

Лекции по квантовой механике I

Э.Т.Ахмедов

Использованная литература

- Л.Д.Ландау и Е.М.Лифшиц, 3й том.
- Ю.М.Белоусов, Лекции по квантовой механике.
- В.В.Киселев, Лекции по квантовой механике.
- Э.Ферми, Лекции по квантовой механике.
- V.Akhmedova and E.T.Akhmedov, Selected special functions for fundamental physics.

Благодарю Кирилла Базарова за помощь в оформлении рисунков и Лианну Акопян за помощь в правке текста.

Содержание

- I. Лекция.** *Интерференция, корпускулярно-волновой дуализм, предпосылки вероятностной интерпретации квантовой механики, атомные величины, волновая функция электрона, стационарное уравнение Шредингера для свободного электрона, принцип суперпозиции, связь между различными релятивистскими и нерелятивистскими волновыми уравнениями и уравнениями Гамильтона-Якоби и эйконала.* **5**
- II. Лекция.** *Нестационарное уравнение Шредингера для кванта в потенциале, уравнение непрерывности для плотности вероятности, стационарное уравнение Шредингера, одномерное уравнение Шредингера, волновой пакет, групповая и фазовая скорости, пространство Гильберта, нормировка волновой функции в непрерывном и дискретном спектре, квантовая механика свободной частицы на окружности.* **20**
- III. Лекция.** *Операторы и наблюдаемые в квантовой механике, операторы импульса, координаты и Гамильтона, измерение в квантовой механике и вероятностная интерпретация, коммутатор двух операторов и коммутационные соотношения Гейзенберга, операторы инверсии и трансляции, бра и кет абстрактные векторы в пространстве Гильберта, координатное и импульсное представления, эрмитово сопряжение и эрмитов (самосопряженный) оператор, свойства операторов.* **34**
- IV. Лекция.** *Основные положения квантовой механики, еще раз об измерении в квантовой механике, оператор эволюции, представления Шредингера и Гейзенберга, интегралы движения, соотношение неопределенностей Гейзенберга, теоремы Эренфеста, операторы инверсии и трансляции и их свойства.* **51**
- V. Лекция.** *Простейшие задачи одномерной квантовой механики, (вариационный) принцип наименьшего действия для стационарного уравнения Шредингера, условия сшивки волновых функций, нормировка волновой функции на единичный поток, осцилляторная теорема, квантовый линейный осциллятор.* **65**
- VI. Лекция.** *Уровни энергии и волновые функции квантового линейного осциллятора, лестничные операторы, полиномы Эрмита и их свойства, когерентные состояния, методы перева-*

VI Шекция. *Квазиклассика как приближенный метод решения уравнения Шредингера, пределы применимости квазиклассического приближения, квазиклассическая волновая функция в классически запрещенной и разрешенной зонах, условия шивки в квазиклассике, метод Цваана, линии Стокса, условия квантования Бора–Зоммерфельда, фазовый объем, нормировка квазиклассической волновой функции, туннелирование в квазиклассическом приближении.*

98

VI Шекция. *Алгебры и группы Ли, алгебра Гейзенберга и ее реализации, алгебра $so(2)$ и группа вращений двумерной плоскости и ее реализации, алгебра $so(3)$ и ее реализации, оператор момента импульса.*

112

IX Лекция. *Собственные состояния оператора момента импульса или представления алгебры трехмерных вращений, некоторые простейшие примеры представлений, спин, трехмерный (двухкомпонентный) нерелятивистский спинор, матрицы Паули и их свойства, алгебра Клиффорда в трех измерениях, гамильтониан взаимодействия магнитного момента и спина с внешним магнитным полем.*

125

X. Лекция. *Тожественность частиц, бозоны и фермионы, волновые функции двух бозонов и фермионов, определитель Слеттера, спиновые векторы состояний для двух частиц со спином $1/2$, примеры реализации теоремы Неттер в квантовой механике, принцип наименьшего действия и стационарное уравнение Шредингера в криволинейных координатах, оператор Лапласа на двумерной сфере.*

138

XI Лекция. *Собственные функции оператора Лапласа на сфере и их связь с собственными состояниями квадрата оператора момента импульса; полиномы Лежандра, их полнота и ортонормированность, связь с мультипольным разложением; ассоциированные полиномы Лежандра; сферические гармоники и их свойства.*

152

XI Шекция. *Задача двух тел в квантовой механике, радиальное уравнение Шредингера, эффективная одномерная задача для радиального движения в трех измерениях, движение в поле Ку-*

лона, радиальная волновая функция для водородоподобного атома, спектр энергий, вырождение уровней энергии в атоме водорода.

166

I. Лекция. *Интерференция, корпускулярно-волновой дуализм, предпосылки вероятностной интерпретации квантовой механики, атомные величины, волновая функция электрона, нестационарное уравнение Шредингера для свободного электрона, принцип суперпозиции, связь между различными релятивистскими и нерелятивистскими волновыми уравнениями и уравнениями Гамильтона-Якоби и эйконала.*

1. Начнем наше обсуждение квантовой механики с рассмотрения экспериментальных данных, подтверждающих корпускулярно-волновой дуализм. Мы обсудим мысленный эксперимент, который основан на опытных данных, полученных в результате большого количества реальных экспериментов, поставленных в разное время за последние 150–200 лет. Не все эти эксперименты про квантовую механику. И опыты, подтверждающие квантовую механику, не исчерпываются теми, что мы сейчас обсудим.

Итак, рассмотрим интерференцию света¹. Пусть у нас имеется источник когерентного света (лазер), в котором мы можем менять частоту и интенсивность в очень широких диапазонах; стена с двумя узкими прямоугольными щелями, ширину которых мы тоже можем менять, и чувствительный сенсорный экран. Пусть вся эта конструкция помещена в камеру, в которой мы можем как менять степень вакуума, так и нагнетать плотность воздуха и пыли. И у нас имеются фотодетекторы, которые мы можем помещать в щели.

Для начала рассмотрим ситуацию, в которой соблюдаются стандартные условия для интерференции света: расстояния между источником света, стеной и экраном (D_1, D_2) достаточно велики по сравнению с длиной волны, λ ; ширина щелей, d , и расстояние между ними, l , сравнимо с длиной волны; вся конструкция находится в обычном воздухе или вакууме (не имеет значения). Сенсоры на экране можно отключить, так как картина видна невооруженным взглядом.

Тогда при достаточно высокой интенсивности излучения от источника мы увидим интерференционную картину, изображенную на рис. 1. Как известно, для получения такой картины важно, чтобы источник света создавал в щелях когерентные колебания электромагнитного излучения. То есть, чтобы в щелях согласовывались амплитуды,

¹Мы хотим для начала обсудить свет, а не электроны, потому, что для электромагнитных волн легче получить достаточно большую длину волны и высокую интенсивность, чем для электронов, как станет ясно из дальнейшего обсуждения.

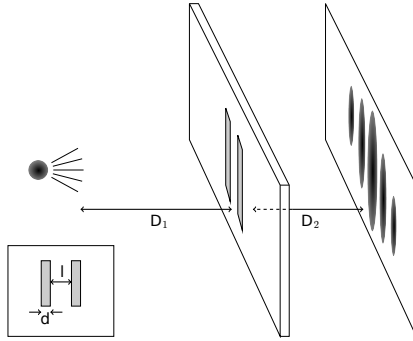


Рис. 1:

частоты и фазы колебаний: можно сказать, что щели служат источниками вторичных волн.

От точечного источника до стенки с щелями мы имеем почти сферическую волну, которую в окрестности щелей можно считать почти плоской ввиду ее большого радиуса $D_1 \gg l, d$. Между экраном и стенкой мы получим с хорошей точностью две цилиндрические волны. Если забыть про то, что они цилиндрические, то схематично обсуждаемую интерференционную картину можно описать следующими формулами:

$$I_x \sim |E_{1x} + E_{2x}|^2 \sim |e^{i\phi_{1x}} + e^{i\phi_{2x}}|^2 = 2 [1 + \cos(\phi_{1x} + \phi_{2x})], \quad (1)$$

где I_x — это интенсивность света в точке x на экране, E_{1x} — это любая из компонент электрического или магнитного поля, создаваемая излучением от щели под номером 1 в обсуждаемой точке экрана, E_{2x} — то же самое для щели 2, а ϕ_{1x} и ϕ_{2x} — это соответствующие фазы волн.

Посмотрим теперь, что будет происходить при очень низкой интенсивности. То есть мы начнем потихонечку увеличивать интенсивность излучения источника от нуля. В такой ситуации мы “увидим” отдельные всплески на сенсорном экране², как изображено на рис. 2. Чтобы зарегистрировать эти всплески, необходимо включить сенсоры, так как чувствительность глаз где-то в 10 раз меньше необходимой. Мы можем сделать интенсивность столь низкой, что временной промежуток между отдельными всплесками будет больше, чем время

²Смотрите, например, видео про эксперимент НІТАСНІ на youtube.

прохождения светового сигнала от источника до сенсорного экрана. Мы можем видеть такую картину как в вакууме, так и в обычном воздухе.

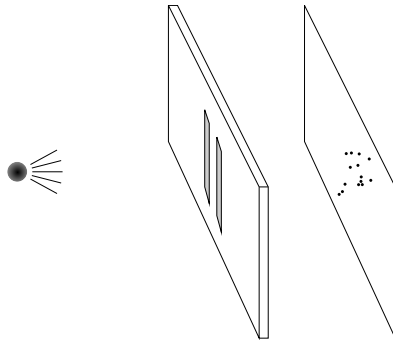


Рис. 2:

Обсуждаемая ситуация наводит на мысль, что поток интенсивного света состоит из отдельных частиц или корпускул. Действительно, если запоминать (скажем, при помощи компьютера, присоединенного к сенсорам), где возникают всплески, то через некоторое время мы получим интерференционную картину, состоящую из отдельных точек, как изображено на рис. 3. То есть там, где в интерференционной картине были яркие пятна, мы получим много всплесков, а где были затемнения, там вообще не будет возбужденных сенсоров.

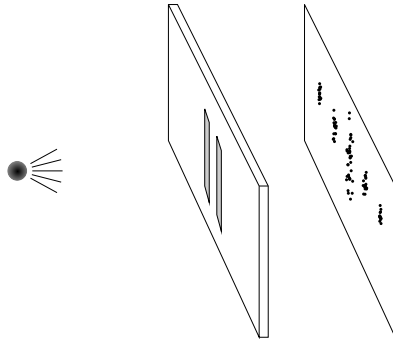


Рис. 3:

Однако, нетрудно понять, что частицы не могут создать интерференцию. Действительно, что запрещает им попадать в те места,

где имеются затемнения в интерференционной картине? При двух щелях корпускулы могут создать не более двух пятен, как изображено на рис. 4. Все зависит от интенсивности рассеяния частиц на границах щелей. Заметим, что мы специально создали такую низкую интенсивность, чтобы корпускулы не взаимодействовали между собой, то есть каждая из них летела от источника до экрана независимо от других частиц.

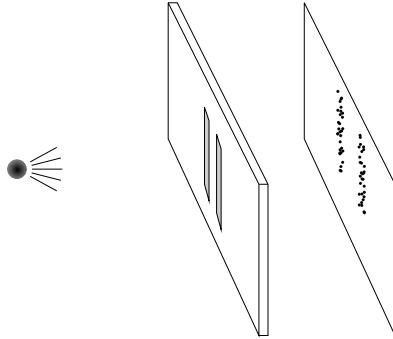


Рис. 4:

Чтобы детально изучить явление, начнем менять все параметры эксперимента, изменение которых нам доступно. Если менять либо ширину щелей d , либо длину волны λ (частоту) излучения, то мы увидим следующее явление. При высокой интенсивности интерференционная картина будет наблюдаться при условии, что

$$\lambda/d \geq 1. \tag{2}$$

Если же

$$\lambda/d \ll 1, \tag{3}$$

то интерференционная картина пропадет, и мы увидим лишь два пятна.

То же самое мы получим и при очень низкой интенсивности — в зависимости от величины отношения λ/d будут, соответственно, интерференционная картина или два пятна, состоящие из точек, как на рис. 3 и 4.

Далее, поставим в одну из щелей (или даже в обе щели) фотодетектор. Если корпускула идет через данную щель, то соответствующий детектор с ней взаимодействует. Нам, при этом, совершенно даже и не надо знать, в какой из щелей это произошло. В обсуждаемых ситуациях интерференционная картина пропадет, и мы увидим лишь два пятна, вне зависимости от того, велика ли интенсивность или нет и каково отношение длины волны к ширине щелей.

Наконец, начнем увеличивать плотность пыли в установке не меняя остальных параметров. При достаточно высокой плотности и при определенных свойствах частиц пыли мы увидим, как интерференционная картина размоется.

Последние две ситуации мы описали для того, чтобы подчеркнуть, насколько важна когерентность излучений между двумя щелями. Детекторы в них и пыль в камере разрушают эту когерентность.

Итак, при высокой интенсивности свет ведет себя как электромагнитная волна, а при низкой — и как волна (ведь по какой-то причине возникает интерференционная картина), и как корпускула (ведь мы получаем точечное взаимодействие с сенсорами на экране — всплески). Но если фотон (квант или корпускула света) ведет себя как волна, то волна чего?

2. Все, что мы рассмотрели выше — это объективные экспериментальные данные. Обсудим теперь, как их интерпретирует квантовая механика.

От момента возникновения в источнике и до взаимодействия с сенсором на экране или с детектором, то есть пока квант света является изолированной системой, он ведет себя как волна, которая описывается теми же уравнениями, что и обычные электромагнитные волны. А амплитуда этой волны в данной точке определяет вероятность того, что квант окажется там и провзаимодействует с соответствующим прибором (сенсором или детектором в обсуждаемом случае). При этом, очевидно, что, чем выше вероятность попадания фотона в данную область, тем больше актов воздействия фотонов из потока на сенсоры в экране в этой области. Соответственно, мы получаем больше всплесков. А чем ниже вероятность, тем меньше точек засвечивания.

В результате в случае каждого отдельного кванта мы имеем дело с волной вероятности, которая интерферирует сама с собой на двух щелях, так же как это делает электромагнитная волна. Именно этим и объясняется возникновение запретов отдельным фотонам попадать в затемненные области картины интерференции.

Подчеркнем еще раз, что для интерференции важна когерентность волн из двух щелей. Если в щелях стоят детекторы, то квант

взаимодействуя с ними меняет свое состояние. Поэтому когерентность теряется. В частности, система, в данном случае состоящая из одного кванта, перестает быть замкнутой. Микроскопический фотон входит в контакт с макроскопическим сенсором или детектором. После чего его состояние меняется существенным образом, как мы обсудим ниже.

Подчеркнем также, что для обсуждения вероятностной картины необходимо большое число событий. То есть не один фотон, а целый поток. Необходимо набрать достаточно большое количество точек на экране, например. Однако мы вынуждены описывать эту картину из поведения каждого фотона поотдельности.

Далее для фотона и плоской монохроматической электромагнитной волны мы имеем соотношения:

$$E = \hbar\omega, \quad p = \frac{E}{c} = \hbar\frac{\omega}{c} = \hbar k, \quad \hbar \approx 1,054 \cdot 10^{-27} \text{ erg} \cdot \text{sec},$$

где E и p — это его энергия и модуль импульса, а ω и k — это его частота и модуль волнового вектора. Из курса теории поля мы знаем, что плоская монохроматическая электромагнитная волна описывается выражением вида:

$$\vec{E}(\underline{x}) = \vec{E}_0 e^{-ik \cdot \underline{x}} = \vec{E}_0 e^{-i\omega t + i\vec{k}\vec{x}}, \quad (4)$$

где $\underline{x} = (ct, \vec{x})$ — 4-вектор координаты, $\underline{k} = (\omega/c, \vec{k})$ — волновой 4-вектор, а \vec{E}_0 — комплексный вектор, который определяет амплитуду и начальную фазу волны. Этот вектор $\vec{E}(\underline{x})$ решает волновое уравнение вида:

$$\square \vec{E}(\underline{x}) = 0, \quad (5)$$

если $|\vec{k}| \equiv k = \omega/c$, которое следует из уравнений Максвелла в определенной калибровке. Это читатель должен был пройти на курсе теории поля. Такие же выражения мы имеем и для магнитного поля в волне и для вектор-потенциала.

Аналогично волну вероятности для отдельного фотона (так называемую волновую функцию) можно описать в виде решения этого же волнового уравнения, которое имеет вид:

$$\vec{E}(\underline{x}) = \vec{E}_0 e^{\frac{-iEt + i\vec{p}\vec{x}}{\hbar}}. \quad (6)$$

То есть все формулы те же самые, а физический смысл различный — одно выражение описывает интенсивную электромагнитную волну (4), а другое — волну вероятности для отдельного кванта (6).

Соответственно и у формулы (1) в случае низкой интенсивности (для одного кванта) мы имеем иную интерпретацию. А именно I_x теперь имеет смысл потока вероятности через точку x на экране, а выражение $E_{1x} + E_{2x}$ задает так называемую суперпозицию двух состояний фотона — он прошел через первую и через вторую щель.

Здесь мы очень схематично обсудили вероятностную интерпретацию в квантовой механике и волновую функцию на примере фотонов. В дальнейшем в наших лекциях мы будем неоднократно возвращаться к вероятностной интерпретации и обсудим ее более подробно.

3. Все, о чем было рассказано выше, можно увидеть и для электронов. Только в этом случае тяжелее добиться выполнения условия (2) и отдельно высокой интенсивности. Как мы сейчас покажем, в привычных нам условиях длина волны электрона оказывается порядка таковой для фотона из рентгеновского спектра, то есть очень короткой. Поэтому для электронов проще получается картинка на рис. 4, а не на рис. 1.

Прежде чем обсудить какая волна вероятности описывает свободный электрон, мы введем так называемые атомные величины. Это поможет нам почувствовать масштабы тех физических явлений, которые будут обсуждаться на этих лекциях. Мы построим эти величины из размерностных соображений, используя заряд электрона e , его массу m , постоянную Планка \hbar и скорость света c . Они должны присутствовать в описании рассматриваемых явлений.

Безразмерная величина, которую можно построить из e , \hbar и c , — это так называемая постоянная тонкой структуры:

$$\frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}.$$

Она играет важную роль в квантовой механике и электродинамике. Соответствующая характерная скорость электрона в атоме определяется как:

$$v_0 = \frac{e^2}{\hbar} \approx \frac{c}{137},$$

то есть является нерелятивистской. Поэтому характерная энергия равна:

$$E_0 = \frac{mv_0^2}{2} = \frac{me^4}{2\hbar^2} \approx 0,5 \cdot 10^{-10} \text{ erg}.$$

При этом, $1eV = 1,6 \cdot 10^{-12}erg$. Следовательно $E_0 \approx 30eV$. Наконец, характерный атомный размер или характерная длина волны электрона в атоме тогда равна:

$$\lambda_0 = a_0 = \frac{\hbar}{mv_0} = \frac{\hbar^2}{me^2} \approx 0,5 \cdot 10^{-8}sm.$$

Такую длину волны имеют фотоны из рентгеновского спектра. Это как раз то, о чем мы говорили выше.

Наивно, чтобы “рассмотреть” объект размера a_0 в микроскоп, необходимо рассеять на нем фотон, имеющий длину волны короче, чем λ_0 , то есть частоту больше, чем $\omega_0 \approx 10^{18}sec^{-1}$. Энергия такого фотона имеет прядок $\hbar\omega_0 = 10^3eV \gg E_0$. Поэтому при попадании его по электрону с характерной энергией E_0 , состояние последнего сильно меняется.

Приблизительно такое же воздействие на электрон или фотон происходит при их контакте с макроскопическим прибором. Таким как детектор или сенсор. Это указывает на то, что повторное измерение физических величин для этой же квантовой системы (электрона или фотона) в том же состоянии крайне проблематично. Данные наблюдения существенно отличаются от нашего повседневного опыта с телами макроскопических массы и размеров.

4. Чтобы определить волны, которые описывают поведение электронов, вспомним, что длина волны фотона с волновым вектором $p = \hbar k$ определяется по формуле

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi\hbar}{p}.$$

По аналогии можно определить так называемую длину волны де Бройля для нерелятивистского электрона:

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{2\pi\hbar}{mv},$$

что подтверждается экспериментальными наблюдениями. Соответственно плоская монохроматическая волна, описывающая свободный электрон (не находящийся под воздействием сил и полей) с заданной энергией, описывается следующей формулой:

$$\Psi(\vec{x}, t) = A e^{\frac{-iEt + i\vec{p}\vec{x}}{\hbar}}, \quad E = \frac{p^2}{2m}. \quad (7)$$

Величина $\Psi(\vec{x}, t)$ называется волновой функцией электрона. Вектор ли амплитуда A или какая-то другая величина, то есть имеет ли электрон какую-то поляризацию, станет ясно из следующих лекций.

Аналогично тому, как для электромагнитной волны определяется интенсивность излучения,

$$dI = (\vec{S}, d\vec{\sigma}) \sim \left([\vec{E}, \vec{B}], d\vec{\sigma} \right) \sim |\vec{E}|^2 d\Omega,$$

через вектор Умова-Пойнтинга \vec{S} , из волновой функции $\Psi(\vec{x}, t)$ можно построить поток вероятности. Это будет сделано на следующей лекции. Также на следующей лекции будет показано, что с этим потоком через уравнение непрерывности связана плотность вероятности

$$dw = |\Psi(\vec{x}, t)|^2 d^3x.$$

Это аналогично тому, как вектор \vec{S} связан с плотностью электромагнитной энергии в волне. Величина dw определяет вероятность нахождения электрона в момент времени t в элементарном объеме d^3x в окрестности точки \vec{x} .

Теперь можно записать уравнение, которое решает волновая функция (7). Для этого вычислим ее производную по времени,

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{x}, t)}{\partial t} \equiv i\hbar \partial_t \Psi(\vec{x}, t) = E\Psi(\vec{x}, t) = \frac{\vec{p}^2}{2m} \Psi(\vec{x}, t),$$

пространственный градиент,

$$\frac{\partial \Psi(\vec{x}, t)}{\partial \vec{x}} \equiv \vec{\partial} \Psi(\vec{x}, t) \equiv \vec{\nabla} \Psi(\vec{x}, t) = \frac{i\vec{p}}{\hbar} \Psi(\vec{x}, t),$$

и лапласиан:

$$\Delta \Psi(\vec{x}, t) \equiv \vec{\partial}^2 \Psi(\vec{x}, t) = -\frac{\vec{p}^2}{\hbar^2} \Psi(\vec{x}, t).$$

Из этих соотношений сразу видно, что волновая функция (7) решает так называемое нестационарное уравнение Шредингера для свободной частицы:

$$i\hbar \partial_t \Psi(\vec{x}, t) = -\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} \Psi(\vec{x}, t), \quad (8)$$

которое является нерелятивистским аналогом волнового уравнения на электромагнитные поля. Оно линейно по $\Psi(\vec{x}, t)$. Поэтому если имеются два его решения $\Psi_1(\vec{x}, t)$ и $\Psi_2(\vec{x}, t)$ то и

$$a_1 \Psi_1(\vec{x}, t) + a_2 \Psi_2(\vec{x}, t)$$

решает это уравнения при любых комплексных постоянных $a_{1,2}$. Это наблюдение является отражением так называемого принципа суперпозиции и означает следующее. Волновая функция характеризует квантовое состояние электрона, а электрон может находиться в суперпозиции нескольких состояний. Например, в эксперименте с двумя щелями величина:

$$\Psi_1(\vec{x}, t) + \Psi_2(\vec{x}, t)$$

характеризует суперпозицию двух состояний электрона: в первом он прошел через первую щель, а во втором — он прошел через вторую. Соответственно вместо формулы (1) для потока вероятности мы имеем:

$$I_x \sim |\Psi_1(\vec{x}, t) + \Psi_2(\vec{x}, t)|^2$$

Итак, на данный момент, воспользовавшись экспериментальными наблюдениями, мы мотивировали введение волновой функции, ее вероятностную интерпретацию и принцип суперпозиции.

5. Обсудим теперь иной (скажем так, теоретический) взгляд на происхождение нестационарного уравнения Шредингера для свободной частицы. Любое решение уравнения (5) имеет скорость света, а потому не может описывать нерелятивистскую частицу. В каком же тогда релятивистском волновом уравнении можно взять нерелятивистский предел и получить уравнение (8)?

Чтобы ответить на этот вопрос мы пойдем немного окольным путем, а заодно установим связи между различными, казалось бы совершенно друг с другом не связанными, уравнениями. Перепишем уравнение (5) в виде:

$$\hbar^2 \square \Psi(\vec{x}, t) = 0, \tag{9}$$

где Ψ может быть любой из компонент электрического или магнитного поля или же вектор потенциала. Будем искать решение этого уравнения в виде:

$$\Psi(\vec{x}, t) = e^{i \frac{S(\vec{x}, t)}{\hbar}}, \tag{10}$$

где величина $S(\vec{x}, t)/\hbar$ в геометрической оптике называется эйконалом. В простейшем случае плоской монохроматической волны эйконал

имеет вид, который следует из уравнения (6): $S = -Et + \vec{p}\vec{x}$. В случае же волнового пакета $S(\vec{x}, t)$ может иметь и более сложную форму.

Подставим выражение (10) в (9) и найдем уравнение на эйконал в пределе геометрической оптики. Это такой предел, в котором $S/\hbar \gg 1$, а также и градиенты величины S/\hbar на характерных размерах системы намного больше единицы³. В простейшем случае такая ситуация, например, отвечает картине, в которой волновой вектор k и размер щели d связаны соотношением $kd \gg 1$. Это совпадает с пределом (3), в котором вместо интерференционной картины мы получаем два пятна⁴. То есть это ситуация, в которой волновыми свойствами электромагнитного излучения можно пренебречь и обсуждать лучи света. Это как раз и делается в геометрической оптике.

Итак, учитывая, что

$$\partial_\mu e^{i\frac{S}{\hbar}} = \frac{i\partial_\mu S}{\hbar} e^{i\frac{S}{\hbar}}$$

и

$$\square e^{i\frac{S}{\hbar}} \equiv \partial^\mu \partial_\mu e^{i\frac{S}{\hbar}} = \partial^\mu \left(\frac{i\partial_\mu S}{\hbar} e^{i\frac{S}{\hbar}} \right) = \left[i\frac{\square S}{\hbar} - \frac{\partial_\mu S \partial^\mu S}{\hbar^2} \right] e^{i\frac{S}{\hbar}},$$

получаем в пределе геометрической оптики, что

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \hbar^2 \square e^{i\frac{S}{\hbar}} = \lim_{\hbar \rightarrow 0} \partial_\mu S \partial^\mu S e^{i\frac{S}{\hbar}} = 0,$$

то есть уравнение эйконала:

$$\partial_\mu S \partial^\mu S = 0. \quad (11)$$

Градиенты $S(\vec{x}, t)$ указывают направления распространения мировых линий света.

Полученное уравнение (11) имеет также и другое название и несколько иной смысл. В релятивистской механике оно называется уравнением Гамильтона-Якоби для безмассовой частицы. Его решением является действие $S(\vec{x}, t)$, вычисленное на классической (экстремальной) траектории. А именно, уравнение Гамильтона-Якоби решает действие для частицы:

³Обычно такой предел записывается как $\hbar \rightarrow 0$, но так как \hbar размерная величина, то и стремится к нулю она в соответствующих характерных масштабах.

⁴Дело в том, что если разлагать эйконал вокруг некоторой точки, то можно увидеть, что $\frac{S(\vec{x}, t)}{\hbar} \approx \frac{S(\vec{x}_0, t_0)}{\hbar} + \frac{\partial_t S(\vec{x}, t)}{\hbar} (t - t_0) + \frac{\vec{\partial} S(\vec{x}, t)}{\hbar} (\vec{x} - \vec{x}_0)$. И тогда в свете формулы (4) видна связь $\vec{k} = \vec{\partial} S(\vec{x}, t)/\hbar$ и $\omega = \partial_t S(\vec{x}, t)/\hbar$.

$$S[\underline{x}(\cdot)] = \int_{t_0}^t dt' L[\underline{x}(t'), \dot{\underline{x}}(t'), t'],$$

в которое подставлена конкретная мировая линия $\underline{x}(t') = (ct', \vec{x}(t'))$, решающая уравнения движения и удовлетворяющая граничным условиям: $\underline{x}(t) = (ct, \vec{x})$, $\underline{x}(t_0) = (ct_0, \vec{x}_0)$. При этом (ct_0, \vec{x}_0) играет роль некоторой произвольной реперной точки, задающей начальные условия для уравнения Гамильтона-Якоби. Градиенты $S(\vec{x}, t)$ указывают направления распространения мировых линий безмассовых частиц.

У уравнения Гамильтона-Якоби имеется очень простой смысл. В курсе теоретической механики проходят, что $E = -\partial_t S$, $\vec{p} = \vec{\partial} S$, где E и \vec{p} — это энергия и импульс частицы. Вспомните, например, что $\vec{p} = \hbar \vec{k}$, а $\vec{k} = \vec{\partial} S(\vec{x}, t) / \hbar$, как показано в сноске 3. Соответственно (11) утверждает не что иное как соотношение: $p^\mu p_\mu = 0$, где $p_\mu = \partial_\mu S$ — четыре-импульс частицы.

Теперь можно обсудить уравнение эйконала для релятивистской частицы с массой. Действительно, уравнение $p^\mu p_\mu = 0$ обобщается на случай свободной релятивистской частицы с массой m :

$$p^\mu p_\mu = m^2 c^2. \quad (12)$$

Ему, соответственно, отвечает уравнение Гамильтона-Якоби для свободной релятивистской частицы с массой:

$$\partial_\mu S \partial^\mu S = m^2 c^2. \quad (13)$$

А это уравнение, в свою очередь, можно получить как предел геометрической оптики из так называемого уравнения Шредингера-Фока-Клейна-Гордона (или просто Клейна-Гордона):

$$[\hbar^2 \square + m^2 c^2] \Psi(\underline{x}) = 0. \quad (14)$$

Действительно, если подставить в него выражение (10) и взять предел $\hbar \rightarrow 0$, то мы получим уравнение (13) таким же образом как было получено уравнение (11) из (9).

Уравнение Клейна-Гордона описывает, например, динамику пионов в атомных ядрах. Так же как из уравнения Максвелла можно получить потенциал Кулона для статического источника, из уравнения Клейна-Гордона следует так называемый потенциал Юкавы. Он

применим для описания взаимодействия нуклонов в ядрах. Очевидно, в пределе $m \rightarrow 0$ из уравнения Клейна-Гордона следует уравнение Максвелла на любую из компонент электрического или магнитного поля или же вектор-потенциала.

Какое отношение все эти наблюдения имеют к уравнению Шредингера? Дело в том, что из (12) в нерелятивистском пределе $|\vec{p}| \ll mc$ мы получим следующее соотношение:

$$E = \sqrt{(mc^2)^2 + \vec{p}^2 c^2} \approx mc^2 + \frac{\vec{p}^2}{2m}, \quad E' \equiv E - mc^2 \approx \frac{\vec{p}^2}{2m}.$$

Аналогично из (13) в пределе, $|\vec{\partial}S| \ll mc$, мы получаем нерелятивистское уравнение Гамильтона-Якоби для свободной частицы:

$$-\partial_t S = \sqrt{(mc^2)^2 + (\vec{\partial}S)^2} c^2 \approx mc^2 + \frac{(\vec{\partial}S)^2}{2m},$$

которое проходят в стандартном курсе теоретической механики в виде:

$$-\partial_t S' \equiv -\partial_t (S + mc^2 t) \approx \frac{(\vec{\partial}S')^2}{2m}. \quad (15)$$

Последнее очевидно эквивалентно соотношению $E' = \frac{\vec{p}^2}{2m}$.

Итак, вопрос заключается в том, какое волновое уравнение приводит в пределе геометрической оптики к уравнению (15)? Нетрудно видеть, что если подставить в уравнение Шредингера (8) выражение вида $\Psi = e^{i \frac{S'}{\hbar}}$, то на S' в пределе $\hbar \rightarrow 0$ мы получим уравнение (15).

Это происходит не случайно. Действительно, в квантовой механике обсуждаемый предел называется квазиклассическим приближением, которое будет обсуждаться подробно на одной из последующих лекций в этом семестре. Обсуждаемое явление, в частности, показывает, что квантовая механика включает в себя классическую, как составную часть в некотором пределе. А именно, из волнового уравнения мы получаем такое, решения которого определяют классические траектории.

В заключении получим напрямую уравнение Шредингера в нерелятивистском пределе из уравнения Клейна-Гордона. Запишем (14) в виде:

$$\left[-\frac{\hbar^2 \partial_t^2}{c^2} + \hbar^2 \Delta \right] \Psi(\underline{x}) = m^2 c^2 \Psi(\underline{x}), \quad (16)$$

и будем искать его решение в форме

$$\Psi(\underline{x}) = e^{-i \frac{m c^2 t}{\hbar}} \Psi'(\vec{x}, t),$$

где положим, что $\Psi'(\vec{x}, t)$ медленная функция от времени по сравнению с экспоненциальным множителем в последнем выражении. Это и отвечает нерелятивистскому приближению. Учитывая соотношение

$$\partial_t \Psi = -i \frac{m c^2}{\hbar} e^{-i \frac{m c^2 t}{\hbar}} \Psi' + e^{-i \frac{m c^2 t}{\hbar}} \partial_t \Psi',$$

получим, что

$$\hbar^2 \partial_t^2 \Psi = \left[-(m c^2)^2 \Psi' - 2i \hbar m c^2 \partial_t \Psi' + \hbar^2 \partial_t^2 \Psi' \right] e^{-i \frac{m c^2 t}{\hbar}}. \quad (17)$$

Как мы пояснили, в нерелятивистском пределе верно неравенство

$$\hbar |\partial_t \Psi'| \ll m c^2 |\Psi'|.$$

Поэтому в (17) можно пренебречь $\hbar^2 \partial_t^2 \Psi'$. Тогда подставляя (17) в (16), мы как раз и получаем уравнение Шредингера (8) на Ψ' .

Задачи.

I. Получите уравнение Гамильтона-Якоби (Эйконала),

$$\partial_\mu S \partial^\mu S = m^2 c^2,$$

из уравнения ШКГФ,

$$[\hbar^2 \square + m^2 c^2] \Psi(\underline{x}) = 0,$$

в пределе геометрической оптики.

II. Покажите, что если рассмотреть решение уравнения ШКГФ,

$$\left[-\frac{\hbar^2 \partial_t^2}{c^2} + \hbar^2 \Delta \right] \Psi(\underline{x}) = m^2 c^2 \Psi(\underline{x}),$$

в виде разложения в ряд Фурье:

$$\Psi(\underline{x}) = \int \frac{d^3 \vec{p}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \tilde{\Psi}(\underline{p}) e^{\frac{i \underline{p} \cdot \underline{x}}{\hbar}}, \quad \underline{p} = (E/c, \vec{p}),$$

где $E = c\sqrt{\vec{p}^2 + m^2 c^2}$. И рассмотреть только такие гармоники, для которых

$$\tilde{\Psi}(\underline{p}) \neq 0,$$

только при $|\vec{p}| \ll mc$, то соответствующая волновая функция $\Psi(\underline{x})$ приближенно решает свободное уравнение Шредингера.

II. Лекция. *Нестационарное уравнение Шредингера для кванта в потенциале, уравнение непрерывности для плотности вероятности, стационарное уравнение Шредингера, одномерное уравнение Шредингера, волновой пакет, групповая и фазовая скорости, пространство Гильберта, нормировка волновой функции в непрерывном и дискретном спектре, квантовая механика свободной частицы на окружности.*

1. На прошлой лекции мы ввели нестационарное уравнение Шредингера для свободной нерелятивистской частицы (8). Для нерелятивистской частицы в потенциале $V(\vec{x})$ постулируется следующее уравнение:

$$i\hbar\partial_t\Psi(\vec{x},t) = \left[-\frac{\hbar^2\Delta}{2m} + V(\vec{x})\right]\Psi(\vec{x},t). \quad (18)$$

Можно сказать, что оно следует из совокупности экспериментальных данных.

Заметим, что если искать решение (18) в виде $\Psi(\vec{x},t) = e^{i\frac{S(\vec{x},t)}{\hbar}}$, то в квазиклассическом пределе мы получим уравнение Гамильтона-Якоби для нерелятивистской частицы в потенциале:

$$-\partial_t S = \frac{(\vec{\partial}S)^2}{2m} + V(\vec{x}),$$

которое очевидно отражает тот факт, что $E = \vec{p}^2/2m + V$.

2. На первой лекции объяснялось, что величина $d^3\vec{x}|\Psi(\vec{x},t)|^2$ определяет вероятность обнаружить квант в момент времени t в окрестности точки \vec{x} в объеме $d^3\vec{x}$. Такая величина называется плотностью вероятности $\rho(\vec{x},t) = |\Psi(\vec{x},t)|^2$. Очевидно, что вероятность обнаружить квант хоть где-то во всем пространстве R^3 равна единице. Из чего следует условие нормировки волновой функции:

$$\int_{R^3} d^3\vec{x} |\Psi(\vec{x},t)|^2 \equiv \int_{R^3} d^3\vec{x} \rho(\vec{x},t) = 1. \quad (19)$$

Заметим, однако, что для выполнения этого условия необходимо, чтобы интеграл в нормировке сходился. То есть волновая функция должна достаточно быстро убывать при стремлении к пространственной

бесконечности $\Psi(\vec{x}, t)|_{|\vec{x}| \rightarrow \infty} \rightarrow 0$. Нетрудно видеть, что свободная монохроматическая волна де Бройля (7) не подчиняется этому условию. Поэтому в таком случае требуется иное условие нормировки, которое мы обсудим ниже.

Плотность вероятности удовлетворяет некоторому уравнению непрерывности. Чтобы показать это рассмотрим интеграл от $\rho(\vec{x}, t)$ для какой-то области $M \in R^3$ и продифференцируем его по времени:

$$\frac{d}{dt} \int_M d^3\vec{x} |\Psi|^2 = \int_M d^3\vec{x} \partial_t |\Psi|^2 = \int_M d^3\vec{x} [\Psi^* \partial_t \Psi + \Psi \partial_t \Psi^*].$$

Воспользуемся теперь на правой стороне этой цепочки равенств уравнением Шредингера и сопряженным к нему, чтобы выразить $\partial_t \Psi$ и $\partial_t \Psi^*$ через пространственные производные от волновой функции:

$$\begin{aligned} & \int_M d^3\vec{x} [\Psi^* \partial_t \Psi + \Psi \partial_t \Psi^*] = \\ &= \frac{1}{i\hbar} \int_M d^3\vec{x} \left[\Psi^* \left[-\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + V \right] \Psi - \Psi \left[-\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + V \right] \Psi^* \right] = \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \int_M d^3\vec{x} \left[\Psi^* \vec{\partial}^2 \Psi - \Psi \vec{\partial}^2 \Psi^* \right] = \frac{i\hbar}{2m} \int_M d^3\vec{x} \vec{\partial} \left[\Psi^* \vec{\partial} \Psi - \Psi \vec{\partial} \Psi^* \right] \equiv \\ & \equiv - \int_M d^3\vec{x} \operatorname{div} \vec{j}. \end{aligned}$$

Здесь на последнем шаге мы определили плотность потока вероятности:

$$\vec{j} \equiv -\frac{i\hbar}{2m} \left[\Psi^* \vec{\partial} \Psi - \Psi \vec{\partial} \Psi^* \right].$$

Если собрать все эти соотношения вместе, то получается:

$$\int_M d^3\vec{x} \partial_t |\Psi|^2 = \frac{i\hbar}{2m} \int_M d^3\vec{x} \vec{\partial} \left[\Psi^* \vec{\partial} \Psi - \Psi \vec{\partial} \Psi^* \right].$$

Или, перенося все выражения на левую сторону этого равенства, мы выводим соотношение:

$$\int_M d^3\vec{x} \left[\partial_t \rho + \operatorname{div} \vec{j} \right] = 0, \quad (20)$$

которое верно для любой замкнутой области M . Поэтому выполняется уравнение непрерывности для плотности ρ и тока \vec{j} вероятности.

Заметим, что когда на первой лекции мы ввели $\Psi(\vec{x}, t)$ для свободного кванта, то обсуждали аналог потока электромагнитного излучения через площадку Σ на экране: $I \sim \int_{\Sigma} \left([\vec{E}, \vec{B}], d\vec{\sigma} \right)$. Теперь мы можем пояснить, что аналогом такой величины для вероятности является:

$$I \sim \int_{\Sigma} \left(\vec{j}, d\vec{\sigma} \right).$$

Действительно, из (20) следует, что изменение полной вероятности найти частицу в данной области M равно:

$$\frac{d}{dt} \int_M d^3\vec{x} \rho = \oint_{\partial M} \left(\vec{j}, d\vec{\sigma} \right),$$

как следует из теоремы Стокса. Здесь ∂M — это граница области M .

3. Перейдем теперь к обсуждению стационарного уравнения Шредингера. Если квант изолирован, то его энергия E остается постоянной. В такой ситуации можно искать решение нестационарного уравнения Шредингера (18) путем так называемого разделения переменных:

$$\Psi(\vec{x}, t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \psi(\vec{x}). \quad (21)$$

Такой вид волновой функции также может быть мотивирован формой волны для свободного кванта:

$$\Psi(\vec{x}, t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} e^{\frac{i\vec{p}\vec{x}}{\hbar}},$$

которая обсуждалась на первой лекции. У свободного кванта энергия, очевидно, задана и определяется нерелятивистским соотношением через импульс: $E = \vec{p}^2/2m$.

Подставляя такую волновую функцию как (21) в уравнение (18) и используя, что $i\hbar\partial_t e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \psi(\vec{x}) = E e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \psi(\vec{x})$, мы получаем стационарное уравнение Шредингера:

$$E \psi(\vec{x}) = \left[-\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + V(\vec{x}) \right] \psi(\vec{x}), \quad (22)$$

где волновая функция $\psi(\vec{x})$ определяет состояние кванта с данной энергией E .

4. Чтобы освоиться со свойствами решений уравнения Шредингера, рассмотрим его одномерный аналог:

$$E \psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) + V(x) \psi(x), \quad (23)$$

где $\psi''(x) \equiv \frac{d^2\psi(x)}{dx^2}$. То есть в данной ситуации волновая функция не зависит от координат y и z . Нестационарный вариант этого уравнения имеет вид:

$$i\hbar\partial_t\Psi(x, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \Psi(x, t). \quad (24)$$

В принципе, стационарное и нестационарное уравнения Шредингера можно рассматривать в любой размерности, а не только в трех измерениях. И некоторые варианты (18) и (22) в различных размерностях имеют не только академический, но и прикладной интерес. В такой ситуации задача эффективно сводится к квантовой механике в иной размерности, чем три. Мы же в наших лекциях будем рассматривать одномерное уравнение Шредингера просто как модель для упрощения формул и изложения базовых принципов квантовой механики.

Начнем мы наше обсуждение одномерной задачи со свободного кванта, $V(x) = 0$. В этом случае стационарное уравнение Шредингера сводится к:

$$E \psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x). \quad (25)$$

Если ввести импульс p , то есть записать $E = p^2/2m$, то произвольное решение этого уравнения можно представить в виде:

$$\psi_p(x) = A_+(p) e^{\frac{ipx}{\hbar}} + A_-(p) e^{-\frac{ipx}{\hbar}}, \quad (26)$$

где $A_{\pm}(p)$ произвольные комплексные константы, которые, в принципе, могут зависеть от p . Мы предполагаем, что здесь $p > 0$, так как при замене $p \rightarrow -p$ два вклада с правой стороны этой формулы меняются местами.

При этом произвольное решение нестационарного уравнения Шредингера (24) с $V = 0$ в силу его линейности можно представить в виде суперпозиции решений с заданным импульсом:

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dp A(p) e^{-i \frac{p^2}{2m\hbar} t + \frac{ipx}{\hbar}}. \quad (27)$$

Здесь ситуация аналогична той, что возникала в курсе теории поля при разложении решения уравнений Максвелла без источника на отдельные свободные волны. Заметим, что для произвольной функции $A(p)$ такое решение не имеет определенной энергии и импульса.

Обсуждаемое выражение можно переписать в виде:

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^0 dp A(p) e^{-i \frac{p^2}{2m\hbar} t + \frac{ipx}{\hbar}} + \int_0^{+\infty} dp A(p) e^{-i \frac{p^2}{2m\hbar} t + \frac{ipx}{\hbar}}.$$

Делая замену $p \rightarrow -p$ в первом интеграле на правой стороне, это соотношение можно переписать так:

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \int_0^{+\infty} dp \left[A_+(p) e^{\frac{ipx}{\hbar}} + A_-(p) e^{-\frac{ipx}{\hbar}} \right] e^{-i \frac{p^2}{2m\hbar} t} \equiv \\ &\equiv \int_0^{+\infty} dp \psi_p(x) e^{-i \frac{p^2}{2m\hbar} t}, \end{aligned}$$

где $A_{\pm}(p) = A(\pm p)$, а ψ_p определено в (26). То есть мы получили две эквивалентные записи произвольного решения одномерного свободного нестационарного уравнения Шредингера.

