется *атомным формфактором*. При этом мы получаем окончательное выражение для функции (22):

$$u(\mathbf{q}) \;=\; -\frac{4\pi e^2}{q^2}\,\big(Z - F(\mathbf{q})\big). \qquad (24)$$

Величину q^2 можно записать как $q^2 = (8m\varepsilon/\hbar^2)\sin^2(\theta/2)$, где θ – угол рассеяния электрона, m – масса электрона, ε – энергия рассеиваемого электрона (энергия на бесконечности). Таким образом, дифференциальное сечение упругого рассеяния электронов атомом, найденное в борновском приближении (по формуле (16)), имеет вид

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{\mathbf{p}}} \;=\; \frac{4m^2e^4}{(\hbar q)^4}\,\big|\,Z - F(\mathbf{q})\,\big|^2 \;=\; \left(\frac{e^2}{4\varepsilon}\right)^2 \frac{1}{\sin^4(\theta/2)}\,\big|\,Z - F(\mathbf{q})\,\big|^2. \qquad (25)$$

Для атома характерная величина потенциала $|U|$ и кинетическая энергия электронов имеют порядок $\hbar^2/ma^2$, где a – порядок величины размера атома. Поэтому условие применимости борновского приближения здесь сводится к неравенству $pa/\hbar >> 1$, означающему, что скорость рассеиваемого электрона должна быть велика по сравнению со скоростями электронов в атоме.

В области достаточно больших углов рассеяния, при $qa >> 1$, атомный формфактор мал, так как множитель $e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$ в подынтегральном выражении (23) является быстро осциллирующей функцией. Пренебрегая в (25) величиной $F(\mathbf{q})$ по сравнению с Z, приходим к формуле Резерфорда для сечения рассеяния быстрых электронов ядром атома.

В области малых углов рассеяния, при $qa << 1$, следует разложить (23) в ряд по степеням $\mathbf{q}$, полагая

$$e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} = 1 - i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} - (\mathbf{q}\cdot\mathbf{r})^2/2 + \ldots . \qquad (26)$$

С учетом определения (19) и условия нормировки волновой функции атомных электронов на единицу член нулевого порядка дает:

$$F(0) = \int d^3\mathbf{r}\; n(\mathbf{r}) = Z\int\left(\prod_{i=1}^{Z} d^3\mathbf{r}_i\right)\left|\psi_{n'}\right|^2 = Z . \qquad (27)$$

Этого приближения не достаточно для вычисления (25). Член первого порядка пропорционален дипольному электрическому моменту атома; при отсутствии зависимости функции $n(\mathbf{r}) = n(r)$ от углов дипольный момент атома заведомо обращается в нуль:

$$\int d^3\mathbf{r}\;\mathbf{r}\; n(r) = 0 . \qquad (28)$$

Неисчезающий вклад в (25) дает член второго порядка; с учетом равенства

$$\int \frac{d\Omega}{4\pi}(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r})^2 = \frac{1}{3}q^2r^2 \qquad (29)$$

находим

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{\mathbf{p}}} = \left(\frac{1}{3a_B}\int d^3\mathbf{r}\; r^2\, n(r)\right)^2 . \qquad (30)$$

Таким образом, в области малых углов сечение упругого рассеяния электронов атомом не зависит от угла рассеяния и определяется средним квадратом расстояния атомных электронов от ядра.

В заключение найдем по формуле (25) сечение упругого рассеяния быстрых электронов на атоме водорода в основном состоянии [1,8].