Здесь для дальнейшего полезно сделать два замечания. Во-первых, спектр всевозможных решений свободного уравнения Шредингера является непрерывным, так как p и $E(p) = p^2/2m$ пробегают все значения в интервалах $(-\infty, +\infty)$ и $[0, +\infty)$, соответственно. Именно поэтому в соотношении (27) мы имеем интеграл, а не сумму. Во-вторых, для каждого данного значения E мы имеем два решения стационарного уравнения Шредингера: с $p > 0$ и $-p < 0$. Говорят, что в таком случае спектр решений уравнения Шредингера имеет двойное вырождение.

Обсудим теперь физический смысл двух так называемых парциальных волн с заданным модулем импульса p :

$$\Psi_{\pm p}(x, t) \equiv A_{\pm}(p) e^{-i \frac{p^2}{2m\hbar} t \pm \frac{ipx}{\hbar}}, \quad p > 0. \quad (28)$$

Из условия $-\frac{p^2}{2m}t \pm px = const$ видно, что эти два выражения описывают волны двигающиеся при $t \rightarrow +\infty$ в сторону увеличения или

уменьшения x , соответственно. И совершают они это движение с так называемой фазовой скоростью: $|v_{ph}| \equiv |dx/dt| = E(p)/p = p/2m$. Действительно, уровни постоянной фазы таких волн смещаются вдоль оси x с этой скоростью направо или налево, соответственно.

5. Примером такого выражения как (27) является так называемый волновой пакет. Обычно он отвечает ситуации, когда под интегралом коэффициенты $A(p)$ существенно отличаются от нуля только в некотором интервале $[p_0 - \Delta p/2, p_0 + \Delta p/2]$. Здесь p_0 называется несущим импульсом волнового пакета, а Δp его шириной, соответственно:

$$\Psi(x, t) = \int_{p_0 - \Delta p/2}^{p_0 + \Delta p/2} dp A(p) e^{-i \frac{E(p)}{\hbar} t + i \frac{px}{\hbar}}, \quad (29)$$

где, вообще говоря, $E(p)$ не обязательно равно $p^2/2m$, если мы не имеем дело с пакетом свободных волн в пустоте. Определим так называемую групповую скорость волнового пакета.

Если для всех значений $p \in [p_0 - \Delta p/2, p_0 + \Delta p/2]$ мы имеем $A(p) > 0$, то в точке $x = 0$, $t = 0$ получается положительная интерференция всех гармоник в интеграле (29). Т.е. в данной точке находится пик (гребень) волнового пакета. Найдем теперь положение этого гребня в другой момент времени $t \neq 0$, имея ввиду, что его определяет координата максимума. Положение максимума определяется из условия:

$$\frac{d}{dp} [E(p)t - px] = 0,$$

то есть $E'(p)t = x$. Окуда следует, что для групповой скорости мы получаем следующее выражение:

$$v_{gr} \equiv \frac{dx}{dt} = E'(p).$$

Для свободной волны $E(p) = p^2/2m$ и мы, соответственно, получаем, что $v_{gr} = p/m$, что не равно фазовой скорости. В трехмерном случае групповая скорость определяются как $\vec{v}_{gr} = \vec{\partial}_p E(p)$.

6. Вернемся теперь к обсуждению смысла выражения (27). Как мы сказали выше — это суперпозиция многих состояний свободного кванта с разными импульсами. Или разложение решения волнового уравнения по парциальным волнам — отдельным модам. В математическом смысле — это разложение Фурье данной функции. А именно, если рассматривать $\Psi(x, t)$ как функцию от x , ее можно разложить в интеграл Фурье:

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dp \tilde{A}(p, t) e^{\frac{ipx}{\hbar}}.$$

В рассматриваемом случае $\tilde{A}(p, t) = A(p) e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$, так как мы имеем дело не с произвольной функцией, а с решением нестационарного уравнения Шредингера для свободной частицы.

Интеграл или ряд Фурье — это разложение по базису в пространстве функций. Дело в том, что пространство функций является векторным. Действительно, вспомним, что такое обычное векторное пространство, не вдаваясь в математические формальности. Векторное пространство состоит из элементов, векторов, которые можно умножать на числа и прибавлять друг к другу: то есть если, например, $\vec{v} = (v^1, \dots, v^N) = v^j$ и \vec{w} элементы такого пространства, то и $\vec{u} = a\vec{v} + b\vec{w}$, где a и b некоторые числа, тоже принадлежит ему. Здесь N — размерность векторного пространства.

В векторном пространстве можно ввести скалярное произведение. Например,

$$\langle \vec{v} | \vec{w} \rangle = \sum_{j=1}^N v^j w^j.$$

Оно должно удовлетворять некоторым стандартным условиям. Мы используем для записи скалярного произведения несколько нестандартное обозначение, которое однако обычно используется в квантовой механике. Векторное пространство со скалярным произведением называется гильбертовым. Или пространством Гильберта.

Далее, в векторном пространстве можно ввести базис \vec{e}_a , $a = \overline{1, N}$, который удовлетворяет условию ортонормированности⁵

$$\langle \vec{e}_a | \vec{e}_b \rangle = \delta_{ab} \quad (30)$$

и полноты:

$$\sum_{a=1}^N e_a^i e_a^j = \delta^{ij}, \quad i, j = \overline{1, N}. \quad (31)$$

⁵Безусловно, по определению скалярное произведение должно удовлетворять определенным аксиомам (условиям). Мы здесь не будем их озвучивать, чтобы не перегружать изложение и так как они достаточно очевидны.

Условие полноты можно использовать для разложения векторов по базису. Действительно, если умножить левую и правую сторону (31) на v^j и просуммировать по всем возможным значениям j , то мы получим, что

$$\vec{v} = \sum_{a=1}^N \vec{e}_a v_a, \quad v_a \equiv \langle \vec{e}_a | \vec{v} \rangle. \quad (32)$$

Вернемся теперь к обсуждению пространства функций. Точно так же, если мы имеем две функции $\psi_1(x)$ и $\psi_2(x)$ от $x \in R$, принимающие значения в комплексных числах, то $\psi(x) = a\psi_1(x) + b\psi_2(x)$ тоже принадлежит тому же пространству функций. Здесь a и b произвольные комплексные константы. Далее, на этом векторном пространстве можно ввести скалярное произведение:

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_1^*(x) \psi_2(x). \quad (33)$$

Таким образом пространство функций является гильбертовым.

Что является базисом в таком гильбертовом пространстве функций? Оказывается, что в качестве такового можно выбрать функции вида $f_p(x) = a_p e^{\frac{ipx}{\hbar}}$, где константу a_p нам еще предстоит определить. Здесь аргумент x играет роль индекса j у базисного вектора e_a^j , а индекс p — роль a . Действительно, рассмотрим скалярное произведение двух таких функций:

$$\begin{aligned} \langle f_{p_1} | f_{p_2} \rangle &= a_{p_1}^* a_{p_2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\frac{ip_1 x}{\hbar}} e^{\frac{ip_2 x}{\hbar}} = \\ &= 2\pi\hbar a_{p_1}^* a_{p_2} \delta(p_1 - p_2), \end{aligned} \quad (34)$$

где мы воспользовались двумя свойствами дельта функции:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{2\pi} e^{ikx} = \delta(k), \quad \delta(ax) = \frac{\delta(x)}{|a|}, \quad (35)$$

которые выводились в курсе теории поля и поясняются ниже в приложении к этой лекции. Теперь если в (34) положить $a_p = 1/\sqrt{2\pi\hbar}$, то мы получим, что функции

$$f_p(x) = \frac{e^{\frac{ipx}{\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \quad (36)$$

составляют ортонормированный базис,

$$\langle f_{p_1} | f_{p_2} \rangle = \delta(p_1 - p_2), \quad (37)$$

в пространстве комплексных функций на действительной оси, $x \in \mathbb{R}$. Чтобы убедиться, что это действительно базис, нужно проверить условие полноты. Нетрудно получить, что

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dp f_p^*(x_1) f_p(x_2) = \int_{-\infty}^{+\infty} dp \frac{e^{\frac{ip(x_2-x_1)}{\hbar}}}{2\pi\hbar} = \delta(x_1 - x_2). \quad (38)$$

Это и есть условие полноты. Действительно, если последнее уравнение умножить с левой и правой стороны на $\psi(x_1)$ и проинтегрировать по x_1 , то мы получим, что

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dp A(p) \frac{e^{\frac{ipx_2}{\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}} = \psi(x_2).$$

Это означает, что $\psi(x_2)$ отвечает разложению Фурье, где $A(p)$ определяется из обратного преобразования:

$$A(p) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \psi(x_1) \frac{e^{-\frac{ipx_1}{\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}},$$

как и должно быть.

В связи с тем, что функции составляют гильбертово пространство, возникает вопрос: какой в этом контексте имеют смысл дифференциальные операторы, вроде d/dx или d^2/dx^2 , например? Нетрудно видеть, что — они суть ни что иное как матрицы, то есть линейные операторы. Действительно, результат действия матрицы M на вектор \vec{v} дает другой $\vec{u} = M\vec{v}$, элемент того же самого пространства. Точно так же результат действия дифференциального оператора D на функцию $\psi_1(x)$ дает снова функцию $\psi_2(x) = D\psi_1(x)$ из того же пространства. В этом смысле базис (36) состоит из собственных функций операторов d/dx и d^2/dx^2 :

$$\frac{d}{dx} f_p(x) = \frac{ip}{\hbar} f_p(x), \quad \frac{d^2}{dx^2} f_p(x) = -\frac{p^2}{\hbar^2} f_p(x),$$

ведь результат действия этих дифференциальных операторов на эти функции эквивалентен умножению на число, как $M\vec{v} = \lambda\vec{v}$.

Аналогично стационарное уравнение Шредингера (23) оказывается уравнением на собственные значения E и собственные функции $\psi(x)$ дифференциального оператора вида:

$$H = -\frac{1}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x).$$

Физический смысл этого оператора станет ясен на следующей лекции.

7. В заключении заметим, что решение одномерного свободного уравнения Шредингера с заданным импульсом:

$$\Psi_p(x, t) = \frac{e^{-\frac{ip^2 t}{2m\hbar} + \frac{ipx}{\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \quad (39)$$

удовлетворяет следующему условию нормировки:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \Psi_{p_1}^*(x, t) \Psi_{p_2}(x, t) = \delta(p_1 - p_2), \quad (40)$$

которое следует из (34) и (37). Для непрерывного спектра оно заменяет соотношение (19). Если воспринимать стоящую справа $\delta(x)$ как обычную, а не обобщенную, функцию, то при $p_1 \neq p_2$ она равна нулю. А при $p_1 = p_2$ мы получаем бесконечность. Сейчас мы обсудим происхождение этой бесконечности.

Для этого рассмотрим движение свободного кванта по окружности длины L . То есть мы хотим обсуждать такие решения уравнений⁶ (23) и (24) с $V = 0$, которые удовлетворяют условию периодичности $\Psi(x+L, t) = \Psi(x, t)$ и $\psi(x+L) = \psi(x)$. Ведь теперь $x \in [-L/2, L/2]$, а не $x \in R$. С одной стороны мы знаем, что произвольное решение уравнения Шредингера можно разложить по модам вида:

$$\psi_p(x) = a_p e^{\frac{ipx}{\hbar}},$$

а с другой стороны любую функцию имеющую период L можно разложить по модам вида:

⁶На всякий случай заметим, что метрика на окружности плоская $ds^2 = dx^2 = \frac{L^2}{(2\pi)^2} d\varphi^2$, $\varphi \in [-\pi, \pi]$. А это значит, что оператор Лапласа на окружности имеет тот же вид, что и на прямой: $\frac{d^2}{dx^2} = \frac{(2\pi)^2}{L^2} \frac{d^2}{d\varphi^2}$.

$$f_l(x) = a_l e^{i \frac{2\pi l}{L} x}, \quad (41)$$

где l — это любое целое число. Из этих наблюдений следует, что теперь импульс p может пробегать не весь спектр непрерывных значений из R , а только дискретные значения вида $p_l = \frac{2\pi l \hbar}{L}$. Действительно, только при таких значениях импульса стационарное уравнение Шредингера имеет решение с периодом L . Соответственно и спектр энергий на окружности пробегает только дискретные значения:

$$E_l = \frac{p_l^2}{2m} = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{mL^2} l^2. \quad (42)$$

Поэтому теперь и произвольное решение нестационарного уравнения Шредингера на окружности разлагается не в интеграл, а в ряд Фурье:

$$\Psi(x, t) = \sum_{l \in Z} A_l e^{-i \frac{2\pi^2 \hbar}{mL^2} l^2 t + i \frac{2\pi l}{L} x}.$$

Это является примером общей ситуации в квантовой механике: спектр энергий кванта оказывается дискретным, если он совершает финитное (в ограниченной области) движение и непрерывным, если движение инфинитное (неограниченно). Грубо говоря, при финитном движении в области распространения кванта должно укладываться целое число полуволн. При инфинитном движении такого ограничения нет.

Видно также, что для данного значения энергии мы имеем двойное вырождение — волну, двигающуюся по и против часовой стрелки по окружности, то есть с $l > 0$ и $l < 0$.

Найдем теперь нормировочные коэффициенты a_l в (41). Для этого вычислим следующее скалярное произведение:

$$\langle f_{l_1} | f_{l_2} \rangle = a_{l_1}^* a_{l_2} \int_{-L/2}^{L/2} dx e^{-i \frac{2\pi l_1}{L} x} e^{i \frac{2\pi l_2}{L} x} = a_{l_1}^* a_{l_2} L \delta_{l_1 l_2},$$

где мы воспользовались тем фактом, что интеграл $\int_{-L/2}^{L/2} dx e^{i \frac{2\pi n}{L} x}$ равен нулю, если $n \neq 0$, так как под интегралом стоит периодическая функция. Если же $n = 0$, то интеграл равен L .

Из последнего соотношения следует, что если взять $a_l = 1/\sqrt{L}$, то функции (41) составляют ортонормированный базис в гильбертовом пространстве на окружности. Условие полноты несколько сложнее поучить, но оно следует из так называемого соотношения Пуассона:

$$\frac{1}{L} \sum_{l \in Z} e^{-i \frac{2\pi l}{L} x_1} e^{i \frac{2\pi l}{L} x_2} = \sum_{n \in Z} \delta(x_1 - x_2 - Ln),$$

которое верно для $x_{1,2} \in [-L/2, L/2]$. Чтобы получить это соотношение, надо применить последовательно прямое и обратное преобразования Фурье для периодической функции. И нужно проверить, что при этом данная функция не изменится. Это фактически и будет условием полноты.

Здесь важно сделать несколько замечаний. Во-первых, нетрудно видеть, что обсуждаемый базис состоит из собственных функций операторов d/dx и d^2/dx^2 :

$$\frac{d}{dx} f_l(x) = i \frac{2\pi l}{L} f_l(x), \quad \frac{d^2}{dx^2} f_l(x) = - \left(\frac{2\pi l}{L} \right)^2 f_l(x).$$

Из чего видно, что одни и те же операторы, действуя в разных пространствах, могут иметь разные собственные значения и спектр собственных функций. Во-вторых, как следует из условия нормировки базисных функций, для свободных волн на окружности,

$$\Psi_l(x, t) = \frac{e^{-i \frac{2\pi^2 \hbar}{mL^2} l^2 + i \frac{2\pi l}{L} x}}{\sqrt{L}},$$

мы получаем, что:

$$\int_{-L/2}^{L/2} dx \Psi_{l_1}^*(x, t) \Psi_{l_2}(x, t) = \delta_{l_1 l_2}.$$

В частности для случая $l_1 = l_2$ интеграл не расходится, а равен единице:

$$\int_{-L/2}^{L/2} dx |\Psi_l^*(x, t)|^2 = 1.$$

И действительно, в отличие от непрерывного спектра, в дискретном условии нормировки имеет именно такой вид.

Почти очевидно, что в пределе $L \rightarrow \infty$ из ситуации на окружности мы должны получить свободную частицу на прямой. Действительно, в таком случае спектр становится непрерывным, так как $p_{l+1} - p_l = \frac{2\pi}{L} \rightarrow 0$. Однако, откуда же тогда возникает бесконечность в нормировочном интеграле для непрерывного спектра?

Чтобы ответить на этот вопрос, рассмотрим следующий предел:

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \int_{-L/2}^{L/2} dx e^{-i \frac{2\pi l_1 \hbar}{L} x} e^{i \frac{2\pi l_2 \hbar}{L} x} = \lim_{L \rightarrow \infty} L \delta_{l_1 l_2}.$$

Теперь видно, что если $p_1 = \frac{2\pi l_1 \hbar}{L} \neq \frac{2\pi l_2 \hbar}{L} = p_2$, то с правой стороны последнего соотношения мы получаем ноль, как и должно быть в непрерывном спектре. Если же $p_1 = p_2$, то с правой стороны теперь мы получаем бесконечность, которая равна объему пространства (в одномерном случае — длине окружности).

Рассматривая ситуацию на окружности, мы убрали этот объем в нормировку волновых функций. Если же он бесконечен, то этого сделать не получится. И действительно, из интегрального представления дельта функции следует, что:

$$\delta(0) = \lim_{L \rightarrow \infty} \int_{-L/2}^{L/2} \frac{dx}{2\pi} e^{i \cdot 0 \cdot x} \sim \lim_{L \rightarrow \infty} L.$$

То есть как раз именно такая бесконечность как в непрерывном спектре.

Заметим, что физический смысл этой бесконечности, если ее все-таки убрать в нормировку, довольно таки очевиден: вероятность найти частицу в одной точке в большом объеме стремится к нулю при стремлении этого объема к бесконечности.

Приложение о дельта функции. Формально интеграл, задающий дельта функцию в (35), не определен. Однако его можно определить следующим образом:

$$\delta(k) = \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \left[\int_{-\infty}^0 \frac{dx}{2\pi} e^{i(k-i\epsilon)x} + \int_0^{+\infty} \frac{dx}{2\pi} e^{i(k+i\epsilon)x} \right],$$

где $\epsilon \rightarrow +0$ означает, что ϵ стремится к нулю все время оставаясь положительной.

Теперь каждый из интегралов на правой стороне этого выражения сходится из-за наличия подавляющего экспоненциального множителя. Взяв их, мы получаем:

$$\delta(k) = \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \left[\frac{e^{i(k-i\epsilon)x}}{2\pi i(k-i\epsilon)} \Big|_{-\infty}^0 + \frac{e^{i(k+i\epsilon)x}}{2\pi i(k+i\epsilon)} \Big|_0^{+\infty} \right] =$$

$$= \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \left[\frac{1}{2\pi i(k - i\epsilon)} - \frac{1}{2\pi i(k + i\epsilon)} \right] = \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \frac{\epsilon}{\pi(k^2 + \epsilon^2)}.$$

Правая сторона в пределе действительно дает дельта функцию, как обсуждалось на курсе теории поля. Иногда вместо интегрального представления (35) записывают формально математически корректное равенство:

$$\delta(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{2\pi} e^{i[k+i0\text{sign}(x)]x},$$

где

$$\text{sign}(x) = 1, \quad x > 0$$

$$\text{sign}(x) = -1, \quad x < 0.$$

Обсуждаемое здесь выражение фактически имеет смысл предела $\epsilon \rightarrow +0$, который мы только что рассмотрели.

Задачи.

I. Получите нерелятивистское уравнение Гамильтона-Якоби,

$$-\partial_t S = \frac{(\vec{\partial} S)^2}{2m} + V(\vec{x}),$$

из уравнения Шредингера,

$$i\hbar\partial_t\Psi(\vec{x}, t) = \left[-\frac{\hbar^2\Delta}{2m} + V(\vec{x}) \right] \Psi(\vec{x}, t),$$

в пределе геометрической оптики.

III. Лекция. *Операторы и наблюдаемые в квантовой механике, операторы импульса, координаты и Гамильтонна, измерение в квантовой механике и вероятностная интерпретация, коммутатор двух операторов и коммутационные соотношения Гайзенберга, операторы инверсии и трансляции, бра и кет абстрактные векторы в пространстве Гильберта, координатное и импульсное представления, эрмитово сопряжение и эрмитов (самосопряженный) оператор, свойства операторов.*

1. У классической механики есть по крайней мере четыре независимых, но физически эквивалентных формулировки: ньютоновская, лагранжева, гамильтонова и Гамильтона-Якоби. Исторически гамильтонова формулировка была первой обобщена на квантовый случай. Поэтому вспомним основные ее положения.

В гамильтоновой формулировке наблюдаемой величиной в принципе является любая действительная функция на фазовом пространстве $F(p_j, q_j, t)$. Это может быть, например, координата q_j , импульс p_j , кинетическая $p_j^2/2m$ или потенциальная $V(q_j)$ энергии. Наконец основной наблюдаемой является гамильтониан:

$$H = \frac{p_j^2}{2m} + V(q_j). \quad (43)$$

Чтобы задать динамику системы (перемещение частицы во времени) определяется так называемая скобка Пуассона для любых двух наблюдаемых G и F :

$$\{G, F\} = \sum_{j=1}^D \frac{\partial G}{\partial p_j} \frac{\partial F}{\partial q_j} - \frac{\partial G}{\partial q_j} \frac{\partial F}{\partial p_j},$$

где D — число степеней свободы в системе.

Соответственно, не трудно видеть, что:

$$\{p_j, q_k\} = \delta_{jk}. \quad (44)$$

Тогда уравнения движения частицы в гамильтоновой форме имеют вид:

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

А зависимость произвольной наблюдаемой от времени можно найти из уравнения:

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

Знание всех этих формул нам пригодится на этой и следующих лекциях. Перейдем теперь к обсуждению квантовой механики.

2. Естественный вопрос в данном контексте следующий: что является наблюдаемой в квантовой механике? Какую величину можно измерить на эксперименте? И как математически она задается в рамках аппарата квантовой механики?

Дедуктивно вывести ответ на такие вопросы, используя знания из классической механики, невозможно, так как последние укладываются в квантовую механику лишь как составная часть. Ответы можно лишь определить мотивируя их наблюдаемыми данными, а затем проверяя выводы на эксперименте. То есть необходимо действовать индуктивно. Поэтому здесь мы приведем наводящие соображения, основываясь на некоторых простых примерах и опытных данных.

Рассмотрим одномерное движение кванта на окружности длины L , которое обсуждалось в конце прошлой лекции. Пусть состояние кванта определяется известной уже нам волновой функцией:

$$\psi_l(x) = \frac{e^{i p_l x}}{\sqrt{L}}, \quad p_l = \frac{2\pi l \hbar}{L}.$$

Очевидно в этом состоянии квант имеет определенный импульс p_l , так как его движение во времени соответствует волне:

$$\Psi_l(x, t) = \frac{e^{-i \frac{2\pi^2 \hbar}{mL^2} l^2 t + i \frac{2\pi l}{L} x}}{\sqrt{L}}.$$

Она двигается по окружности именно с таким импульсом. Это мы обсуждали на прошлой лекции. Заметим на будущее, что в данном состоянии при измерении координаты кванта она может оказаться в любом интервале dx в окрестности любой точки $x \in [0, L)$ с одинаковой вероятностью, так как

$$|\Psi_l(x, t)|^2 dx = |\psi_l(x)|^2 dx = \frac{dx}{L}.$$

Ведь $\Psi_l(x, t)$ нигде и никогда не равна нулю.

Рассмотрим теперь дифференциальный оператор $-i\hbar d/dx$, собственной функцией которого является $\psi_l(x)$:

$$-i\hbar \frac{d}{dx} \psi_l(x) = p_l \psi_l(x).$$

Соответствующее собственное значение в точности равно p_l . Вспомним теперь о вероятностной интерпретации волновой функции и о том, что $\psi_l(x)$, $l \in Z$ составляют ортонормированный базис в пространстве функций на окружности. Имея эти факты ввиду, рассмотрим следующую матрицу:

$$\int_{-L/2}^{L/2} dx \psi_{l_1}^*(x) \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \psi_{l_2}(x) = p_{l_1} \delta_{l_1 l_2} = p_{l_2} \delta_{l_1 l_2}. \quad (45)$$

Это очевидно диагональная, но бесконечная, так как $l_1, l_2 \in Z$, матрица. В свете вероятностной интерпретации, на ее диагонали стоят математические ожидания оператора $-i\hbar d/dx$ в состояниях $\psi_l(x)$, $l \in Z$.

Заметим мимоходом, что в таком базисе рассматриваемый дифференциальный оператор представлен как обычная матрица (правда бесконечная). Также заметим, что обсуждаемое равенство (45) является полным аналогом соотношения $\hat{e}_a^T \hat{M} \hat{e}_b = M_{ab}$ в конечномерном векторном пространстве, которое определяет компоненты матрицы \hat{M} в данном базисе \hat{e}_a , $a = \overline{1, N}$.

Далее, не трудно определить предел $L \rightarrow \infty$ рассматриваемых здесь соотношений. Этот предел отвечает уже свободному кванту на прямой, как мы обсуждали на прошлой лекции. А именно, в качестве базиса теперь мы имеем:

$$\psi_p(x) = \frac{e^{ipx}}{\sqrt{2\pi\hbar}}.$$

И вместо матрицы мы получаем соответственно:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_{p_1}^*(x) \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \psi_{p_2}(x) = p_2 \delta(p_1 - p_2) = p_1 \delta(p_1 - p_2).$$

Напомним, что так как на прямой движение инфинитное, то и спектр теперь непрерывный. Соответственно вместо диагональной матрицы мы получаем так называемое ядро интегрального оператора $p_1 \delta(p_1 - p_2)$. Наконец трехмерный вариант обсуждаемых соотношений определяет выражение:

$$\int d^3 \vec{x} \psi_{\vec{p}_1}^*(\vec{x}) \left(-i\hbar \vec{\partial} \right) \psi_{\vec{p}_2}(\vec{x}) = \vec{p}_2 \delta^{(3)}(\vec{p}_1 - \vec{p}_2) = \vec{p}_1 \delta^{(3)}(\vec{p}_1 - \vec{p}_2).$$

Очевидно, что если измерить импульс кванта в состоянии $\psi_p(x)$ или $\psi_l(x)$, то он окажется, соответственно, равным p или p_l .

3. Рассмотрим теперь такое состояние кванта на окружности, которое является суперпозицией вида:

$$\psi(x) = \sum_{l=-\infty}^{+\infty} C_l \psi_l(x) \equiv \sum_{l \in Z} C_l \psi_l(x). \quad (46)$$

В этом состоянии квант не имеет определенного импульса, если хотя бы две C_l не равны нулю. Для набора C_l самого общего вида, волновая функция $\psi(x)$ является суперпозицией состояний со всеми возможными значениями импульса. Очевидно, что таким образом можно представить любое состояние кванта, так как $\psi_l(x)$, $l \in Z$ задают полный набор возможных состояний. Соответственно здесь:

$$C_l = \int_{-L/2}^{L/2} dx \psi_l^*(x) \psi(x), \quad (47)$$

в чем можно убедиться, умножив обе стороны (46) на $\psi_l^*(x)$ и проинтегрировав по dx .

Далее, условие нормировки обсуждаемой волновой функции имеет вид:

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-L/2}^{L/2} dx \psi^*(x) \psi(x) = \\ &= \int_{-L/2}^{L/2} dx \left(\sum_{l_1 \in Z} C_{l_1}^* \psi_{l_1}^*(x) \right) \left(\sum_{l_2 \in Z} C_{l_2} \psi_{l_2}(x) \right) = \sum_{l \in Z} |C_l|^2, \end{aligned}$$

где мы переставили интегрирование и суммирование местами и использовали условие ортонормированности $\psi_l(x)$, $l \in Z$. Таким образом мы получаем соотношение $\sum_{l \in Z} |C_l|^2 = 1$, то есть набор величин $|C_l|^2$, $l \in Z$ в принципе может задавать какие-то вероятности. Какие именно мы сейчас и обсудим.

Собирая все вместе сказанное выше, можно задать математическое ожидание оператора $-i\hbar d/dx$ в состоянии $\psi(x)$:

$$\int_{-L/2}^{L/2} dx \psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \psi(x) = \sum_{l \in Z} p_l |C_l|^2. \quad (48)$$

Теперь обсудим очевидный вопрос: какое значение мы получим, если измерим импульс кванта, который находится в состоянии $\psi(x)$? Ответ, что он окажется равным (48) не верен.

В случае измерения импульса отдельного кванта, его величина окажется равной одному из значений p_l с вероятностью $|C_l|^2$. А само состояние кванта при измерении изменится и перейдет из $\psi(x)$ в $\psi_l(x)$. Эти наблюдения подтверждаются экспериментом. Напомним, в частности, что в двухщелевом эксперименте при определении положения кванта на сенсорном экране он оказывался в какой-то конкретной точке на экране, а не был размазан в усредненном положении между всеми сенсорами. В том случае, правда, определяется не импульс, а координата на сенсорном экране.

Измерением является воздействие на квант макроскопическим прибором, определяющим какую-то физическую величину (например, импульс или координату). Если же мы имеем много квантов, каждый из которых находится в состоянии с волновой функцией $\psi(x)$, то тогда очевидно, что средний померенный у них импульс окажется равным (48).

Все обсуждаемые здесь формулы легко обобщаются на случай непрерывного спектра. Их не трудно даже сразу записать в трехмерной форме. А именно, можно рассмотреть состояние в суперпозиции:

$$\psi(\vec{x}) = \int \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} C(\vec{p}) \psi_{\vec{p}}(\vec{x}), \quad (49)$$

где

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{x}) = \frac{e^{i(\vec{p}\cdot\vec{x})/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}},$$

и

$$C(\vec{p}) = \int \frac{d^3\vec{x}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \psi_{\vec{p}}^*(\vec{x}) \psi(\vec{x}).$$

Тогда среднее от оператора $-i\hbar\vec{\partial}$ в обсуждаемом состоянии равно:

$$\int \frac{d^3\vec{x}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \psi^*(\vec{x}) \left(-i\hbar\vec{\partial}\right) \psi(\vec{x}) = \int \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \vec{p} |C(\vec{p})|^2$$

Соответственно, если квант находился исходно в состоянии (49), то после измерения его импульса он может оказаться в объеме $d^3\vec{p}$ в окрест-

ности \vec{p} с плотностью вероятности $d^3\vec{p} |C(\vec{p})|^2$. При таком измерении квант перейдет из $\psi(\vec{x})$ в состояние с волновой функцией $\psi_{\vec{p}}(\vec{x})$.

Мы привели все эти соображения, чтобы подвести к мысли, что наблюдаемой величиной, которая отвечает импульсу кванта является оператор $-i\hbar\vec{\partial}$ и его соответствующий аналог $-i\hbar d/dx$ в одном измерении. Иными словами мы определили оператор импульса в квантовой механике: $\hat{p} = -i\hbar\vec{\partial}$. Собственные значения этого оператора определяют спектр возможных импульсов кванта, то есть те значения, которые импульс может принять в результате измерения в эксперименте.

Заметим, что если квант находится в состоянии с волновой функцией $\psi_{\vec{p}}(\vec{x})$, то ее эволюция во времени описывается волной вида:

$$\Psi_{\vec{p}}(\vec{x}, t) = \frac{e^{-iEt + i\vec{p}\vec{x}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}, \quad E = \frac{\vec{p}^2}{2m}.$$

Соответственно эволюция состояния (49) во времени определяется из уравнения:

$$\Psi(\vec{x}, t) = \int \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} C(\vec{p}) \Psi_{\vec{p}}(\vec{x}, t). \quad (50)$$

Не трудно видеть, что обе последние волновые функции решают нестационарное уравнение Шредингера для свободного кванта.

Здесь вероятно следует подчеркнуть еще раз, что процесс измерения не описывается решением уравнения Шредингера. Действительно, ведь при измерении происходит размыкание микроскопической замкнутой системы. При этом, происходит переход из состояния $\Psi(\vec{x}, t)$ в $\Psi_{\vec{p}}(\vec{x}, t)$. То есть из всего интеграла по \vec{p} в (50) остается единственный вклад. Такой процесс, так называемой редукции (или коллапса) волновой функции, не описывается уравнением Шредингера для отдельного кванта.

4. Другим примером наблюдаемой величины в квантовой механике является оператор координаты \hat{q} . Аналогично сказанному выше, можно мотивировать и постулировать, что он действует на все встречавшиеся нам выше волновые функции простым умножением на координату:

$$\hat{q}\psi(\vec{x}) = \vec{x}\psi(\vec{x}) \quad (51)$$

Заметим, что $\vec{x}\psi(x) \neq const\psi(x)$. То есть ни одна из встречавшихся выше волновых функций не является собственной для оператора \hat{q} .

Собственная функция такого оператора должна удовлетворять соотношению:

$$\vec{q}\psi_{\vec{a}}(\vec{x}) = \vec{a}\psi_{\vec{a}}(\vec{x}),$$

где \vec{a} некоторый постоянный вектор. Очевидным решением последнего соотношения является функция вида:

$$\psi_{\vec{a}}(\vec{x}) = \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{a}), \quad (52)$$

ведь $\vec{x}\delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{a}) = \vec{a}\delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{a})$. Ее разложение по базису собственных состояний момента имеет известный нам вид:

$$\delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{a}) = \int \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \frac{e^{i\vec{p}(\vec{x}-\vec{a})/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}, \quad (53)$$

то есть в данном случае $C(\vec{p}) = 1$. На будущее заметим, что из этого следует, что в данном состоянии квант может приобрести любой импульс \vec{p} в объеме $d^3\vec{p}$ с не зависящей от его величины вероятностью. Иными словами, все значения импульса в этом состоянии равновероятны. Или собственная функция оператора координаты \vec{q} является равновероятной суперпозицией всевозможных собственных состояний оператора импульса.

Далее, не трудно видеть, что волновые функции (52) для всевозможных значений \vec{a} составляют базис. То есть любая волновая функция может быть тавтологически разложена по нему:

$$\psi(\vec{x}) = \int d^3\vec{a} \psi(\vec{a}) \psi_{\vec{a}}(\vec{x}) \equiv \int d^3\vec{a} \psi(\vec{a}) \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{a}),$$

с очевидными значениями для коэффициентов разложения $\psi(\vec{a})$. Можно найти “матрицу” оператора импульса в состояниях $\psi_{\vec{a}}(\vec{x})$ или же “матрицу” оператора координаты в состояниях $\psi_{\vec{p}}(\vec{x})$. Окажется, что они не диагональные. Например,

$$\begin{aligned} \int d^3\vec{x} \psi_{\vec{p}_1}^*(\vec{x}) \vec{x} \psi_{\vec{p}_2}(\vec{x}) &= \int d^3\vec{x} \psi_{\vec{p}_1}^*(\vec{x}) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{p}_2} \right) \psi_{\vec{p}_2}(\vec{x}) = \\ &= -i\hbar \vec{\partial}_{\vec{p}_2} \delta^{(3)}(\vec{p}_1 - \vec{p}_2). \end{aligned}$$

Наконец, учитывая сделанные выше наблюдения, можно понять физический смысл и происхождение дифференциального оператора в стационарном уравнении Шредингера. А именно, если взять гамильтониан (43) и заменить в нем переменные фазового пространства \vec{p} и \vec{q} на квантово-механические операторы \hat{p} и \hat{q} , то мы получим так называемый оператор Гамильтона или гамильтониан:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{q}) = \frac{(-i\hbar\vec{\partial})^2}{2m} + V(\vec{x}) = -\frac{\hbar^2\Delta}{2m} + V(\vec{x}), \quad (54)$$

который и возникает в нестационарном и стационарном уравнениях Шредингера:

$$i\hbar\partial_t\Psi(\vec{x}, t) = \hat{H}\Psi(\vec{x}, t), \quad \hat{H}\psi_E(\vec{x}) = E\psi_E(\vec{x}).$$

Как мы заметили на прошлой лекции решением стационарного уравнения Шредингера является спектр (собственные значения) и собственные функции гамильтониана.

5. В отличие от классической ситуации, порядок, в котором стоят импульс и координата в квантовом случае нельзя менять. Это является обычной ситуацией для матричных операторов. Также верно и для дифференциальных операторов. Действительно, вычислим так называемый коммутатор операторов момента и координаты:

$$\left(\hat{p}_j\hat{q}_k - \hat{q}_k\hat{p}_j\right)\psi(\vec{x}) = \left(-i\hbar\partial_j x_k - x_k(-i\hbar\partial_j)\right)\psi(\vec{x}) = -i\hbar\delta_{jk}\psi(\vec{x}).$$

Здесь $\psi(\vec{x})$ произвольная функция и $j, k = \overline{1, 3}$. Чтобы получить данное соотношение мы предполагали, что оператор дифференцирования действует на все функции от \vec{x} , которые находятся от него справа; а также воспользовались правилом Лейбница и тем, что $\partial_j x_k = \delta_{jk}$.

Так как обсуждаемое соотношение верно для произвольной $\psi(\vec{x})$, то мы получаем, что $\hat{p}_j\hat{q}_k \neq \hat{q}_k\hat{p}_j$. Вместо этого имеется так называемое коммутационное соотношение Гейзенберга:

$$[\hat{p}_j, \hat{q}_k] \equiv \hat{p}_j\hat{q}_k - \hat{q}_k\hat{p}_j = -i\hbar\delta_{jk}. \quad (55)$$

В одномерном случае его можно записать как:

$$\frac{i}{\hbar} [\hat{p}, \hat{q}] = 1$$

Сравните его со скобкой Пуассона (44). Заметим, что $[\hat{p}, \hat{q}] = -[\hat{q}, \hat{p}]$ и $\{p, q\} = -\{q, p\}$. То есть и скобка Пуассона и коммутатор антисимметричны. Можно показать, что именно в скобку Пуассона и переходит коммутатор Гейзенберга в классическом пределе.

6. Теперь попробуем абстрагироваться сильнее, чем раньше, и, следуя Дираку, введем так называемые векторы бра (bra) и кет (ket) в пространстве Гильберта. Их название возникает из английского слова brackets — скобки.

А именно, в гильбертовом пространстве имеются векторы состояний кет $|\psi\rangle$, и сопряженные им векторы состояний бра $\langle\psi|$. Какое отношение эти векторы имеют к волновым функциям $\psi(x)$ мы обсудим чуть ниже. Сейчас же можно их представлять точно так же, как абстрактные векторы в конечномерном векторном пространстве \vec{v} . Точнее аналогом векторов кет будут столбцы, а векторов бра — строки с комплексно сопряженными компонентами. То есть для данного состояния вектор $\langle\psi|$ получается из $|\psi\rangle$ чем-то вроде последовательного применения операций транспонирования и комплексного сопряжения.

Скалярное произведение двух векторов можно записать, как $\langle\psi_1|\psi_2\rangle$. Действительно, умножив строку на столбец мы получим число. А норма вектора $\langle\psi|\psi\rangle$, квадрат его модуля, будет действительным положительным числом — аналогом суммы квадратов модулей компонент комплексного вектора в конечномерном случае.

Рассмотрим базис из собственных векторов оператора координаты. Для простоты ограничимся одномерным случаем⁷:

$$\hat{q}|x\rangle = x|x\rangle, \quad \langle x|\hat{q} = x\langle x|, \quad x \in (-\infty, +\infty).$$

Здесь для обозначения собственного вектора мы используем тот же параметр x , что и для собственного числа. Подчеркнем, что $|x\rangle$ — это не функция от x , а собственный вектор оператора \hat{q} в гильбертовом пространстве состояний, отвечающий собственному числу x . С таким же успехом вместо x можно использовать a .

Условие ортонормированности этого базиса выглядит тогда как:

$$\langle x_1|x_2\rangle = \delta(x_1 - x_2).$$

А условие полноты имеет вид:

⁷В этой части лекции мы предполагаем некоторые свойства рассматриваемых операторов, которые будут определены чуть ниже. Это не должно вызвать путаницы.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx |x\rangle \langle x| = \hat{\mathbf{1}}, \quad (56)$$

где справа стоит единичный оператор в гильбертовом пространстве. Действительно, если умножить не строку на столбец, как в скалярном произведении, а столбец на строку, то мы получим не число, а “матрицу” — оператор. Так и должно получаться при тензорном произведении векторов. А так как в нашем случае идет сумма по полному базису, то мы в результате получаем “единичную матрицу” — единичный оператор.

Действительно, вспомним, что соотношение полноты в конечномерном случае $\sum_{a=1}^N e_a^j e_a^k = \delta^{jk}$ можно записать в виде $\sum_{a=1}^N \vec{e}_a \otimes \vec{e}_a = \hat{\mathbf{1}}_{N \times N}$. Здесь $\hat{\mathbf{1}}_{N \times N}$ — единичная $N \times N$ матрица, а $\vec{v} \otimes \vec{w}$ обозначает тензорное произведение двух рассматриваемых векторов. В соотношении (56) сумма по a заменяется на интеграл по x .

Аналогично можно взять базис из собственных векторов оператора импульса:

$$\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle, \quad \langle p|\hat{p} = p\langle p|,$$

где в случае непрерывного спектра $p \in (-\infty, +\infty)$. Условия ортонормированности и полноты выглядят так же как и для $|x\rangle$:

$$\langle p_1|p_2\rangle = \delta(p_1 - p_2), \quad \int_{-\infty}^{+\infty} dp |p\rangle \langle p| = \hat{\mathbf{1}}.$$

Теперь естественно задать следующие вопросы: как оператор импульса действует на собственный вектор оператора координаты? И наоборот, как оператор координаты действует на собственный вектор оператора импульса? Не трудно видеть, что для того чтобы выполнялось соотношение:

$$[\hat{p}, \hat{q}]|x\rangle = -i\hbar|x\rangle,$$

необходимо потребовать, чтобы было верно:

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

Действительно, тогда

$$\langle x'|[\hat{p}, \hat{q}]|x\rangle = \langle x'|(\hat{p}\hat{q} - \hat{q}\hat{p})|x\rangle = \langle x'|(\hat{p}x - x'\hat{p})|x\rangle = -i\hbar\delta(x' - x).$$

И чтобы последнее равенство выполнялось необходимо потребовать $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$. Абсолютно аналогично, чтобы выполнялось условие

$$[\hat{p}, \hat{q}] |p\rangle = -i\hbar |p\rangle,$$

необходимо потребовать, чтобы:

$$\hat{q}|p\rangle = i\hbar \frac{d}{dp}|p\rangle,$$

ведь \hat{p} действует на $|p\rangle$ просто умножением на p . Таким образом, мы видим два различных представления операторов импульса и координаты. Если они применяются к собственным векторам оператора координаты, то \hat{q} действует просто умножением, а \hat{p} — дифференцированием. Это называется координатным или x -представлением. И наоборот, если они применяются к собственным векторам оператора импульса, то \hat{p} действует умножением, а \hat{q} дифференцированием. Это называется импульсным или p -представлением.

Здесь мы видим немного более сложный пример ситуации, которая встречается в конечномерных векторных пространствах. Если разложить матрицу по разным базисам, то и ее компоненты будут выглядеть поразному.

Далее, можно спросить чему будет равняться скалярное произведение собственных векторов импульса и координаты? А именно, чему равны произведения $\langle x|p\rangle$ и $\langle p|x\rangle$? Чтобы ответить на этот вопрос, рассмотрим следующее выражение: $\langle p|\hat{p}|x\rangle$. С одной стороны мы знаем, что $\langle p|\hat{p} = p\langle p|$. С другой стороны $\hat{p}|x\rangle = -i\hbar \frac{d}{dx}|x\rangle$. Поэтому мы получаем соотношение

$$-i\hbar \frac{d}{dx} \langle p|x\rangle = p\langle p|x\rangle.$$

На будущее заметим, что правила действий здесь простые: после того как операторы \hat{p} и \hat{q} заменяются на их конкретные представления (реализации), их можно выносить из под знака (...).

Решая полученное дифференциальное уравнение на $\langle p|x\rangle$, мы получаем, что

$$\langle p|x\rangle = \frac{e^{\frac{ipx}{\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}} = \psi_p(x),$$

где коэффициент при экспоненте мы зафиксировали из условия нормировки. Аналогично можно найти, что

$$\langle x|p\rangle = \frac{e^{-\frac{ipx}{\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}} = \psi_p^*(x),$$

Очевидно эти две величины определяют проекции векторов из одного базиса на другой. А физический смысл их в том, что они определяют плотность вероятности найти квант в окрестности точки x , если он находится в состоянии $|p\rangle$. Такой взгляд на данные скалярные произведения применим в координатном представлении.

На самом деле верно и обратное — $\langle p|x\rangle$ и сопряженная ей функция определяют вероятность обнаружить у кванта импульс в окрестности значения p , если он находится в состоянии $|x\rangle$. Такой взгляд применим в импульсном представлении.

В свете полученных формул многие приведенные выше абстрактные соотношения приобретают уже известную нам форму. Например, условие ортогональности приобретает вид:

$$\begin{aligned} \langle p_1|p_2\rangle &= \langle p_1|\hat{\mathbf{1}}|p_2\rangle = \left\langle p_1\left|\int_{-\infty}^{+\infty} dx\right|x\right\rangle\left\langle x\right|p_2\rangle = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \langle p_1|x\rangle\langle x|p_2\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{e^{\frac{ip_1x}{\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{e^{-\frac{ip_2x}{\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}} = \delta(p_1 - p_2). \end{aligned}$$

Здесь мы воспользовались условием полноты (56) для собственных векторов оператора координаты.

Тавтологически это же соотношение является и условием полноты для собственных векторов оператора координаты. Действительно, если обе стороны (56) слева умножить на $\langle p_1|$, а справа на $|p_2\rangle$, то мы получим ту же цепочку равенств.

Аналогично, можно свести к известным формулам условие полноты для собственных векторов оператора импульса и условие ортогональности собственных векторов оператора координаты.

Теперь должно быть ясно, что если квант находится в состоянии $|\psi\rangle$, то плотность вероятности обнаружить его в окрестности точки x определяет величина скалярного произведения $\langle x|\psi\rangle$. В результате мы имеем равенства:

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle, \quad \psi^*(x) = \langle \psi|x\rangle.$$

Это называется координатным или x -представлением волновых функций.

Аналогично величины:

$$\psi(p) = \langle p|\psi\rangle, \quad \psi^*(p) = \langle \psi|p\rangle$$

определяют плотности вероятности обнаружить у кванта импульс в окрестности величины p , если он находится в состоянии $|\psi\rangle$. Соответственно это называется импульсным или p -представлением волновых функций. Например, волновая функция кванта с импульсом k в p -представлении имеет вид $\psi_k(p) = \delta(p - k)$. Иными словами, волновые функции задают лишь какую-то конкретную реализацию (представление) абстрактных векторов из гильбертова пространства состояний.

Нетрудно найти связь между двумя представлениями волновых функций. Действительно,

$$\psi(x) = \langle \psi|x\rangle = \langle \psi|\hat{\mathbf{1}}|x\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dp \langle \psi|p\rangle \langle p|x\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dp \psi(p) \frac{e^{\frac{ipx}{\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}}. \quad (57)$$

То есть волновые функции в двух обсужаемых представлениях связаны преобразованием Фурье⁸. Соответственно скалярное произведение двух произвольных векторов записывается как:

$$\langle \psi_1|\psi_2\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \langle \psi_1|x\rangle \langle x|\psi_2\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_1^*(x) \psi_2(x).$$

Что очевидно совпадает с принятым на предыдущих лекциях определением.

7. Наконец, можно задать два представления и для гамильтониана, который в абстрактной операторной форме и в координатном представлении выглядит как указано в уравнении (54). А в импульсном представлении он записывается в виде:

$$\hat{H} = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V\left(i\hbar\vec{\partial}_p\right).$$

То есть так он действует на волновые функции $\psi(\vec{p})$ в p -представлении. Чтобы переписать это уравнение в несколько более осязаемой форме, рассмотрим стационарное уравнение Шредингера, которое в абстрактной операторной форме выглядит как⁹:

⁸Заметим, что выше $\psi(p)$ мы обозначали как $C(p)$. Надеемся, что это не приведет к путанице.

⁹Для упрощения формул мы рассматриваем одномерный случай.

$$\hat{H}|\psi\rangle \equiv \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{q})\right)|\psi\rangle = E|\psi\rangle, \quad \langle\psi|\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{q})\right) = \langle\psi|E. \quad (58)$$

Если умножить обе стороны второго соотношения справа на $|x\rangle$, то мы получим уравнение в x -представлении. Если же умножить обе его стороны на $|p\rangle$, то получится:

$$\left\langle\psi\left|\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{q})\right)\right|p\right\rangle = E\psi(p).$$

На левой стороне этого уравнения имеем, что:

$$\left\langle\psi\left|\frac{\hat{p}^2}{2m}\right|p\right\rangle = \left\langle\psi\left|\frac{p^2}{2m}\right|p\right\rangle = \frac{p^2}{2m}\psi(p).$$

Далее

$$\begin{aligned} \langle\psi|V(\hat{q})|p\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \langle\psi|V(\hat{q})|x\rangle \langle x|p\rangle = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx V(x) \langle\psi|x\rangle \frac{e^{-\frac{ipx}{\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx V(x) \psi(x) \frac{e^{-\frac{ipx}{\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}}. \end{aligned}$$

Представляя теперь $\psi(x)$ в интеграле с правой стороны последнего соотношения в виде разложения Фурье (57), получаем, что

$$\begin{aligned} \langle\psi|V(\hat{q})|p\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} dq \int_{-\infty}^{+\infty} dx V(x) \psi(q) \frac{e^{\frac{iqx}{\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{e^{-\frac{ipx}{\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}} = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dq \bar{V}(q-p) \psi(q), \quad (59) \end{aligned}$$

где

$$\bar{V}(p-q) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi\hbar}} V(x) \frac{e^{\frac{i(q-p)x}{\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

— соответствующая Фурье компонента потенциала. Таким образом, собирая все вместе, получаем, что в p -представлении стационарное уравнение Шредингера имеет вид:

$$\frac{p^2}{2m}\psi(p) + \int_{-\infty}^{+\infty} dq \bar{V}(q-p) \psi(q) = E\psi(p). \quad (60)$$

То есть $V\left(i\hbar\frac{d}{dp}\right)$ можно записать в виде интегрального оператора (59).

8. Обсудив конкретные и простые примеры, мы готовы рассмотреть теперь некоторые общие положения. Итак, наблюдаемой в квантовой механике является функция от операторов следующего вида: $F(\hat{q}, \hat{p}, t)$. При этом собственные значения этой величины должны быть действительными, так как на эксперименте мы измеряем действительные числа.

Что мы понимаем под функцией от операторов? Если рассмотреть функцию от одного оператора, скажем \hat{A} , то ее естественно определить в виде ряда Тейлора:

$$F(\hat{A}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{F^{(n)}(0)}{n!} \hat{A}^n,$$

где \hat{A}^n понимается просто как степень матрицы или дифференциального оператора.

В случае же когда мы имеем дело с функцией от двух и более операторов, которые не коммутируют друг с другом, $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$, то возникают некоторые сложности. Например, во втором порядке в ряде Тейлора помимо степеней \hat{A}^2 и \hat{B}^2 присутствует произведение операторов \hat{A} и \hat{B} , которое может иметь две не равных формы — $\hat{A}\hat{B}$ и $\hat{B}\hat{A}$. Возникает вопрос какой из этих двух вариантов выбрать. В таком случае функция от оператора определяется как ряд по степеням \hat{A} и \hat{B} , а в каждом порядке присутствуют все слова из “букв” \hat{A} и \hat{B} во всех возможных порядках. И каждый вклад входит со своим коэффициентом. Разные коэффициенты перед каждым словом будут отвечать разным результирующим операторам.

Однако при рассмотрении простейших операторов вида \hat{q} , \hat{p} , $\hat{p}^2/2m$, $V(\hat{q})$ и $\hat{p}^2/2m + V(\hat{q})$ такие сложности не возникают. Когда же мы столкнемся с более сложной ситуацией, тогда мы и обсудим результат на конкретном примере.

Помимо приведенных простейших примеров, можно определить операторы инверсии и трансляции, которые задаются их действиями на волновые функции. А именно, оператор инверсии \hat{P} действует как:

$$\hat{P}\psi(\vec{x}) = \psi(-\vec{x}),$$

а оператор трансляции T_a на вектор \vec{a} как:

$$T_a\psi(\vec{x}) = \psi(\vec{x} + \vec{a}).$$

Очевидно имеется также и единичный оператор, который присутствовал в некоторых наших формулах неявно. Например, в коммутационном соотношении Гейзенберга:

$$[\hat{p}_j, \hat{q}_k] = -i\hbar\delta_{jk} \hat{\mathbf{1}}.$$

Мы его не выписывали явно, так как он действует тривиально на любой вектор состояния или волновую функцию $\hat{\mathbf{1}}|\psi\rangle = |\psi\rangle$. Также он коммутирует с любым оператором $\hat{A}\hat{\mathbf{1}} = \hat{\mathbf{1}}\hat{A}$. Помимо этого верно, что $\hat{A}^0 = \hat{\mathbf{1}}$.

Все рассмотренные до сих пор операторы являются линейными. Примером нелинейной операции является возведение волновой функции в степень. Такие операторы мы не будем рассматривать в данном курсе.

Линейные операторы удовлетворяют ряду очевидных свойств, которые для определенности стоит привести здесь. Во-первых, действуя на вектор $|\psi\rangle$ из гильбертова пространства состояний оператором \hat{A} , мы опять получим вектор из этого же пространства, $\hat{A}|\psi\rangle = |\psi'\rangle$, который вообще говоря не совпадает с исходным. Во-вторых, верны следующие очевидные соотношения:

$$\begin{aligned} \hat{A} \left(a_1 |\psi_1\rangle + a_2 |\psi_2\rangle \right) &= a_1 \hat{A} |\psi_1\rangle + a_2 \hat{A} |\psi_2\rangle \\ \left(a \hat{A} + b \hat{B} \right) |\psi\rangle &= a \hat{A} |\psi\rangle + b \hat{B} |\psi\rangle \\ \hat{A} \left(b \hat{B} + c \hat{C} \right) &= b \hat{A} \hat{B} + c \hat{A} \hat{C}. \end{aligned}$$

Здесь $a_{1,2}$, a , b и c — это комплексные числа. В последнем соотношении важен порядок в произведении операторов.

Для каждого оператора \hat{A} можно определить ему эрмитово сопряженный \hat{A}^+ по следующему соотношению:

$$\langle \psi_1 | \hat{A} \psi_2 \rangle = \langle \hat{A}^+ \psi_1 | \psi_2 \rangle,$$

где мы приняли новые, но достаточно очевидные обозначения. Эти соотношения в менее абстрактной форме записываются как¹⁰:

$$\langle \psi_1 | \hat{A} \psi_2 \rangle \equiv \int dx \psi_1^*(x) \left(\hat{A} \psi_2(x) \right) =$$

¹⁰В связи с появлением новых обозначений стоит подчеркнуть, что форма записи $\langle \psi_1 | \hat{A} | \psi_2 \rangle$ применима только к эрмитовым (самосопряженным) операторам. Если оператор не эрмитов, то необходимо конкретизировать на какой вектор состояния он действует: $\langle \psi_1 | \hat{A} \psi_2 \rangle$ или $\langle \hat{A} \psi_1 | \psi_2 \rangle$. $(\hat{A} \hat{B})^+ = \hat{B}^+ \hat{A}^+$.

$$= \int dx \left(\hat{A}^+ \psi_1(x) \right)^* \psi_2(x) \equiv \langle \hat{A}^+ \psi_1 | \psi_2 \rangle.$$

Оператор называется самосопряженным или эрмитовым, если $\hat{A}^+ = \hat{A}$, то есть, если $\langle \psi_1 | \hat{A} \psi_2 \rangle = \langle \hat{A} \psi_1 | \psi_2 \rangle$. Легко проверить, что эрмитовыми являются операторы импульса, \hat{p} , координаты, \hat{q} , и гамильтониан, \hat{H} . Выше мы неявно это предполагали.

Оказывается, что для эрмитового оператора величина $\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$ является действительной для любого состояния $|\psi\rangle$. Это следует из цепочки равенств:

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

в которой мы использовали эрмитовость \hat{A} и свойство $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle^* = \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle$.

Из этого наблюдения, в свою очередь, следует, что любой эрмитов оператор имеет действительные собственные значения: если в последнем соотношении в качестве вектора состояния использовать собственный для оператора $\hat{A} |\psi_n\rangle = a_n |\psi_n\rangle$, то мы получим, что:

$$a_n = \langle \psi_n | \hat{A} \psi_n \rangle = \langle \hat{A} \psi_n | \psi_n \rangle = a_n^*.$$

Из чего с необходимостью мы заключаем, что физическим наблюдаемым величинам отвечают именно эрмитовы операторы. Так как при измерении физической величины мы должны получить действительное число, как было сказано выше.

Задачи.

I. Рассмотрите квант в следующем начальном состоянии

$$\Psi(x, t) = C e^{-\frac{(x-x_0)^2}{l^2}},$$

для одномерного свободного уравнения Шредингера. Здесь константа C подбирается из нормировки, а l и x_0 заданы. Рассмотрите решение свободного нестационарного уравнения Шредингера, отвечающее такому начальному состоянию. Покажите, что ширина рассматриваемого волнового пакета будет расти со временем, что отвечает расплыванию волнового пакета.

II. Получите трехмерное уравнение Шредингера в импульсном представлении.

IV. Лекция. Основные положения квантовой механики, еще раз об измерении в квантовой механике, оператор эволюции, представления Шредингера и Гейзенберга, интегралы движения, соотношение неопределенностей Гейзенберга, теоремы Эренфеста, операторы инверсии и трансляции и их свойства.

1. Итак, подытожим набранные на прошлых лекциях знания, которые были получены при рассмотрении простейших примеров, и сформулируем уже известные нам основные положения квантовой механики:

- Каждой измеримой физической величине сопоставляется линейный эрмитов оператор \hat{A} : $\hat{A}^+ = \hat{A}$.
- Каждое так называемое чистое состояние¹¹ микроскопической квантовой системы характеризуется вектором из пространства Гильберта $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$. Пространство Гильберта — это векторное пространство со скалярным произведением. В этом пространстве у каждого вектора кет $|\psi\rangle$ есть сопряженный вектор бра¹² $\langle\psi|$.
- Выполняется принцип суперпозиции. \hat{A} именно, система может находиться в суперпозиции состояний: например, $|\psi\rangle = \sum_n C_n |\psi_n\rangle$, где $|\psi_n\rangle$ — это полный ортонормированный набор собственных состояний некоторого эрмитового оператора $\hat{A} |\psi_n\rangle = a_n |\psi_n\rangle$. При этом $C_n = \langle\psi_n|\psi\rangle$.
- Спектр состояний наблюдаемой \hat{A} , вообще говоря, может быть конечным, счетным (дискретным) или непрерывным (континуальным). Также бывают спектры с вырождениями, то есть когда одному и тому же собственному числу a_n отвечает несколько линейно независимых векторов $|\psi_n\rangle$.
- Эволюция состояния во времени определяется нестационарным уравнением Шредингера:

$$i\hbar \partial_t |\Psi_t\rangle = \hat{H} |\Psi_t\rangle, \quad -i\hbar \partial_t \langle\Psi_t| = \langle\Psi_t| \hat{H}, \quad (61)$$

где оператор $\hat{H} = \hat{H}^+$ называется гамильтонианом.

¹¹ Бывают еще так называемые смешанные состояния, которые характеризуются матрицей плотности. Их мы обсудим в самом конце этого курса.

¹² Мы считаем, что пространство сопряженных векторов совпадает (изоморфно) с исходным. Это верно для всех задач данного курса.

- Математическое ожидание (среднее) физической величины \hat{A} в состоянии $|\Psi_t\rangle$ определяется диагональным матричным элементом:

$$\langle \hat{A} \rangle \equiv \langle \Psi_t | \hat{A} | \Psi_t \rangle = \int d^3\vec{x} \Psi^*(\vec{x}, t) \hat{A} \Psi(\vec{x}, t). \quad (62)$$

И это не та величина, которую принимает наблюдаемая в случае ее измерения для одного кванта. Это значение физической величины принимает при ее измерении для большого числа квантов, каждый из которых находится в состоянии $|\Psi_t\rangle$.

- При измерении физической величины \hat{A} для единственного кванта она может принять одно из своих собственных значений a_n . Если квант исходно находится в состоянии $|\psi\rangle = \sum_n C_n |\psi_n\rangle$, то \hat{A} может принять значение a_n с вероятностью $|C_n|^2$. В случае непрерывного спектра вместо вероятности определяется плотность вероятности.

Измерение в квантовой механике — это приведение микроскопической квантовой системы в контакт с макроскопической классической. Для большой классической системы ее действие S очень большое $S/\hbar \gg 1$, а также велики и его градиенты $|\partial_\mu S/\hbar|$ на характерных размерах. Для маленькой квантовой системы эти величины порядка единицы или меньше.

В принципе большие классические системы можно описывать при помощи векторов состояний $|\Psi_t\rangle$, но это будет превышением точности. Действительно, например, для камня все состояния в суперпозиции кроме одного будут входить с очень маленькой вероятностью. (В отличие, например, от кванта в двухщелевом эксперименте.) Вероятности других состояний будут столь малы, что их никогда не измерит ни один прибор. Поэтому данным явлением любой *физик* обязан пренебречь. Превышение точности одно из главных преступлений, что может совершить физик как ученый.

Измерение квантовой системы — это ее размыкание, которое приводит к редукции состояния. Например, к переходу $|\psi\rangle \rightarrow |\psi_n\rangle$. Такая редукция не описывается гамильтоновой эволюцией (61) для замкнутой квантовой системы.

Наконец, заметим, что вероятностную интерпретацию имеют не векторы состояний $|\psi\rangle$ и $|\psi_n\rangle$, а их скалярное произведение $\langle \psi_n | \psi \rangle$. Примером последнего и является волновая функция $\psi(x) = \langle x | \psi \rangle$. До

момента измерения квант находится в каком-то состоянии $|\psi\rangle$. А в момент измерения мы определяем вероятность перехода, определяемую с использованием величины $\langle\psi_n|\psi\rangle$.

Однако, как в деталях происходит редукция? В каких терминах следует описывать замкнутую систему, состоящую одновременно из большой классической и из маленькой квантовой систем? У научного сообщества пока нет хороших и общепринятых ответов на эти вопросы. В любом случае для начала их обсуждения нам необходимо ввести так называемую матрицу плотности, что будет сделано только в самом конце этого курса.

2. В течение этой лекции мы обсудим еще несколько других общих положений квантовой механики. Покажем, что можно выбрать базис из ортонормированных собственных векторов любой физической величины \hat{A} . Рассмотрим ее собственные векторы и числа $\hat{A}|\psi_n\rangle = a_n|\psi_n\rangle$ и следующую цепочку равенств:

$$\begin{aligned} a_n\langle\psi_m|\psi_n\rangle &= \langle\psi_m|\hat{A}\psi_n\rangle = \langle\psi_m|\hat{A}|\psi_n\rangle = \langle\hat{A}^+\psi_m|\psi_n\rangle = \\ &= \langle\hat{A}\psi_m|\psi_n\rangle = a_m^*\langle\psi_m|\psi_n\rangle = a_m\langle\psi_m|\psi_n\rangle. \end{aligned}$$

Здесь $|\psi_n\rangle$ и $|\psi_m\rangle$ — любые два собственных вектора \hat{A} , отвечающие двум разным собственным числам a_n и a_m . В этой цепочке равенств мы использовали эрмитовость $\hat{A}^+ = \hat{A}$ и тот факт, что все собственные числа эрмитового оператора являются действительными.

Вычитая из самой левой стороны этой цепочки ее самую правую, мы получаем, что

$$(a_n - a_m)\langle\psi_m|\psi_n\rangle = 0.$$

Это означает, что, если $a_n \neq a_m$, то обсуждаемые векторы ортогональны друг другу:

$$\langle\psi_m|\psi_n\rangle = 0, \quad n \neq m.$$

В этом рассуждении не было важно дискретный или непрерывный спектр мы обсуждаем. Важно только, что спектр невырожден. Вырожденный случай мы опишем чуть ниже.

В случае дискретного невырожденного спектра можно перескаляривать векторы следующим образом:

$$|\bar{\psi}_n\rangle = \frac{|\psi_n\rangle}{\langle\psi_n|\psi_n\rangle},$$

чтобы получить ортонормированный базис:

$$\langle \bar{\psi}_m | \bar{\psi}_n \rangle = \delta_{mn}.$$

Обсудим теперь ситуацию, когда в спектре имеется вырождение. То есть для одного собственного значения мы имеем несколько собственных векторов:

$$\hat{A} |\psi_n^{(j)}\rangle = a_n |\psi_n^{(j)}\rangle, \quad j = \overline{1, g_n},$$

где $g_n > 1$ — кратность вырождения. Заметим, что любая линейная комбинация рассматриваемых векторов, тоже является собственным вектором с тем же числом:

$$\hat{A} |\psi_n^{(c)}\rangle = \hat{A} \sum_{j=1}^{g_n} c_j |\psi_n^{(j)}\rangle = \sum_{j=1}^{g_n} c_j \hat{A} |\psi_n^{(j)}\rangle = \sum_{j=1}^{g_n} c_j a_n |\psi_n^{(j)}\rangle = a_n |\psi_n^{(c)}\rangle.$$

Если кратность вырождения конечна или даже счетна, то в g_n -мерном векторном пространстве натянутом на векторы $|\psi_n^{(j)}\rangle$ можно ввести ортонормированный базис. Алгоритм действий следующий. Положим первый вектор в базисе равным $|\psi_n^{(c=1)}\rangle = |\psi_n^{(j=1)}\rangle$, а второй будем искать в виде:

$$|\psi_n^{(c=2)}\rangle = |\psi_n^{(j=1)}\rangle + \alpha_{22} |\psi_n^{(j=2)}\rangle,$$

где комплексную константу α_{22} мы найдем из условия ортогональности $|\psi_n^{(c=2)}\rangle$ и $|\psi_n^{(c=1)}\rangle$:

$$0 = \langle \psi_n^{(c=1)} | \psi_n^{(c=2)} \rangle \equiv \langle \psi_n^{(j=1)} | \psi_n^{(j=1)} \rangle + \alpha_{22} \langle \psi_n^{(j=1)} | \psi_n^{(j=2)} \rangle.$$

Откуда следует, что

$$\alpha_{22} = - \frac{\langle \psi_n^{(j=1)} | \psi_n^{(j=1)} \rangle}{\langle \psi_n^{(j=1)} | \psi_n^{(j=2)} \rangle},$$

где мы предположили, что $\langle \psi_n^{(j=1)} | \psi_n^{(j=2)} \rangle \neq 0$. Иначе уже исходные векторы были бы ортогональны. Также предполагается, что $\langle \psi_n^{(j=1)} | \psi_n^{(j=1)} \rangle < \infty$, что верно для дискретного спектра.

Аналогично, полагая, что

$$|\psi_n^{(c=3)}\rangle = |\psi_n^{(j=1)}\rangle + \alpha_{32} |\psi_n^{(j=2)}\rangle + \alpha_{33} |\psi_n^{(j=3)}\rangle,$$

и требуя его ортогональности по отношению к векторам $|\psi_n^{(c=2)}\rangle$ и $|\psi_n^{(c=1)}\rangle$, мы получим два алгебраических уравнения на константы α_{32} и α_{33} .

Непрерывный спектр требует отдельного обсуждения. Но во многих физических задачах удается найти базис, который ортонормирован не на символ Кронекера, а на дельта функцию, $\langle \psi_m | \psi_n \rangle = \delta(m - n)$. Мы видели это на примере свободной частицы даже в присутствии вырождения, когда одному и тому же уровню энергии $E_p = p^2/2m$ соответствуют два состояния p и $-p$.

3. Обсудим теперь общие свойства решений нестационарного уравнения Шредингера (61). Чтобы однозначно зафиксировать его решение необходимо задать начальное условие в какой-то момент времени t_0 : $|\Psi_{t=t_0}\rangle = |\psi_0\rangle$. Тогда можно показать, что решением будет вектор вида:

$$|\Psi_t\rangle = e^{-\frac{i\hat{H}(t-t_0)}{\hbar}} |\psi_0\rangle, \quad (63)$$

где, как мы обсудили на прошлой лекции,

$$e^{-\frac{i\hat{H}(t-t_0)}{\hbar}} \equiv \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i(t-t_0)}{\hbar}\right)^n (\hat{H})^n.$$

Действительно, если подставить в уравнение (63) начальный момент времени $t = t_0$, то мы получим начальное условие. Далее из определения экспоненты от оператора в виде ряда, мы получаем следующую цепочку равенств:

$$\frac{d}{dt} |\Psi_t\rangle = \frac{d}{dt} e^{-\frac{i\hat{H}(t-t_0)}{\hbar}} |\psi_0\rangle = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} e^{-\frac{i\hat{H}(t-t_0)}{\hbar}} |\psi_0\rangle = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} |\Psi_t\rangle. \quad (64)$$

То есть выражение (63) действительно решает уравнение (61).

Для дальнейшего заметим, что если $|\psi_0\rangle$ является собственным вектором гамильтониана, $\hat{H} |\psi_0\rangle = E |\psi_0\rangle$, то

$$|\Psi_t\rangle = e^{-\frac{i\hat{H}(t-t_0)}{\hbar}} |\psi_0\rangle = e^{-\frac{iE(t-t_0)}{\hbar}} |\psi_0\rangle,$$

в чем можно убедиться прямым вычислением, используя разложение экспоненты в ряд. Фактически мы неявно использовали это свойство, когда переходили от нестационарного к стационарному уравнению Шредингера.

Если же $|\psi_0\rangle$ является суперпозицией собственных состояний гамильтониана, то есть $|\psi_0\rangle = \sum_n C_n |\psi_n\rangle$, где $\hat{H} |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle$, то

$$|\Psi_t\rangle = e^{-\frac{i\hat{H}(t-t_0)}{\hbar}} |\psi_0\rangle = \sum_n C_n e^{-\frac{iE_n(t-t_0)}{\hbar}} |\psi_n\rangle.$$

Величина

$$\hat{U}(t-t_0) = e^{-\frac{i\hat{H}(t-t_0)}{\hbar}}$$

называется оператором эволюции. Эрмитово сопряженный к нему имеет вид:

$$\hat{U}^+(t-t_0) = e^{\frac{i\hat{H}(t-t_0)}{\hbar}},$$

так как $\hat{H}^+ = \hat{H}$. Из этого следует, что

$$\hat{U}(t-t_0) \hat{U}^+(t-t_0) = \hat{U}^+(t-t_0) \hat{U}(t-t_0) = \hat{\mathbf{1}}$$

или $\hat{U}^{-1}(t-t_0) = \hat{U}^+(t-t_0)$. Оператор, удовлетворяющий такому свойству, называется унитарным.

Тот факт, что оператор эволюции унитарен является одним из самых важных свойств квантовой теории. Например, из этого свойства сразу же следует, что гамильтонова эволюция в квантовой механике не меняет скалярное произведение:

$$\langle \Psi_{1t} | \Psi_{2t} \rangle = \langle \psi_{10} | \hat{U}^+(t-t_0) \hat{U}(t-t_0) | \psi_{20} \rangle = \langle \psi_{10} | \psi_{20} \rangle,$$

что имеет фундаментальное значение.

4. Далее, как мы обсудили выше, среднее от оператора по состоянию определяется по формуле (62), которую можно переписать в виде:

$$\langle \hat{A} \rangle (t) = \langle \psi_0 | \hat{U}^+(t-t_0) \hat{A} \hat{U}(t-t_0) | \psi_0 \rangle,$$

то есть в такой записи, если сам оператор \hat{A} явно от времени не зависит, то вся зависимость среднего сосредоточена в состоянии $|\Psi_t\rangle$. Такая запись наблюдаемых, когда состояние меняется во времени, а оператор нет, называется представлением Шредингера.

С другой стороны, обсуждаемое среднее можно тавтологически переписать в форме:

$$\langle \hat{A} \rangle (t) = \langle \psi_0 | \hat{A}(t) | \psi_0 \rangle,$$

где

$$\hat{A}(t) = \hat{U}^+(t - t_0) \hat{A} \hat{U}(t - t_0).$$

То есть в такой записи вся зависимость квантового среднего от времени сосредоточена в операторе, а состояние не меняется. Это называется представлением Гейзенберга.

Найдем какое уравнение решает оператор в представлении Гейзенберга:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \hat{A}(t) &\equiv \frac{d}{dt} \hat{U}^+(t - t_0) \hat{A} \hat{U}(t - t_0) = \\ &= \left(\frac{d}{dt} \hat{U}^+(t - t_0) \right) \hat{A} \hat{U}(t - t_0) + \hat{U}^+(t - t_0) \hat{A} \left(\frac{d}{dt} \hat{U}(t - t_0) \right) = \\ &= \frac{i\hat{H}}{\hbar} \hat{U}^+(t - t_0) \hat{A} \hat{U}(t - t_0) + \hat{U}^+(t - t_0) \hat{A} \left(-\frac{i\hat{H}}{\hbar} \right) \hat{U}(t - t_0) = \\ &= \frac{i\hat{H}}{\hbar} \hat{A}(t) - \hat{A}(t) \frac{i\hat{H}}{\hbar}. \end{aligned}$$

Здесь мы использовали то факт, что \hat{A} явно от времени не зависит; применили правило дифференцирования по Лейбницу; использовали, что $\frac{d}{dt} \hat{U}(t - t_0) = -\frac{i\hat{H}}{\hbar} \hat{U}(t - t_0)$, как следует из определения оператора эволюции и показано в уравнения (64). Далее использовалось, что $[\hat{H}, \hat{U}] = 0$, так как \hat{U} является рядом по степеням \hat{H} .

Приравнивая самую левую и самую правую части рассматриваемой цепочки равенств, мы получаем так называемое уравнение Гейзенберга:

$$\frac{d}{dt} \hat{A}(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}(t)],$$

которое и определяет зависимость операторов от времени. Если \hat{A} все-таки зависит явно от времени, то обсуждаемое уравнение принимает вид:

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

Сравните его с уравнением

$$\frac{d}{dt}F(t) = \{H, F(t)\} + \frac{\partial}{\partial t}F(t),$$

которое, как мы обсуждали на одной из предыдущих лекций, определяет зависимость наблюдаемых от времени в классической механике. Там же мы объясняли, что при квантовании скобка Пуассона $\{G, F\}$ переходит в коммутатор $\frac{i}{\hbar} [G, F]$.

5. Одним из важных следствий сделанных наблюдений является, то что, если оператор \hat{I} коммутирует с гамильтонианом $[\hat{H}, \hat{I}] = 0$, то он не зависит от времени $d\hat{I}/dt = 0$, то есть является интегралом движения. Сравните это со свойством интегралов движения в классической механике $\{H, I\} = 0$.

Покажем теперь, что если два эрмитовых оператора коммутируют, $[G, F] = 0$, то для них можно выбрать общий базис собственных состояний. Действительно, пусть $|\psi_n\rangle$ — базис собственных состояний оператора \hat{F} , то есть $\hat{F}|\psi_n\rangle = f_n|\psi_n\rangle$. Пусть в результате действия оператора \hat{G} на произвольное состояние из набора $|\psi_n\rangle$ мы получаем вектор $|\phi_n\rangle = \hat{G}|\psi_n\rangle$, который не пропорционален $|\psi_n\rangle$. Тогда разложим его по базису $|\psi_n\rangle$:

$$\hat{G}|\psi_n\rangle = \sum_k G_{nk} |\psi_k\rangle,$$

где, $G_{nk} = \langle \psi_n | \hat{G} | \psi_k \rangle$, как не трудно получить прямо из обсуждаемого разложения, помножив обе стороны последнего соотношения слева на $\langle \psi_n |$. Так как $\hat{G}\hat{F} = \hat{F}\hat{G}$, то два следующих выражения равны друг другу:

$$\hat{F}\hat{G}|\psi_n\rangle = \hat{F}\sum_k G_{nk} |\psi_k\rangle = \sum_k G_{nk} f_k |\psi_k\rangle$$

и

$$\hat{G}\hat{F}|\psi_n\rangle = \hat{G}f_n|\psi_n\rangle = \sum_k G_{nk} f_n |\psi_k\rangle.$$

Вычитая одно из другого, получаем, что

$$\sum_k G_{nk} (f_k - f_n) |\psi_k\rangle = 0.$$

Так как мы имеем дело с полным базисом, то из этого соотношения следует, что $G_{nk} (f_k - f_n) = 0$. В результате, если $f_k \neq f_n$, то $G_{kn} = 0$.

То есть недиагональные элементы матрицы $G_{nk} = \langle \psi_n | \hat{G} | \psi_k \rangle$ равны нулю. Иными словами оператор \hat{G} диагонален в базисе собственных состояний оператора \hat{F} , $G_{nk} = g_k \delta_{nk}$. То есть он имеет те же собственные состояния, что и требовалось доказать.

Эти наблюдения показывают, что две коммутирующие величины можно одновременно измерить. Действительно, при измерении произойдет редукция в одно из их общих собственных состояний, а операторы примут соответствующие собственные значения.

В частности, гамильтониан можно измерить одновременно с интегралом движения. Например, мы уже сталкивались с подобной ситуацией, когда для свободной частицы гамильтониан коммутирует с импульсом $[\hat{H}, \hat{p}] = 0$. Соответственно для такой частицы одновременно могут быть определены энергия и импульс.

6. Насколько точно можно одновременно измерить две некоммутирующие величины показывает соотношение неопределенностей Гейзенберга. Получим его из первых принципов в общей ситуации. А именно, рассмотрим коммутационное соотношение двух эрмитовых операторов:

$$[\hat{G}, \hat{F}] = i\hat{D}, \quad \hat{F}^+ = \hat{F}, \quad \hat{G}^+ = \hat{G}, \quad (65)$$

а \hat{D} — произвольный оператор. Введем обозначение:

$$\Delta\hat{G} \equiv \hat{G} - \langle \psi | \hat{G} | \psi \rangle, \quad \Delta\hat{F} \equiv \hat{F} - \langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle,$$

для произвольного состояния $|\psi\rangle$. Рассмотрим следующий оператор:

$$\hat{A} = \Delta\hat{G} + i a \Delta\hat{F},$$

где a — произвольная действительная константа. Для произвольного оператора и состояния верно:

$$\langle \psi | \hat{A}^+ \hat{A} | \psi \rangle = \int dx |\hat{A} \psi(x)|^2 \geq 0.$$

Поэтому:

$$\begin{aligned} 0 &\leq \langle \psi | \left(\Delta\hat{G} - i a \Delta\hat{F} \right) \left(\Delta\hat{G} + i a \Delta\hat{F} \right) | \psi \rangle = \\ &= \langle \Delta\hat{G}^2 \rangle + a^2 \langle \Delta\hat{F}^2 \rangle + i a \langle \psi | [\hat{G}, \hat{F}] | \psi \rangle, \end{aligned}$$

где мы использовали то, что величины $\langle \psi | \hat{G} | \psi \rangle$ и $\langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle$ являются действительными для эрмитовых операторов, поэтому $(\Delta \hat{G} + i a \Delta \hat{F})^+ = \Delta \hat{G} - i a \Delta \hat{F}$. Мы обозначили так называемую дисперсию, как $\langle \Delta \hat{G}^2 \rangle = \langle \psi | \Delta \hat{G}^2 | \psi \rangle$ и также для \hat{F} . И наконец мы воспользовались тем, что $[\Delta \hat{G}, \Delta \hat{F}] = [\hat{G}, \hat{F}]$, что не трудно показать.

Итак, в результате мы получаем следующее неравенство:

$$\langle \Delta \hat{G}^2 \rangle + a^2 \langle \Delta \hat{F}^2 \rangle - a \langle \hat{D} \rangle \geq 0,$$

где мы использовали коммутатор (65). Поскольку это неравенство верно при любом действительном a , дискриминант стоящего с его левой стороны квадратного трехчлена должен быть меньше нуля:

$$\langle \hat{D} \rangle^2 - 4 \langle \Delta \hat{G}^2 \rangle \langle \Delta \hat{F}^2 \rangle \leq 0.$$

В результате мы получаем соотношение неопределенностей Гейзенберга в общем виде:

$$\Delta G \Delta F \geq \frac{|\langle \hat{D} \rangle|}{2},$$

где мы обозначили $\Delta G \equiv \sqrt{\langle \Delta \hat{G}^2 \rangle}$ и также для F .

В случае импульса и координаты $[\hat{p}, \hat{q}] = -i \hbar$ это соотношение приводит к неравенству:

$$\Delta p \Delta q \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (66)$$

Аналог этого соотношения должен быть известен студентам из курса оптики. Действительно, рассмотрим волновой пакет, в который дают одинаковый вклад моды в интервале $[k_0 - \Delta k, k_0 + \Delta k]$ значений волнового вектора. Тогда соответствующая величина поля в пакете пропорциональна:

$$\psi(x) \sim \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} dk e^{ikx} = 2 e^{ik_0 x} \frac{\sin(\Delta k x)}{ix}.$$

Интенсивность в таком пакете, $|\psi(x)|^2$, существенно отлична от нуля в области значений $x \in [-\Delta x, \Delta x]$, где $\Delta x \gtrsim 1/\Delta k$.

В частности это означает и обратное. А именно, если пропустить волну через щель ширины Δx , то у прошедшей волны будет разброс в значениях волнового вектора пропорциональный $\Delta k \gtrsim 1/\Delta x$. Таким образом, мы имеем соотношение $\Delta k \Delta x \gtrsim 1$, которое мы получили для интенсивной волны света. Но оно верно и для волны вероятности отдельного кванта. Если же умножить обе его стороны на \hbar , то получится соотношение неопределенностей $\Delta p \Delta x \gtrsim \hbar$.

Аналогично, если волновой пакет имеет продолжительность Δt , то разброс частот в нем определяется как $\Delta \omega \gtrsim 1/\Delta t$. Соответственно мы получаем соотношение неопределенностей на энергию и время $\Delta E \Delta t \gtrsim \hbar$, которое мы подробнее обсудим на одной из следующих лекций.

В заключении этого раздела лекции перечислим основные свойства коммутатора:

- $[\hat{G}, \hat{F}] = -[\hat{F}, \hat{G}]$ — антисимметрия.
- $[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B} + \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}]$ — похоже на правило дифференцирования Лейбница, поэтому и называется правилом Лейбница.
- $[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] = 0$ — тождество Якоби.

В этих соотношениях не сложно убедиться, если явно раскрыть скобки в коммутаторах.

7. Обсудим теперь на конкретном примере теоремы Эренфеста, которые утверждают то, что средние от физических величин удовлетворяют тем же уравнениям, что и соответствующие классические наблюдаемые. Для простоты рассмотрим одномерную частицу в потенциале:

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

Тогда уравнение Гейзенберга на координату имеет вид:

$$\frac{d\hat{q}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{q}] = \frac{i}{\hbar} \left[\frac{\hat{p}^2}{2m}, \hat{q} \right] = \frac{\hat{p}}{m},$$

где мы воспользовались тем, что $[V(\hat{q}), \hat{q}] = 0$ и правилом Лейбница, чтобы показать, что $\left[\frac{\hat{p}^2}{2m}, \hat{q} \right] = -\frac{i\hbar}{m} \hat{p}$. Усредняя самую левую и самую правую стороны обсуждаемой цепочки равенств по любому состоянию, мы получаем:

$$\frac{d\langle\hat{q}\rangle}{dt} = \frac{\langle\hat{p}\rangle}{m}$$

— уравнение из классической механики.

Далее:

$$\frac{d\hat{p}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{p}] = \frac{i}{\hbar} [V(\hat{q}), \hat{p}] = -V'(\hat{q}),$$

где мы воспользовались тем, что $[\frac{\hat{p}^2}{2m}, \hat{p}] = 0$ и правилом Лейбница, чтобы показать, что $\frac{i}{\hbar} [V(\hat{q}), \hat{p}] = -V'(\hat{q})$. Таким образом, не трудно видеть, что в x -представлении (то есть если усреднять только по $|x\rangle$) мы имеем:

$$\frac{d\langle\hat{p}\rangle}{dt} = -V'(\langle\hat{q}\rangle).$$

Все эти наблюдения не сложно обобщить на трехмерный случай и на произвольные операторы, как можно видеть из формы уравнения Гейзенберга на временную зависимость операторов.

8. Обсудим еще один важный основополагающий факт. Покажем, что если имеются два интеграла движения, $[\hat{H}, \hat{I}_1] = 0$ и $[\hat{H}, \hat{I}_2] = 0$, которые, однако, не коммутируют друг с другом, $[\hat{I}_2, \hat{I}_1] \neq 0$, то это приводит к тому, что спектр энергий имеет вырождение.

Действительно, выберем базис из общих собственных векторов гамильтониана \hat{H} и первого интеграла \hat{I}_1 :

$$\hat{H} |\psi_{E,1}\rangle = E |\psi_{E,1}\rangle, \quad \hat{I}_1 |\psi_{E,1}\rangle = a_1 |\psi_{E,1}\rangle.$$

Но при этом получается, что

$$\hat{I}_2 |\psi_{E,1}\rangle = |\phi\rangle \neq |\psi_{E,1}\rangle.$$

То есть $|\psi_{E,1}\rangle$ не является собственным состоянием оператора \hat{I}_2 . Однако, поскольку $\hat{H} \hat{I}_2 = \hat{I}_2 \hat{H}$, мы получаем, что:

$$\hat{H} |\phi\rangle = \hat{H} \hat{I}_2 |\psi_{E,1}\rangle = \hat{I}_2 \hat{H} |\psi_{E,1}\rangle = E \hat{I}_2 |\psi_{E,1}\rangle = E |\phi\rangle,$$

то есть вектор $|\phi\rangle$ является собственным для гамильтониана с тем же собственным значением, что и $|\psi_{E,1}\rangle$. При этом $|\phi\rangle$ и $|\psi_{E,1}\rangle$ не пропорциональны друг другу, что и означает вырождение спектра.

Заметим, что в рассматриваемом обсуждении не требовалось, чтобы операторы $\hat{I}_{1,2}$ являлись эрмитовыми. Единственно, что было важно — это возможность разложить собственные состояния одного оператора по собственным другого. Это для эрмитовых операторов всегда возможно, но может также оказаться верным и для некоторых не эрмитовых операторов.

Вместе с тем в квантовой механике важную роль играют операторы, которые осуществляют преобразования симметрии и коммутируют с гамильтонианом. Однако при этом они не всегда являются эрмитовыми. Как мы увидим из следующих лекций примерами таких симметрий являются вращения (повороты), отражения относительно осей симметрии (инверсии координат) и трансляции.

9. В заключении лекции обсудим несколько примеров интегралов движения, возникающих из симметрии. Например, с вырождением спектра энергии из-за наличия двух интегралов движения мы встречались при обсуждении свободной частицы. А именно, в этом случае гамильтониан $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$ коммутирует с импульсом \hat{p} , и с оператором инверсии \hat{P} , который действуем как

$$\hat{P} \psi(x) \equiv \psi(-x).$$

Поэтому очевидно, что $\hat{P}\hat{p} = -\hat{p}\hat{P}$ и $[\hat{P}, \hat{p}] \neq 0$. Но, при этом, $[\hat{P}, \hat{H}] = 0$. В результате в качестве собственных функций гамильтониана, отвечающих одной и той же энергии, мы имели две: $\psi_p(x)$ и $\psi_{-p}(x) = \psi_p(-x)$.

Другой важный пример интеграла движения возникает в случае периодического потенциала $V(x+a) = V(x)$ с периодом a . В такой ситуации гамильтониан коммутирует с так называемым оператором трансляции, $[\hat{T}_a, \hat{H}] = 0$, который действует как:

$$\hat{T}_a \psi(x) = \psi(x+a).$$

Заметим, что $[\hat{T}_a, \hat{p}] = 0$. Действительно,

$$\psi(x+a) = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{a^n}{n!} \frac{d^n \psi(x)}{dx^n} = \left(\sum_{n=0}^{+\infty} \frac{a^n}{n!} \frac{d^n}{dx^n} \right) \psi(x) = e^{a \frac{d}{dx}} \psi(x).$$

То есть оператор трансляции можно представить как функцию только от \hat{p} :

$$\hat{T}_a = e^{-\frac{ia\hat{p}}{\hbar}}.$$

Далее, из этого сразу следует, что он является унитарным $\hat{T}_a \hat{T}_a^+ = \hat{T}_a \hat{T}_{-a} = \hat{\mathbf{1}}$. Можно показать, что у любого унитарного оператора $\hat{A} \hat{A}^+ = \hat{\mathbf{1}}$ собственные значения по модулю равны единице. Действительно, пусть имеется собственное число и вектор, $\hat{A}|\psi\rangle = a|\psi\rangle$. Тогда получаем следующую цепочку равенств:

$$\langle\psi|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{\mathbf{1}}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}\hat{A}^+|\psi\rangle = a^* a \langle\psi|\psi\rangle.$$

То есть $|a|^2 = 1$, что и требовалось доказать. Таким образом, это свойство верно и для оператора трансляции, и для оператора эволюции \hat{U} .