Волновая функция основного состояния атома водорода имеет вид:

$$\psi_0(\mathbf{r}) \;=\; \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}\, e^{-r/a}, \tag{31}$$

где $a = a_B$. «Плотность электронов» с учетом того, что $Z = 1$, есть

$$n(r) \;=\; \left|\psi_0\right|^2 \;=\; \frac{1}{\pi a^3}\, e^{-2r/a}. \tag{32}$$

Вычисление атомного формфактора (23) с функцией (32) дает:

$$F(q) \;=\; \frac{1}{\pi a^3}\int d^3\mathbf{r}\; e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}-2r/a} \;=\; \frac{16}{(4+q^2a^2)^2}. \tag{33}$$

Подставляя (33) в (25), получаем:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{\mathbf{p}}} \;=\; a^2\,\frac{4(8+q^2a^2)^2}{(4+q^2a^2)^4}, \qquad a = a_B. \tag{34}$$

С учетом условия применимости борновского приближения ($ka >> 1$, где $k = p/\hbar$) полное сечение рассеяния, как можно убедиться, равно

$$\sigma \;\approx\; a^2\,\frac{7\pi}{3(ka)^2}. \tag{35}$$

Отметим, что результат (34) можно получить непосредственно по формуле (16), если под $u(\mathbf{q})$ понимать компоненту Фурье поля

$$U(\mathbf{r}) \;=\; -\left(\frac{e^2}{r}+\frac{e^2}{a}\right)e^{-2r/a}. \tag{36}$$

Такая форма энергии взаимодействия рассеиваемого электрона с атомом водорода отвечает наличию эффективного электростатического

потенциала $\varphi(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r})/e$. Согласно уравнению Пуассона, это соответствует распределению плотности заряда в атоме водорода вида

$$\rho(\mathbf{r}) \;=\; -\frac{1}{4\pi}\Delta\varphi(\mathbf{r}) \;=\; |e|\,\delta(\mathbf{r}) \;+\; e\,|\psi_0(\mathbf{r})|^2, \qquad (37)$$

где $\psi_0(\mathbf{r})$ – волновая функция атомного электрона (31). Первый член в правой стороне (37), очевидно, описывает точечное ядро, а второй – электронное «облако» атома водорода. Соотношение (12) приводит к аналогичному выводу и в общем случае: в рассматриваемой задаче об упругом рассеянии электронов на атоме электрически нейтральному атому с Z электронами в заданном стационарном состоянии можно сопоставить эффективное распределение плотности заряда

$$\rho(\mathbf{r}) \;=\; Z|e|\,\delta(\mathbf{r}) \;+\; e\,n(\mathbf{r}), \qquad (38)$$

равное сумме вкладов точечного ядра и окружающего ядро облака атомных электронов.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. *Ландау Л.Д.* Квантовая механика / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – М.: Физматлит, 2001. – 803 с.

2. *Дирак П.* Принципы квантовой механики / П. Дирак. – М.: Наука, 1979. – 480 с.

3. *Давыдов А.С.* Квантовая механика / А.С. Давыдов. – М.: Наука, 1973. – 703 с.

4. *Соколов А.А.* Квантовая механика и атомная физика / А.А. Соколов, И.М. Тернов. – М.: Просвещение, 1970. – 424 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. *Фейнман Р.* Фейнмановские лекции по физике. Задачи и упражнения с ответами и решениями к выпускам 5–9 / Р. Фейнман, Р. Лейтон, М. Сэндс. – М.: Едиториал УРСС, 2004. – 360 с.

7. *Флюгге З.* Задачи по квантовой механике: в 2 т. / З. Флюгге. – М.: Мир, 1974. – 656 с.

8. *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.

9. *Елютин П.В.* Квантовая механика с задачами / П.В. Елютин, В.Д. Кривченков. – М.: Физматлит; УНЦ довузовского образования МГУ, 2001. – 304 с.

10. *Бете Г.* Квантовая механика / Г. Бете. – М.: Мир, 1965. – 333 с.

Лыков Сергей Николаевич
Гасумянц Виталий Эдуардович
Рыков Сергей Александрович

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА
ЗАДАЧИ С РЕШЕНИЯМИ

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 28.12.2008. Формат 60×84/16. Печать цифровая.
Усл. печ. л. 16,25. Уч.-изд. л. 16,25. Тираж 200. Заказ 3807b.

Отпечатано с готового оригинал-макета, представленного авторами,
в Цифровом типографском центре Издательства Политехнического университета.
195251, Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29.
Тел.: (812) 550-40-14
Тел./факс: (812) 297-57-76