В результате, возвращаясь к примеру с трансляциями, собственные числа оператора \hat{T}_a можно записать как $\lambda = e^{ika}$, где $\hbar k$ является собственным числом оператора \hat{p} и называется квазиимпульсом. Поэтому собственные функции оператора трансляции представляются как:

$$\psi_k(x) = e^{ikx} \phi(x),$$

где $\phi(x) = \phi(x+a)$ — периодическая функция. Волновые функции такого вида называются Блоховскими.

Задачи.

I. Получите уравнение Гейзенберга

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

в ситуации когда оператор явно зависит от времени.

II. Докажите правило Лейбница и тождество Якоби для пропагатора.

V. Лекция. Простейшие задачи одномерной квантовой механики, (вариационный) принцип наименьшего действия для стационарного уравнения Шредингера, условия сшивки волновых функций, нормировка волновой функции на единичный поток, осцилляционная теорема, квантовый линейный осциллятор.

1. На этой лекции мы изучим несколько задач квантовой механики, в которых рассматривается одномерное движение в потенциалах $V(x)$ простейшего вида. Попутно будут сформулированы некоторые общие положения для одномерного движения и не только.

Как мы знаем одномерное стационарное уравнение Шредингера имеет вид:

$$\psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)] \psi(x) = 0, \quad \psi''(x) \equiv \frac{d^2\psi(x)}{dx^2}. \quad (67)$$

Для дальнейшего нам необходимо разобрать вывод этого уравнения из вариационного принципа. Оно следует из действия вида:

$$S[\psi(\cdot), \psi^*(\cdot)] = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left[\frac{\hbar^2 |\psi'(x)|^2}{2m} - [E - V(x)] |\psi(x)|^2 \right]. \quad (68)$$

Покажем, что его вариация по ψ^* равна нулю на волновых функциях, решающих уравнение (67):

$$\begin{aligned} 0 = \delta_{\psi^*} S &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left[\frac{\hbar^2 \psi' (\delta\psi^*)'}{2m} - [E - V(x)] \psi \delta\psi^* \right] = \\ &= \psi' \delta\psi^* \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left[\frac{\hbar^2 \psi''}{2m} + [E - V(x)] \psi \right] \delta\psi^*. \end{aligned}$$

Теперь, если потребовать граничные условия Дирихле¹³ $\delta\psi^*(-\infty) = \delta\psi^*(+\infty) = 0$, то мы получим уравнение Шредингера (67). Если же проварьировать действие по ψ , то мы получим комплексно сопряженное уравнение.

¹³Напомним, что из принципа наименьшего действия всегда наряду с уравнениями движения следуют граничные условия.

Заметим, что в уравнение Шредингера неизвестной величиной наряду с ψ является также и E . Поэтому ее можно тоже рассматривать, как переменную для вариации. Действительно, если вместо (68) определить действие вида

$$S[\psi(\cdot), \psi^*(\cdot), E] = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left[\frac{\hbar^2 |\psi'(x)|^2}{2m} - [E - V(x)] |\psi(x)|^2 \right] + E \cdot \text{const},$$

то уравнение Шредингера не изменится, а его вариация по E приведет к соотношению вида:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi(x)|^2 = \text{const}.$$

Здесь размерную константу с правой стороны можно убрать в нормировку волновой функции. То есть E является множителем Лагранжа, который приводит к связи — условию нормировки на волновые функции. (Мы здесь подразумеваем, что спектр дискретный.)

Наконец, подчеркнем, что истинный минимум действию (68) доставляет волновая функция основного уровня энергии $\psi_0(x)$, отвечающая наименьшему возможному значению E_0 . Чтобы найти волновые функции ψ_1, ψ_2, \dots возбужденных уровней E_1, E_2, \dots , необходимо искать экстремумы (68) с дополнительными условиями, что волновые функции друг другу ортогональны:

$$0 = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_0(x)^* \psi_1(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_{0,1}(x)^* \psi_2(x) = \dots$$

Это позволяет найти все собственные функции $\psi_n(x)$ и значения E_n оператора Гамильтона.

2. Теперь мы готовы рассмотреть несколько модельных версий потенциала $V(x)$. Пусть потенциал имеет такой вид, как изображено на рис. 5. То есть,

$$\begin{aligned} V(x) &= 0, & x < 0, \\ V(x) &= V_0 > 0, & x > 0. \end{aligned}$$

(а) Рассмотрим сначала случай $E > V_0$. Тогда, ввиду кусочно-го постоянства потенциала, уравнение Шредингера принимает вид

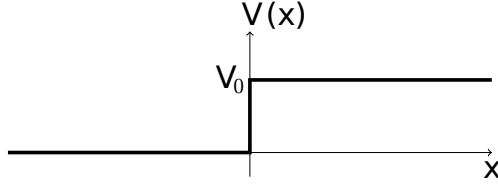


Рис. 5:

$$\begin{aligned} \psi''_-(x) + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi_-(x) &= 0, \\ \psi''_+(x) + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V_0] \psi_+(x) &= 0, \end{aligned} \quad (69)$$

где

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \psi_-(x), & x < 0 \\ \psi(x) &= \psi_+(x), & x > 0. \end{aligned}$$

Сразу видно, что $\psi''_-(0) \neq \psi''_+(0)$. А что можно сказать про $\psi_{\pm}(0)$ и $\psi'_{\pm}(0)$?

Из общих соображений, принимая во внимание физический смысл $|\psi(x)|^2$ как плотности вероятности, естественно предположить, что $\psi(x)$ нигде не должна испытывать скачков. Это косвенно подтверждается опытными данными. То есть условие сшивки на волновую функцию должно иметь вид: $\psi_-(0) = \psi_+(0)$.

Чтобы определить поведение $\psi'(x)$ в нуле, применим вариационный принцип. В рассматриваемом случае:

$$\begin{aligned} S[\psi(\cdot), \psi^*(\cdot)] &= \int_{-\infty}^0 dx \left[\frac{\hbar^2 |\psi'_-(x)|^2}{2m} - E |\psi_-(x)|^2 \right] + \\ &+ \int_0^{+\infty} dx \left[\frac{\hbar^2 |\psi'_+(x)|^2}{2m} - [E - V_0] |\psi_+(x)|^2 \right]. \end{aligned}$$

Варируя это действие по ψ^* мы получим два дополнительных граничных вклада при $x = 0$. Чтобы получить (69), необходимо положить сумму этих вкладов равной нулю:

$$\psi'_-(0) \delta\psi_-^*(0) - \psi'_+(0) \delta\psi_+^*(0) = 0.$$

Учитывая, что $\psi(x)$ непрерывна в нуле, соответственно, $\delta\psi_-^*(0) = \delta\psi_+^*(0) \neq 0$, мы получаем условие сшивки на производную волновой функции¹⁴: $\psi'_-(0) = \psi'_+(0)$. Применим теперь эти знания к обсуждаемой задаче.

Общие решения уравнений (69) имеют вид:

$$\begin{aligned}\psi_+(x) &= A_+ e^{\frac{ip_+x}{\hbar}} + B_+ e^{-\frac{ip_+x}{\hbar}}, & p_+ &= \sqrt{2m(E - V_0)}, \\ \psi_-(x) &= A_- e^{\frac{ip_-x}{\hbar}} + B_- e^{-\frac{ip_-x}{\hbar}}, & p_- &= \sqrt{2mE},\end{aligned}\quad (70)$$

где A_{\pm} и B_{\pm} некоторые комплексные константы.

Применяя условия сшивки для этих функций, получаем:

$$\begin{aligned}\psi_-(0) = \psi_+(0) &\implies A_+ + B_+ = A_- + B_-, \\ \psi'_-(0) = \psi'_+(0) &\implies p_+ (A_+ - B_+) = p_- (A_- - B_-).\end{aligned}\quad (71)$$

Эти условия позволяют выразить два коэффициента из A_{\pm} и B_{\pm} через два других. Один из оставшихся двух коэффициентов можно найти из условия нормировки¹⁵, к обсуждению которого в данной задаче мы теперь и перейдем.

Чтобы сформулировать удобное условие нормировки, обсудим физический смысл решений ψ_{\pm} . Для этого рассмотрим решения нестационарного уравнения, отвечающие $\psi_{\pm}(x)$:

$$\Psi_{\pm}(\vec{x}, t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \psi_{\pm}(x), \quad \frac{p_{\pm}^2}{2m} = E = \frac{p_+^2}{2m} + V_0.$$

Из этого выражения видно, что волны

$$A_{\pm} e^{-\frac{iEt}{\hbar} + \frac{ip_{\pm}x}{\hbar}}$$

совершают движение направо вдоль оси x , а волны

$$B_{\pm} e^{-\frac{iEt}{\hbar} - \frac{ip_{\pm}x}{\hbar}}$$

¹⁴Подчеркнем, однако, что если потенциал $V(x)$ является обобщенной функцией (например, дельта-функцией), то условия сшивки на производные волновых функций могут выглядеть сложнее и требуют отдельного обсуждения на семинарах.

¹⁵Заметим, что у общего решения остается один не фиксированный коэффициент, что связано с наличием двух линейно независимых решений в обсуждаемой ситуации. То есть это связано с вырождением спектра. Мы вернемся к этому вопросу ниже.

— налево.

В таком случае, если рассмотреть решение вида (70) с $B_+ = 0$, то оно описывает следующую ситуацию. Волна с амплитудой A_- падает на потенциальный барьер V_0 слева. Волна, отвечающая A_+ , описывает прошедшую над барьером, а B_- — отраженную.

Аналогично, если рассмотреть решение вида (70) с $A_- = 0$, то оно описывает волну B_+ падающую на барьер справа, A_+ — отраженную, а B_- — прошедшую.

То есть обсуждаемые две ситуации описывают надбарьерное рассеяние. Соответственно полное решение (70) отвечает суперпозиции двух рассматриваемых решений. Мы имеем два линейно независимых решения.

Для задачи надбарьерного рассеяния удобнее нормировать волновую функцию используя не плотность вероятности, $\rho = |\Psi|^2$, а поток, $j = \frac{i\hbar}{2m} [\Psi^* \partial_x \Psi - \Psi \partial_x \Psi^*]$. На второй лекции мы вывели уравнение непрерывности, которое в одномерном случае имеет вид:

$$0 = \partial_t \rho + \partial_x j.$$

Оно следует из уравнения Шредингера и означает, очевидно, что поток вероятности должен сохраняться. То есть в обсуждаемой задаче $j_+ = j_-$, где:

$$j_{\pm}(x) = \frac{i\hbar}{2m} [\psi_{\pm}^* \partial_x \psi_{\pm} - \psi_{\pm} \partial_x \psi_{\pm}^*] = \frac{p_{\pm}}{m} [|A_{\pm}|^2 - |B_{\pm}|^2].$$

Прежде, чем обсудить условие нормировки, сделаем несколько замечаний. Во-первых, из сохранения потока следует условие

$$p_- [|A_-|^2 - |B_-|^2] = p_+ [|A_+|^2 - |B_+|^2],$$

которое не трудно вывести из (71).

Во-вторых, заметим, что обсуждаемые условия никак не ограничивают значения E . Действительно, энергия прямо связана с длиной волны, как можно видеть из (70), например. А для волн при $E > V_0$ никаких ограничений на длину волны не возникает. Таким образом, при $E > V_0$ энергия может принимать любые значения. Это означает, что спектр непрерывный. Более того, так как каждому значению E отвечают два линейно независимых решения (двигающихся налево и направо — с p и $-p$), то мы имеем дважды вырожденный спектр. Здесь ситуация аналогична свободным волнам — на прямой и без потенциала.

Вернемся, теперь, к условию нормировки. Если рассматривать задачу про надбарьерное рассеяние с падением волны на барьер с левой стороны, то условие сохранения потока вероятности можно переписать, как

$$p_- |A_-|^2 = p_+ |A_+|^2 + p_- |B_-|^2.$$

Ведь при падении слева $B_+ = 0$, как пояснялось выше.

В такой постановке задачи искомыми величинами являются вероятность прохождения или отражения от барьера, а не вероятность обнаружения кванта в том или ином положении. Поэтому удобно нормироваться так, что поток падающей волны равен единице $\frac{p_-}{m} |A_-|^2 = 1$. Тогда поток прошедшей волны, $T = \frac{p_+}{m} |A_+|^2$, определяет вероятность прохождения, а поток отраженной, $R = \frac{p_-}{m} |B_-|^2$, — вероятность отражения. И из условия сохранения потока мы получаем: $1 = T + R$. Как и должно быть.

3. Продолжим обсуждение других частных примеров одномерного движения в простейших потенциалах.

(b) Рассмотрим теперь такой же потенциал, как на рис. 5, но с условием, что $E < V_0$. Тогда в области $x < 0$ и уравнение Шредингера, и его решение не меняется. То есть $\psi_-(x)$ имеет такой же вид, как в (70). В области же $x > 0$ уравнение Шредингера выглядит как:

$$\psi_+''(x) - \frac{2m}{\hbar^2} [V_0 - E] \psi_+(x) = 0, \quad \frac{2m}{\hbar^2} [V_0 - E] > 0.$$

Общее решение такого уравнения имеет вид:

$$\psi_+(x) = A_+ e^{-\kappa x} + B_+ e^{\kappa x}, \quad \kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}. \quad (72)$$

Но так как ψ_+ определяет плотность вероятности нахождения частицы в области $x > 0$, то она не может неограниченно расти по модулю при $x \rightarrow +\infty$. Поэтому необходимо потребовать, чтобы $B_+ = 0$.

В такой ситуации, как не трудно посчитать, $j_+ = 0$ при любых значениях A_+ . А поэтому из условия сохранения потока вероятности, мы получаем, что $|A_-| = |B_-|$. То есть все что падает на барьер очевидно от него же и отражается.

Здесь стоит сделать несколько замечаний. Во-первых, если коэффициент A_+ выбрать действительным, то из условия сшивки можно

показать, что вся волновая функция $\psi(x)$ окажется действительной¹⁶. Это является ситуацией общего положения: если движение кванта в одномерной задаче ограничено с одной из сторон, то волновую функцию всегда можно выбрать действительной.

Во-вторых, при $E < V_0$ условия сшивки никак не ограничивают спектр энергий. Действительно, в области $x < 0$ могут существовать волны любой длины. А длина волны связана с энергией кванта, как мы заметили выше. Поэтому спектр энергий непрерывный.

В-третьих, в данном случае вырождение спектра снимается. Действительно, волны, двигающиеся налево и направо, теперь, не являются независимыми, а связаны между собой. Ведь существует только решение с $|A_-| = |B_-|$, а не с независимыми значениями A_- и B_- . То есть каждому уровню энергии соответствует лишь одна волновая функция. Это тоже является ситуацией общего положения: если движение кванта ограничено хотя бы с одной стороны, то спектр энергий невырожденный. Мы покажем это в общем случае чуть ниже.

В-четвертых, не смотря на то, что поток вероятности под барьером равен нулю, $j_+ = 0$, волновая функция там отлична от нуля, $\psi_+ \neq 0$, хотя и экспоненциально быстро убывает. То есть плотность вероятности обнаружить квант под барьером не равна нулю. А это значит, что в отличии от классической частицы, квант может проникнуть в классически запрещенную область $E < V_0$. В начале XX века это являлось одним из ярких, новых и парадоксальных явлений квантовой теории.

(c) Рассмотрим теперь ситуацию, когда $E < V_0$ и, при этом, $V_0 \rightarrow +\infty$. Как не трудно видеть, в таком случае $\kappa \rightarrow +\infty$ и соответственно $\psi_+(x) \rightarrow 0$ при всех значениях $x > 0$. Физически это означает, что в случае очень глубокого барьера частица туда вообще не проникает. В такой ситуации условие сшивки переходит в $\psi_-(0) = \psi_+(0) \equiv 0$.

Как и в примере **(b)** в этой задаче спектр энергий непрерывен и невырожден.

(d) Продолжим наше обсуждение одномерной квантовой механики рассмотрением потенциала такого вида, как изображен на рис. 6, где $V_2 > V_1 > V_0$. В таком потенциале можно рассмотреть отдельно три случая.

– Если, $E > V_2$, то ситуация не сильно отличается от задачи из пункта **(a)**. Теперь, однако будет рассеяние не только в точке $x = b$ на барьере V_2 , но и в точке $x = a$ на барьере V_1 . Придется накладывать

¹⁶Заметим, что так как физический смысл имеет только величина $|\psi|^2$, то волновая функция определена с точностью до фазы. Важную роль играют относительные фазы волновых функций в суперпозиции, но не общая фаза.

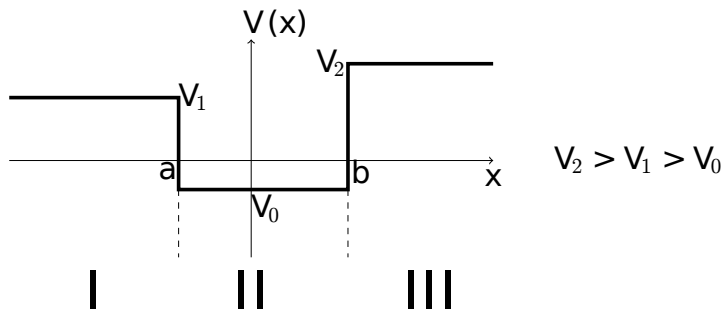


Рис. 6:

условия сшивки волновой функции как в $x = a$, так и в $x = b$. Но это не значительно усложнит задачу. Важно, что спектр будет непрерывным и дважды вырожденным, как в пункте **(а)**.

– Если же $V_1 < E < V_2$, то ситуация не сильно отличается от задачи из пункта **(б)**. Опять же единственное, но не очень значительное усложнение будет заключаться в том, что придется сшивать волновую функцию еще и в точке $x = a$. Спектр будет непрерывным и невырожденным, как в случае **(б)**.

– Совершенно новую ситуацию мы встречаем в случае $V_0 < E < V_1 < V_2$. Тогда, так как потенциал является кусочно постоянной функцией, стационарное уравнение можно разбить на три региона:

$$\begin{aligned} \psi''_I &= \frac{2m}{\hbar^2} [V_1 - E] \psi_I, & x < a, & \quad \frac{2m}{\hbar^2} [V_1 - E] > 0, \\ \psi''_{II} &= -\frac{2m}{\hbar^2} [E - V_0] \psi_{II}, & a < x < b, & \quad \frac{2m}{\hbar^2} [E - V_0] > 0, \\ \psi''_{III} &= \frac{2m}{\hbar^2} [V_2 - E] \psi_{III}, & b < x, & \quad \frac{2m}{\hbar^2} [V_2 - E] > 0. \end{aligned}$$

Решения этих уравнений имеют вид:

$$\psi_I = B_I e^{\kappa_I x}, \quad \kappa_I = \frac{\sqrt{2m(V_1 - E)}}{\hbar}$$

– экспоненциально убывает при $x \rightarrow -\infty$, что необходимо для сходимости нормировочного интеграла для волновой функции;

$$\psi_{II} = A_{II} e^{\frac{ipx}{\hbar}} + B_{II} e^{-\frac{ipx}{\hbar}}, \quad p = \sqrt{2m(E - V_0)};$$

и

$$\psi_{III} = A_{III} e^{-\kappa_{III} x}, \quad \kappa_{III} = \frac{\sqrt{2m(V_2 - E)}}{\hbar}$$

— экспоненциально убывает при $x \rightarrow +\infty$, что опять же необходимо для сходимости нормировочного интеграла для волновой функции.

Так как мы имеем дело с экспоненциальными функциями, то удобно поделить условия сшивки для ψ' , на условия сшивки для ψ . То есть накладывать условие сшивки на так называемые логарифмические производные. Тогда мы получим соотношения вида:

$$\frac{\psi'_I}{\psi_I} \Big|_{x=a} = \frac{\psi'_{II}}{\psi_{II}} \Big|_{x=a}, \quad \frac{\psi'_{II}}{\psi_{II}} \Big|_{x=b} = \frac{\psi'_{III}}{\psi_{III}} \Big|_{x=b}.$$

Это удобно, так как большая часть экспонент сократится и мы получим соотношения на коэффициенты A и B , а также и на показатели экспонент — фактически на E .

Схематично волновая функция будет выглядеть так, как изображено на рис. 7. То есть в яме мы получим нечто похожее на стоячие волны. Фактически решения в данных условиях будут существовать только, если в яме помещается целое число полуволн. А так как длина волны связана с энергией E , то решения уравнения Шредингера в рассматриваемой ситуации будут существовать только при дискретных значениях E . Таким образом мы получим дискретный спектр для состояний при финитном движении кванта в области $a < x < b$. Так и получается квантование энергии при финитном движении.

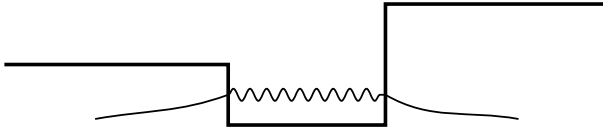


Рис. 7:

Спектр в данной задаче будет невырожденным, как и в ситуации с одним барьером. Опять же волновые функции в обсуждаемой задаче всегда можно выбрать действительными.

Наконец, можно рассмотреть случай бесконечной ямы, когда $E < V_{1,2} \rightarrow +\infty$. Это задача для домашней работы.

(е) Рассмотрим теперь движение кванта в потенциале такого вида, как изображен на рис. 8. Очевидно, если $E > V_0$ мы имеем ситуацию аналогичную пункту (а). Если $V_1 < E < V_2$, то задача аналогична

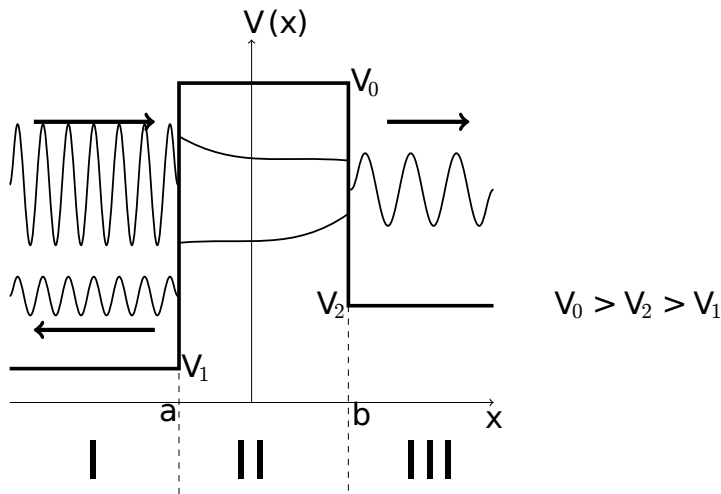


Рис. 8: На этом рисунке одновременно изображена форма потенциала и волновой функции в задаче про подбарьерное рассеяние. Причем у волновой функции показано изменение амплитуды после прохождения под барьером и отражения от него. Под барьером имеется линейная комбинация растущей и падающей экспонент с комплексными коэффициентами.

пункту **(b)**. Совершенно новая ситуация возникает, когда $V_2 < E < V_0$. Тогда мы можем рассмотреть задачу прохождения (тунnelирования) под барьером. Или задачу про подбарьерное рассеяние, как показано на рис. 8.

В постановке задачи про подбарьерное рассеяние в области *I* мы имеем падающую и отраженную волну, а в области *III* — только прошедшую. В области же *II*, под барьером, возникнет линейная комбинация из растущих экспонент в обоих направлениях. Они имеют комплексными коэффициенты A_{II} и B_{II} . В данной ситуации растущая экспонента в любом направлении ничему не противоречит, так как рост происходит только в ограниченной области $a < x < b$. Заметим, что в описываемой задаче поток будет сохраняться и не равен нулю также и под барьером.

Вероятность прохождения в принципе можно найти точно. При решении опять же удобно нормировать поток падающей волны на единицу. Однако, в пределе $\kappa_{II}(b-a) \gg 1$, где $\kappa_{II} = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$, выражение для коэффициента прохождения упростится до:

$$D = \frac{p_{III}}{m} |A_{III}|^2 \sim e^{-\kappa_{II}(b-a)}.$$

В таком пределе применимо квазиклассическое приближение, в котором вероятность прохождения можно найти особенно элегантно способом. О нем мы расскажем на одной из последующих лекций этого семестра.

4. Обсудив несколько примеров, перейдем к общим положениям. Пусть квант движется в потенциале общего вида, который схематично изображен на рис. 9. Единственное условие, что потенциал в асимптотиках на бесконечности выходит на константы¹⁷: $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} V(x) = V_{\pm}$.

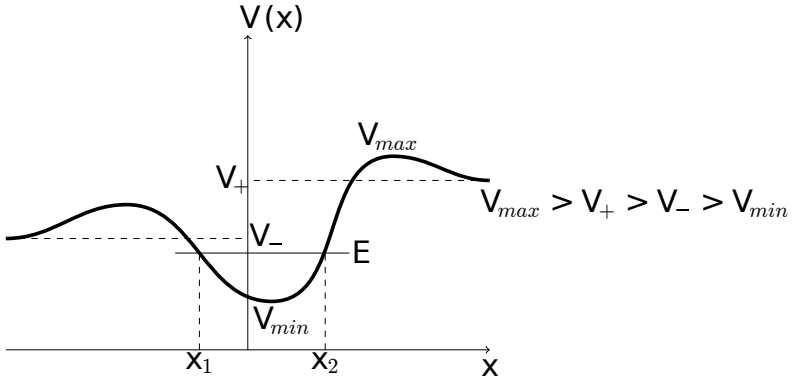


Рис. 9: Без потери общности мы предполагаем, что $V_+ > V_-$.

– Если $E > V_+$, то в зависимости от того больше E или V_{max} , мы имеем ситуацию аналогичную либо пункту (d), либо же (e). В любом случае в пределе $|x| \rightarrow \infty$ уравнение Шредингера упрощается до:

$$\psi_{\pm}'' + \frac{2m}{\hbar^2} \Delta E_{\pm} \psi_{\pm} \approx 0, \quad \Delta E_{\pm} = E - V_{\pm}.$$

Решение подобного уравнения имеет вид:

$$\psi_{\pm}(x) \approx A_{\pm} e^{\frac{ip_{\pm}x}{\hbar}} + B_{\pm} e^{-\frac{ip_{\pm}x}{\hbar}}, \quad p_{\pm} = \sqrt{2m\Delta E_{\pm}}.$$

Точный вид волновых функций для произвольного потенциала как правило найти невозможно. Однако в некоторых ситуациях для оценки

¹⁷Неограниченно растущий потенциал в любом из направлений на бесконечностях тоже подойдет для рассмотрения. Наши наблюдения при этом не сильно изменятся. А вот неограниченно убывающий потенциал, $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} V(x) \rightarrow -\infty$, в любом из направлений, представляет собой нефизическую ситуацию. Это видно уже и в классической задаче.

можно экстраполировать асимптотическое поведение волновых функций до промежуточных значений x и сшивать различные их приближенные формы. Для этого можно использовать найденные нами выше условия сшивки и асимптотические поведения волновой функции. Это даст, например, приближенное решение задачи и оценки вероятности отражение и прохождения через потенциальную яму.

Важно лишь заметить, что в обсуждаемой ситуации спектр энергий является непрерывным и дважды вырожденным, как мы описывали выше. Так как при $E > V_+$ имеется два линейно независимых решения.

– Если $V_- < E < V_+$, то с левой стороны, в пределе $x \rightarrow -\infty$, уравнение Шредингера будет иметь такой же вид как и выше. С правой же стороны в пределе $x \rightarrow +\infty$ оно приобретает следующую форму:

$$\psi_+'' - \frac{2m}{\hbar^2} |\Delta E_+| \psi_+ \approx 0.$$

Решение такого уравнения, которое не растет неограниченно, будет иметь асимптотику вида:

$$\psi_+(x) \approx A_+ e^{-\kappa_+ x}, \quad \kappa_+ = \frac{\sqrt{2m |\Delta E_+|}}{\hbar}.$$

В результате мы получим, что $\lim_{x \rightarrow +\infty} \psi(x) = 0$. Покажем, что из этого следует, что спектр невырожден.

Действительно, допустим, что имеется два решения стационарного уравнения Шредингера, ψ_1 и ψ_2 , с одной и той же энергией E , которые при этом не пропорциональны друг другу. Тогда:

$$\frac{\psi_1''}{\psi_1} = -\frac{2m}{\hbar} [E - V(x)] = \frac{\psi_2''}{\psi_2}.$$

Это соотношение можно переписать как $\psi_1'' \psi_2 - \psi_1 \psi_2'' = 0$. Проинтегрировав последнее равенство, получим, что

$$\psi_1'(x) \psi_2(x) - \psi_1(x) \psi_2'(x) = C.$$

Здесь константу интегрирования C можно найти, вычислив выражение $\psi_1'(x) \psi_2(x) - \psi_1(x) \psi_2'(x)$, например, при $x \rightarrow +\infty$. Но при таких значениях координаты $\psi_{1,2}(x \rightarrow +\infty) \rightarrow 0$, что влечет за собой равенство $C = 0$. Тогда получаем соотношение:

$$\frac{\psi_1'}{\psi_1} = \frac{\psi_2'}{\psi_2}.$$

Проинтегрировав его, находим, что $\psi_1(x) = \bar{C} \psi_2(x)$, то есть противоречие с исходным предположением. Поэтому в рассматриваемой ситуации спектр невырожден, что и требовалось доказать.

– Если $V_{min} < E < V_-$, то в пределе $|x| \rightarrow \infty$, уравнение Шредингера упрощается до:

$$\psi''_{\pm} - \frac{2m}{\hbar^2} |\Delta E_{\pm}| \psi_{\pm} \approx 0.$$

Нормируемое решение такого уравнения имеет асимптотики вида:

$$\psi_{\pm}(x) \approx A_{\pm} e^{\mp \kappa_{\pm} x}, \quad \kappa_{\pm} = \frac{\sqrt{2m|\Delta E_{\pm}|}}{\hbar},$$

и тоже стремиться к нулю при $|x| \rightarrow \infty$. То есть здесь также можно применить описанные выше аргументы и увидеть, что спектр будет невырожденным. Более того, он будет дискретным, так как в яме должно укладываться целое число полуволен. Это схематично изображено на рис. 10. Только длина волны теперь будет не постоянной, так как волновой вектор зависит от координаты $k(x) = \frac{\sqrt{2m|E-V(x)|}}{\hbar}$.

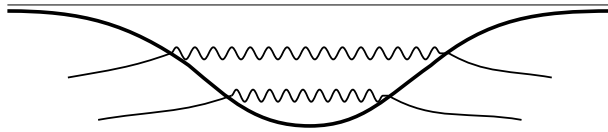


Рис. 10:

Заметим, что на второй лекции мы встречали ситуацию, когда спектр был дискретным, но дважды вырожденным. Так было при рассмотрении частицы на окружности. Но тогда не было условия, что в каком-то пределе волновая функция стремится к нулю по модулю. Именно поэтому вырождение не пропадало.

Далее, в обсуждаемой задаче можно доказать так называемую осцилляторную теорему, которая утверждает следующее. У волновой функции $\psi_n(x)$, которая отвечает $(n + 1)$ -му уровню энергии из дискретного спектра E_0, E_1, E_2, \dots , имеется n нулей в интервале $x \in [x_1, x_2]$: $\psi_n(x^{(i)}) = 0, i = \overline{1, n}$. Границы этого интервала $x_{1,2}$ — это точки поворота, которые определяются как $V(x_{1,2}) = E$ и показаны на рис. 9.

Для наглядности на рис. 11 мы схематично изобразили графики волновых функций первых нескольких уровней энергии.

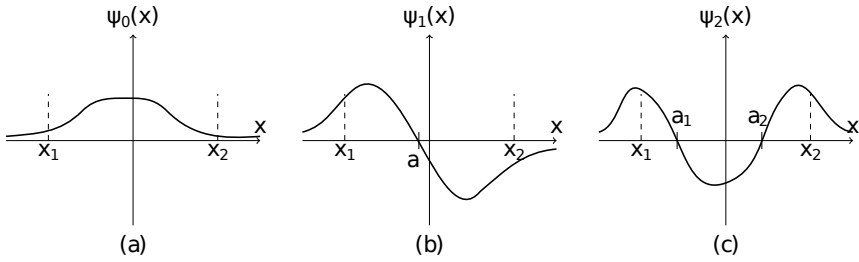


Рис. 11:

Пояснение к доказательству этой теоремы можно найти в параграфе 8 книги Л.Шиффа “Квантовая Механика” (см. также рис. 11).

5. Теперь мы перейдем к обсуждению одной очень важной квантово–механической задачи. Она важна потому, что является точно решаемой и в то же самое время нетривиальной. Главное, что в ней видны многие из общих свойств различных одномерных моделей квантовой механики.

Итак, мы приступаем к обсуждению квантового линейного осциллятора, который как и в классической механике отвечает движению в потенциале

$$V(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2},$$

где ω — это новый параметр, который задает частоту классических колебаний. Заметим, что такой потенциал неограниченно растет при $|x| \rightarrow \infty$.

Для упрощения формул введем безразмерные переменные

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x, \quad \epsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}.$$

В этих переменных стационарное уравнение Шредингера приобретает вид:

$$\psi''(\xi) + (\epsilon - \xi^2) \psi(\xi) = 0, \quad \psi''(\xi) = \frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2}. \quad (73)$$

В пределе $|\xi| \rightarrow \infty$ рассматриваемое уравнение упрощается до $\psi''(\xi) - \xi^2 \psi(\xi) \approx 0$. Не трудно показать, что его приближенно решает функция вида $\psi(\xi) \propto e^{-\xi^2/2}$. Это можно увидеть, если при вычислениях оставить только лидирующие (наибольшие) вклады в пределе $|\xi| \rightarrow \infty$.

Данное наблюдение позволяет угадать, что точное решение (73) следует искать в виде

$$\psi(\xi) = \phi(\xi) e^{-\xi^2/2}, \quad (74)$$

где $\phi(\xi)$ некоторая функция. Если подставить ψ такого вида в (73), то на ϕ мы получим уравнение:

$$\phi''(\xi) - 2\xi\phi'(\xi) + (\epsilon - 1)\phi(\xi) = 0. \quad (75)$$

Его решение будем искать в виде ряда:

$$\phi(\xi) = \sum_{m=0}^{\infty} a_m \xi^m. \quad (76)$$

Подставляя (76) в (75), получаем:

$$\sum_{m=0}^{\infty} \left[(m+2)(m+1)a_{m+2} - 2(m+1)a_m + (\epsilon - 1)a_m \right] \xi^m = 0. \quad (77)$$

Приравнивая к нулю коэффициент при каждой степени ξ^m , мы увидим рекурсионное соотношение на коэффициенты ряда (76):

$$a_{m+2} = \frac{2m+1-\epsilon}{(m+1)(m+2)} a_m. \quad (78)$$

Из (78) сразу получаем следующий факт. Если ϵ произвольное число, то в (76) в пределе $|\xi| \rightarrow \infty$ доминируют высокие степени m . Но в пределе $m \gg 1$ и $m \gg \epsilon$ из рекурсионного соотношения следует, что $a_{m+2} \approx \frac{2a_m}{m}$. Поэтому ряд (76) приближенно ведет себя как $\phi(\xi) \sim e^{\xi^2}$, то есть $\psi(\xi) \sim e^{\xi^2/2}$. Мы таким образом получаем недопустимую ситуацию, в которой волновая функция неограниченно растет при $|\xi| \rightarrow \infty$. В частности, в такой ситуации нормировочный интеграл $\int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi(x)|^2$ будет расходиться для волновых функций из дискретного спектра. Такое не допустимо. Поэтому ряд (76) должен обрываться.

Он обрывается, если $\epsilon = \epsilon_n \equiv 2n + 1$ для какого-то $n = 0, 1, 2, \dots$. Действительно, тогда $a_{n+2} = 0$. В таком случае $\phi(\xi)$ является полиномом¹⁸. В рассматриваемой ситуации волновая функция

¹⁸На следующей лекции мы покажем, что $\phi_n(\xi)$ — это полиномы Эрмита.

ограничена, а потому нормируема. Более того спектр дискретный, так как из $\epsilon_n \equiv 2n + 1$ следует, что $E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$, $n = 0, 1, 2, \dots$

Задачи.

I. Покажите, что в ситуации изображенной на рис. 8. под барьером поток вероятности не равен нулю.

II. Рассмотрите барьер, изображенный на рис. 8. Покажите, что в пределе $\kappa_{II} (b - a) \gg 1$, где $\kappa_{II} = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$, выражение для коэффициента прохождения упростится до:

$$D = \frac{p_{III}}{m} |A_{III}|^2 \sim e^{-\kappa_{II}(b-a)}.$$

III. Докажите осцилляторную теорему.

IV. Покажите, что при подстановке (74) в (73) на функцию $\phi(\xi)$ получается уравнение вида (75).

V. Получите соотношение (77) из уравнения (75).

VI. Лекция. Уровни энергии и волновые функции квантового линейного осциллятора, лестничные операторы, полиномы Эрмита и их свойства, когерентные состояния, методы перевала и стационарной фазы.

1. Прошлую лекцию мы закончили рассмотрением линейного квантового осциллятора. Мы показали, что если ввести безразмерные переменные

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x, \quad \epsilon = \frac{2E}{\hbar\omega},$$

и искать решение стационарного уравнения Шредингера в виде

$$\psi(\xi) = \phi(\xi) e^{-\xi^2/2},$$

то $\phi(\xi)$ должно подчиняться соотношению:

$$\phi''(\xi) - 2\xi\phi'(\xi) + (\epsilon - 1)\phi(\xi) = 0. \quad (79)$$

Более того было показано, что нормируемые решения уравнения Шредингера возникают только, если $\epsilon_n \equiv 2n + 1$, $n = 0, 1, 2, \dots$. Для таких значений энергии функции $\phi_n(\xi)$ являются полиномами.

Фактически мы таким образом уже знаем спектр осциллятора, $E_n = \hbar\omega (n + \frac{1}{2})$, $n = 0, 1, 2, \dots$, а на данной лекции мы найдем его волновые функции. Для этого введем оператор импульса $\hat{P} = -i\frac{d}{d\xi}$ сопряженный $\hat{Q} = \xi$ в x -представлении. Не трудно проверить, что

$$[\hat{P}, \hat{Q}] = \frac{1}{\hbar} [\hat{p}, \hat{q}] = -i.$$

Далее, в новых обозначениях стационарное уравнение Шредингера для осциллятора приобретает вид:

$$\frac{1}{2} \left(-\frac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2 \right) \psi_n(\xi) = \left(n + \frac{1}{2} \right) \psi_n(\xi), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (80)$$

Введем так называемые лестничные операторы:

$$\begin{aligned} \hat{a} &\equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{Q} + i\hat{P}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right), \\ \hat{a}^+ &\equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{Q} - i\hat{P}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right). \end{aligned} \quad (81)$$

Заметим, что так как \hat{Q} и \hat{P} являются эрмитовыми, то при сопряжении \hat{a} переходит в \hat{a}^+ , а \hat{a}^+ — в \hat{a} . То есть лестничные операторы не являются эрмитово самосопряженными.

Не трудно проверить, что

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1. \quad (82)$$

В математике это соотношение называется алгеброй Гейзенберга.

С использованием лестничных операторов, гамильтониан осциллятора можно представить как:

$$\hat{H} \equiv \frac{1}{2} \left(-\frac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2 \right) = \hat{a}^+ \hat{a} + \frac{1}{2} = \hat{a} \hat{a}^+ - \frac{1}{2}. \quad (83)$$

Таким образом, с использованием \hat{a} и \hat{a}^+ уравнение Шредингера (80) приобретает вид:

$$\left(n + \frac{1}{2} \right) |n\rangle = \left(\hat{a}^+ \hat{a} + \frac{1}{2} \right) |n\rangle, \quad \psi_n(\xi) = \langle \xi | n \rangle. \quad (84)$$

Не трудно видеть, что основное состояние осциллятора, отвечающее наименьшей энергии, $\hat{a}^+ \hat{a} |0\rangle = 0$, подчиняется соотношению:

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

Построим все остальные состояния $|n\rangle$ с использованием $|0\rangle$ и лестничных операторов. Для этого применим к обеим сторонам уравнения (84) оператор \hat{a}^+ и продолжим получающуюся цепочку равенств:

$$\begin{aligned} \left(n + \frac{1}{2} \right) \hat{a}^+ |n\rangle &= \hat{a}^+ \hat{H} |n\rangle = \hat{a}^+ \left(\hat{a} \hat{a}^+ - \frac{1}{2} \right) |n\rangle = \\ &= \left(\hat{a}^+ \hat{a} - \frac{1}{2} \right) \hat{a}^+ |n\rangle = \left(\hat{H} - 1 \right) \hat{a}^+ |n\rangle. \end{aligned}$$

Здесь мы использовали оба представления гамильтониана (83) через \hat{a} и \hat{a}^+ .

Сравнивая начало и конец последней цепочки равенств, мы получаем, что

$$\hat{H} \hat{a}^+ |n\rangle = \left[(n+1) + \frac{1}{2} \right] \hat{a}^+ |n\rangle.$$

Таким образом, ввиду невырожденности спектра, вектор $\hat{a}^+ |n\rangle$ должен быть пропорционален $(n+1)$ -му собственному состоянию гамильтониана:

$$\hat{a}^+ |n\rangle = q |n+1\rangle.$$

Остается найти константу пропорциональности q . Считая векторы $|n\rangle$ нормированными, получаем, что:

$$\langle n | \hat{a} \hat{a}^+ |n\rangle = \langle n+1 | q^* q |n+1\rangle = |q|^2 \langle n+1 | n+1\rangle = |q|^2.$$

С другой стороны мы знаем, что

$$n |n\rangle = \hat{a}^+ \hat{a} |n\rangle = (\hat{a} \hat{a}^+ - [\hat{a}, \hat{a}^+]) |n\rangle = (\hat{a} \hat{a}^+ - 1) |n\rangle.$$

То есть, сравнивая начало и конец этой цепочки равенств, получаем:

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

и

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

Поэтому $|q| = \sqrt{n+1}$, а так как волновая функция определена с точностью до полной фазы, то в результате следует соотношение:

$$\hat{a}^+ |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle. \quad (85)$$

Таким образом, \hat{a}^+ переводит состояние $|n\rangle$ в $|n+1\rangle$ и называется, соответственно, повышающим оператором; или оператором рождения. Аналогично можно показать, что

$$\hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle. \quad (86)$$

Поэтому \hat{a} называется понижающим оператором; или оператором уничтожения.

Теперь, применяя соотношение (85) n раз, стартуя с $|n=0\rangle$, мы находим все состояния осциллятора:

$$|n\rangle = \frac{(\hat{a}^+)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle, \quad \hat{a} |0\rangle = 0. \quad (87)$$

В принципе этих знаний достаточно для вычислений различных квантово-механических наблюдаемых и амплитуд вероятностей. Однако полезно явно найти, соответствующие, волновые функции и изучить их свойства.

2. Начнем с того, что найдем функцию $\psi_0(\xi) = \langle \xi | 0 \rangle$. Для этого рассмотрим соотношения:

$$0 = \langle \xi | \hat{a} | 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{d}{d\xi} + \xi \right) \langle \xi | 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{d}{d\xi} + \xi \right) \psi_0(\xi),$$

где мы использовали х-представление оператора \hat{a} . Решение полученного дифференциального уравнения на $\psi_0(\xi)$ имеет вид $\psi_0(\xi) = A e^{-\xi^2/2}$. Константу A можно найти из условия нормировки

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\xi |\psi_0(\xi)|^2 = 1.$$

Для этого надо уметь вычислять гауссов интеграл:

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-a x^2}, \quad a > 0.$$

Возведем его в квадрат:

$$I^2 = \int \int_{-\infty}^{+\infty} dx dy e^{-a(x^2+y^2)}.$$

В этом двойном интеграле сделаем замену к полярным координатам: $x = r \cos \varphi$, $y = r \sin \varphi$. Тогда:

$$I^2 = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{+\infty} dr r e^{-a r^2} = \pi \int_0^{+\infty} dt e^{-a t} = \frac{\pi}{a},$$

где мы сделали замену переменной интегрирования $t = r^2$. Таким образом, $I = \sqrt{\pi/a}$.

В результате, используя проделанные вычисления и собирая все вместе, мы получаем, что волновая функция основного состояния имеет вид:

$$\psi_0(x) = \frac{e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}}{\pi^{\frac{1}{4}}},$$

если восстановить исходную переменную x вместо ξ .

Далее, для возбужденных уровней мы получаем, что

$$\begin{aligned}\psi_n(\xi) &= \langle \xi | n \rangle = \left\langle \xi \left| \frac{(\hat{a}^+)^n}{\sqrt{n!}} \right| 0 \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right)^n \langle \xi | 0 \rangle = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right)^n \psi_0(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!} \sqrt{\pi}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right)^n e^{-\frac{\xi^2}{2}}.\end{aligned}\quad (88)$$

Если явно применить получающийся здесь дифференциальный оператор к экспоненте, то окажется, что

$$\psi_n(\xi) = \frac{\phi_n(\xi)}{\sqrt{2^n n!} \sqrt{\pi}} e^{-\frac{\xi^2}{2}},\quad (89)$$

где $\phi_n(\xi)$ некоторые полиномы. Прямым вычислением производной для нескольких простейших случаев $n = 0, 1, 2$ и 3 , можно найти:

$$\phi_0(\xi) = 1, \quad \phi_1(\xi) = 2\xi, \quad \phi_2(\xi) = 4\xi^2 - 2, \quad \phi_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi.\quad (90)$$

Ниже мы покажем, что это полиномы Эрмита и опишем их свойства.

Здесь сразу стоит заметить, что графики волновых функций первых нескольких уровней энергии схематично были изображены на рис. 11 из прошлой лекции. При этом квант даже в основном состоянии совершает колебания с энергией $E_0 = \hbar\omega/2$. Это так называемые нулевые колебания, наличие которых разительно отличает квантовую механику от классической.

3. Перейдем теперь к обсуждению свойств полиномов Эрмита. Если $\epsilon_n \equiv 2n + 1$, то уравнение (75) принимает вид:

$$\phi_n''(\xi) - 2\xi\phi_n'(\xi) + 2n\phi_n(\xi) = 0,\quad (91)$$

и носит имя Эрмита. Чтобы найти его решения мы используем стандартный математический метод. А именно, рассмотрим функцию вида:

$$W(\xi, \alpha) \equiv e^{2\alpha\xi - \alpha^2} = e^{\xi^2 - (\xi - \alpha)^2} = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{H_n(\xi)}{n!} \alpha^n, \quad |\alpha| < \infty.\quad (92)$$

Где мы разложили ее в ряд Тейлора по степеням α и ввели новые функции:

$$\begin{aligned}
H_n(\xi) &= \left. \frac{\partial^n W(\xi, \alpha)}{\partial \alpha^n} \right|_{\alpha=0} = \\
&= e^{\xi^2} \left[\frac{\partial^n e^{-(\xi-\alpha)^2}}{\partial \alpha^n} \right]_{\alpha=0} = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n}.
\end{aligned} \tag{93}$$

Прямое вычисление производных по ξ в этом выражении показывает, что по крайней мере для $n = 0, 1, 2$ и 3 имеем $H_n(\xi) = \phi_n(\xi)$ из (90). Функция $W(\xi, \alpha)$ называется производящей для полиномов Эрмита $H_n(\xi)$. Сейчас мы покажем, что они решают уравнение (91) для всех n .

Из вида функции $W(\xi, \alpha)$, который указан в (92), следует, что она удовлетворяет уравнениям:

$$\frac{\partial W}{\partial \alpha} - 2(\xi - \alpha)W = 0, \tag{94}$$

и

$$\frac{\partial W}{\partial \xi} - 2\alpha W = 0. \tag{95}$$

Подставляя в эти соотношения разложение $W(\xi, \alpha)$ в ряд по $H_n(\xi)$ и приравнивая нулю коэффициенты при каждой степени α^n , мы получаем рекурсионные соотношения на полиномы Эрмита:

$$H_{n+1}(\xi) - 2\xi H_n(\xi) + 2n H_{n-1}(\xi) = 0, \tag{96}$$

и

$$H'_n(\xi) = 2n H_{n-1}(\xi). \tag{97}$$

Исключением из них H_{n-1} можно получить:

$$H_{n+1} - 2\xi H_n + H'_n = 0.$$

Дифференцируя это уравнение по ξ и снова используя (97) для случая $n + 1$, мы получаем уравнение Эрмита (91) на $H_n(\xi)$. То есть $H_n(\xi) \propto \phi_n(\xi)$, а равенство мы явно установили пока только для $n = 0, 1, 2$ и 3 .

4. Покажем, что волновые функции, которые решают (80)

$$\psi_n(\xi) = A_n H_n(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}}, \quad H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n}. \quad (98)$$

задают полный и ортонормированный базис на прямой $\xi \in (-\infty, +\infty)$. Заодно мы явно найдем A_n и покажем, что $H_n = \phi_n$.

Фактически в том, что такие функции ортогональны мы убежились на предыдущих лекциях двумя независимыми способами. И делали это для общего вида гамильтонианов с дискретным спектром. Один способ основывался на соотношениях следующего вида:

$$0 = \langle n | \hat{\mathbf{1}} | m \rangle = \left\langle n \left| \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi |\xi\rangle \langle \xi| \right| m \right\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \psi_n(\xi) \psi_m(\xi),$$

где $m \neq n$ и мы использовали, что $\psi_n^* = \psi_n$. Другой способ следует из общего доказательства, что две волновые функции, отвечающие разным собственным значениям эрмитового оператора, ортогональны друг другу. Поэтому более подробно на ортогональности мы останавливаться не будем.

Найдем, теперь, нормировочный коэффициент A_n в (98). Для этого умножим рекурсионное соотношение (96) для H_{n-1} на H_n и вычтем из него соотношение (96) для H_n , помноженное на H_{n-1} . В результате мы получим равенство:

$$H_n^2 + 2(n-1)H_n H_{n-2} - H_{n+1}H_{n-1} - 2nH_{n-1}^2 = 0.$$

Далее, умножим это соотношение на $e^{-\xi^2}$ и проинтегрируем по $d\xi$ в интервале $\xi \in (-\infty, +\infty)$. Используя то, что ψ_n , ψ_{n-2} , ψ_{n+1} и ψ_{n-1} ортогональны, получаем:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\xi H_n^2(\xi) e^{-\xi^2} \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \frac{\psi_n^2(\xi)}{A_n^2} = 2n \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \frac{\psi_{n-1}^2(\xi)}{A_{n-1}^2}.$$

Теперь можно проитерировать последнее равенство n раз и получить:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \frac{\psi_n^2(\xi)}{A_n^2} = 2^n n! \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi e^{-\xi^2} = 2^n n! \sqrt{\pi},$$

где мы воспользовались тем, что $H_0 = 1$ и взяли гауссов интеграл. Таким образом, так как

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \psi_n^2(\xi) = 1,$$

то $A_n = 1/\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}$, что совпадает с нормировочным коэффициентом в (88). Теперь волновые функции для состояний квантового линейного осциллятора известны нам полностью.

Чтобы доказать полноту базиса из волновых функций ψ_n нам необходимо знать асимптотическое поведение полиномов Эрмита при большом значении индекса:

$$H_n(\xi) \approx \sqrt{2} \left(\frac{2n}{e}\right)^{\frac{n}{2}} e^{\frac{\xi^2}{2}} \cos\left(\sqrt{2n+1}\xi - \frac{\pi n}{2}\right), \quad n \rightarrow \infty. \quad (99)$$

Эта формула выводится в приложении в конце этой лекции.

Чтобы получить условие полноты, умножим рекурсионное соотношение (96) на $H_n(\xi')$ и вычтем из полученного равенства такое же, где произведена замена $\xi \longleftrightarrow \xi'$:

$$[H_{n+1}(\xi) H_n(\xi') - H_{n+1}(\xi') H_n(\xi)] - 2n [H_n(\xi) H_{n-1}(\xi') - H_n(\xi') H_{n-1}(\xi)] = 2(\xi - \xi') H_n(\xi) H_n(\xi'). \quad (100)$$

Деля это соотношение на $2^n n! \sqrt{\pi}$ и просуммировав его по n от 1 до N , получаем:

$$\sum_{n=0}^N \frac{H_n(\xi) H_n(\xi')}{2^n n! \sqrt{\pi}} = \frac{H_{N+1}(\xi) H_N(\xi') - H_{N+1}(\xi') H_N(\xi)}{(\xi - \xi') 2^{N+1} N! \sqrt{\pi}}, \quad (101)$$

где мы воспользовались тем, что $H_0 = 1$ и $H_1 = 2\xi$.

Теперь возьмем предел $N \rightarrow \infty$ в (101) и на правой стороне используем асимптотическую поведение H_N из (99). Тогда в (101) мы получим выражение вида:

$$H_{N+1}(\xi) H_N(\xi') - H_{N+1}(\xi') H_N(\xi) \approx 2e^{\frac{\xi^2}{2} + \frac{(\xi')^2}{2}} \left(\frac{2N}{e}\right)^N \sin\left[\sqrt{2N}(\xi - \xi')\right]. \quad (102)$$

В результате следует соотношение полноты волновых функций осциллятора:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}}{\sqrt{2^n n!} \sqrt{\pi}} \frac{H_n(\xi') e^{-(\xi')^2/2}}{\sqrt{2^n n!} \sqrt{\pi}} \equiv \sum_{n=0}^{+\infty} \psi_n(\xi) \psi_n(\xi') = \delta(\xi - \xi'). \quad (103)$$

Для этого надо воспользоваться тем, что

$$\delta(\xi - \xi') = \lim_{\sqrt{2N} \rightarrow \infty} \int_{-\sqrt{2N}}^{+\sqrt{2N}} \frac{dk}{2\pi} e^{ik(\xi - \xi')} = \lim_{\sqrt{2N} \rightarrow \infty} \frac{\sin \left[\sqrt{2N}(\xi - \xi') \right]}{\pi (\xi - \xi')},$$

формулой Стирлинга для $N!$ и перенесли множитель $e^{\frac{\xi^2}{2} + \frac{(\xi')^2}{2}}$ из (102) на левую сторону (101).

5. Обсудим теперь одно важное свойство волновых функций квантового линейного осциллятора. Обратим внимание, что гамильтониан в этой задаче,

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \left(\hat{P}^2 + \hat{Q}^2 \right),$$

остаётся неизменным при перестановке $\hat{P} \longleftrightarrow \hat{Q}$. Причём выше мы рассмотрели задачу в x -представлении. В нём алгебра Гейзенберга задается в виде $\hat{Q} = \xi$, $\hat{P} = -id/d\xi$, а гамильтониан как указано в (83). С таким же успехом мы можем использовать p -представление, в котором, как мы знаем:

$$\hat{P} = p, \quad \hat{Q} = i \frac{d}{dp}.$$

Поэтому

$$\hat{a} = \frac{i}{\sqrt{2}} \left(\frac{d}{dp} + p \right), \quad \hat{a}^+ = \frac{i}{\sqrt{2}} \left(\frac{d}{dp} - p \right).$$

В свою очередь стационарное уравнение Шредингера приобретает вид:

$$\frac{1}{2} \left(-\frac{d^2}{dp^2} + p^2 \right) \bar{\psi}_n(p) = \left(n + \frac{1}{2} \right) \bar{\psi}_n(p).$$

Откуда сразу видно, что $\psi_n(\xi)$ и $\bar{\psi}_n(p)$ могут отличаться только на фазу¹⁹. При этом, как мы знаем из прошлых лекций, волновые функции в x - и p -представлениях связаны друг с другом преобразованием Фурье:

¹⁹Если мы выбрали фазу $\psi_n(\xi)$ равной нулю, то это не значит, что и $\bar{\psi}_n(p)$ тоже будет действительной.

$$\bar{\psi}_n(p) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \frac{e^{ip\xi}}{\sqrt{2\pi}} \psi_n(\xi).$$

Прямым вычислением можно показать, что $\bar{\psi}_n(p) = i^n \psi_n(\xi \rightarrow p)$. Это фактически означает, что волновые функции линейного осциллятора являются самосопряженными (с точностью до фазы) относительно преобразования Фурье.

6. Основную часть этой лекции мы закончим обсуждением так называемых когерентных состояний. А именно, рассмотрим собственные состояния неэрмитового оператора понижения \hat{a} :

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle, \quad \langle\alpha|\hat{a}^+ = \alpha\langle\alpha|. \quad (104)$$

Здесь α некоторое комплексное число. Возможно возникает естественный вопрос, почему мы также не рассматриваем собственные кет состояния оператора повышения \hat{a}^+ ? Подумайте самостоятельно почему у такого оператора нет нормируемых собственных кет состояний.

Чтобы найти волновую функцию, отвечающую когерентному состоянию $|\alpha\rangle$, запишем дифференциальное уравнение для него, действуя традиционным образом:

$$\begin{aligned} \alpha\psi_\alpha(\xi) &\equiv \alpha\langle\xi|\alpha\rangle = \langle\xi|\hat{a}|\alpha\rangle = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right) \langle\xi|\alpha\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right) \psi_\alpha(\xi), \end{aligned}$$

где мы воспользовались x -представлением оператора \hat{a} .

Решение полученного дифференциального уравнения на $\psi_\alpha(\xi)$ с правильной нормировкой имеет следующий вид:

$$\psi_\alpha(\xi) = \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}} e^{-\frac{1}{2}(\xi - \sqrt{2}\alpha)^2},$$

то есть отличается от $\psi_0(\xi)$ лишь на сдвиг $\xi \rightarrow \xi - \sqrt{2}\alpha$.

Когерентное состояние интересно, помимо всего прочего, тем, что минимизирует соотношение неопределенностей Гейзенберга. Покажем это. Из соотношений (85) и (86) мы фактически знаем, что матрицы лестничных операторов в базисе $|n\rangle$ имеют вид:

$$\langle m|\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\delta_{m,n-1}, \quad \langle m|\hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\delta_{m,n+1}.$$

Поэтому, если из (81) выразить \hat{Q} через лестничные операторы, то мы получим:

$$\langle m | \hat{Q} | n \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\sqrt{n} \delta_{m,n-1} + \sqrt{m+1} \delta_{m,n+1}).$$

Тогда

$$\langle m | \hat{q} | n \rangle = x_0 \langle m | \hat{Q} | n \rangle, \quad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}.$$

Из этого сразу следует, что $\langle n | \hat{q} | n \rangle = 0$, а

$$\langle n | \hat{q}^2 | n \rangle = \sum_{m=0}^{\infty} \langle n | \hat{q} | m \rangle \langle m | \hat{q} | n \rangle = x_0^2 \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

Здесь мы использовали условие полноты (103) в виде:

$$\sum_{m=0}^{\infty} |m\rangle \langle m| = \hat{1}.$$

Аналогично можно найти, что $\langle n | \hat{p} | n \rangle = 0$, а $\langle n | \hat{p}^2 | n \rangle = p_0^2 \left(n + \frac{1}{2} \right)$, где $p_0 = \sqrt{\hbar m \omega}$.

В результате дисперсии операторов координаты и импульса по осцилляторным состояниям равны:

$$\langle \Delta \hat{q}^2 \rangle_n \equiv \langle (\hat{q} - \langle \hat{q} \rangle_n)^2 \rangle_n = \langle \hat{q}^2 \rangle_n = x_0^2 \left(n + \frac{1}{2} \right),$$

$$\langle \Delta \hat{p}^2 \rangle_n = \langle \hat{p}^2 \rangle_n = p_0^2 \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

Поэтому при усреднении по n -му уровню осциллятора мы имеем следующее соотношение неопределенностей:

$$\langle \Delta \hat{q}^2 \rangle_n \langle \Delta \hat{p}^2 \rangle_n = \hbar^2 \left(n + \frac{1}{2} \right)^2 \geq \frac{\hbar^2}{4}.$$

Видно что на основном состоянии $n = 0$ достигается минимум на правой стороне этого выражения, а заодно и равенство в соотношении неопределенностей Гейзенберга $\Delta q \Delta p \geq \hbar/2$. То же самое верно и для

ψ_α при любом α , так как сдвиг $x \rightarrow x - \sqrt{2}\alpha x_0$ не влияет на значения средних.

Представим теперь когерентное состояние в виде разложения по собственным состояниям осциллятора. А именно, найдем коэффициенты в разложении:

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} C_{\alpha,n} |n\rangle. \quad (105)$$

Имеем следующую цепочку равенств:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \alpha C_{\alpha,n} |n\rangle = \alpha |\alpha\rangle = \hat{a} |\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} C_{\alpha,n} \hat{a} |n\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} C_{\alpha,n} \sqrt{n} |n-1\rangle.$$

Сравнивая начало и конец этой цепочки равенств, выводим рекурсионное соотношение:

$$C_{\alpha,n} = \frac{\alpha}{\sqrt{n}} C_{\alpha,n-1}.$$

Применяя его n раз для понижения индекса на правой стороне, получаем:

$$C_{\alpha,n} = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} C_{\alpha,0}.$$

Здесь $C_{\alpha,0}$ можно найти из условия нормировки:

$$1 = \langle \alpha | \alpha \rangle = |C_{\alpha,0}|^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} = |C_{\alpha,0}|^2 e^{|\alpha|^2}.$$

Откуда сразу следует, что

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle. \quad (106)$$

Согласно принципам квантовой механики n -й коэффициент в этой сумме определяет вероятность обнаружить квант в состоянии $|n\rangle$, если он исходно находился в когерентном состоянии $|\alpha\rangle$. Эта вероятность задается так называемым распределением Пуассона:

$$W_n \equiv |\langle \alpha | n \rangle|^2 = |C_{\alpha,n}|^2 = \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} e^{-|\alpha|^2}.$$

Можно показать, что для распределения Пуассона $\langle n \rangle = |\alpha|^2$.

Когерентные состояния не ортогональны друг другу. Действительно,

$$\begin{aligned} \langle \alpha | \alpha' \rangle &= e^{-\frac{|\alpha|^2}{2} - \frac{|\alpha'|^2}{2}} \sum_{n', n} \frac{(\alpha^*)^{n'} (\alpha')^n}{\sqrt{n'! n!}} \langle n' | n \rangle = \\ &= e^{-\frac{|\alpha|^2}{2} - \frac{|\alpha'|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha^* \alpha')^n}{n!} = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2} - \frac{|\alpha'|^2}{2} + \alpha^* \alpha'} \neq 0. \end{aligned}$$

Но при этом они составляют полный базис со следующим условием полноты:

$$\int \frac{d^2 \alpha}{\pi} |\alpha\rangle \langle \alpha| = \hat{1}, \quad (107)$$

где $d^2 \alpha \equiv d \operatorname{Re} \alpha d \operatorname{Im} \alpha$. Действительно:

$$\delta_{mn} = \langle m | n \rangle = \int \frac{d^2 \alpha}{\pi} \langle m | \alpha \rangle \langle \alpha | n \rangle = \int \frac{d^2 \alpha}{\pi} \frac{\alpha^m (\alpha^*)^n}{\sqrt{m!} \sqrt{n!}} e^{-|\alpha|^2},$$

где мы воспользовались тем, что $\langle \alpha | n \rangle = C_{\alpha, n}$ и уравнениями (106) и (105). Сделаем в интеграле справа следующую замену переменных: $\alpha = \sqrt{r} e^{i\varphi}$. Тогда $d^2 \alpha = \frac{1}{2} dr d\varphi$. В результате

$$\begin{aligned} \delta_{mn} &= \frac{1}{2\pi \sqrt{m!} \sqrt{n!}} \int_0^{+\infty} dr r^{\frac{m+n}{2}} e^{-r} \int_0^{2\pi} d\varphi e^{i(m-n)\varphi} = \\ &= \frac{\delta_{mn}}{n!} \int_0^{+\infty} dr r^n e^{-r} = \delta_{mn}, \end{aligned}$$

где использовалось то, что $\int_0^{2\pi} d\varphi e^{i(m-n)\varphi} = 2\pi \delta_{mn}$. Таким образом, мы получили тождество и утверждаемое соотношение полноты (107) базиса когерентных состояний действительно верно.

7. Приложение о методе перевала и стационарной фазы. Для того чтобы найти асимптотическое поведение (99) нам необходимо разобрать приближенный метод вычисления интегралов. Строго этот метод доказывается в книгах по комплексному анализу. Например, в книге Лаврентьева и Шабата. Здесь мы разберем его доказательство лишь схематично.

Допустим нам надо найти приближенное значение интеграла вида:

$$I = \int_a^b d\alpha f(\alpha) e^{\lambda S(\alpha)},$$

при $\lambda \rightarrow +\infty$, где $S(\alpha)$ и $f(\alpha)$ некоторые функции. Конкретно нам надо оценить самый большой вклад в этот интеграл в данном пределе.

Пусть функция $S(\alpha)$ на интервале $\alpha \in [a, b]$ имеет N максимумов: $S'(\alpha_j) = 0$ и $S''(\alpha_j) < 0$, где $j = \overline{1, N}$. Тогда при очень больших значениях λ график функции $e^{\lambda S(\alpha)}$ будет иметь вид схематично изображенный на рис. 12. Там же для наглядности схематично изображен и график регулярной функции $f(\alpha)$.

Из рис. 12 понятно, что основной вклад в обсуждаемый интеграл в пределе $\lambda \rightarrow +\infty$ будет приходить из окрестности каждого из максимумов²⁰ α_j . Поэтому функции $S(\alpha)$ и $f(\alpha)$ можно разложить в их ряды Тейлора в окрестностях α_j . Тогда приближенно имеем:

$$I \approx \sum_{j=1}^N \int_a^b d\alpha \left[f(\alpha_j) + f'(\alpha_j) (\alpha - \alpha_j) + \dots \right] \times \\ \times \exp \left\{ \lambda \left[S(\alpha_j) + \frac{S''(\alpha_j)}{2} (\alpha - \alpha_j)^2 + \dots \right] \right\}.$$

Прямым вычислением можно показать, что вклады, которые возникают из членов обозначенных многоточиями в этом выражении, подавлены в пределе $\lambda \rightarrow +\infty$. Дело в том, что основной вклад в интеграл в интеграл дают такие значения α , которые сосредоточены в окрестности ширины $|\alpha - \alpha_j| \sim \frac{1}{\sqrt{-\lambda S''(\alpha_j)}} \rightarrow 0$ вокруг каждого из максимумов α_j , $j = \overline{1, N}$.

Это связано с наличием множителя $e^{\lambda S''(\alpha_j)(\alpha - \alpha_j)^2}$ под интегралом. Он быстро убывает по мере удаления от $\alpha = \alpha_j$. Поэтому более высокие степени $|\alpha - \alpha_j|$ отвечают подавленные члены в разложении в ряд по $1/\lambda$. Тоже самое верно и для $f'(\alpha_j) (\alpha - \alpha_j)$ по сравнению с $f(\alpha_j)$.

В результате мы получаем

²⁰Если бы мы искали приближенный ответ для рассматриваемого интеграла в пределе $\lambda \rightarrow -\infty$, то метод работал бы также, но необходимо было бы искать минимумы функции $S(\alpha)$.

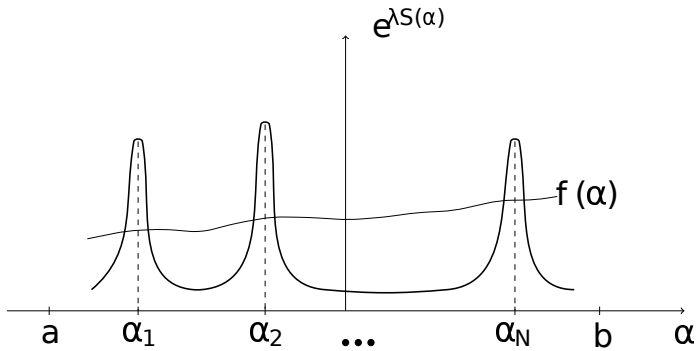


Рис. 12: Чем больше λ , тем более высокие и узкие пики на этом рисунке мы получаем.

$$I \approx \sum_{j=1}^N f(\alpha_j) e^{\lambda S(\alpha_j)} \int_{-\infty}^{+\infty} d\alpha e^{\lambda \frac{S''(\alpha_j)}{2} (\alpha - \alpha_j)^2}. \quad (108)$$

Заметим, что в этом интеграле мы распространили пределы интегрирования от $[a, b]$ до $(-\infty, +\infty)$. Это можно сделать по той же причине, по которой мы пренебрегли более высокими вкладами. Так как основной вклад в данный интеграл приходит от области $\frac{1}{\sqrt{-\lambda S''(\alpha_j)}} \ll |b - a|$.

В результате, чтобы найти искомым приближенный ответ остается взять в (108) гауссов интеграл по α :

$$I \approx \sum_{j=1}^N \sqrt{\frac{2\pi}{-\lambda S''(\alpha_j)}} f(\alpha_j) e^{\lambda S(\alpha_j)}. \quad (109)$$

Подчеркнем, что $S''(\alpha_j) < 0$. Это и дает искомым приближенный ответ для интеграла в пределе $\lambda \rightarrow +\infty$. Понятно, что в этой сумме некоторые вклады могут доминировать над другими. Но максимальный вклад там содержится, а несколько вкладов учитываются, если они одного порядка.

Из рис. 12 может создаться впечатление, что этот метод работает только если экстремумы $S(\alpha)$ являются действительными. Однако в наших рассуждениях нигде не использовалось, что корни уравнения $S'(\alpha) = 0$ не могут быть комплексными. Поэтому данный метод легко распространяется и на случай комплексных α_j .

Далее, метод перевала не трудно обобщить и на случай, когда необходимо оценить интеграл

$$I = \int_a^b d\alpha f(\alpha) e^{i\lambda S(\alpha)}, \quad \lambda \rightarrow \infty.$$

В этом случае надо применить так называемый метод стационарной фазы. Дело в том, что в обсуждаемом пределе множитель $e^{i\lambda S(\alpha)}$ под интегралом очень быстро осциллирует при отклонении от экстремумов $S'(\alpha) = 0$. Из-за этих быстрых осцилляций вклад от отклонений от экстремумов в интеграл пренебрежимо мал. А дальше аргументация устроена буквально также как рассказано выше в этом разделе.

8. Приложение о поведении полиномов Эрмита при больших значениях индекса. Чтобы воспользоваться методом перевала для поиска асимптотики полиномов Эрмита представим их в интегральной форме. Воспользуемся соотношением:

$$e^{-\xi^2} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\alpha e^{-\alpha^2 + 2i\xi\alpha}, \quad (110)$$

которое доказывается следующим образом:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} d\alpha e^{-\alpha^2 + 2i\xi\alpha} &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\alpha e^{-(\alpha - i\xi)^2 - \xi^2} = \\ &= e^{-\xi^2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\bar{\alpha} e^{-\bar{\alpha}^2} = e^{-\xi^2} \sqrt{\pi}. \end{aligned}$$

Более основательное объяснение причин, по которым мы можем делать комплексную замену переменных $\alpha \rightarrow \bar{\alpha} = \alpha - i\xi$ в гауссовом интеграле мы дадим на одной из следующих лекций. Сейчас же просто заметим, что это связано с возможностью деформации контура интегрирования в комплексной плоскости α .

Используя соотношение (110) в (93) и проводя n -кратное дифференцирование по ξ , мы получаем, что:

$$\begin{aligned} H_n(\xi) &= \frac{2^n (-i)^n e^{\xi^2}}{\sqrt{\pi}} \alpha^n \int_{-\infty}^{+\infty} d\alpha e^{-\alpha^2 + 2i\xi\alpha} = \\ &= \frac{2^n}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\alpha (\xi - i\alpha)^n e^{-\alpha^2}, \end{aligned}$$

где на последнем шаге мы опять сделали замену переменных $\alpha \rightarrow \bar{\alpha} = \alpha - i\xi$ и переименовали $\bar{\alpha}$ в α .

В этом интеграле роль λ из метода перевала играет n . При этом $S(\alpha) = \log(\xi - i\alpha) - \frac{\alpha^2}{n}$, а $f(\alpha) = 1$. Так как в данном случае пределы интегрирования распространяются до бесконечности, а экспонента $e^{-\alpha^2}$ является очень быстро растущей функцией, то мы ее включили в $S(\alpha)$, а не в $f(\alpha)$.

Таким образом условие экстремума в данном случае имеет вид:

$$2\alpha + \frac{in}{\xi - i\alpha} = 0.$$

Данное квадратное уравнение на α имеет два решения. При этом вторая производная $S(\alpha)$ равна:

$$\frac{d^2}{d\alpha^2} \left[\log(\xi - i\alpha) - \frac{\alpha^2}{n} \right] = -\frac{2}{n} + \frac{1}{(\xi - i\alpha)^2}.$$

Используя оба максимума в (109) и формулу Стирлинга для $n!$, получаем (99).

Задачи.

I. Получите выражение для гамильтониана квантового осциллятора его выражение через лестничные операторы.

II. Получите (90) из (89).

III. Получите (96) и (97) из (94) и (95).

IV. Получите (100), а затем из него — соотношение (101).

V. Докажите соотношение:

$$i^n \psi_n(\xi \rightarrow p) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \frac{e^{ip\xi}}{\sqrt{2\pi}} \psi_n(\xi).$$

VI. Объясните почему оператор повышения (или рождения) не имеет собственного (когерентного) состояния.

VII. Получите приближенное асимптотическое поведение полиномов Эрмита при большом значении их индекса.

VII. Лекция. *Квазиклассика как приближенный метод решения уравнения Шредингера, пределы применимости квазиклассического приближения, квазиклассическая волновая функция в классически запрещенной и разрешенной зонах, условия шивки в квазиклассике, метод Цваана, линии Стокса, условия квантования Бора–Зоммерфельда, фазовый объем, нормировка квазиклассической волновой функции, туннелирование в квазиклассическом приближении.*

1. Для потенциала $V(x)$ общего вида уравнение Шредингера решить аналитически не возможно. Поэтому применяются приближенные методы. Одним из таких наиболее распространенных методов является так называемое квазиклассическое приближение. Оно основано на факте, который мы разобрали в конце самой первой лекции. А именно, мы показали, что, если, грубо говоря, длина волны кванта много меньше характерных размеров прибора, то его поведение близко к классическому.

Обсудим более подробно как работает данное приближение. Напомним, что если искать решение стационарного уравнения Шредингера,

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{x}) + [E - V(\vec{x})] \psi(\vec{x}) = 0,$$

в виде

$$\psi(\vec{x}) = e^{i \frac{S(\vec{x}, \hbar)}{\hbar}}, \quad (111)$$

то для новой неизвестной функции $S(\vec{x}, \hbar)$ мы получим следующее уравнение:

$$\frac{(\vec{\partial} S)^2}{2m} - \frac{i \hbar}{2m} \Delta S = E - V(\vec{x}). \quad (112)$$

Учитывая, что поведение кванта является практически классическим, будем искать решение последнего уравнения в виде ряда:

$$S(\vec{x}, \hbar) = S_0(\vec{x}) + \frac{\hbar}{i} S_1(\vec{x}) + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 S_2(\vec{x}) + \dots, \quad (113)$$

где $S_{0,1,2}(\vec{x})$ от \hbar уже не зависят. После подстановки разложения (113) в (112) надо положить равным нулю множители при каждой степени \hbar с левой стороны уравнения.

В лидирующем порядке, \hbar^0 , то есть если устремить $\hbar \rightarrow 0$ в том смысле, в котором это говорилось на первой лекции, мы получаем уравнение Гамильтона–Якоби для укороченного действия:

$$\frac{(\vec{\partial}S_0)^2}{2m} = E - V(\vec{x}). \quad (114)$$

Оно связано с полным экстремальным действием, которое обсуждалось на первой лекции, соотношением $S(\vec{x}, t) = -Et + S_0(\vec{x})$.

В следующем порядке, \hbar^1 , мы получаем уравнение:

$$2\vec{\partial}S_0\vec{\partial}S_1 = -\Delta S_0, \quad (115)$$

а во втором порядке (\hbar^2):

$$\vec{\partial}S_0\vec{\partial}S_2 + \frac{(\vec{\partial}S_1)^2}{2} + \frac{\Delta S_1}{2} = 0.$$

Чтобы двигаться дальше, мы рассмотрим одномерное движение. Обычно в трехмерном случае данную задачу тоже упрощают, рассматривая “эффе́ктивное одномерное” радиальное движение, например. Многомерное квазиклассическое приближение удобно рассматривать в формализме функционального интеграла Фейнмана, который мы обсудим в начале следующего семестра.

2. В одномерном случае уравнение (114) имеет вид:

$$\frac{(S'_0)^2}{2m} = E - V(x).$$

Его решение, соответственно, равно:

$$S_0(x) = \pm \int_{x_0}^x dx' \sqrt{2m [E - V(x')]}, \quad (116)$$

где x_0 выбирается с учетом постановки задачи — обычно из граничных условий. Подынтегральное выражение в последнем уравнении — это ни что иное, как классический импульс:

$$p(x) = \sqrt{2m [E - V(x)]}, \quad S_0(x) = \pm \int_{x_0}^x dx' p(x'). \quad (117)$$

В следующем порядке одномерный вариант уравнения (115) можно переписать как:

$$S_1' = -\frac{S_0''}{2S_0'} = -\frac{p'}{2p}.$$

Интегрируя это соотношение, получаем, что:

$$S_1 = -\frac{1}{2} \log p + \text{const}.$$

Подставляя полученные выражения для S_0 и S_1 в (113) и (111), мы найдем приближенное поведение волновой функции:

$$\psi(x) \approx \frac{C_1}{\sqrt{p(x)}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x dx' p(x')} + \frac{C_2}{\sqrt{p(x)}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x dx' p(x')}, \quad (118)$$

где $C_{1,2}$ — это вообще говоря неизвестные комплексные константы. Здесь следует сделать два замечания. Во-первых, множитель $1/\sqrt{p}$ имеет простое объяснение. А именно, вероятность нахождения частицы в интервале $[x, x+dx]$ в данном случае определяется как $|\psi|^2 \sim 1/p$. Это как раз то, что и следует ожидать, поскольку при классическом движении время, проводимое частицей на отрезке dx , обратно пропорционально скорости частицы или ее импульсу $p(x)$. Во-вторых, подчеркнем, что в квазиклассическом приближении как правило не ограничиваются нулевым порядком, S_0 , а оставляют также и первую поправку, S_1 .

Выше мы неявно предполагали, что квант находится в классически разрешенной зоне $E > V(x)$. В запрещенной же области, $E < V(x)$, функция $p(x)$ чисто мнимая. Тогда общий вид решения следующий:

$$\psi(x) \approx \frac{\bar{C}_1}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x dx' |p(x')|} + \frac{\bar{C}_2}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x dx' |p(x')|}. \quad (119)$$

Здесь, однако, следует подчеркнуть, что одновременное сохранение обоих экспонент в этом выражении является сильным превышением

точности. Действительно, в пределе $\hbar \rightarrow 0$ спадающая экспонента подавлена по сравнению с растущей даже сильнее, чем степенные поправки, отброшенные из (113). Как с этим иметь дело мы сейчас и разберемся. Для этого нам надо научиться склеивать волновые функции в разных областях.

3. Обсуждение озвученных проблем и вопросов требует разбирательства в пределах применимости квазиклассического приближения. Для получения уравнения (114) из (112) мы пренебрегли фактически вторым вкладом на левой стороне (112). Это подразумевает, что

$$\hbar \left| \frac{\Delta S}{(\vec{\partial} S)^2} \right| \ll 1.$$

В одномерном случае это соотношение можно переписать в виде:

$$\left| \frac{d}{dx} \frac{\hbar}{S'} \right| \ll 1.$$

В лидирующем порядке $S' \approx p$, как мы только что видели. Поэтому условие применимости данного приближения принимает вид:

$$\left| \frac{d}{dx} \frac{\lambda(x)}{2\pi} \right| \ll 1, \quad \lambda(x) = \frac{2\pi\hbar}{p(x)}.$$

Таким образом, для применимости квазиклассики дебройлевская длина волны кванта должна меняться медленно. Это условие можно переписать в виде:

$$1 \gg \left| \frac{\hbar}{p^2} \frac{d}{dx} \sqrt{2m[E - V(x)]} \right| = \frac{\hbar m}{p^3} \left| \frac{dV}{dx} \right| = \frac{\hbar m |F|}{p^3}, \quad (120)$$

где $F = -\frac{dV}{dx}$ — классическая сила и мы использовали выражение (117) для импульса.

Из полученных условий видно, что квазиклассическое приближение становится не применимым при слишком маленьком импульсе. В частности оно заведомо не применимо в окрестности точек поворота, где $p(x = a) = 0$, так как $E = V(x = a)$ (см. рис. 13).

Выражения (118) и (119) для волновой функции определяют ее поведение по разные стороны от точек поворота. Нам необходимо теперь научиться сшивать такие два поведения, чтобы определить неизвестные коэффициенты в выражениях для квазиклассических волновых функций. Это требует разбора нескольких характерных примеров.

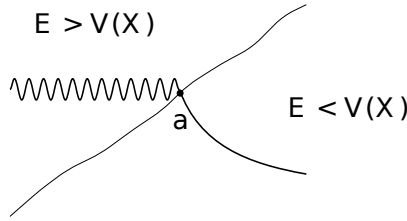


Рис. 13:

Начнем мы со следующей ситуации. Пусть $V(x) > E$ для всех значений $x > a$ (см. рис. 13). Тогда в этой области волновая функция должна затухать и в достаточном удалении от $x = a$, там где применимо квазиклассическое приближение, должна вести себя как:

$$\psi(x) \approx \frac{C}{2\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \left| \int_a^x dx' p(x') \right|}, \quad x > a, \quad (121)$$

где мы в качестве x_0 очевидно выбрали a и для дальнейшего удобства заменили \bar{C}_1 в (119) на $C/2$. Таким образом, из физических соображений в (119) мы отбросили экспоненциально большой вклад, положив $\bar{C}_2 = 0$ и оставили экспоненциально маленький.

Неизвестный действительный коэффициент C в (121) можно найти из условия нормировки. Но до этого его нужно сначала связать с $C_2^* = C_1$ из (118): напомним, что в одномерном случае волновую функцию невырожденного спектра всегда можно положить действительной. Поэтому в классически разрешенной области $\psi(x)$ всегда можно записать в виде:

$$\psi(x) \approx \frac{C_1}{\sqrt{p(x)}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_a^x dx' p(x')} + \frac{C_1^*}{\sqrt{p(x)}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_a^x dx' p(x')}, \quad x < a. \quad (122)$$

Итак, чтобы выразить C_1 через C надо проследить за изменением волновой функции от положительных значений $(x - a)$, где она имеет вид (121), к отрицательным $(x - a)$, где применимо выражение (122). При этом, однако, приходится пройти через область в окрестности точки поворота, $x = a$, где квазиклассическое приближение не применимо и необходимо рассмотреть точное решение стационарного уравнения Шредингера для произвольного $V(x)$. Фактически это не возможно.

Чтобы преодолеть данную трудность мы разберем так называемый метод Цваана сшивки квазиклассических волновых функций. Он не самый простой, но при этом наиболее универсальный и элегантный.

Для этого надо рассмотреть уравнение Шредингера в комплексной плоскости x на комплексную функцию $\psi(x)$. В комплексной плоскости x можно уйти с действительной оси и обойти точку поворота $x = a$. Это позволяет сшить два рассматриваемых поведения $\psi(x)$ (121) и (122) на оси x . Действительная функция, которая будет ограничением комплексной $\psi(x)$ на ось x и является искомой волновой функцией²¹.

С одной стороны обходя $x = a$ в ее окрестности можно в лидирующем порядке представить:

$$E - V(x) \approx F_n (x - a)^n, \quad F_n = - \left. \frac{d^n V(x)}{dx^n} \right|_{x=a} < 0, \quad (123)$$

где n — степень точки поворота. В простейшем случае $n = 1$. Мы здесь им и ограничимся, но излагаемый метод применим и для произвольных значений n . С другой стороны мы должны находиться все же достаточно далеко от $x = a$, чтобы квазиклассическое приближение было применимо.

Разложение (123) применимо, если $|x - a| \ll L$, где L — характерное расстояние, на котором существенно меняется $V(x)$. Условие же применимости квазиклассического приближения (120) в данном случае приводит к:

$$|x - a|^{3/2} \gg \frac{\hbar}{\sqrt{m |F_1|}},$$

так как $p \approx \sqrt{2m |F_1| |x - a|}$. Оба этих условия совместимы, если

$$L^{3/2} \gg \frac{\hbar}{\sqrt{m |F_1|}}, \quad (124)$$

что верно для широкого круга потенциалов и определяет пределы применимости обсуждаемого метода шивки.

В рассматриваемом приближении уравнение Шредингера сводится к

$$\psi'' - \frac{2m |F_1|}{\hbar^2} (x - a) \psi \approx 0.$$

²¹Заранее подчеркнем, что обсуждаемый метод *не* является аналитическим продолжением функции $\psi(x)$ в комплексной плоскости переменной x из классически запрещенной зоны, $x > a$, в разрешенную, $x < a$.

После очевидной замены переменных, $z = \left(\frac{2m|F_1|}{\hbar^2}\right)^{1/3} (x - a)$, оно принимает вид так называемого уравнения Эйри:

$$\psi''(z) - z\psi(z) = 0, \quad \psi''(z) \equiv \frac{d^2\psi(z)}{dz^2}, \quad (125)$$

где z теперь комплексная переменная.

4. Итак, приступим к рассмотрению асимптотик решения уравнения Эйри и их сшивки. Для начала заметим, что точное решение уравнения Эйри хорошо известно и является одной из стандартных спецфункций. Более того, так как коэффициенты в уравнении (125) являются аналитическими функциями внутри комплексной плоскости z , т.е. при $|z| < \infty$, то его точное решение не имеет ни полюсов, ни разрывов.

Обсуждаемое нами приближенное решение этого уравнения ведет себя как:

$$\psi(z) \approx \frac{A_+}{z^{1/4}} e^{\int_0^z dz' \sqrt{z'}} + \frac{A_-}{z^{1/4}} e^{-\int_0^z dz' \sqrt{z'}}. \quad (126)$$

Это можно вывести из (125) буквально таким же образом как мы получили выше выражение (118) с учетом того, что $p(z) = \sqrt{z}$.

У приближенного решения (126), в отличие от точного, очевидно есть разрывы. Действительно, $z^{1/4}$, \sqrt{z} и

$$\int_0^z dz' \sqrt{z'} = \frac{2}{3} z^{3/2}$$

имеют разрывы в комплексной плоскости z вдоль $\text{Re } z \in (-\infty, 0]$. И это не случайно, так как в некоторых областях комплексной плоскости один из членов в сумме (126) пренебрежимо мал по сравнению с другим, а в иных областях — другой. При переходах между областями асимптотика функции Эйри (126) может испытывать скачки. Сама же функция Эйри таких скачков не испытывает в силу своей аналитичности.

Нас из физических соображений интересует такое решение уравнения Эйри, которое на действительной оси при $z \sim (x - a) > 0$ ведет себя как:

$$\psi(z) \approx \frac{C}{2 z^{1/4}} e^{-\frac{2}{3} z^{3/2}}, \quad \text{Im } z = 0, \quad \text{Re } z > 0, \quad (127)$$

что отвечает (121). А нужно нам получить ее поведение на действительной оси, $\text{Im } z = 0$, в том месте, где у асимптотики есть разрез $\text{Re } z < 0$. При обходе $z \sim (x - a) = 0$ эта асимптотика (127) сохраняет свой вид с точностью до сильно подавленных поправок, на которые она как раз и может меняться скачком. Покажем это.

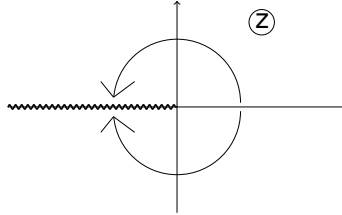


Рис. 14:

При обходе по окружности вокруг $z = 0$ можно представить переменную как $z = \rho e^{i\varphi}$, где ρ модуль z , а φ — его фаза. Тогда

$$\frac{2}{3} z^{\frac{3}{2}} = \frac{2}{3} \rho^{\frac{3}{2}} \left[\cos \left(\frac{3\varphi}{2} \right) + i \sin \left(\frac{3\varphi}{2} \right) \right]. \quad (128)$$

Если теперь обойти $z = 0$ против часовой стрелки в верхней полуплоскости, как изображено на рис. 14, то фаза поменяется $0 \rightarrow \pi$. В результате над разрезом мы получим, что

$$\psi_+(z) \approx \frac{C}{2\rho^{1/4}} e^{i\frac{2}{3}\rho^{\frac{3}{2}} - \frac{i}{4}\pi}.$$

Здесь фаза $-\frac{i}{4}\pi$ в экспоненте появляется из-за поворота $z^{1/4}$ в знаменателе, а первый вклад там же мы получили из (128), подставив туда $\varphi = \pi$. Это называется аналитическим продолжением функции (127).

При обходе же по часовой стрелке в нижней полуплоскости (см. рис. 14) фаза меняется $0 \rightarrow -\pi$. Поэтому под разрезом мы получим:

$$\psi_-(z) \approx \frac{C}{2\rho^{1/4}} e^{-i\frac{2}{3}\rho^{\frac{3}{2}} + \frac{i}{4}\pi}.$$

Какой же из ответов верный, если они не совпадают? Более того, это не действительные функции и в качестве ответов для волновой функции в нашем случае они не подходят. Заметим, что ψ_{\pm} не совпадают именно из-за того, что у асимптотического поведения решения имеются разрезы. Напомним, при этом, что у точного решения разреза нет и

оно определено однозначно. Тогда, как же выглядит его асимптотика там, где у приближенного решения есть разрез?

Для этого внимательней присмотримся к выражению на правой стороне (128). Мнимая часть этого выражения равна нулю при $\varphi = 0, \pm 2\pi/3$. Эти лучи на комплексной плоскости z называются линиями Стокса для данной задачи (см. рис. 15). На данных лучах аргумент обоих экспонент в (126) является действительной функцией. Это значит, что одна из этих экспонент пренебрежимо мала по сравнению со второй.

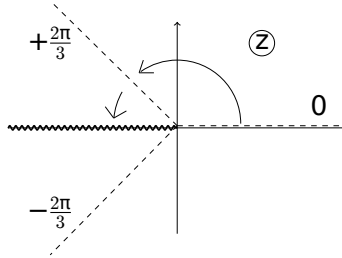


Рис. 15:

На линии Стокса $\varphi = 0$ мы определились с поведением асимптотики (127). А вращая угол либо как $0 \rightarrow \pi$, либо $0 \rightarrow -\pi$ надо быть осторожней и задержаться на соответствующей линии Стокса $\varphi = \pm 2\pi/3$ и аккуратно посмотреть, что происходит. Например, на луче $\varphi = 2\pi/3$ аналитическое продолжение функции (127) ведет себя как:

$$\psi_+(z) \approx \frac{C}{2\rho^{1/4}} e^{\frac{2}{3}\rho^{\frac{3}{2}} - \frac{i}{4}\frac{2\pi}{3}}.$$

Заметим, что из экспоненциально малой на линии Стокса $\varphi = 0$ она стала экспоненциально большой на $\varphi = 2\pi/3$. Это значит, что здесь к ней можно добавить экспоненциально маленькую функцию:

$$\delta\psi(z) \approx \frac{C}{2\rho^{1/4}} e^{-\frac{2}{3}\rho^{\frac{3}{2}} + \frac{i}{4}\frac{2\pi}{3}},$$

не нарушив приближения, в котором мы обсуждаем решение уравнения Эйри. В результате двигаясь дальше по φ от $2\pi/3$ к π , на разрезе мы получим действительную $\psi(z)$:

$$\psi(z) \approx \frac{C}{2\rho^{1/4}} e^{i\frac{2}{3}\rho^{\frac{3}{2}} - \frac{i}{4}\pi} + \frac{C}{2\rho^{1/4}} e^{-i\frac{2}{3}\rho^{\frac{3}{2}} + \frac{i}{4}\pi}, \quad (129)$$

как и должно быть в случае волновой функции. Более того, действуя аналогично при вращении по часовой стрелке в нижней полуплоскости, мы получим тот же ответ.

Итак, применяя метод Цваана, мы нашли, что при обходе точки поворота $x = a$ из асимптотики (121) мы получаем, что в классически разрешенной зоне волновая функция ведет себя как:

$$\psi(x) \approx \frac{C}{\sqrt{p}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x dx' p(x') + \frac{\pi}{4}\right), \quad x < a, \quad (130)$$

где C действительная константа. Этим и завершается объяснение как сшивать квазиклассические волновые функции.

5. Рассмотрим теперь ситуацию, в которой квант находится в яме, как изображено на рис. 16. То есть теперь имеется две точки поворота и $b \leq x \leq a$ — классически разрешенная область.

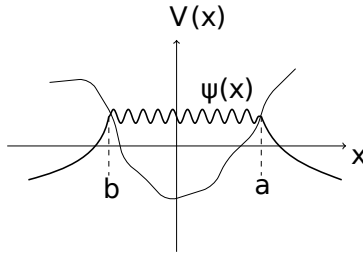


Рис. 16:

Согласно правилу, которое мы обсудили в предыдущем разделе условие сшивки можно сформулировать как

$$\frac{C}{2\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \left| \int_a^x dx' p(x') \right|} \rightarrow \frac{C}{\sqrt{p}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \left| \int_a^x dx' p(x') \right| - \frac{\pi}{4}\right) \\ V(x) > E \rightarrow V(x) < E. \quad (131)$$

В таком виде оно не зависит от того с какой стороны от точки поворота $x = a$ находится классически разрешенная область.

Согласно этому правилу условие сшивки в точке $x = b$ приводит к

$$\psi(x) \approx \frac{C}{\sqrt{p}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_b^x dx' p(x') - \frac{\pi}{4}\right), \quad x > b.$$

Применив это же правило в области слева от $x = a$, получим, что:

$$\psi(x) \approx \frac{C'}{\sqrt{p}} \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_x^a dx' p(x') - \frac{\pi}{4} \right), \quad x < a.$$

Обратите внимание на пределы интегрирования в последних двух выражениях. Для того, чтобы они совпадали во всей области $b \leq x \leq a$, сумма их фаз, которая не зависит от x , должна быть целым кратным π :

$$\frac{1}{\hbar} \int_b^a dx p(x) - \frac{\pi}{2} = \pi n, \quad C = (-1)^n C'.$$

Откуда мы получаем правило квантования Бора–Зоммерфельда:

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \oint dx p(x) = n + \frac{1}{2}, \quad (132)$$

где интеграл $\oint dx p(x) = 2 \int_b^a dx p(x)$ взят по полному периоду классического движения в яме.

Здесь число n — равно количеству нулей волновой функции (косинуса) в классически разрешенной зоне, как и должно быть в силу осцилляторной теоремы. Это же число определяет и количество длин полуволн, которые уместаются в яме. Так как квазиклассическое приближение применимо, когда длина волны очень мала по сравнению с характерными размерами системы, то должно быть $n \gg 1$. Наконец, в правиле квантования Бора–Зоммерфельда n определяет порядковый номер стационарного уровня энергии. А само правило позволяет выразить значение E через n и увидеть, что в яме спектр дискретный.

Соотношение (132) можно понимать еще и следующим образом. Интеграл $\oint dx p(x)$ — это площадь, охватываемая классической фазовой траекторией частицы в фазовой плоскости (p, x) . Разделив эту площадь на клетки размера $2\pi\hbar$ каждая, мы получим всего n клеток в пределе $n \gg 1$. Но n — есть число квантовых состояний с энергией не превышающей n -го ее значения.

Таким образом, можно сказать, что в квазиклассическом приближении каждому квантовому состоянию соответствует “объем” в фазовом пространстве равный $2\pi\hbar$. Или, иными словами, число состояний в фазовом объеме $\Delta p \Delta x$ равно $\Delta p \Delta x / 2\pi\hbar$.

Далее, для нормировки волновой функции состояния в яме из рис. 16 в интеграле $\int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi(x)|^2$ можно пренебречь вкладом от $x < b$ и $x > a$. Там волновая функция экспоненциально мала в

квазиклассическом приближении. Ясно, что и соответствующий вклад в интеграл мал. Поэтому:

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi(x)|^2 \approx \frac{C^2}{2} \int_b^a \frac{dx}{p(x)} = \frac{\pi C}{2m\omega},$$

где $\omega = 2\pi/T$, а $T = 2m \int_b^a \frac{dx}{p(x)} = 2 \int_b^a \frac{dx}{v(x)}$ — период классического движения в яме. В результате, $C/\sqrt{p} = \sqrt{2\omega/\pi v}$. Что и определяет искомый нормировочный коэффициент при финитном движении у дискретных уровней.

6. Рассмотрим теперь задачу про подбарьерное рассеяние или туннелирование. Пусть имеется потенциал такого вида, как изображен на рис. 17, то есть $V(x)|_{|x| \rightarrow \infty} \rightarrow 0$.

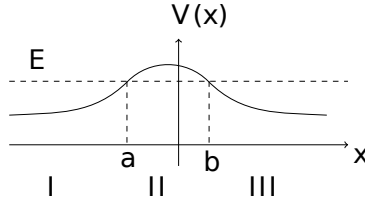


Рис. 17:

В данной задаче нас интересует такое решение уравнения Шредингера, которое описывает единственную прошедшую волну в области III справа от барьера, экспоненциально спадающую в области II под барьером и падающую и отраженную в области I слева от барьера (см. рис. 17). То есть мы знаем, что в области III волновая функция имеет вид:

$$\psi_{III}(x) \approx \frac{C}{\sqrt{p}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_b^x dx' p(x') + i \frac{\pi}{4}}, \quad x > b,$$

где фаза $+i \frac{\pi}{4}$ выбрана для дальнейшего удобства.

Действуя таким же образом как выше, в области II мы получим, что

$$\psi_{II}(x) \approx \frac{C}{\sqrt{|p|}} e^{\frac{1}{\hbar} \left| \int_b^x dx' p(x') \right|}, \quad a < x < b. \quad (133)$$

Эта функция экспоненциально растет на лево от b — в сторону a (см. рис. 17).

Нормируем теперь $\psi_{III}(x)$ так, чтобы прошедший поток вероятности определялся величиной ее коэффициента:

$$\psi_{III}(x) \approx \sqrt{\frac{D}{v}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_b^x dx' p(x') + i \frac{\pi}{4}}, \quad x > b,$$

где $v = p/m$, а ток вероятности для такой волны равен $j_{III} = D$. Тогда

$$\psi_{II}(x) \approx \sqrt{\frac{D}{|v|}} e^{\frac{1}{\hbar} \left| \int_a^b dx p(x) \right| - \frac{1}{\hbar} \left| \int_a^x dx' p(x') \right|}, \quad a < x < b,$$

как следует из (133). Наконец, применив опять правило обхода точки поворота $x = a$, получаем, что

$$\psi_I(x) = 2 \sqrt{\frac{D}{v}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_a^b dx p(x)} \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_x^a dx' p(x') - \frac{\pi}{4} \right), \quad x < a.$$

Эта функция принимает вид суперпозиции падающей и отраженной волн:

$$\psi_I(x) = \frac{1}{\sqrt{v}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_a^x dx' p(x') + i \frac{\pi}{4}} + \frac{1}{\sqrt{v}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_a^x dx' p(x') - i \frac{\pi}{4}}, \quad (134)$$

если

$$D = e^{-\frac{2}{\hbar} \int_a^b dx p(x)} \equiv e^{-\frac{1}{\hbar} \oint dx p(x)}. \quad (135)$$

Выбранная нормировка отвечает равной единице плотности потока вероятности падающей волны. А потому D — это коэффициент прохождения через барьер, так как равен потоку прошедшей волны j_{III} .

Подчеркнем, что обсуждаемые формулы применимы, если показатель экспоненты в (135) очень велик по модулю. Тогда D , соответственно, экспоненциально мал. С экспоненциальной малостью D связан тот факт, что в (134) поток отраженной волны также равен единице, как и в падающей. Экспоненциально малая разница между ними теряется в квазиклассическом приближении. Обратите внимание на связь этого обсуждения с ситуацией рассмотренной на пятой лекции про подбарьерное рассеяние.

Задачи.

I. Получите волновые функции осциллятора в квазиклассическом приближении и сравните их с видом $\psi_n(x)$ в пределе $n \rightarrow \infty$, который был получен в конце прошлой лекции.

II. Получите асимптотики волновых функций в квазиклассическом приближении в ситуации когда имеется больше, чем три линии Стокса.

VIII. Лекция. *Алгебры и группы Ли, алгебра Гейзенберга и ее реализации, алгебра $so(2)$ и группа вращений двумерной плоскости и ее реализации, алгебра $so(3)$ и ее реализации, оператор момента импульса.*

1. До сих пор мы в основном рассматривали одномерное движение. Теперь можно перейти к трехмерному. Для этого нам надо ввести новый оператор. Мы уже знакомы с операторами координаты \hat{q} и импульса \hat{p} . Для трехмерного движения важную роль также играет и оператор момента импульса \hat{M} . Чтобы ввести его и найти его собственные значения и вектора, нам необходимо определить такие понятия как алгебра и группа Ли и их представления.

На этой лекции мы будем использовать термин “реализация”, чтобы отличать его от строгого математического понятия “представления”. Дело в том, что здесь мы будем говорить о представлениях алгебр в несколько более широком смысле, чем это понимается в математике. В узком смысле понятие представления алгебры мы будем использовать на следующей лекции.

Мы будем стараться избегать формальных математических определений, если только они не совершенно необходимы. Наша задача скорее разобраться в теме на конкретных примерах, а не давать общих определений. Однако что такое алгебры Ли нам все-таки придется определить.

Итак, алгеброй Ли \mathcal{G} называется векторное пространство, в котором определена так называемая скобка Ли. А именно, любым двум элементам алгебры $a, b \in \mathcal{G}$ ставится в соответствие элемент $[a, b] = c$, который тоже принадлежит этой алгебре $c \in \mathcal{G}$. Скобка Ли $[a, b]$ двух элементов алгебры обладает следующими свойствами:

- $[a, b] = -[b, a]$ — антисимметрия;
- $[[a, b], c] + [[c, a], b] + [[b, c], a] = 0$ — тождество Бьянки;
- $[\alpha a + \beta b, c] = \alpha [a, c] + \beta [b, c]$, так как \mathcal{G} — это векторное пространство.

Здесь α и β некоторые числа. В алгебре Ли всегда есть единичный элемент, скобка Ли которого с любым другим элементом алгебры равна нулю: $[a, 1] = 0$.

Заметим, что скобка Ли — это не обязательно коммутатор. С математической точки зрения это какая-то формальная операция, ко-

торая удовлетворяет упомянутым выше свойствам. Однако, очевидно, что коммутатор является одной из возможных реализаций скобки Ли.

2. Примером алгебры Ли является знакомая нам уже алгебра Гейзенберга. Ее элементы — это \hat{a} , \hat{a}^+ и $\hat{\mathbf{1}}$. Единственная ненулевая скобка Ли между ними это:

$$[a, a^+] = \hat{\mathbf{1}}.$$

Очевидно, что скобка Ли элемента алгебры с самим собой равна нулю в силу ее антисимметричности.

На прошлых лекциях мы ознакомились с некоторыми реализациями алгебры Гейзенберга. Например, ее можно реализовать с использованием операторов координаты \hat{Q} и импульса \hat{P} :

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{Q} + i\hat{P}), \quad \hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{Q} - i\hat{P}).$$

Но эти же коммутационные соотношения (эту же алгебру с той же скобкой Ли) можно реализовать и с помощью операторов:

$$\hat{a} = \frac{d}{d\alpha}, \quad \hat{a}^+ = \alpha.$$

Более того, нам известна и еще одна реализация алгебры Гейзенберга. А именно, мы уже знаем, что в следствии соотношений:

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

эти операторы в данном базисе можно представить в виде полубесконечных матриц:

$$a_{mn} = \sqrt{n} \delta_{m,n-1}, \quad a_{mn}^+ = \sqrt{n+1} \delta_{m,n+1}.$$

Такой вид лестничные операторы приобретают когда действуют на полубесконечный вектор из волновых функций осциллятора ($\psi_0(x), \psi_1(x), \psi_2(x), \dots$). Заметим, что операторы рождения и уничтожения не могут быть реализованы при помощи конечных матриц, так как след коммутатора конечных матриц равен нулю:

$$\text{Tr} [\hat{a}, \hat{a}^+] = \text{Tr} \hat{a} \hat{a}^+ - \text{Tr} \hat{a}^+ \hat{a} = 0.$$

А при этом в следствии коммутационного соотношения Гейзенберга он должен равняться $\text{Tr} \hat{\mathbf{1}} \neq 0$. Поэтому обсуждаемая алгебра может быть реализована только на матрицах бесконечного размера, где следует доопределить след как бесконечную сумму.

3. Более простой, но не менее важной для нашего курса является алгебра вращений в двумерной плоскости. В данной части лекции мы возможно слишком подробно обсудим некоторые банальные соотношения из этой алгебры и дадим иной взгляд на уже знакомые студентам формулы. Это должно помочь разобраться в дальнейшем в более сложных ситуациях.

Начнем мы с обсуждения группы вращений двумерной плоскости. Группой G является множество элементов, которые можно умножать друг на друга: если $g_{1,2} \in G$, то и $g_1 g_2 \in G$. У каждого из элементов группы $g \in G$ есть обратный $g^{-1} \in G$: $g^{-1} g = g g^{-1} = 1$. А также в группе есть единичный элемент, который при умножении на любой другой его не меняет: $g 1 = 1 g = g$.

Любая матрица, задающая поворот координатной сетки в двумерной плоскости, является ортогональной и имеет единичный детерминант. Ее реализация, которая известна студентам младших курсов, определяется 2×2 матрицами действующими на двумерный вектор следующим образом:

$$\begin{pmatrix} v'_1 \\ v'_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi \\ \sin \varphi & \cos \varphi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix}.$$

Такие матрицы образуют группу, которая называется $SO(2)$, где буква S отвечает за единичный детерминант, O — за ортогональность, а 2 — за размер матриц вращения. Обсудим теперь алгебру Ли $so(2)$ обсуждаемой группы $SO(2)$. По определению алгебра отвечает за инфинитезимальные вращения — за вращения на очень маленькие углы φ . Тогда в линейном приближении $\sin \varphi \approx \varphi$, а $\cos \varphi \approx 1$ и

$$\begin{pmatrix} v'_1 \\ v'_2 \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} 1 & -\varphi \\ \varphi & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = \left[\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \varphi \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix}.$$

Элементами алгебры $so(2)$ являются единичный оператор,

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

и так называемы генератор $so(2)$:

$$\hat{l} = -i \|\epsilon_{ab}\| = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}, \quad a, b = \overline{1, 2}, \quad (136)$$

где причина введения мнимой единицы $-i$ в определение оператора станет ясной из дальнейшего. Так как \hat{l} — единственный отличный от единичного элемент, то алгебра не имеет ненулевых коммутационных соотношений. Соответственно, она даже проще, чем алгебра Гейзенберга.

Чтобы обратно из алгебры получить группу нужно применить много ($N \rightarrow \infty$) раз одно и тоже инфинитезимальное вращение на малый угол φ/N :

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left(\hat{1} + i \frac{\varphi}{N} \hat{l} \right)^N = e^{i\varphi \hat{l}} = \exp \left[\varphi \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right] = \begin{pmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi \\ \sin \varphi & \cos \varphi \end{pmatrix}.$$

Последнее равенство в этом соотношении можно получить разлагая матричную экспоненту в ряд Тейлора и используя равенство

$$\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}^2 = - \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

которое аналогично соотношению на мнимую единицу $i^2 = -1$. Поэтому из четных степеней φ возникнет косинус помноженный на единичную матрицу, а из нечетных — синус помноженный на антисимметричную матрицу. В результате, обсуждаемое соотношение аналогично формуле Эйлера:

$$e^{i\varphi} = \cos \varphi + i \sin \varphi.$$

$$\exp \left[\varphi \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right] = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \cos \varphi + \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \sin \varphi.$$

В свете этого можно сразу сказать и о другой реализации обсуждаемой группы и алгебры. А именно, вместо двумерного вектора (v_1, v_2) можно использовать комплексное число $v_1 + i v_2 = \rho e^{i\phi}$, где $\rho = \sqrt{v_1^2 + v_2^2}$, а $\text{tg } \phi = v_1/v_2$. То есть на двумерной плоскости вместо базисных векторов $(1, 0)$ и $(0, 1)$ можно использовать 1 и i . Тогда вращения в этой плоскости можно представить как умножение на комплексное число, модуль которого равен единице:

$$\rho' e^{i\phi'} \equiv v'_1 + i v'_2 = e^{i\varphi} (v_1 + i v_2) = e^{i\varphi} \rho e^{i\phi} = \rho e^{i(\phi+\varphi)}.$$

В этой ситуации элементами алгебры будут единичный 1 и, в качестве генератора, мнимая единица i .

Помимо этого, из сделанного наблюдения следует, что элемент группы возникает в результате экспоненцирования элемента алгебры, что является ситуацией общего положения. При этом, в данном простейшем случае произведение элементов группы приводит к суммированию элементов алгебры: $e^{i\varphi_1} e^{i\varphi_2} = e^{i(\varphi_1+\varphi_2)}$. Поэтому, в отличие от группы, алгебра (повороты на инфинитезимальные углы) является векторным пространством.

Заметим далее, что, как и в случае алгебры Гейзенберга, $so(2)$ задает симметрии в некоторой физической задаче. Действительно, рассмотрим уравнение обычного классического линейного осциллятора ($\phi = \omega t$):

$$\frac{d^2 f(\phi)}{d\phi^2} = -f(\phi). \quad (137)$$

Любое его решение можно представить как:

$$f(\phi) = a \cos \phi + b \sin \phi,$$

где a, b — некоторые числа. Таким образом, из базиса решений можно составить вектор $(\cos \phi, \sin \phi)$, на который дифференциальный оператор $d/d\phi$ действует как:

$$\frac{d}{d\phi} \begin{pmatrix} \cos \phi \\ \sin \phi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \phi \\ \sin \phi \end{pmatrix}, \quad (138)$$

где, как видно, появляется генератор алгебры вращений. Поэтому инфинитезимальные вращения в рассматриваемом пространстве решений можно представить как:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \cos \phi' \\ \sin \phi' \end{pmatrix} &\approx \left[\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \varphi \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} \cos \phi \\ \sin \phi \end{pmatrix} = \\ &= \left[1 + \varphi \frac{d}{d\phi} \right] \begin{pmatrix} \cos \phi \\ \sin \phi \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

где на последнем шаге мы использовали уравнение (138). В результате при действии на решения уравнения классического осциллятора группу $SO(2)$ можно реализовать как:

$$\begin{pmatrix} \cos \phi' \\ \sin \phi' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\phi + \varphi) \\ \sin(\phi + \varphi) \end{pmatrix} = e^{\varphi \frac{d}{d\phi}} \begin{pmatrix} \cos \phi \\ \sin \phi \end{pmatrix}.$$

В такой реализации элементы алгебры — это единичный оператор 1 и генератор $d/d\phi$ — оператор сдвига вдоль окружности. Итак, алгебра $so(2)$ и группа $SO(2)$ осуществляют вращения в пространстве решений уравнения (137).

Наконец, обсудим еще одну реализацию группы и алгебры двумерных вращений, которую мы будем использовать в дальнейшем. А именно, рассмотрим как данная симметрия действует на скалярные функции на плоскости $f(x, y)$. При координатных преобразованиях скалярная функция преобразуется как:

$$f(x, y) = f(x(x', y'), y(x', y')) = f'(x', y').$$

То есть при инфинитезимальном вращении, разлагая в ряд Тейлора до линейного порядка по φ , мы получаем:

$$\begin{aligned} f(x, y) &= f'(x \cos \varphi - y \sin \varphi, x \sin \varphi + y \cos \varphi) \approx \\ &\approx f'(x - y \varphi, x \varphi + y) \approx \left[1 + \varphi (x \partial_y - y \partial_x) \right] f'(x, y) \equiv \left[1 + i \varphi \hat{L} \right] f'(x, y). \end{aligned}$$

В данном случае алгебра вращений порождается единицей и *эрмитовым* дифференциальным оператором (генератором):

$$\hat{L} \equiv -i (x \partial_y - y \partial_x). \quad (139)$$

На будущее заметим, что данный генератор можно записать также как

$$\hat{L} = -i \epsilon_{ab} x_a \partial_b, \quad a, b = \overline{1, 2}.$$

Тогда элемент группы, отвечающий конечному вращению, является унитарным оператором вида:

$$g = e^{i\varphi \hat{L}} = e^{i\omega_{ab} \hat{L}_{ab}},$$

где

$$\hat{L}_{ab} = -i (x_a \partial_b - x_b \partial_a), \quad \omega_{ab} = \frac{\varphi}{2} \epsilon_{ab}.$$

Также не трудно проверить, что при переходе к полярным координатам $x = r \cos \phi$, $y = r \sin \phi$ генератор приобретает уже известный нам вид $\hat{L} = -i d/d\phi$.

В заключении этого раздела получим одну замечательную формулу, которая в дальнейшем нам будет полезна. Не трудно видеть, что в линейном порядке по инфинитезимальному углу φ верна следующая цепочка равенств:

$$\begin{aligned} (1 + i\varphi \hat{L}) x_a (1 - i\varphi \hat{L}) &\approx x_a + i\varphi [\hat{L}, x_a] = \\ &= \delta_{ab} x_b + \varphi \epsilon_{cd} [x_c \partial_d, x_a] = (\delta_{ab} - \varphi \epsilon_{ab}) x_b, \end{aligned}$$

где при вычислении коммутатора мы использовали правило Лейбница. Применяя это соотношение N раз для инфинитезимального угла φ/N и устремляя $N \rightarrow \infty$, мы получаем, что при конечном вращении верно соотношение:

$$e^{i\varphi \hat{L}} x_a e^{-i\varphi \hat{L}} = \left(e^{-i\varphi \hat{l}} \right)_{ab} x_b, \quad (140)$$

где $\hat{l} = -i \|\epsilon_{ab}\|$ — введенный выше матричный генератор для группы вращений (136). С левой стороны этого соотношения мы имеем сопряжение операторами вращения $e^{i\varphi \hat{L}}$ оператора координаты x_a , а с правой стороны — обычное матричное вращение двумерного вектора x_a . Ведь $\left(e^{-i\varphi \hat{l}} \right)_{ab}$ — это обычная ортогональная 2×2 матрица вращения, как мы убедились выше.

Аналогично можно убедиться, что соотношение (140) верно и для ∂_a место x_a , так как оператор $\epsilon_{ab} x_a \partial_b$ коммутирует с ∂_a практически таким же образом, как он делает это с x_a .

Итак, мы здесь установили связь между несколькими разными реализациями группы и алгебры двумерных вращений. На этом мы заканчиваем наше обсуждение двумерных вращений и переходим к трехмерным.

4. Из курса высшей математики и теоретической механики студенты должны знать, что ортогональную 3×3 матрицу с единичным детерминантом, задающую произвольное трехмерное вращение, можно параметризовать тремя так называемыми углами Эйлера. Другая параметризация получается, если произвольное трехмерное вращение рассматривать как комбинацию двумерных вращений в трех ортогональных плоскостях (x, y) , (y, z) и (z, x) . Еще одна реализация следует, когда выбирается ось вращения (характеризующаяся двумя углами) и угол вращения вокруг нее. В любом случае такие матрицы задают группу трехмерных вращений $SO(3)$ и характеризуются тремя параметрами.

Перейдем теперь к обсуждению алгебры. Рассмотрим вращение вектора (v_1, v_2, v_3) вокруг оси z :

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} v'_1 \\ v'_2 \\ v'_3 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi & 0 \\ \sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{pmatrix} = \\ &= \exp \left[i \varphi \begin{pmatrix} 0 & i & 0 \\ -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Мы получили эти соотношения абсолютно таким же образом, как это проделывалось выше в двумерном случае. То есть генератором вращений вокруг оси z (в плоскости (x, y)) является фактически знакомый нам матричный оператор:

$$\hat{l}_3 = \begin{pmatrix} 0 & i & 0 \\ -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (141)$$

Аналогично можно найти, что генераторы вращений вокруг осей x и y имеют вид:

$$\hat{l}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i \\ 0 & -i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{l}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (142)$$

Тогда произвольный элемент группы (отвечающий вращению на конечные углы) можно записать как:

$$g = e^{i \varphi_j \hat{l}_j} = e^{i \tilde{\varphi} \tilde{l}} = e^{i \omega_{jk} \hat{l}_{jk}}, \quad j, k = \overline{1, 3}, \quad (143)$$

где φ_j — три угла, аналогичные углам Эйлера, а

$$\omega_{jk} = \frac{\varphi_l}{2} \epsilon_{ljk} \quad (144)$$

и

$$\left(\hat{l}_{jk} \right)_{ab} = i (\delta_{ja} \delta_{kb} - \delta_{jb} \delta_{ka}), \quad a, b = \overline{1, 3}. \quad (145)$$

Последнее выражение является ни чем иным как замысловатой формой записи элементов матриц (141) и (142). У них только в двух местах стоят отличные от нуля элементы — мнимые единицы, что и отражено в символах Кронекера в (145). Заметим, что $\hat{l}_{ij} = -\hat{l}_{ji}$ и мы имеем три независимых матрицы, что совпадает с количеством матриц в случае \hat{l}_j .

Далее, аналогично (139), при действии на функции $f(x_1, x_2, x_3)$ можно ввести эрмитовы дифференциальные генераторы алгебры вращений:

$$\hat{L}_j = -i \epsilon_{jkl} x_k \partial_l, \quad (146)$$

абсолютно таким же образом, как это делалось выше в двумерном случае. Тогда элемент группы, соответственно, можно записать как:

$$g = e^{i \varphi_j \hat{L}_j} = e^{i \vec{\varphi} \hat{L}} = e^{i \omega_{jk} \hat{L}_{jk}}, \quad j, k, k = \overline{1, 3}. \quad (147)$$

Здесь $\hat{L}_{jk} = -i (x_j \partial_k - x_k \partial_j)$, а ω_{jk} определена в (144). Это реализация группы $SO(3)$ в виде дифференциальных операторов, тогда как уравнение (143) задает ее реализацию в виде 3×3 матриц.

Найдем теперь коммутационные соотношения между операторами \hat{L}_j с различными значениями j , то есть коммутационные соотношения в алгебре $so(3)$. Рассмотрим цепочку равенств:

$$\begin{aligned} [x_j \partial_k, x_l \partial_n] &= [x_j, x_l \partial_n] \partial_k + x_j [\partial_k, x_l \partial_n] = \\ &= x_l [x_j, \partial_n] \partial_k + x_j [\partial_k, x_l] \partial_n = \delta_{kl} x_j \partial_n - \delta_{jn} x_l \partial_k, \end{aligned} \quad (148)$$

где мы несколько раз использовали правило Лейбница для коммутатора. Теперь, вспомним из курса теории поля свойства абсолютно антисимметричного тензора:

$$\epsilon_{mkj} \epsilon_{iln} \delta_{jn} = \epsilon_{mkj} \epsilon_{ilj} = \delta_{mi} \delta_{kl} - \delta_{ml} \delta_{ki}. \quad (149)$$

Используя эти свойства коммутатора и антисимметричного тензора, из уравнений (148) и (149) можно увидеть, что:

$$\left[\hat{L}_j, \hat{L}_k \right] = x_j \partial_k - x_k \partial_j = i \epsilon_{jkn} \hat{L}_n, \quad (150)$$

или

$$\left[\hat{L}_{ij}, \hat{L}_{kl} \right] = i \left(\delta_{ik} \hat{L}_{jl} - \delta_{jk} \hat{L}_{il} - \delta_{il} \hat{L}_{jk} + \delta_{jl} \hat{L}_{ik} \right). \quad (151)$$

Эти два коммутационных соотношения являются эквивалентными формами записи всех ненулевых скобок Ли в алгебре $so(3)$. Можно проверить, что матрицы \hat{l}_j и \hat{l}_{jk} тоже удовлетворяют тем же коммутационным соотношениям (150) и (151), соответственно. То есть они задают реализацию этой же алгебры $so(3)$.

Наконец не трудно видеть, что в линейном приближении по φ_j верна следующая цепочка равенств:

$$\begin{aligned} \left(1 + i \hat{\varphi}_j \hat{L}_j \right) x_k \left(1 - i \hat{\varphi}_j \hat{L}_j \right) &\approx x_k + i \varphi_j \left[\hat{L}_j, x_k \right] = \\ &= \left(\delta_{kl} - i \varphi_j \left(\hat{l}_j \right)_{kl} \right) x_l, \end{aligned}$$

где $\left(\hat{l}_j \right)_{kl} = -i \epsilon_{jkl}$ — определяет значение kl -го элемента матрицы \hat{l}_j из (141) и (142). Применяя это соотношение много раз, мы получаем для конечного вращения, что:

$$e^{i \vec{\varphi} \hat{L}} x_k e^{-i \vec{\varphi} \hat{L}} = \left(e^{-i \vec{\varphi} \hat{l}} \right)_{kj} x_j, \quad (152)$$

что является трехмерным обобщением двумерного равенства (140). Аналогичное равенство верно и для ∂_k . Теперь мы готовы обсудить оператор момента импульса в квантовой механике.

5. Не трудно видеть, что оператор

$$\hat{M}_j = \hbar \hat{L}_j = \epsilon_{jkl} \hat{q}_k \hat{p}_l$$

в классическом пределе переходит в $\vec{M} = [\vec{q} \times \vec{p}]$, то есть — в классический момент импульса. Более того, аналогично тому как оператор

$$\hat{T}_{\vec{a}} = e^{\frac{i \vec{a} \hat{p}}{\hbar}}$$

задает трансляции на вектор \vec{a} при действии на функции $f(\vec{x})$, оператор

$$g = e^{\frac{i \vec{\varphi} \hat{M}}{\hbar}}$$

задает повороты при действии на те же функции. В этом мы убедились выше. Из данных наблюдений мы заключаем, что \hat{M} является искомым оператором момента импульса.

Таким образом, в отличие от \hat{p} , компоненты которого коммутируют друг с другом $[\hat{p}_j, \hat{p}_k] = 0$, компоненты \hat{M} друг с другом не коммутируют:

$$[\hat{M}_j, \hat{M}_k] = i \hbar \epsilon_{jkn} \hat{M}_n,$$

как мы знаем из (150). Это означает, что никакую пару компонент \hat{M} одновременно измерить нельзя.

Однако при вращениях никакие скалярные величины не преобразуются. В результате, например:

$$[\hat{x}^2, \hat{L}_j] = 0, \quad [\hat{p}^2, \hat{L}_j] = 0.$$

В этом можно убедиться прямым вычислением, используя инфинитезимальный вариант соотношения (152) и правило Лейбница. Действительно, например,

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_j] = [\hat{L}_k \hat{L}_k, \hat{L}_j] = i \epsilon_{kjl} (\hat{L}_l \hat{L}_k + \hat{L}_k \hat{L}_l) = 0.$$

Полученное таким образом соотношение означает, что оператор квадрата полного момента импульса \hat{M}^2 можно измерить одновременно с любой из его компонент. Обычно в качестве последней выбирают $\hat{M}_3 \equiv \hat{M}_z$. Это значит, что для \hat{M}^2 и \hat{M}_3 можно ввести общий базис собственных векторов, что мы и используем на следующей лекции.

Далее, часто вместо эрмитовых операторов $\hat{L}_{1,2}$ вводят $\hat{L}_\pm = \hat{L}_1 \pm i \hat{L}_2$. Тогда коммутационные соотношения алгебры вращений приобретают вид:

$$[\hat{L}_3, \hat{L}_\pm] = \pm \hat{L}_\pm, \quad [\hat{L}_+, \hat{L}_-] = 2 \hat{L}_3,$$

как не трудно вывести из (150). Очевидно, что при этом

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_\pm] = 0.$$

Помимо этого, можно показать, что:

$$\begin{aligned}\hat{L}^2 &= \hat{L}_1^2 + \hat{L}_2^2 + \hat{L}_3^2 = \frac{1}{2} \left(\hat{L}_+ \hat{L}_- + \hat{L}_- \hat{L}_+ \right) + \hat{L}_3^2 = \\ &= \hat{L}_+ \hat{L}_- - \hat{L}_3 + \hat{L}_3^2 = \hat{L}_- \hat{L}_+ + \hat{L}_3 + \hat{L}_3^2.\end{aligned}\quad (153)$$

Наконец, на будущее удобно записать операторы вращения в сферических координатах, то есть перейти от (x_1, x_2, x_3) к (r, θ, φ) . Например, можно записать:

$$\begin{aligned}\partial_1 \equiv (\vec{e}_1, \vec{\partial}) &= (\vec{e}_1, \vec{e}_r) \partial_r + (\vec{e}_1, \vec{e}_\theta) \frac{\partial_\theta}{r} + (\vec{e}_1, \vec{e}_\varphi) \frac{\partial_\varphi}{r \sin \theta} = \\ &= \sin \theta \cos \varphi \partial_r + \frac{\cos \theta \cos \varphi}{r} \partial_\theta - \frac{\sin \varphi}{r \sin \theta} \partial_\varphi,\end{aligned}$$

где мы воспользовались тем, что в сферических координатах оператор градиента имеет вид

$$\vec{\partial} = \left(\partial_r, \frac{\partial_\theta}{r}, \frac{\partial_\varphi}{r \sin \theta} \right),$$

как обратный к дифференциалу $d\vec{x} = (dr, r d\theta, r \sin \theta d\varphi)$. При этом, скалярные произведения реперных векторов \vec{e}_1 с \vec{e}_r , \vec{e}_θ и \vec{e}_φ можно найти, например, из рис. 18.

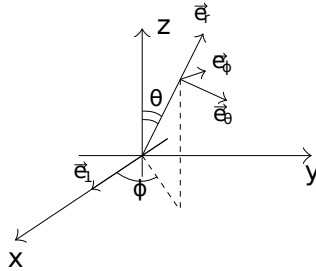


Рис. 18:

Аналогично получается, что:

$$\partial_2 = \sin \theta \sin \varphi \partial_r + \frac{\cos \theta \sin \varphi}{r} \partial_\theta - \frac{\cos \varphi}{r \sin \theta} \partial_\varphi,$$

и

$$\partial_3 = \cos \theta \partial_r - \frac{\sin \theta}{r} \partial_\theta.$$

Используя эти выражения, мы получаем

$$\hat{L}_3 = i \partial_\varphi, \quad \hat{L}_\pm = e^{\pm i \varphi} (\pm \partial_\theta + i \operatorname{ctg} \theta \partial_\varphi). \quad (154)$$

Наконец можно показать, что:

$$\begin{aligned} \hat{M}^2 &= \hbar^2 \hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \partial_\theta \sin \theta \partial_\theta + \frac{1}{\sin^2 \theta} \partial_\varphi^2 \right] = \\ &= -\hbar^2 \left[\partial_\theta^2 + \operatorname{ctg} \theta \partial_\theta + \frac{1}{\sin^2 \theta} \partial_\varphi^2 \right]. \end{aligned} \quad (155)$$

На следующих лекциях мы увидим, что именно такой оператор возникает как часть оператора Лапласа Δ в сферических координатах; \hat{L}^2 называется оператором Лапласа на сфере.

Задачи.

I. Покажите, что при переходе к полярным координатам $x = r \cos \phi$, $y = r \sin \phi$ генератор алгебры $so(2)$ приобретает вид $\hat{L} = -i d/d\phi$.

II. Докажите соотношение

$$e^{i \varphi \hat{L}} x_a e^{-i \varphi \hat{L}} = \left(e^{-i \varphi \hat{l}} \right)_{ab} x_b,$$

где $\hat{l} = -i \|\epsilon_{ab}\|$

III. Покажите, что операторы $\hat{L}_j = -i \epsilon_{jkl} x_k \partial_l$ удовлетворяют коммутационным соотношениям алгебры $so(3)$.

IV. Выведите выражение (155) для квадрата оператора момента вращения.

IX. Лекция. *Собственные состояния оператора момента импульса или представления алгебры трехмерных вращений, некоторые простейшие примеры представлений, спин, трехмерный (двухкомпонентный) нерелятивистский спинор, матрицы Паули и их свойства, алгебра Клиффорда в трех измерениях, гамильтониан взаимодействия магнитного момента и спина с внешним магнитным полем.*

1. Найдем теперь собственные состояния оператора момента импульса \hat{M} . С математической точки зрения нас интересуют так называемые унитарные неприводимые представления алгебры $so(3)$:

$$\left[\hat{j}_3, \hat{j}_\pm \right] = \pm \hat{j}_\pm, \quad \left[\hat{j}_+, \hat{j}_- \right] = 2 \hat{j}_3. \quad (156)$$

Точное определение того, что такое унитарные и неприводимые представления мы здесь давать не будем, так как пока они нам нигде не понадобятся. В последнем выражении для генераторов алгебры мы специально выбрали новые обозначения \hat{j}_k , $k = \overline{1, 3}$ и $\hat{j}_\pm = \hat{j}_1 \pm i \hat{j}_2$. Этим мы хотели подчеркнуть, что у $so(3)$ есть и другие представления, которые не совпадают с реализациями в виде дифференциальных операторов $\hat{L}_k = -i \epsilon_{klm} x_l \partial_m$ или 3×3 матриц \hat{L}_k . Сейчас мы это увидим.

Как было показано на прошлой лекции, оператор квадрата полного момента \hat{j}^2 коммутирует с оператором проекции момента \hat{j}_3 на ось z ,

$$\left[\hat{j}^2, \hat{j}_3 \right] = 0.$$

Поэтому мы можем искать базис из их общих собственных состояний:

$$\hat{j}^2 |J, m\rangle = J |J, m\rangle, \quad \hat{j}_3 |J, m\rangle = m |J, m\rangle. \quad (157)$$

Для дальнейшего нам, во-первых, будет важно, что собственное значение квадрата проекции момента \hat{j}_3^2 не может превышать квадрат полного момента, то есть $m^2 \leq J$. Во-вторых, необходимо помнить следующие соотношения:

$$\hat{j}^2 = \hat{j}_- \hat{j}_+ + \hat{j}_z + \hat{j}_z^2 = \hat{j}_+ \hat{j}_- - \hat{j}_z + \hat{j}_z^2, \quad (158)$$

которые мы уже встречали на прошлой лекции.

Чтобы найти полный базис из (157) мы поступим аналогично тому, как это было сделано в задаче про квантовый гармонический осциллятор. А именно, подействуем оператором \hat{j}_+ на произвольное состояние из (157) и разложим его по базису:

$$\hat{j}_+ |J, m\rangle \equiv |\Phi\rangle = \sum_{m'} a_{m'} |J, m'\rangle. \quad (159)$$

На правой стороне этого равенства идет сумма по m' , но нет суммы по J' , так как \hat{j}_+ коммутирует с \hat{j}^2 , но не коммутирует с \hat{j}_z . Поэтому под действием \hat{j}_+ меняется только m , а J остается неизменным.

Чтобы найти коэффициенты $a_{m'}$ в (159) подействуем на состояние $|\Phi\rangle$ оператором \hat{j}_z и воспользуемся одним из коммутационных соотношений из алгебры (156):

$$\begin{aligned} \hat{j}_z |\Phi\rangle &= \hat{j}_z \hat{j}_+ |J, m\rangle = (\hat{j}_+ \hat{j}_z + \hat{j}_+) |J, m\rangle = \\ &= (m+1) \hat{j}_+ |J, m\rangle = (m+1) |\Phi\rangle. \end{aligned}$$

Из этого следует, что $|\Phi\rangle$ является собственным вектором оператора \hat{j}_z с собственным числом $(m+1)$. Соответственно в сумме на правой стороне (159) присутствует только один член с $m' = m+1$:

$$\hat{j}_+ |J, m\rangle = a_{m+1} |J, m+1\rangle, \quad (160)$$

где число a_{m+1} мы пока не нашли. Таким образом, оператор \hat{j}_+ повышает проекцию момента на ось z на единицу. То есть в некотором смысле он действует также как повышающий оператор \hat{a}^+ для осциллятора.

Аналогично, можно получить, что

$$\hat{j}_- |J, m\rangle = a_m^* |J, m-1\rangle, \quad (161)$$

где a_m^* комплексно сопряжено a_m из (159). В этом можно убедиться, вспомнив, что \hat{j}_- эрмитово сопряжен \hat{j}_+ . Из (161) следует, что \hat{j}_-

действует аналогично понижающему оператору \hat{a} в задаче про осциллятор.

Чтобы двигаться дальше, обозначим максимально возможное значение проекции момента m буквой j . Оно есть, так как $m^2 \leq J$. Тогда должно быть, что

$$\hat{j}_+ |J, j\rangle = 0. \quad (162)$$

Иначе повышающий оператор увеличил бы значение m еще на единицу. Это условие выделяет подкласс представлений алгебры, которые применяются в физике.

Вместо (162) можно было бы рассмотреть состояние с минимальным возможным значением проекции момента $|J, -j\rangle$. Тогда оно удовлетворяло бы условию:

$$\hat{j}_- |J, -j\rangle = 0,$$

то есть было бы аналогично основному состоянию осциллятора $\hat{a}|0\rangle = 0$.

Итак, для состояния $|J, j\rangle$ получаем следующую цепочку равенств:

$$\begin{aligned} J|J, j\rangle &\equiv \hat{j}^2 |J, j\rangle = \left(\hat{j}_- \hat{j}_+ + \hat{j}_z + \hat{j}_z^2\right) |J, j\rangle = \\ &= (0 + j + j^2) |J, j\rangle = j(j+1) |J, j\rangle. \end{aligned}$$

Здесь мы воспользовались (158) и (162). Сравнивая левую и правую сторону этой цепочки равенств, мы получаем, что $J = j(j+1)$. В свете этого мы поменяем обозначение состояний (157) на стандартные в квантовой механике:

$$|J, m\rangle \rightarrow |j, m\rangle,$$

так как J однозначно определяется максимальной проекцией момента j на ось z .

Таким образом, мы имеем базис из состояний:

$$|j, j\rangle, \quad |j, j-1\rangle, \quad |j, j-2\rangle, \dots, |j, -j+1\rangle, \quad |j, -j\rangle, \quad (163)$$

в котором $-j \leq m \leq j$. В таком базисе операторы \hat{j}_k , $k = \overline{1, 3}$ представляются в виде обычных $(2j+1) \times (2j+1)$ матриц. Чтобы найти

компоненты этих матриц надо определить коэффициенты a_m в (160) и (161).

Для вычисления a_m вспомним, что \hat{j}_- эрмитово сопряжен \hat{j}_+ . Поэтому:

$$\left(\hat{j}_+ |j, m\rangle\right)^+ = \langle j, m | \hat{j}_-.$$

Тогда не сложно получить, что:

$$\langle j, m | \hat{j}_- \hat{j}_+ |j, m\rangle = \langle j, m + 1 | a_{m+1}^* a_{m+1} |j, m + 1\rangle = |a_{m+1}|^2, \quad (164)$$

где мы воспользовались ортонормированностью рассматриваемых состояний $\langle j, m + 1 | j, m + 1\rangle = 1$. С другой стороны из (158) мы имеем, что:

$$\hat{j}_- \hat{j}_+ |j, m\rangle = \left(\hat{j}_3^2 - \hat{j}_3^2 - \hat{j}_3\right) |j, m\rangle = [j(j+1) - m(m+1)] |j, m\rangle.$$

Соответственно, умножая последнюю цепочку равенств слева на $\langle j, m |$, учитывая, что $\langle j, m | j, m\rangle = 1$ и сравнивая с (164), мы получаем что:

$$a_{m+1} = \sqrt{(j-m)(j+m+1)},$$

с точностью до полной фазы вектора состояния. Последнюю всегда можно выбрать равной нулю, как мы объяснили на прошлых лекциях. В результате имеем следующие соотношения

$$\begin{aligned} \hat{j}_+ |j, m\rangle &= \sqrt{(j-m)(j+m+1)} |j, m+1\rangle, \\ \hat{j}_- |j, m\rangle &= \sqrt{(j+m)(j-m+1)} |j, m-1\rangle. \end{aligned} \quad (165)$$

Соответственно матрицы генераторов алгебры $so(3)$ в данном базисе имеют вид:

$$\begin{aligned} \langle j, m' | \hat{j}_+ |j, m\rangle &= \sqrt{(j-m)(j+m+1)} \delta_{m', m+1} \\ \langle j, m' | \hat{j}_- |j, m\rangle &= \sqrt{(j+m)(j-m+1)} \delta_{m', m-1} \\ \langle j, m' | \hat{j}_3 |j, m\rangle &= m \delta_{m', m}. \end{aligned}$$

Можно проверить, что для всех $-j \leq m \leq j$ эти матрицы удовлетворяют соотношениям алгебры (156).

Какие значения может пробегать j ? Выше мы неявно предполагали, что j пробегает дискретные значения, но не сказали какие именно. В силу того, что $-j \leq m \leq j$, при данном значении j мы очевидно имеем $N = 2j + 1$ состояний. Число N очевидно должно быть целым. Тогда $j = (N - 1)/2$ может пробегать следующие значения:

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$$

Это перечисляет все возможные представления в интересующем нас классе.

Наконец, выразим произвольное состояние $|j, m\rangle$ через старшее $|j, j\rangle$, аналогично тому, как мы это делали в случае осциллятора. Из (165) следует, что:

$$\begin{aligned} |j, j-1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2j}} \hat{j}_- |j, j\rangle; \\ |j, j-2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{(2j-1)2}} \hat{j}_- |j, j-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2j(2j-1)2!}} \hat{j}_-^2 |j, j\rangle; \\ |j, j-3\rangle &= \frac{1}{\sqrt{(2j-2)3}} \hat{j}_- |j, j-2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2j(2j-1)(2j-2)3!}} \hat{j}_-^3 |j, j\rangle. \end{aligned}$$

и т.д.. Полученные соотношения можно использовать для нахождения произвольного состояния

$$|j, m\rangle = \sqrt{\frac{(j+m)!}{(2j)!(j-m)!}} \hat{j}_-^{j-m} |j, j\rangle \quad (166)$$

по индукции.

В принципе этими выражениями можно пользоваться, чтобы вычислять различные физические величины. Однако на одной из последующих лекций в этом семестре мы найдем волновые функции, которые отвечают этим векторам состояний. Данные волновые функции называются сферическим гармониками.

2. Обсудим теперь некоторые конкретные примеры представлений более детально. Случай $j = 0$ отвечает скалярному представлению алгебры $so(3)$. Оно тривиальное, поскольку вообще никак не преобразуется при вращениях и содержит одно состояние $|0, 0\rangle$.

Первый нетривиальный случай отвечает $j = 1/2$ и имеет важный и глубокий физический смысл. В этом случае базис представления состоит из двух векторов:

$$|+\rangle \equiv \left| j = 1/2, m = +1/2 \right\rangle, \quad |-\rangle \equiv \left| j = 1/2, m = -1/2 \right\rangle.$$

Произвольное состояние в пространстве, в котором действует данное представление, имеет вид:

$$\chi \equiv a |+\rangle + b |-\rangle \equiv a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + b \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}. \quad (167)$$

Такое состояние в квантовой механике называется двухкомпонентным или трехмерным нерелятивистским спинором. В следующем семестре мы познакомимся с четырехкомпонентным или четырехмерным релятивистским спинором. В последней формуле мы привели некоторые из стандартных записей спиноров, которые используются в нерелятивистской квантовой механике. Иногда у спиноров также явно пишут индекс, χ_α , $\alpha = \overline{1, 2}$: $\chi_1 = a$, $\chi_2 = b$.

Из соотношений, которые были получены в предыдущем разделе этой лекции в частности следует, что

$$\hat{j}_3 |\pm\rangle = \pm 1/2 |\pm\rangle, \quad \hat{j}_\pm |\pm\rangle = 0, \quad \hat{j}_\pm |\mp\rangle = |\pm\rangle.$$

Поэтому операторы \hat{j}_3 и \hat{j}_\pm действуют на спиноры χ следующим образом:

$$\begin{aligned} \hat{j}_3 \chi &= \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{pmatrix} \chi, \\ \hat{j}_+ \chi &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \chi, \quad \hat{j}_- \chi = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \chi. \end{aligned} \quad (168)$$

В результате в обсуждаемой ситуации квантово механические операторы задаются как обычные 2×2 матрицы. В частности, вспоминая, что $\hat{j}_\pm = \hat{j}_1 \pm i \hat{j}_2$, из (168) можно найти явный вид всех трех операторов \hat{j}_k :

$$\hat{j} = \frac{\hat{\sigma}}{2}, \quad \hat{M} \equiv \hat{s} = \hbar \frac{\hat{\sigma}}{2},$$

где вектор $\hat{\sigma}$ из матриц/операторов определяется как $\hat{\sigma} \equiv (\hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2, \hat{\sigma}_3)$. Здесь $\hat{\sigma}_k$, $k = \overline{1, 3}$ называются матрицами Паули и имеют вид:

$$\hat{\sigma}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (169)$$

как следует из (168). Величина $\hat{s} = \hbar \hat{\sigma}/2$ называется оператором спина $1/2$.

Не очень сложно показать, что матрицы Паули удовлетворяют следующему соотношению:

$$\hat{\sigma}_j \hat{\sigma}_k = \delta_{jk} \hat{\mathbf{1}} + i \epsilon_{jkn} \hat{\sigma}_n, \quad (170)$$

где

$$\hat{\mathbf{1}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (171)$$

— единичный оператор в обсуждаемом представлении. Соотношение (170) можно установить прямой проверкой, например, убедившись, что

$$\hat{\sigma}_k^2 = \hat{\mathbf{1}}, \quad k = \overline{1, 3}.$$

Затем перемножая попарно различные матрицы (169), можно установить верность соотношения (170) для $j \neq k$.

Из (170) следует, что $\hat{j}_k = \hat{\sigma}_k/2$ удовлетворяют алгебре (156). Помимо этого, из (170) также следует важное для обсуждения в следующем семестре соотношение:

$$\{\hat{\sigma}_j, \hat{\sigma}_k\} \equiv \hat{\sigma}_j \hat{\sigma}_k + \hat{\sigma}_k \hat{\sigma}_j = 2 \delta_{jk} \hat{\mathbf{1}}.$$

На будущее стоит запомнить, что это равенство называется алгеброй Клиффорда в трех измерениях. Наконец, прямым вычислением можно увидеть, что

$$\text{Tr} \hat{\sigma}_k = 0, \quad k = \overline{1, 3}.$$

Рассмотрим теперь представление $j = 1$. Базис в этом случае состоит из векторов:

$$|1, +1\rangle, \quad |1, 0\rangle, \quad |1, -1\rangle.$$

Произвольный вектор в пространстве этого представления имеет вид:

$$A_+ |1, +1\rangle + A_0 |1, 0\rangle + A_- |1, -1\rangle = \vec{A}. \quad (172)$$

Из (165) следует, что в случае $j = 1$, $m = 0, \pm 1$ генераторы алгебры действуют на такие векторы, как матрицы, которые связаны сопряжением с известными нам уже с прошлой лекции матричными операторами \hat{l} . Действительно, не трудно убедиться, используя (165), что

$$\hat{j}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

В тоже самое время матрица

$$\hat{l}_3 = \begin{pmatrix} 0 & i & 0 \\ -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

из (141) имеет следующие собственные значения $\lambda = 0, \pm 1$. То есть всегда можно подобрать такую ортогональную матрицу g , что будет верно соотношение $\hat{j}_3 = g \hat{l}_3 g^T$. Эту же матрицу можно использовать для установления связи $\hat{j}_{1,2} = g \hat{l}_{1,2} g^T$. Таким образом, базис в (172) можно повернуть так, что в новом базисе операторы \hat{j}_k примут вид матриц \hat{l}_k .

3. Есть несколько причин, по которым спинорное представление алгебры $so(3)$ не имеет классического аналога. Дело в том, что среднее от квадрата оператора момента импульса по рассматриваемым нами состояниям равно:

$$\langle \hat{M}^2 \rangle = \hbar^2 j(j+1).$$

Как мы знаем классический предел отвечает $\hbar \rightarrow 0$. Поэтому конечный классический момент импульса имеют состояния с $j \rightarrow \infty$.

Тем не менее очевидно, что представление $j = 1$ в качестве классического аналога имеет обыкновенный вектор, если забыть про понятия измерения, суперпозиции и вероятностную интерпретацию квантовой механики. В частности у интенсивных электромагнитных волн есть поляризация, которая в некотором смысле является классическим аналогом спина фотона. Более подробно, что такое спин безмассовой релятивистской частицы мы обсудим в следующем семестре. Сейчас же заметим, что отличие спина от классической поляризации заключается в том, что интенсивный свет может иметь только

поляризацию определенного типа. В то время как спин фотона может находиться, например, в суперпозиции двух различных спиновых состояний вроде линейной поляризации, например, $\alpha |1, +1\rangle + \beta |1, 1\rangle$.

В то же самое время, спинорное представление $j = 1/2$ очень сильно отличается от обычных объектов, которые рассматриваются при обсуждении алгебры или группы вращений.

Действительно, посмотрим как преобразуются при вращениях на конечные углы векторы представлений $j = 1$ и $j = 1/2$. При повороте на конечный угол вектор (172) преобразуется следующим образом:

$$\vec{A}' = e^{i\varphi \hat{j}_z} \vec{A},$$

как мы обсудили на прошлой лекции. В частности при повороте на полный угол $\varphi = 2\pi$ вокруг оси z базисные вектора представления $j = 1$ преобразуются как:

$$e^{i2\pi \hat{j}_z} |1, +1\rangle = e^{i2\pi(+1)} |1, +1\rangle = |1, +1\rangle;$$

$$e^{i2\pi \hat{j}_z} |1, 0\rangle = e^{i2\pi(0)} |1, 0\rangle = |1, 0\rangle;$$

$$e^{i2\pi \hat{j}_z} |1, -1\rangle = e^{i2\pi(-1)} |1, -1\rangle = |1, -1\rangle.$$

То есть при полном повороте вектор \vec{A} не меняется:

$$e^{i2\pi \hat{j}_z} \vec{A} = \vec{A},$$

как и должно быть в случае обычного вектора.

Посмотрим теперь что при таком повороте происходит со спинором χ . При повороте на произвольный конечный угол спинор преобразуется по закону:

$$\chi' = e^{i\frac{\varphi \hat{\sigma}_z}{\hbar}} \chi = e^{i\varphi \frac{\hat{\sigma}_z}{2}} \chi.$$

В частности при повороте на угол $\varphi = 2\pi$ вокруг оси z базисные векторы представления $j = 1/2$ преобразуются как:

$$e^{i2\pi \frac{\hat{\sigma}_z}{2}} |\pm\rangle = e^{\pm i\pi} |\pm\rangle = -|\pm\rangle.$$

В результате, при повороте на полный угол произвольный спинор меняет знак:

$$e^{i2\pi \frac{\hat{\sigma}_z}{2}} \chi = -\chi,$$

что удивительным образом отличается от векторного представления и не имеет классических аналогов.

Оказывается, что матрица поворота спинора на конечный угол,

$$g = e^{i\varphi \frac{\hat{\sigma}}{2}},$$

принадлежит уже группе $SU(2)$, а не $SO(3)$. Простейшим представлением такой группы как раз и являются приведенные здесь операторы \hat{O} — унитарные (U) матрицы 2×2 с единичным детерминантом (S). У групп $SU(2)$ и $SO(3)$ совпадают алгебры, как мы и убедились выше. Однако сами группы отличаются. Фактически мы только что показали, что каждому элементу группы $SO(3)$ отвечает два элемента группы $SU(2)$, которые отличаются друг от друга на знак \pm , отвечающий полному повороту. Говорят, что группа $SU(2)$ накрывает группу $SO(3)$ дважды а при этом их алгебры изоморфны $so(3) \cong su(2)$.

Наконец для дальнейшего полезно обсудить еще одно свойство, некоторые аналоги которого мы уже обсуждали на предыдущей лекции. Рассмотрим следующую величину:

$$\vec{F} = \chi_1^+ \hat{s} \chi_2,$$

где χ^+ — это сопряженный спинор, то есть строка с комплексно сопряженными компонентами к χ ; χ_1 и χ_2 — два произвольных спинора. В результате величина \vec{F} не несет индексов, нумерующих компоненты спиноров, какие имеются у χ_α и $\hat{\sigma} = \|\sigma_{\alpha\beta}\|$. Однако у \vec{F} очевидно есть векторные индексы F_k , $k = \bar{1}, \bar{3}$, как у вектора \hat{s} .

Сейчас мы покажем, что \vec{F} действительно преобразуется как вектор при вращениях. Рассмотрим преобразование этой величины при инфинитезимальном вращении:

$$\begin{aligned} F'_n &\equiv (\chi'_1)^+ \hat{s}_n \chi'_2 = \chi_1^+ e^{-i\varphi_k \frac{\hat{\sigma}_k}{2}} \left(\hbar \frac{\hat{\sigma}_n}{2} \right) e^{-i\varphi_k \frac{\hat{\sigma}_k}{2}} \chi_2 \approx \\ &\approx \chi_1^+ \left(1 - i\varphi_k \frac{\hat{\sigma}_k}{2} \right) \left(\hbar \frac{\hat{\sigma}_n}{2} \right) \left(1 + i\varphi_k \frac{\hat{\sigma}_k}{2} \right) \chi_2 \approx \\ &\approx \frac{\hbar}{2} \chi_1^+ \left(\hat{\sigma}_n + i\varphi_k \left[\frac{\hat{\sigma}_n}{2}, \frac{\hat{\sigma}_k}{2} \right] \right) \chi_2 = \\ &= F_n + \epsilon_{nkl} \varphi_k F_m = \left(\hat{\mathbf{1}} - i\vec{\varphi} \vec{\hat{l}} \right)_{nm} F_m, \end{aligned}$$

где мы воспользовались коммутационными соотношениями для матриц Паули и определением элементов генераторов алгебры $\vec{\hat{l}}$ через антисимметричный тензор ϵ_{nkl} , которое обсуждалось на прошлой лекции. Таким образом, видно что при инфинитезимальных поворотах \vec{F}

действительно преобразуется как вектор. Заметим, что здесь возникают именно матричные операторы \hat{l}_k , а не \hat{j}_k в базе (172).

Переходя от поворотов на маленькие углы к поворотам на конечные, точно также, как мы это делали на прошлой лекции, получаем

$$\vec{F}' = e^{i\vec{\varphi}\hat{l}} \vec{F},$$

что и требовалось показать.

В свете того, что вектор \vec{F} строится как произведение двух спиноров, иногда говорят, что спинорное представление алгебры $so(3)$ в некотором смысле является квадратным корнем из векторного.

4. Обсудим наконец физический смысл спинороного представления. Орбитальный момент или момент импульса $\vec{M} = \hbar \vec{L}$ связан с вращением кванта. Если квант несет заряд, то при орбитальном вращении создается магнитный момент, как мы знаем из курса теории поля или из общей физики. Во внешнем постоянном магнитном поле такой магнитный момент будет совершать прецессию по закону определяемому из классического уравнения Лармора:

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = -\frac{e}{2mc} [\vec{B} \times \vec{M}], \quad (173)$$

где $\vec{\mu} = \frac{e}{2mc} \vec{M}$ является магнитным моментом, связанным с классическим моментом импульса \vec{M} . По теореме Эренфеста такое уравнение как (173) должно следовать из усреднения какого-то квантового уравнения на \hat{M} , так как $\vec{M} \longleftrightarrow \langle \hat{M} \rangle$. При этом, как мы знаем, зависимость от времени любого оператора в квантовой механике определяется уравнением Гейзенберга:

$$\frac{d\hat{M}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_M, \hat{M}], \quad (174)$$

где \hat{H}_M — гамильтониан, определяющий динамику магнитного момента во внешнем магнитном поле. Наша задача теперь найти какой он должен иметь вид, чтобы из (174) следовало (173) при усреднении. Сейчас мы убедимся, что

$$\hat{H}_M = -\frac{e}{2mc} (\vec{B}, \hat{M}). \quad (175)$$

Действительно, из коммутационных соотношений

$$\left[\hat{M}_j, \hat{M}_k \right] = i \hbar \epsilon_{jkn} \hat{M}_n,$$

следует, что

$$\begin{aligned} \left[\hat{H}_M, \hat{M}_k \right] &= -\frac{e}{2mc} \left[B_j \hat{M}_j, \hat{M}_k \right] = \\ &= \frac{e}{2mc} B_j \left[\hat{M}_j, \hat{M}_k \right] = -\frac{e i \hbar}{2mc} B_j \epsilon_{jkn} \hat{M}_n. \end{aligned}$$

Подставляя этот результат в (174), мы получаем, что

$$\frac{d\hat{M}}{dt} = -\frac{e}{2mc} \left[\vec{B} \times \hat{M} \right], \quad (176)$$

где квадратные скобки определяют векторное произведение, а не коммутатор. Очевидно, что после усреднения это уравнение приведет к (173).

Все что мы говорили в этом разделе до сих пор относилось к магнитному моменту, возникающему из-за орбитального вращения заряженной частицы. Однако, оказывается, что даже покоящийся электрон несет магнитный момент, отвечающий его спину $1/2$. То есть такой внутренний магнитный момент не связан ни с каким вращением. Это свойство электрона следует из эксперимента Штерна–Герлаха. Соответствующий гамильтониан имеет вид:

$$\hat{H}_s = -\frac{e}{mc} \left(\vec{B}, \hat{s} \right), \quad (177)$$

и отличается от (175) на двойку, что следует из эксперимента.

Эти наблюдения говорят о том, что гамильтониан, описывающий движение электрона во внешнем магнитном поле, содержит следующие вклады:

$$\hat{H} = -\hbar^2 \frac{\Delta}{2m} + V(\vec{x}) - \frac{e}{2mc} \left(\vec{B}, \hat{M} + 2\hat{s} \right), \quad (178)$$

а волновая функция, соответственно несет еще и спинорные индексы: $\Psi_\alpha(\vec{x}, t)$. Однако во всех задачах нерелятивистской квантовой механики нашего курса волновую функцию электрона можно представить как произведение: $\Psi_\alpha(\vec{x}, t) = \chi_\alpha \Psi(\vec{x}, t)$. То есть прецессия спина и

движение в пространстве в нерелятивистском случае происходят независимо.

В релятивистском случае, как мы увидим в следующем семестре, ситуация будет иная. Также в следующем семестре мы получим гамильтонианы (175), (177) и (178) аналитически из фундаментальных соображений, то есть постулируя не (178), а более фундаментальные законы.

В представлении современных теорий, вроде теории струн, которые еще не подтверждены экспериментально, спин корпускул возникает из их многомерной структуры. То есть кванты являются так сказать ростками протяженных объектов вроде струн или мембран. В таком контексте спин возникает совершенно естественно, так как очевидно, что протяженный объект, в отличие от корпускулярного, преобразуется при вращениях.

Задачи.

I. Найдите матрицу g , которая поворачивает базис (172) так, что операторы \hat{j}_k принимают вид матриц \hat{l}_k .

Х. Лекция. *Тождественность частиц, бозоны и фермионы, волновые функции двух бозонов и фермионов, определитель Слеттера, спиновые векторы состояний для двух частиц со спином $1/2$, примеры реализации теоремы Неттер в квантовой механике, принцип наименьшего действия и стационарное уравнение Шредингера в криволинейных координатах, оператор Лапласа на двумерной сфере.*

1. Эта лекция своего рода интермедия — коллекция нескольких различных, но все же некоторым образом связанных друг с другом, сюжетов. Начнем мы с обсуждения так называемого свойства тождественности частиц.

Помимо взаимодействия с магнитным полем, наличие спина у квантов приводит и к другим важным следствиям. Дело в том, что в классической механике мы можем различать частицы, если следить за каждой отдельной траекторией. Это в принципе возможно, хотя нередко технически и очень сложно реализовать. В квантовой механике это в принципе не возможно из-за существования суперпозиций состояний, отвечающих движению сразу по нескольким траекториям. Поэтому в квантовой теории неразличимость частиц играет принципиальное значение. Фактически квантовая теория утверждает, что все элементарные частицы одного типа (например, электроны) совершенно не отличимы друг от друга.

К каким последствиям это приводит? Рассмотрим систему из двух тождественных частиц, гамильтониан которой может, например, иметь вид:

$$\hat{H}_{12} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} + V(\vec{x}_1) + V(\vec{x}_2) + \Delta V(\vec{x}_1 - \vec{x}_2). \quad (179)$$

Видно, что этот гамильтониан коммутирует с оператором перестановки частиц \hat{P}_{12} :

$$\left[\hat{H}_{12}, \hat{P}_{12} \right] = 0, \quad \hat{P}_{12} \psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \equiv \psi(\vec{x}_2, \vec{x}_1).$$

Поэтому можно искать собственные функции \hat{H}_{12} среди собственных состояний \hat{P}_{12} :

$$\hat{P}_{12} \psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \lambda \psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2).$$

Но так как $\hat{P}_{12}^2 = \hat{\mathbf{1}}$, то $\lambda^2 = 1$ и $\lambda = \pm 1$.

Теорема Паули “О связи спина со статистикой”, которая доказывается в квантовой теории поля, утверждает, что $\lambda = +1$ отвечают так называемые бозоны — частицы с целым спином $s = 0, 1, 2, \dots$; а $\lambda = -1$ отвечают так называемые фермионы — частицы с полуцелым спином $s = 1/2, 3/2, 5/2, \dots$. Примером бозона является фотон²². Примером фермиона является электрон. Таким образом можно записать $\lambda = (-1)^{2s}$, где s — спин тождественных частиц.

В результате бозоны и фермионы отличаются по своим свойствам относительно перестановок пар частиц. Это приводит к двум принципиально разным статистикам — Бозе–Эйнштейна и Ферми–Дирака.

Далее, если в (179) взаимодействие между частицами отсутствует или пренебрежимо мало, $\Delta V(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) = 0$, то решение соответствующего стационарного уравнения Шредингера можно очевидно искать в виде произведения:

$$\psi_{n_1, s_1; n_2, s_2}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \psi_{n_1, s_1}(\vec{x}_1) \psi_{n_2, s_2}(\vec{x}_2), \quad (180)$$

где $s_{1,2}$ — спиновые квантовые числа частиц (вроде $j = s$ и m), а $n_{1,2}$ — любые другие квантовые числа. Это могут быть, например, импульсы, если частицы свободны $V = 0$.

Однако такая волновая функция как (180) не является собственной для оператора \hat{P}_{12} . Действительно, ведь вторая частица с таким же успехом может находиться в состоянии под номером 1, а первая — в состоянии под номером 2. Поэтому нужными свойствами обладает волновая функция вида:

$$\psi_{n_1, s_1; n_2, s_2}^{(\pm)}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_{n_1, s_1}(\vec{x}_1) \psi_{n_2, s_2}(\vec{x}_2) \pm \psi_{n_1, s_1}(\vec{x}_2) \psi_{n_2, s_2}(\vec{x}_1) \right],$$

где знак “ \pm ” в этом выражении отвечает $\lambda = \pm 1$ — бозонам и фермионам, соответственно. То есть этот знак зависит от спина частиц. А фактор $1/\sqrt{2}$ необходим для правильной нормировки полной волновой функции $\psi_{n_1, s_1; n_2, s_2}^{(\pm)}$ при условии, что каждая отдельная одночастичная волновая функция $\psi_{n, s}$ правильно нормирована.

²²Грубо говоря, спин фотона равен единице. Однако точно, что такое спин для релятивистской безмассовой частицы мы обсудим в следующем семестре. Проблема в том, что фотон не может покоиться и поэтому для него нельзя факторизовать волновую функцию на спиновую и координатную части, как это делалось для электрона на прошлой лекции.

Для фермионов такую волновую функцию можно переписать как:

$$\psi_{n_1, s_1; n_2, s_2}^{(-)}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \det \begin{pmatrix} \psi_{n_1, s_1}(\vec{x}_1) & \psi_{n_2, s_2}(\vec{x}_1) \\ \psi_{n_1, s_1}(\vec{x}_2) & \psi_{n_2, s_2}(\vec{x}_2) \end{pmatrix}.$$

Теперь видно, что если состояния обоих фермионов совпадают, то есть если $n_1 = n_2$ и равны проекции спинов, то $\psi_{n_1, s_1; n_2, s_2}^{(-)}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = 0$. Вероятность такого состояния равна нулю и мы получаем так называемый принцип запрета Паули.

Таким образом, даже между казалось бы невзаимодействующими фермионами, $\Delta V(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) = 0$, имеется так называемое обменное взаимодействие. Иными словами, фермионы “чувствуют” присутствие друг друга из-за свойств их статистики. Имеется своего рода отталкивание, которое в частности приводит к тому, что атомы стабильны, ведь на одной оболочке не может находиться произвольное число электронов.

В то же самое время, вид волновой функции для бозонов $\psi_{n_1, s_1; n_2, s_2}^{(+)}$ говорит о том, что им, наоборот, скорее выгодно находиться в одном и том же состоянии. В результате такое поведение приводит к возможности создания лазера, явлениям сверхтекучести и сверхпроводимости, а также и к механизму Хиггса.

В случае произвольного числа фермионов, N , знак полной волновой функции меняется при перестановке любой пары из них. Поэтому полную волновую функцию можно представить как:

$$\psi_{n_1, s_1; \dots; n_N, s_N}^{(-)}(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \begin{pmatrix} \psi_{n_1, s_1}(\vec{x}_1) & \dots & \psi_{n_N, s_N}(\vec{x}_1) \\ \dots & \dots & \dots \\ \psi_{n_1, s_1}(\vec{x}_N) & \dots & \psi_{n_N, s_N}(\vec{x}_N) \end{pmatrix}.$$

Выражение с правой стороны этого равенства называется определителем Слеттера.

Для N бозонов же получается следующая волновая функция:

$$\psi_{n_1, s_1; \dots; n_N, s_N}^{(+)}(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\{P\}} \psi_{n_{P(1)}, s_{P(1)}}(\vec{x}_1) \dots \psi_{n_{P(N)}, s_{P(N)}}(\vec{x}_N),$$

где $\{P\}$ — это всевозможные перестановки чисел от 1 до N , а $P(k)$ — это k -й элемент в перестановке P .

2. Изучим теперь более детально пару конкретных примеров нерелятивистских частиц со спином. Как уже говорилось на прошлой лекции, в нерелятивистском случае волновые функции частиц факторизуются на координатную и спиновую части:

$$\psi_{n,s}(\vec{x}) = \chi_s \psi_n(\vec{x}),$$

где χ_s характеризует спиновые квантовые числа и в этом разделе не обязательно является спинором, если частица имеет спин отличный от $1/2$. Надеемся, что это не приведет к путанице. Как мы увидим в следующем семестре в релятивистском случае такой факторизации на спиновую и координатную части не происходит.

Из-за факторизации базисные функции двухчастичных состояний, которые мы привели в предыдущем разделе этой лекции, имеют вид:

$$\psi_{n_1, s_1; n_2, s_2}^{(\pm)}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_{n_1}(\vec{x}_1) \psi_{n_2}(\vec{x}_2) \chi_{s_1}(1) \chi_{s_2}(2) \pm \psi_{n_1}(\vec{x}_2) \psi_{n_2}(\vec{x}_1) \chi_{s_1}(2) \chi_{s_2}(1) \right], \quad (181)$$

где, например, $\chi_{s_1}(2)$ описывает состояние второй частицы с квантовыми числами s_1 . Остальные обозначения имеют аналогичный смысл. Из этого выражения вроде видно, что в случае двух частиц в общей ситуации факторизации на спиновую и координатную части не происходит, так как $\chi_{s_1}(1) \chi_{s_2}(2) \neq \chi_{s_1}(2) \chi_{s_2}(1)$.

Рассмотрим волновую функцию (181) более детально на конкретных примерах. В случае бозонов со спином ноль χ_s — это просто число, так как состояние одно. Поэтому все факторизуется тривиальным образом.

В случае спина $1/2$ базис состоит из двух спиноров $|\pm\rangle$. Поэтому в системе из двух частиц мы получаем четыре состояния:

$$|+\rangle|+\rangle, \quad |+\rangle|-\rangle, \quad |-\rangle|+\rangle, \quad |-\rangle|-\rangle, \quad (182)$$

которые можно использовать как базисные спиновые вектора в обсуждаемой системе двух частиц. Тогда для первого, $|+\rangle|+\rangle$, и последнего, $|-\rangle|-\rangle$, случаев векторы спиновых состояний симметричны и в выражении (181) их можно вынести за скобки:

$$\psi_{n_1, s_1; n_2, s_2}^{(-)}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \Phi_{n_1, n_2}^{(-)}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) |\pm\rangle|\pm\rangle$$

где

$$\Phi_{n_1, n_2}^{(-)}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_{n_1}(\vec{x}_1) \psi_{n_2}(\vec{x}_2) - \psi_{n_1}(\vec{x}_2) \psi_{n_2}(\vec{x}_1) \right] \quad (183)$$

— антисимметризованная координатная часть. Полная волновая функция $\psi_{n_1, s_1; n_2, s_2}^{(-)}(\vec{x}_1, \vec{x}_2)$, как видно, является антисимметричной, что и должно быть для пары частиц со спином $1/2$.

Какой физический смысл имеют спиновые состояния $|+\rangle|+\rangle$ и $|-\rangle|-\rangle$? Чтобы ответить на этот вопрос, подействуем на такие состояния квадратом оператора полного спина:

$$\hat{s}^2 \equiv \left(\hat{s}_1 + \hat{s}_2 \right)^2,$$

где $\hat{s}_{1,2} = \hbar \frac{\hat{\sigma}}{2}$ — это спиновые операторы одного и того же вида, каждый из которых действует в своем гильбертовом пространстве, то есть либо только на первый, \hat{s}_1 , либо же — на второй, \hat{s}_2 , спин. Как формально математически записать такие операторы мы обсудим в следующем семестре. Сейчас же неформально можно пользоваться следующими правилами:

$$\hat{s}_1^2 |\pm\rangle |\pm\rangle \equiv \left(\frac{\hbar^2}{4} \hat{\sigma}^2 |\pm\rangle \right) |\pm\rangle = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) |\pm\rangle |\pm\rangle = \frac{3}{4} \hbar^2 |\pm\rangle |\pm\rangle;$$

$$\hat{s}_2^2 |\pm\rangle |\pm\rangle \equiv |\pm\rangle \left(\frac{\hbar^2}{4} \hat{\sigma}^2 |\pm\rangle \right) = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) |\pm\rangle |\pm\rangle = \frac{3}{4} \hbar^2 |\pm\rangle |\pm\rangle;$$

$$\hat{s}_{1z} |\pm\rangle |\pm\rangle \equiv \left(\frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_3 |\pm\rangle \right) |\pm\rangle = \pm \frac{\hbar}{2} |\pm\rangle |\pm\rangle;$$

$$\hat{s}_{2z} |\pm\rangle |\pm\rangle \equiv |\pm\rangle \left(\frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_3 |\pm\rangle \right) = \pm \frac{\hbar}{2} |\pm\rangle |\pm\rangle;$$

$$\hat{s}_{1+} |+\rangle |\pm\rangle \equiv \left(\frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_+ |+\rangle \right) |\pm\rangle = 0;$$

$$\hat{s}_{2+} |\pm\rangle |+\rangle \equiv |\pm\rangle \left(\frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_+ |+\rangle \right) = 0;$$

$$\hat{s}_{1+} |-\rangle |\pm\rangle \equiv \left(\frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_+ |-\rangle \right) |\pm\rangle = \hbar |+\rangle |\pm\rangle;$$

$$\begin{aligned}
\hat{s}_{2+} |\pm\rangle |-\rangle &\equiv |\pm\rangle \left(\frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_+ |-\rangle \right) = \hbar |\pm\rangle |+\rangle; \\
\hat{s}_{1-} |-\rangle |\pm\rangle &\equiv \left(\frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_- |-\rangle \right) |\pm\rangle = 0; \\
\hat{s}_{2-} |\pm\rangle |-\rangle &\equiv |\pm\rangle \left(\frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_- |-\rangle \right) = 0; \\
\hat{s}_{1-} |+\rangle |\pm\rangle &\equiv \left(\frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_- |+\rangle \right) |\pm\rangle = \hbar |-\rangle |\pm\rangle; \\
\hat{s}_{2-} |\pm\rangle |+\rangle &\equiv |\pm\rangle \left(\frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_- |+\rangle \right) = \hbar |\pm\rangle |-\rangle.
\end{aligned}$$

Из этих соотношений в частности сразу следует, что

$$\hat{s}_z |\pm\rangle |\pm\rangle \equiv (\hat{s}_{1z} + \hat{s}_{2z}) |\pm\rangle |\pm\rangle = \pm \hbar |\pm\rangle |\pm\rangle. \quad (184)$$

А если воспользоваться тем, что

$$\begin{aligned}
\hat{s}^2 &\equiv \hat{s}_1^2 + \hat{s}_2^2 + 2 \left(\hat{s}_1, \hat{s}_2 \right) = \\
&= \hat{s}_1^2 + \hat{s}_2^2 + 2 (\hat{s}_{1x} \hat{s}_{2x} + \hat{s}_{1y} \hat{s}_{2y} + \hat{s}_{1z} \hat{s}_{2z}) \\
&= \hat{s}_1^2 + \hat{s}_2^2 + \hat{s}_{1+} \hat{s}_{2-} + \hat{s}_{1-} \hat{s}_{2+} + 2 \hat{s}_{1z} \hat{s}_{2z},
\end{aligned}$$

то из приведенных соотношений можно вывести, что

$$\hat{s}^2 |\pm\rangle |\pm\rangle = 2 \hbar^2 |\pm\rangle |\pm\rangle = \hbar^2 1(1+1) |\pm\rangle |\pm\rangle. \quad (185)$$

Из (184) и (185) видно, что состояния $|\pm\rangle |\pm\rangle$ отвечают полному спину $s = 1$ с проекциями на ось z равными $m = +1$ и $m = -1$, соответственно. То есть,

$$|\pm\rangle |\pm\rangle = \left| s = 1, m = \pm 1 \right\rangle \equiv |1, \pm 1\rangle.$$

Пусть теперь спиновые состояния различаются, то есть:

$$\begin{aligned}
&\psi_{n_1, s_1; n_2, s_2}^{(-)}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_{n_1}(\vec{x}_1) \psi_{n_2}(\vec{x}_2) |+\rangle |-\rangle - \psi_{n_1}(\vec{x}_2) \psi_{n_2}(\vec{x}_1) |-\rangle |+\rangle \right].
\end{aligned}$$

Однако, аналогично $|\pm\rangle|\pm\rangle$ из состояний $|\pm\rangle|\mp\rangle$ можно построить вектора с целым полным спином. Действительно, используя приведенные выше соотношения для действия операторов спина на рассматриваемые состояния, можно показать, что

$$|s = 1, m = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|+\rangle|-\rangle + |-\rangle|+\rangle \right], \quad (186)$$

то есть это недостающее состояние с $s = 1$ и нулевой проекцией полного спина на ось z . А вот состояние:

$$|s = 0, m = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|+\rangle|-\rangle - |-\rangle|+\rangle \right], \quad (187)$$

отвечает полному спину ноль. В этом можно убедиться прямой проверкой:

$$\begin{aligned} \hat{s}^2 \left[\frac{|+\rangle|-\rangle + |-\rangle|+\rangle}{\sqrt{2}} \right] &= 2\hbar^2 \left[\frac{|+\rangle|-\rangle + |-\rangle|+\rangle}{\sqrt{2}} \right]; \\ \hat{s}_z \left[\frac{|+\rangle|-\rangle + |-\rangle|+\rangle}{\sqrt{2}} \right] &= 0; \\ \hat{s}^2 \left[\frac{|+\rangle|-\rangle - |-\rangle|+\rangle}{\sqrt{2}} \right] &= 0. \end{aligned} \quad (188)$$

Таким образом, имея две частицы со спином $1/2$ можно построить два составных бозона — один со спином единица (три состояния, отвечающие трем значениям проекции спина на ось z) и один со спином ноль (одно состояние).

С математической точки зрения мы взяли произведение двух неприводимых представлений и разложили его в сумму двух неприводимых представлений. Здесь мы увидели лишь простейший пример обсуждаемой ситуации. В следующем семестре мы обсудим сложение моментов, а заодно и произведение произвольных представлений алгебры $so(3)$ и их разложение по неприводимым же представлениям.

Итак, используя (186) и (187), можно переписать

$$\begin{aligned} |+\rangle|-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|1, 0\rangle + |0, 0\rangle \right] \\ |-\rangle|+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|1, 0\rangle - |0, 0\rangle \right]. \end{aligned}$$

А поэтому

$$\psi_{n_1, s_1; n_2, s_2}^{(-)}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\Phi_{n_1, n_2}^{(-)}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) |1, 0\rangle + \Phi_{n_1, n_2}^{(+)}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) |0, 0\rangle \right],$$

где $\Phi_{n_1, n_2}^{(-)}(\vec{x}_1, \vec{x}_2)$ определена в (183), а

$$\Phi_{n_1, n_2}^{(+)}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_{n_1}(\vec{x}_1) \psi_{n_2}(\vec{x}_2) + \psi_{n_1}(\vec{x}_2) \psi_{n_2}(\vec{x}_1) \right].$$

При этом видно, что полная волновая функция антисимметрична. Она является суперпозицией двух векторов состояний, отвечающих полным спинам единица и ноль. У состояния $s = 1$ спиновые векторы симметричны, а координатные антисимметричны. В то же самое время, у состояния $s = 0$ координатная волновая функция симметрична, а спиновая антисимметрична.

Все это можно обобщить на случай произвольного числа частиц с произвольными спинами. При этом четность полной волновой функции определяется четностью числа фермионов, входящих в состав состояния. Действительно, перестановка двух одинаковых сложных частиц эквивалентна перестановке нескольких пар одинаковых элементарных их составляющих. Например, мы только, что увидели, что частица составленная из двух фермионов обязательно удовлетворяет статистике Бозе.

3. Обсудим теперь некоторые примеры применения теоремы Неттер в квантовой механике. То есть мы поговорим о законах сохранения, которые следует из симметрий.

Начнем с простого примера. Пусть гамильтониан и, соответственно, уравнение Шредингера не меняются при трансляциях в пространстве на произвольный вектор \vec{a} . (Заметим, что в периодическом потенциале \vec{a} не произвольный, а равен периоду решетки.) Подействуем слева оператором трансляции на обе стороны уравнения Шредингера:

$$e^{\frac{i\hat{p}\vec{a}}{\hbar}} \hat{H} \psi(\vec{x}) = e^{\frac{i\hat{p}\vec{a}}{\hbar}} E \psi(\vec{x}).$$

Так как оператор трансляции унитарный, то

$$e^{\frac{i\hat{p}\vec{a}}{\hbar}} \hat{H} e^{-\frac{i\hat{p}\vec{a}}{\hbar}} e^{\frac{i\hat{p}\vec{a}}{\hbar}} \psi(\vec{x}) = E \psi(\vec{x} + \vec{a}),$$

или

$$e^{\frac{i\hat{p}\vec{a}}{\hbar}} \hat{H} e^{-\frac{i\hat{p}\vec{a}}{\hbar}} \psi(\vec{x} + \vec{a}) = E \psi(\vec{x} + \vec{a}).$$

Так как мы предположили, что уравнение Шредингера не меняется при трансляциях, то

$$\hat{H} = e^{\frac{i\hat{p}\vec{a}}{\hbar}} \hat{H} e^{-\frac{i\hat{p}\vec{a}}{\hbar}}, \quad (189)$$

и, соответственно, волновая функция при сдвиге может меняться только на постоянную фазу:

$$\psi(\vec{x} + \vec{a}) = e^{i\phi} \psi(\vec{x}).$$

Соотношение (189) фактически означает, что оператор трансляции можно пронести через гамильтониан. То есть эти два оператора коммутируют. Действительно, увидим это явно, рассмотрев инфинитезимально маленькие значения \vec{a} и разлагая все функции от \vec{a} лишь до линейного порядка по этому вектору:

$$\hat{H} \approx \left(1 + \frac{i\hat{p}\vec{a}}{\hbar}\right) \hat{H} \left(1 - \frac{i\hat{p}\vec{a}}{\hbar}\right) \approx \hat{H} + \frac{i\vec{a}}{\hbar} [\hat{p}, \hat{H}].$$

Поэтому в линейном порядке по \vec{a} из (189) мы получаем, что $[\hat{p}, \hat{H}] = 0$ и, как следствие, закон сохранения импульса: $d\hat{p}/dt = 0$.

Как и в классической механике, сохранение импульса следует из инвариантности относительно пространственных трансляций. В случае одной частицы это верно только для свободного движения, так как для любого нетривиального потенциала $[\hat{p}, V(\vec{x})] \neq 0$. И действительно, именно в случае свободной частицы гамильтониан коммутирует с импульсом, импульс сохраняется, а волновая функция при трансляциях умножается на постоянную фазу. В случае же многих частиц, которые взаимодействуют друг с другом, может сохраняться только полный импульс системы, если она замкнута: то есть, если нет внешнего потенциала или поля, действующего на все частицы сразу.

Аналогично, как мы знаем, оператор вращения характеризуется тремя углами $\vec{\varphi}$ и действует на волновые функции как:

$$e^{\frac{i\hat{M}\vec{\varphi}}{\hbar}} \psi(\vec{x}) = \psi\left(e^{i\vec{l}\vec{\varphi}} \vec{x}\right).$$

Действуя в этом случае аналогично тому, как мы вывели закон сохранения импульса, находим, что:

$$\left[\hat{M}, \hat{H} \right] = 0, \quad d\hat{M}/dt = 0,$$

если уравнение Шредингера не меняется при вращениях. Таким образом, закон сохранения момента импульса является следствием инвариантности задачи относительно вращений.

Примером такой ситуации является движение частицы в центрально симметричном поле, когда

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(|\vec{x}|),$$

то есть, если потенциал $V(|\vec{x}|)$ является центрально симметричным. Действительно, в этом случае:

$$\left[\hat{M}, \hat{p}^2 \right] = 0, \quad \left[\hat{M}, V(|\vec{x}|) \right] = 0,$$

ведь коммутатор с \hat{M} отвечает за инфинитезимальные вращения, а \hat{p}^2 , $|\vec{x}|$ и $V(|\vec{x}|)$ являются скалярами, которые, как известно, не меняются при вращениях.

В данной ситуации собственные волновые функции гамильтониана можно искать среди собственных состояний оператора вращений. Сейчас мы явно это увидим.

4. Эту лекцию мы закончим выводом уравнения Шредингера в сферических координатах. Сделаем мы это не самым простым, но, при этом, универсальным способом.

На одной из предыдущих лекций мы показали, что стационарное уравнение Шредингера можно получить из принципа наименьшего действия для функционала вида:

$$S[\psi(\cdot)] = \int d^3x \left[\frac{\hbar^2}{2m} \left| \vec{\partial}\psi \right|^2 - \left[E - V(\vec{x}) \right] |\psi|^2 \right]. \quad (190)$$

Это трехмерное обобщение того одномерного действия, которое рассматривалось ранее. При его вариации по ψ^* возникает трехмерное стационарное уравнение Шредингера в декартовых координатах:

$$\left[-\hbar^2 \frac{\partial^2}{2m} + V(\vec{x}) \right] \psi(\vec{x}) = E \psi(\vec{x}).$$

А как записать действие таким образом, чтобы из него можно было получить уравнение Шредингера в любых координатах? Оказывается, что если забыть про спин электрона, то ответом на поставленный вопрос является функционал вида:

$$S[\psi(\cdot)] = \int d^3x \sqrt{g} \left[\hbar^2 \frac{g^{ij} \partial_i \psi^* \partial_j \psi}{2m} - \left[E - V(\vec{x}) \right] |\psi|^2 \right], \quad (191)$$

где мы используем метрику вида:

$$dl^2 = g_{ij}(x) dx^i dx^j, \quad i, j = \overline{1, 3}$$

в трехмерном пространстве, $g_{ij}(x)$ соответственно метрический тензор, а $g^{ij}(x)$ — тензор обратный к метрическому:

$$g_{ij}(x) g^{jk}(x) = \delta_i^k.$$

Здесь δ_i^k — символ Кронекера. В обсуждаемой ситуации индексы поднимаются и опускаются с использованием рассматриваемых метрического и обратного к нему тензоров:

$$v_i = g_{ij} v^j, \quad v^j = g^{jk} v_k.$$

Наконец $g \equiv \det \|g_{ij}\|$.

Сейчас мы покажем, что действие (191) не меняет своего вида при заменах координат $x_i \rightarrow \bar{x}_i(x)$. Действительно, при смене системы координат расстояние между точками не должно меняться, то есть:

$$dl^2 = g_{ij}(x) dx^i dx^j = \bar{g}_{ij}(\bar{x}) d\bar{x}^i d\bar{x}^j.$$

Поэтому метрический тензор должен преобразовываться следующим образом:

$$\bar{g}_{ij}(\bar{x}) = g_{kl}(x) \frac{\partial x^k}{\partial \bar{x}^i} \frac{\partial x^l}{\partial \bar{x}^j}.$$

Из этого следует, что

$$\det \|\bar{g}_{ij}(\bar{x})\| = \det \|g_{kl}(x)\| \left[\det \left\| \frac{\partial x^k}{\partial \bar{x}^i} \right\| \right]^2,$$

а так как при этом:

$$d^3\bar{x} = dx^3 \det \left\| \frac{\partial \bar{x}^k}{\partial x^i} \right\| = \frac{dx^3}{\det \left\| \frac{\partial x^k}{\partial \bar{x}^i} \right\|},$$

то произведение $d^3x \sqrt{g}$ является инвариантом:

$$d^3\bar{x} \sqrt{\bar{g}} = dx^3 \sqrt{g}.$$

Далее, аналогичным образом можно показать, что

$$\bar{g}^{ij} \frac{\partial}{\partial \bar{x}^i} \frac{\partial}{\partial \bar{x}^j} = g^{ij} \frac{\partial}{\partial x^i} \frac{\partial}{\partial x^j}.$$

В результате следует, что действие (191) инвариантно при заменах координат.

Таким образом, если мы стартовали с декартовых координат и перешли к сферическим, то есть

$$dl^2 = dx^2 + dy^2 + dz^2 = dr^2 + r^2 d\theta^2 + r^2 \sin^2 \theta d\varphi^2,$$

то из действия (190) мы получим (191), где:

$$\|g_{ij}\| = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & r^2 & 0 \\ 0 & 0 & r^2 \sin^2 \theta \end{pmatrix}, \quad \|g^{ij}\| = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{r^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \end{pmatrix}, \quad (192)$$

а $\sqrt{g} = r^2 \sin \theta$ и $\partial_i = (\partial_r, \partial_\theta, \partial_\varphi)$.

Найдем теперь уравнение Шредингера в криволинейных координатах. При вариации действия (191) по ψ^* , мы получаем

$$0 = \delta_{\psi^*} S = \int d^3x \sqrt{g} \left[\hbar^2 \frac{g^{ij} \partial_i \delta\psi^* \partial_j \psi}{2m} - \left[E - V(\vec{x}) \right] \delta\psi^* \psi \right].$$

Интегрируя по частям в первом слагаемом и отбрасывая вклад от границы пространства, где как обычно величина поля фиксирована $\delta\psi^* = 0$, мы получаем:

$$0 = - \int d^3x \delta\psi^* \left[\hbar^2 \frac{\partial_i g^{ij} \sqrt{g} \partial_j}{2m} + \sqrt{g} \left[E - V(\vec{x}) \right] \right] \psi$$

В результате следует стационарное уравнение Шредингера в криволинейных координатах:

$$\left[-\hbar^2 \frac{\Delta_g}{2m} + V(\vec{x}) \right] \psi = E \psi,$$

где

$$\Delta_g = \frac{1}{\sqrt{g}} \partial_i g^{ij} \sqrt{g} \partial_j \quad (193)$$

— это оператор Лапласа-Бельтрами в метрике g_{ij} при действии на скалярные поля.

Соответственно в сферических координатах:

$$\begin{aligned} \Delta_g &= \frac{1}{r^2 \sin \theta} \left[\partial_r r^2 \sin \theta \partial_r + \partial_\theta \frac{r^2 \sin \theta}{r^2} \partial_\theta + \partial_\varphi \frac{r^2 \sin \theta}{r^2 \sin^2 \theta} \partial_\varphi \right] = \\ &= \frac{1}{r^2} \partial_r r^2 \partial_r + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \partial_\theta \sin \theta \partial_\theta + \frac{\partial_\varphi^2}{\sin^2 \theta} \right] = \frac{1}{r^2} \partial_r r^2 \partial_r - \frac{\hat{L}^2}{r^2}. \quad (194) \end{aligned}$$

Как видно в окончательном выражении появился оператор квадрата орбитального момента \hat{L}^2 в той форме, в которой мы его получили на одной из предыдущих лекций — через производные по сферическим углам θ и φ .

Более того, теперь мы можем объяснить геометрический смысл оператора \hat{L}^2 . Как мы знаем, в сферических координатах линейный элемент имеет вид:

$$dl^2 = dx^2 + dy^2 + dz^2 = dr^2 + r^2 [d\theta^2 + \sin^2 \theta d\varphi^2] = dr^2 + r^2 d\Omega^2,$$

где

$$d\Omega^2 = d\theta^2 + \sin^2 \theta d\varphi^2$$

— это метрика на двумерной сфере единичного радиуса. Действительно, с ее использованием можно найти расстояние между двумя точками с разными углами θ и φ , которые находятся на сфере единичного радиуса с центром в начале координат.

Если, теперь, найти оператор Лапласа-Бельтрами для этой метрики на сфере, то получится, что он равен как раз:

$$-\hat{L}^2 = \frac{1}{\sin \theta} \partial_\theta \sin \theta \partial_\theta + \frac{\partial_\varphi^2}{\sin^2 \theta} \equiv \Delta_{\theta, \varphi}.$$

Таким образом, \hat{L}^2 действительно является оператором Лапласа на сфере. Применим теперь эти знания для движения в центральном поле $V(|\vec{r}|) = V(r)$. В таком случае уравнение Шредингера имеет вид:

$$-\frac{1}{2m} \left[\hbar^2 \frac{1}{r^2} \partial_r r^2 \partial_r - \frac{\hat{M}^2}{r^2} \right] \psi(\vec{r}) + V(r) \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}). \quad (195)$$

Учитывая вид дифференциального оператора на его левой стороне, решение этого уравнения можно искать разделением переменных:

$$\psi(\vec{r}) = R(r) Y(\theta, \varphi), \quad (196)$$

где $Y(\theta, \varphi)$ — это собственные функции орбитального момента²³:

$$\hat{L}^2 Y(\theta, \varphi) = l(l+1) Y(\theta, \varphi), \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (197)$$

Так как на $Y(\theta, \varphi)$ оператор \hat{M}^2 действует просто умножением на собственное число, то после подстановки (196) в (195) функцию $Y(\theta, \varphi)$ можно сократить слева и справа и получить, что $R(r)$ решает так называемое радиальное уравнение Шредингера:

$$\left[\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R(r) + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(r)] R(r) = 0. \quad (198)$$

В заключении заметим, что вид собственной волновой функции гамильтониана (196) говорит о том, что она является собственной также и для оператора орбитального момента, как следует из (197). На следующей лекции мы найдем явный вид волновых функций $Y(\theta, \varphi) = \langle \theta, \varphi | l, m \rangle$, $-l \leq m \leq l$, которые называются сферическими гармониками. Они связаны с собственными состояниями оператора момента импульса, которые мы нашли на одной из предыдущих лекций.

Задачи

I. Покажите, что соотношения (185) и (188) верны.

II. Получите выражение (194) для оператора Лапласа в сферических координатах.

III. Выведите уравнение (198).

²³Здесь мы используем знание, полученное на одной из предыдущих лекций, что собственные значения оператора момента импульса имеют вид $l(l+1)$ с $l = 0, 1, 2, \dots$

XI. Лекция. Собственные функции оператора Лапласа на сфере и их связь с собственными состояниями квадрата оператора момента импульса; полиномы Лежандра, их полнота и ортонормированность, связь с мультипольным разложением; ассоциированные полиномы Лежандра; сферические гармоники и их свойства.

1. На прошлых лекциях мы ввели оператор Лапласа на сфере:

$$-\hat{L}^2 = \frac{1}{\sin \theta} \partial_\theta \sin \theta \partial_\theta + \frac{\partial_\varphi^2}{\sin^2 \theta} \equiv \Delta_{\theta, \varphi}.$$

Теперь мы хотим явно найти его собственные функции:

$$\left[\frac{1}{\sin \theta} \partial_\theta \sin \theta \partial_\theta + \frac{\partial_\varphi^2}{\sin^2 \theta} \right] Y(\theta, \varphi) = L Y(\theta, \varphi). \quad (199)$$

Мы уже знаем, что собственные состояния и числа оператора орбитального момента имеют вид:

$$\hat{L}^2 |l, m\rangle = l(l+1) |l, m\rangle,$$

где в случае орбитального момента, а не спина, число l пробегает только целые значения. Таким образом:

$$Y(\theta, \varphi) \equiv Y_{lm}(\theta, \varphi) = \langle \theta, \varphi | l, m \rangle, \quad L = -l(l+1).$$

Действительно, функции $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ однозначно определены на сфере (для всех значений углов θ и φ) и не имеют нигде полюсов, только если $l = 0, 1, 2, \dots$ и $-l \leq m \leq l$. Это не так, например, для полуцелых значений l : в этом случае однозначной определенности нет из-за смены знака при повороте на полный угол, как мы сейчас увидим.

Из уравнения (199) сразу видно, что искать его решение следует в виде:

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = u_{lm}(\theta) e^{im\varphi}. \quad (200)$$

Действительно, так как функция $e^{im\varphi}$ является собственной для оператора Лапласа на окружности²⁴:

²⁴Необходимо, чтобы m было целым для однозначной определенности на сфере:

$$\partial_{\varphi}^2 e^{i m \varphi} = -m^2 e^{i m \varphi},$$

то после подстановки (200) в (199) и сокращения $e^{i m \varphi}$ с левой и правой стороны, на $u_{lm}(\theta)$ мы получаем уравнение:

$$\left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \sin \theta \frac{d}{d\theta} - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} + l(l+1) \right] u_{lm}(\theta) = 0. \quad (201)$$

Фактически наша задача на этой лекции найти решения этого уравнения и описать их свойства.

Начнем мы со случая $m = 0$ и сделаем в (201) замену переменных $x = \cos \theta$. В результате из (201) следует так называемое уравнение Лежандра:

$$\left[\frac{d}{dx} (1-x^2) \frac{d}{dx} + l(l+1) \right] u_l(x) = 0, \quad x \in [-1, 1], \quad (202)$$

где использовалось то, что $-\sin \theta d\theta = dx$ и $\sin^2 \theta = 1 - x^2$.

2. Сейчас мы покажем, что уравнение (202) решают так называемые полиномы Лежандра:

$$P_l(x) \equiv \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l. \quad (203)$$

Несколько полиномов с наименьшими значениями l имеют следующий вид:

$$P_0(x) = 1, \quad P_1(x) = x, \quad P_2(x) = \frac{1}{2} (3x^2 - 1),$$

$$P_3(x) = \frac{1}{2} (5x^3 - 3x), \dots$$

На будущее заметим, что l равна степени P_l .

Как и в случае полиномов Эрмита, рассмотрим производящую функцию:

$e^{i m (\varphi + 2\pi)} = e^{i m \varphi}$. Например, при полуцелых значениях m будет меняться знак этой функции при полном повороте, как мы знаем. Не говоря уже о произвольных значениях m .

$$W(x, t) = \frac{1}{\sqrt{1 - 2tx + t^2}}, \quad (204)$$

где мы берем такой знак у корня, чтобы он был равен единице при $t = 0$. Здесь подразумевается, что t — это комплексное число. Разложение функции $W(x, t)$ в ряд по степеням t вокруг нуля имеет вид:

$$\frac{1}{\sqrt{1 - 2tx + t^2}} = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(x) t^l, \quad (205)$$

где предполагается, что $|t| < r$, а r — это модуль наименьшего из корней уравнения $1 - 2tx + t^2 = 0$: снаружи диска радиуса r с центром в $t = 0$ в комплексной плоскости t начинается разрез у корня в знаменателе функции $W(x, t)$. Сейчас мы покажем, что $P_l(x)$ — это полиномы Лежандра.

Чтобы выразить $P_l(x)$ через $W(x, t)$, поделим обе стороны равенства (205) на t^{l+1} и проинтегрируем их по контуру C в комплексной плоскости t . Контур должен обходить $t = 0$ и находиться в области аналитичности функции $W(x, t)$, то есть внутри диска радиуса r вокруг $t = 0$. Тогда из (205), используя теорему Коши в виде:

$$\frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z)}{z - z_0} dz = f(z_0), \quad (206)$$

для аналитической внутри контура C функции $f(z)$, из (205) мы получим, что:

$$P_l(x) = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{dt}{t^{l+1} \sqrt{1 - 2tx + t^2}}.$$

Сделаем в этом интеграле замену $1 - ty = \sqrt{1 - 2tx + t^2}$. Тогда он преобразуется в:

$$P_l(x) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{C'} \frac{(y^2 - 1)^l}{2^l (y - x)^{l+1}} dy, \quad (207)$$

где контур C' обходит точку $y = x$ в области аналитичности подинтегрального выражения в комплексной плоскости y .

Используя снова теорему Коши в форме:

$$\frac{n!}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z)}{(z-z_0)^{n+1}} dz = f^{(n)}(z_0) \equiv \left. \frac{d^n f(z)}{dz^n} \right|_{z=z_0}, \quad (208)$$

для аналитической функции $f(z)$, мы получаем:

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \left[\frac{d^l}{dy^l} (y^2 - 1)^l \right]_{y=x},$$

что совпадает с (203).

То есть $W(x, t)$ является производящей функцией именно полиномов Лежандра (203). Обсуждаемая ситуация аналогична той, что мы встречали в случае полиномов Эрмита. Однако здесь мы использовали несколько иной способ извлечения $P_l(x)$ из $W(x, t)$, чем тот, что в случае полиномов Эрмита. На самом деле оба способа применимы в обеих ситуациях с одним и тем же результатом.

3. Прежде, чем показать, что (203) решает уравнение Лежандра (202), сделаем одно поучительное замечание немного не по основной теме лекции. Рассмотрим “мультипольное” разложение потенциала Кулона,

$$\frac{1}{|\vec{R} - \vec{r}|} = \frac{1}{\sqrt{R^2 - 2Rr \cos \theta + r^2}},$$

при $R \gg r$, то есть по степеням r/R . Не трудно видеть, что

$$\frac{1}{|\vec{R} - \vec{r}|} = \frac{1}{R} W\left(\cos \theta, \frac{r}{R}\right),$$

то есть мы получаем производящую функцию полиномов Лежандра $W(x, t)$, в которой $t = r/R$ и $x = \cos \theta$.

Таким образом, $P_l(x)$ возникают в мультипольном разложении в электростатике. При этом l -й полином отвечает l -полю. Например, $P_1(\cos \theta)$ описывает поле диполя.

4. Покажем теперь, что $P_l(x)$ решают уравнение (202). Будем опять действовать также, как и в случае полиномов Эрмита. Из явного вида $W(x, t)$ (204) получается, что эта функция решает следующие два уравнения:

$$\begin{aligned} (1 - 2tx + t^2) \frac{\partial W}{\partial t} + (t - x) W &= 0, \\ (1 - 2tx + t^2) \frac{\partial W}{\partial x} - t W &= 0. \end{aligned} \quad (209)$$

Если подставить в них разложение (205) и приравнять нулю множители при каждой степени t , то мы получим два рекурсионных соотношения на $P_l(x)$:

$$\begin{aligned}(l+1)P_{l+1} - (2l+1)xP_l + lP_{l-1} &= 0, \\ P'_{l+1} - 2xP'_l + P'_{l-1} - P_l &= 0,\end{aligned}\tag{210}$$

где $P'_l = dP_l(x)/dx$. По одному на каждое из уравнений (209) на $W(x, t)$.

Дифференцируя первое уравнение из (210) по x и вычитая из него второе помноженное на l , мы таким образом исключаем P'_{l-1} из соотношений. Аналогично можно продифференцировать первое уравнение из (210) по x и вычесть из него второе помноженное на $l+1$. Таким образом мы избавимся от P'_{l+1} . В результате вместо (210) мы получаем два других рекуррентных соотношения вида:

$$P'_{l+1} - xP'_l = (l+1)P_l, \quad xP'_l - P'_{l-1} = lP_l.$$

Заменяя в первом из полученных соотношений l на $l-1$ и подставляя в него P'_{l-1} , выраженное через P'_l и P_l из второго уравнения, мы получаем:

$$(1-x^2)P'_l = lP_{l-1} - lxP_l.$$

Снова дифференцируя это соотношение по x и подставляя в него P'_{l-1} , выраженное через P'_l и P_l , мы уже получаем само уравнение Лежандра (202) на $u_l(x) = P_l(x)$. Этим мы заканчиваем наше доказательство того, что $P_l(x)$ решают уравнение (202).

5. Покажем теперь, что из полиномов Лежандра можно составить ортонормированный базис функций на отрезке $x \in [-1, 1]$. Условие ортогональности,

$$\int_{-1}^1 dx P_{l'}(x) P_l(x) = 0, \quad l' \neq l,\tag{211}$$

доказывается абсолютно таким же образом, как и в случае собственных векторов состояний для произвольного эрмитового оператора. В данном случае оператор имеет вид $-\frac{d}{dx}(1-x^2)\frac{d}{dx}$, как следует из (202).

Опять же, чтобы найти нормировочные коэффициенты в базисе, будем действовать аналогично тому, как это делалось в случае

полиномов Эрмита. А именно, заменим в первом из рекурсионных соотношений (210) l на $l-1$ и помножим его на $(2l+1) P_l$. Затем вычтем из полученного уравнения само первое соотношение из (210) помноженное на $(2l-1) P_{l-1}$. В результате мы получим следующее равенство:

$$l(2l+1)P_l^2 + (l-1)(2l+1)P_{l-2}P_l - (l+1)(2l-1)P_{l-1}P_{l+1} - l(2l-1)P_{l-1}^2 = 0.$$

Интегрируя это соотношение по $x \in [-1, 1]$ и используя условие ортогональности (211), мы получаем рекурсию для нормировочных интегралов:

$$\int_{-1}^1 dx P_l^2(x) = \frac{2l-1}{2l+1} \int_{-1}^1 dx P_{l-1}^2(x).$$

Используя это соотношение l раз, чтобы понизить значение индекса, мы получаем:

$$\int_{-1}^1 dx P_l^2(x) = \frac{3}{2l+1} \int_{-1}^1 dx P_1^2(x) = \frac{2}{2l+1},$$

где мы подставили $P_1(x) = x$ в интеграл с правой стороны и взяли его. Таким образом, функции $\sqrt{\frac{2l+1}{2}} P_l(x)$ составляют ортонормированный набор на отрезке $x \in [-1, 1]$. Чтобы показать, что они составляют базис необходимо предъявить условие полноты.

6. Для доказательства полноты базиса из полиномов $P_l(x)$, нам, как и в случае полиномов Эрмита, необходимо найти асимптотику функций $P_l(x)$ при больших значениях l . Однако в данном случае мы используем несколько иной подход. Опять же для полиномов Лежандра можно использовать и старый подход, исходя из их интегрального представления. Оба метода можно использовать в обоих случаях с одинаковым результатом.

Итак, сделаем в уравнении (202) замену $e^t = \text{tg} \frac{\theta}{2}$, где, напомним, $x = \cos \theta$, и разделим его на $l(l+1)$. В результате получится следующее соотношение:

$$\left[-\frac{1}{l(l+1)} \frac{d^2}{dt^2} - \frac{1}{\text{ch}^2 t} \right] P_l(t) = 0. \quad (212)$$

Это стационарное уравнение Шредингера в потенциале $-\frac{1}{\text{ch}^2 t}$ с энергией $E = 0$ из непрерывного спектра. Роль постоянной Планка здесь

играет $\hbar^2 \rightarrow \frac{1}{l(l+1)}$. Таким образом предел $l \gg 1$ отвечает квазиклассическому приближению $\hbar \rightarrow 0$.

Квазиклассическое решение уравнения (212), как мы знаем, имеет вид:

$$P_l(t) \approx \frac{C}{\sqrt{p}} \cos \left[\left(l + \frac{1}{2} \right) \int^t dt' p(t') - \frac{\pi}{4} \right],$$

где $p(t) = \frac{1}{\text{ch}t}$ и $\sqrt{l(l+1)} \approx l + \frac{1}{2}$. Как обычно в квазиклассическом приближении мы оставляем лидирующий вклад и первую поправку.

Находя константу C из условия нормировки, беря интеграл под знаком косинуса и восстанавливая исходные переменные, мы получаем:

$$P_l(\cos \theta) \approx \frac{2 \cos \left[\left(l + \frac{1}{2} \right) \theta - \frac{\pi}{4} \right]}{\sqrt{(2l+1) \pi \sin \theta}}, \quad l \gg 1. \quad (213)$$

Теперь мы готовы показать полноту базиса из полиномов Лежандра. Аналогично случаю полиномов Эрмита, воспользуемся первым из рекурсионных соотношений (210). Умножим его $P_l(y)$ и вычтем такое же уравнение, где x и y поменялись местами. В результате получается равенство:

$$\begin{aligned} (l+1) \left[P_{l+1}(x) P_l(y) - P_{l+1}(y) P_l(x) \right] - l \left[P_l(x) P_{l-1}(y) - P_l(y) P_{l-1}(x) \right] = \\ = (2l+1) (x-y) P_l(x) P_l(y). \end{aligned}$$

Разделив это соотношение на $2(x-y)$, а затем просуммировав по l от 1 до L и используя, что $P_0(x) = 1$ и $P_1(x) = x$, мы получаем:

$$\sum_{l=0}^L \left(l + \frac{1}{2} \right) P_l(x) P_l(y) = \frac{L+1}{2} \frac{P_{L+1}(x) P_L(y) - P_{L+1}(y) P_L(x)}{x-y}.$$

Беря в этом выражении предел $L \rightarrow \infty$ и используя асимптотическое поведение (213) для P_L и P_{L+1} , абсолютно аналогично случаю полиномов Эрмита, мы получим соотношение полноты:

$$\sum_{l=0}^{\infty} \left(l + \frac{1}{2} \right) P_l(x) P_l(y) = \delta(x-y) \equiv \frac{\delta(\theta_x - \theta_y)}{|\sin \theta_x|},$$

где $x = \cos \theta_x$ и $y = \cos \theta_y$.

7. Перейдем теперь к поиску решений уравнения (201) с $m \neq 0$. Запишем уравнение Лежандра (202) в виде:

$$(1 - x^2) P_l'' - 2x P_l' + l(l+1) P_l = 0.$$

Дифференцируя его m раз по x и вводя новое обозначение $V_{lm} \equiv \frac{d^m P_l}{dx^m}$, получаем уравнение:

$$(1 - x^2) V_{lm}'' - 2(m+1)x V_{lm}' + (l-m)(l+m+1) V_{lm} = 0.$$

Если же теперь определить

$$u_{lm} \equiv (1 - x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m P_l}{dx^m} \equiv (1 - x^2)^{\frac{m}{2}} V_{lm}, \quad (214)$$

то на новую функцию u_{lm} получается уравнение вида:

$$(1 - x^2) u_{lm}'' - 2x u_{lm}' + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{1-x^2} \right] u_{lm} = 0,$$

которое после замены $x = \cos \theta$ в точности совпадает с (201).

Таким образом, уравнение (201) решают так называемые ассоциированные полиномы Лежандра, которые имеют вид:

$$u_{lm}(\cos \theta) \equiv P_l^m(\cos \theta) = \frac{1}{2^l l!} \sin^m \theta \frac{d^{l+m}}{d \cos^{l+m} \theta} [\cos^2 \theta - 1]^l, \\ P_l^m(x) = (1 - x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m P_l(x)}{dx^m}, \quad (215)$$

как следует из (214). Так как степень полинома $P_l(x)$ равна l , то видно, что $P_l^m(x) = 0$, если $m > l$. Таким образом мы нашли часть функций из представления алгебры $so(3)$ для $0 \leq m \leq l$.

8. Чтобы найти остальные функции, с $-l \leq m < 0$, из представления алгебры $so(3)$ мы поступим следующим образом. Рассмотрим уравнение Лапласа в трехмерном плоском пространстве:

$$\Delta f(\vec{x}) = 0.$$

Его частное решение в комплексных функциях можно представить в виде:

$$f(x, y, z) = \left(z + ix \cos \alpha + iy \sin \alpha \right)^l, \quad l = 0, 1, 2, \dots,$$

для любого значения параметра $\alpha \in [-\pi, \pi)$. То, что $f(\vec{x})$ решает уравнение Лапласа просто следует из тождества $\cos^2 \alpha + \sin^2 \alpha = 1$. В этом можно убедиться прямой подстановкой такой функции $f(x, y, z)$ в уравнение Лапласа.

Так как уравнение Лапласа линейно, то его решает и выражение вида:

$$U_{lm}(\vec{x}) = \int_{-\pi}^{\pi} \left(z + ix \cos \alpha + iy \sin \alpha \right)^l e^{im\alpha} d\alpha.$$

Теперь, если сделать в этом выражении замену к сферическим координатам, $(x, y, z) = (r \sin \theta \cos \varphi, r \sin \theta \sin \varphi, r \cos \theta)$, то мы получим, что

$$U_{lm}(r, \theta, \varphi) = r^l e^{im\varphi} \int_{-\pi}^{\pi} \left(\cos \theta + i \sin \theta \cos \alpha \right)^l e^{im\alpha} d\alpha.$$

Как мы знаем, в сферических координатах уравнение Лапласа имеет вид:

$$\left[\frac{1}{r^2} \partial_r r^2 \partial_r + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \partial_\theta \sin \theta \partial_\theta + \frac{\partial_\varphi^2}{r^2 \sin^2 \theta} \right] U_{lm}(r, \theta, \varphi) = 0.$$

Если теперь учесть, что

$$\partial_r r^2 \partial_r r^l = l(l+1)r^l, \quad \partial_\varphi^2 e^{im\varphi} = -m^2 e^{im\varphi},$$

то мы получим, что выражение

$$v_{lm}(\cos \theta) = \int_{-\pi}^{\pi} \left(\cos \theta + i \sin \theta \cos \alpha \right)^l e^{im\alpha} d\alpha,$$

а также и

$$\bar{v}_{lm}(\cos \theta) = \int_{-\pi}^{\pi} \left(\cos \theta + i \sin \theta \cos \alpha \right)^l \cos(m\alpha) d\alpha \quad (216)$$

решают уравнение (201) и регулярны при всех значениях θ . Можно доказать, что

$$P_l^m(\cos \theta) = \frac{i^m (l+m)!}{2\pi l!} \bar{v}_{lm}(\cos \theta). \quad (217)$$

Идея доказательства следующая. Рассмотрим интегральное представление полиномов Лежандра (207). Возьмем в нем в качестве контура C' окружность радиуса $\sqrt{1-x^2}$ с центром в точке $y = x$, то есть представим в том интеграле $y = x + \sqrt{1-x^2} e^{i\alpha}$, где α — новая переменная, параметризующая контур C' . Тогда интеграл (207) преобразуется в

$$\begin{aligned} P_l(x) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \left[\frac{x^2 + 2xi\sqrt{1-x^2}e^{i\alpha} + (1-x^2)e^{2i\alpha} - 1}{2i\sqrt{1-x^2}e^{i\alpha}} \right]^l d\alpha = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \left(x + i\sqrt{1-x^2} \cos \alpha \right)^l d\alpha \end{aligned} \quad (218)$$

Это выражение совпадает с (216) в случае, если $m = 0$ и $x = \cos \theta$. Теперь дифференцируя последний интеграл m раз по x и используя соотношение (214), мы получаем, что равенство (217) верно, если $\bar{v}_{lm}(\cos \theta)$ определена как (216).

Наконец, используя (217) и (216) и меняя в них m на $-m$, мы получаем, что

$$P_l^{-m}(\cos \theta) = (-1)^m \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(\cos \theta).$$

Таким образом мы нашли все ассоциированные полиномы Лежандра для $-l \leq m \leq l$ при данном l .

9. Аналогично $P_l(x)$ для $P_l^m(x)$ можно показать условие ортогональности:

$$\int_{-1}^1 dx P_l^m(x) P_l^{m'}(x) = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \delta_{ll'} \delta_{mm'}, \quad -l \leq m \leq l. \quad (219)$$

А также можно вывести условие полноты.

В результате, собирая все сделанные выше наблюдения вместе, мы получаем, что функции вида

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta) e^{im\varphi},$$

$$-l \leq m \leq l, \quad l = 0, 1, 2, \dots, \quad (220)$$

задают ортонормированный базис на сфере. Условие ортогональности имеет вид:

$$\int d\Omega Y_{lm}(\theta, \varphi) Y_{l'm'}(\theta, \varphi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'}, \quad d\Omega = d\varphi d\theta \sin\theta, \quad (221)$$

а условие полноты:

$$\sum_{l, |m| \leq l} Y_{lm}(\theta, \varphi) Y_{lm}(\theta', \varphi') = \frac{\delta(\theta - \theta')}{|\sin\theta|} \delta(\varphi - \varphi'). \quad (222)$$

Эти функции называются сферическими гармониками и играют исключительно важную роль в физике вообще и в нашем курсе, в частности. Несколько сферических функций с наименьшими значениями l имеют вид:

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_{10} = i \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta, \quad Y_{1,\pm 1} = \mp i \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{\pm i\varphi},$$

$$Y_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (1 - 3 \cos^2\theta), \quad Y_{2,\pm 1} = \pm \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \cos\theta \sin\theta e^{\pm i\varphi},$$

$$Y_{2,\pm 2} = -\sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2\theta e^{\pm 2i\varphi}.$$

В заключение напомним, что вектор функций

$$(Y_{l,-l}, Y_{l,-l+1}, \dots, Y_{l,l-1}, Y_{l,l})$$

задает $(2l+1)$ -мерное представление алгебры $so(3)$. И мы в очередной раз сталкиваемся с тем явлением, что полный набор решений какой-то системы дифференциальных уравнений задает некоторое представление какой-то алгебры симметрии.

В частности, можно прямо проверить, что

$$\hat{L}_3 Y_{lm} \equiv -i \partial_\varphi Y_{lm} = m Y_{lm}$$

$$\hat{L}_\pm Y_{lm} \equiv e^{\pm i \varphi} (\pm \partial_\theta + i \operatorname{ctg} \theta \partial_\varphi) Y_{lm} = \sqrt{(l \mp m)(l \pm m + 1)} Y_{l, m \pm 1} \quad (223)$$

Наконец, подчеркнем важное для дальнейшего свойство сферических гармоник. При отражении $\vec{x} \rightarrow -\vec{x}$ углы меняются как $\theta \rightarrow \pi - \theta$ и $\varphi \rightarrow \pi + \varphi$. Откуда видно, что при инверсии сферические гармоники преобразуются как

$$\hat{I} Y_{lm} = (-1)^l Y_{lm},$$

то есть l определяет четность гармоник при инверсии. Это свойство будет использовано в следующем семестре.

10. Аппендикс о теореме Коши.

Рассмотрим интеграл вида:

$$I_m = \oint_{C_{z_0, R}} dz (z - z_0)^m, \quad m \in \mathbb{Z}. \quad (224)$$

Здесь $C_{z_0, R}$ — это окружность радиуса R с центром в точке z_0 . Чтобы вычислить этот интеграл, представим z , который лежит на этой окружности, в следующем виде: $z = z_0 + R e^{i \varphi}$, где $\varphi \in [0, \pi)$. Тогда I_m принимает следующий вид:

$$I_m = R^{m+1} i \int_0^{2\pi} d\varphi e^{i(m+1)\varphi}. \quad (225)$$

В силу периодичности подинтегрального выражения, полученный интеграл равен нулю при всех m , кроме $m = -1$. То есть:

$$I_m = \begin{cases} 0, & m \neq -1 \\ 2\pi i, & m = -1 \end{cases} \quad (226)$$

Рассмотрим теперь интеграл вида:

$$I = \frac{1}{2\pi i} \oint_{C_{z_0, R}} dz \frac{f(z)}{z - z_0}. \quad (227)$$

Здесь $f(z)$ — аналитическая функция внутри окружности $C_{z_0, R}$. Это значит, что в разложении этой функции в ряд Лорана внутри этой

окружности вокруг любой точки не присутствуют члены отрицательной степени: например, $f(z) = \sum_{m \in \mathbb{Z}} f_m (z - z_0)^m$, где $f_m = 0$ при $m < 0$. Тогда, разлагая $f(z)$ в (227) в ряд Лорана внутри обсуждаемой области и воспользовавшись рассуждениями приведенными выше, получаем:

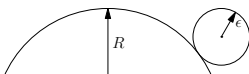
$$I = f_0 \equiv f(z_0). \tag{228}$$

Чтобы обобщить все эти выкладки на случай контуров более общего вида, чем окружность, рассмотрим контур $C_{R,\epsilon}$, который изображен на рисунке 19. А именно, пусть интеграл идет вдоль контура окружности радиуса R , а в некоторой точке отходит на окружность малого радиуса ϵ , а затем продолжает идти вдоль исходного контура. Пусть $f(z)$ аналитическая в соответствующей области. В силу аналитичности всего подинтегрального выражения внутри маленького контура радиуса ϵ , этот контур дает нулевой вклад в интеграл. То есть, мы все еще имеем равенство

$$\frac{1}{2\pi i} \oint_{C_{R,\epsilon}} dz \frac{f(z)}{z - z_0} = f(z_0), \tag{229}$$

не смотря на деформацию контура. Используя контура малых радиусов различного размера, мы можем продеформировать исходную окружность в контур произвольной формы, коль скоро нам позволяет сделать это аналитичность функции $f(z)$. То есть при таких деформациях контура он не должен пересекать полюса и разрывы функции $f(z)$, если они имеются. Это завершает схематическое доказательство формулы Коши (206). Докажите самостоятельно (208) в качестве упражнения.

Рис. 19:



Задачи

I. Воспроизведите асимптотическое выражение для полиномов Лежандра при большом значении их индекса и покажите полноту их базиса.

II. Проверьте соотношения (218).

III. Проверьте соотношения (223).

ХII. Лекция. *Задача двух тел в квантовой механике, радиальное уравнение Шредингера, эффективная одномерная задача для радиального движения в трех измерениях, движение в поле Кулона, радиальная волновая функция для водородоподобного атома, спектр энергий, вырождение уровней энергии в атоме водорода.*

1. Перейдем теперь непосредственно к задаче, для которой и было необходимо обсуждение момента импульса и алгебры вращений. А именно обсудим задачу двух тел в квантовой механике.

Пусть две частицы с массами m_1 и m_2 взаимодействуют по закону, описываемому потенциалом $V(\vec{x}_1 - \vec{x}_2)$. В таком случае гамильтониан системы выглядит как:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} + V(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial \vec{x}_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{\partial^2}{\partial \vec{x}_2^2} + V(\vec{x}_1 - \vec{x}_2).$$

На этой лекции мы забудем, что у каждой из частиц может быть спин отличный от нуля.

Действуя фактически также, как в классической задаче двух тел, введем новые переменные:

$$\vec{R} = \frac{m_1 \vec{x}_1 + m_2 \vec{x}_2}{m_1 + m_2}, \quad \vec{x} = \vec{x}_1 - \vec{x}_2.$$

Тогда получаем, что

$$\frac{\partial}{\partial \vec{x}_1} = \frac{\partial}{\partial \vec{x}} + \frac{m_1}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial \vec{R}}, \quad \frac{\partial}{\partial \vec{x}_2} = -\frac{\partial}{\partial \vec{x}} + \frac{m_2}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial \vec{R}}.$$

В результате не трудно видеть, что гамильтониан принимает вид:

$$\begin{aligned} \hat{H} &\equiv -\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial \vec{x}_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{\partial^2}{\partial \vec{x}_2^2} + V(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial \vec{R}^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial \vec{x}^2} + V(\vec{x}), \end{aligned} \quad (230)$$

где

$$M = m_1 + m_2, \quad \frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}$$

— суммарная и приведенная массы.

Из получающейся формы гамильтониана (230) видно, что переменные разделились так, что происходит свободное движение центра масс M и относительное движение с приведенной массой m в потенциале $V(\vec{x})$. Ситуация очевидно абсолютно аналогична задаче двух тел в классической механике. Поэтому разделение переменных можно было сделать еще в классической задаче, а затем уже ее проквантовать — заменить импульсы и координаты на соответствующие операторы.

Таким образом, в новых переменных решение стационарного уравнения Шредингера с гамильтонианом (230) можно искать в виде:

$$\Psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \phi(\vec{R}) \psi(\vec{x}),$$

где

$$\hat{H} \Psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = E \Psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2),$$

а

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial \vec{R}^2} \phi(\vec{R}) = \frac{\vec{P}^2}{2M} \phi(\vec{R})$$

и

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial \vec{x}^2} + V(\vec{x}) \right] \psi(\vec{x}) = \mathcal{E} \psi(\vec{x}). \quad (231)$$

При этом, как и должно быть, полная энергия системы является суммой кинетической энергии движения центра масс $\frac{\vec{P}^2}{2M}$ и внутренней энергии \mathcal{E} относительного движения: $E = \frac{\vec{P}^2}{2M} + \mathcal{E}$.

Отныне мы забудем про элементарное свободное движение центра масс с волновой функцией:

$$\Phi(\vec{R}, t) = \frac{e^{-\frac{i}{\hbar} \left[\frac{\vec{P}^2}{2M} t - \vec{P} \vec{R} \right]}}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}$$

и будем обсуждать лишь относительное движение, то есть искать решения уравнения (231).

2. Ситуация в задаче двух тел существенно упрощается, когда взаимодействие имеет центрально симметричную форму $V(\vec{x}) = V(|\vec{x}|)$. Как мы обсуждали на прошлых лекциях, в этом случае сохраняется оператор момента импульса, так как

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial \vec{x}^2} + V(|\vec{x}|), \hat{M} \right] = 0, \quad \hat{M} = \hbar \hat{L},$$

и гамильтониан относительного движения удобно представить в сферических координатах:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{r^2} \partial_r r^2 \partial_r - \frac{\hat{L}^2}{r^2} \right] + V(r) \right\} \psi_E(\vec{r}) = E \psi_E(\vec{r}).$$

(См. самый конец лекции X.)

Далее, как мы уже тоже знаем, решение этого уравнения можно искать в виде:

$$\psi_{Elm}(\vec{r}) = R_{El}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi),$$

где

$$\hat{L}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = l(l+1) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad |m| \leq l, \quad l = 0, 1, 2, \dots$$

— сферические гармоники. Тогда $R_{El}(r)$ решает так называемое радиальное уравнение Шредингера, которое можно записать в виде:

$$\left\{ \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} + \frac{2\mu}{\hbar^2} [E - V(r)] - \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} R_{El}(r) = 0. \quad (232)$$

Заметим, что это уравнение не содержит квантового числа проекции орбитального момента m , поэтому и радиальная часть волновой функции, $R_{El}(r)$, не зависит от него.

Далее условие нормировки на волновую функцию имеет вид:

$$\begin{aligned} 1 &= \int |\psi_{Elm}(\vec{r})|^2 d^3\vec{r} = \int \int \int dr r^2 d\Omega |R_{El}(r)|^2 |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 = \\ &= \int_0^{+\infty} dr r^2 |R_{El}(r)|^2 \int \int d\Omega |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 = \int_0^{+\infty} dr r^2 |R_{El}(r)|^2 \int \int d\Omega |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 \end{aligned} \quad (233)$$

где мы воспользовались тем, что

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

Уже глядя на условие нормировки на радиальную часть волновой функции,

$$1 = \int_0^{+\infty} dr r^2 |R_{El}(r)|^2, \quad (234)$$

можно догадаться, что будет удобно ввести новую функцию $\chi_{El}(r)$, такую что

$$R_{El}(r) = \frac{\chi_{El}(r)}{r}.$$

Действительно, используя тождество

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} R(r) = \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right] R(r) = \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r R(r),$$

которое верно для любой функции $R(r)$, можно получить, что $\chi_{El}(r)$ решает уравнение вида

$$\chi_{El}''(r) + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E - V(r) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right] \chi_{El}(r) = 0, \quad \chi'_{El}(r) \equiv \frac{d\chi_{El}(r)}{dr} \quad (235)$$

как следует из (232). Таким образом, мы получили обычное одномерное уравнение Шредингера для $\chi_{El}(r)$ на оси $r \in [0, +\infty)$ с эффективным потенциалом

$$V_{eff}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2},$$

который содержит дополнительное отталкивание за счет вращения.

Очевидно, что условие нормировки на $\chi_{El}(r)$, при этом, имеет простой вид:

$$1 = \int_0^{+\infty} dr |\chi_{El}(r)|^2.$$

То есть для изучения радиального движения в центральном поле мы можем использовать приобретенные знания при рассмотрении одномерной квантовой механики. Этот факт полезен при решении задач и пригодится нам в следующем семестре. Сейчас же мы вернемся к радиальному уравнению Шредингера (232) и будем его решать для потенциала Кулона.

3. Современная наука фактически началась в XVII веке с точного решения Ньютоном задачи Кеплера — с вывода законов движения планет из гравитационной силы. Иметь точно решаемый, но не тривиальный пример, особенно, если он очень близок к реальной ситуации, крайне удобно при исследовании нового направления в естественных науках. Действительно, такой пример сильно упрощает понимание общей ситуации. Как правило, однако, точно решаемое приближение оказывается достаточно далеким от описываемого им качественно, но не количественно, реального физического явления.

Аналогично, квантовая механика в ее матричной (гейзенберговской) формулировке началась с точного решения квантового линейного осциллятора, который мы обсудили на одной из прошлых лекций. Однако в квантовой механике есть и еще один точно решаемый пример — это водородоподобный атом. Точное решение этой задачи было найдено Шредингером и привело к блестящему описанию экспериментальных данных.

Чтобы найти волновые функции и спектр энергий электрона в водородоподобном атоме, необходимо решить уравнение (232) в притягивающем потенциале Кулона:

$$V(r) = -\frac{Z e^2}{r}$$

при отрицательных энергиях $E < 0$, отвечающих финитному движению в связанном состоянии. Здесь Z — это заряд ядра в единицах заряда электрона: водородоподобный атом — это ион с ядром с зарядом Ze , в поле которого движется единственный электрон e .

Теперь, также как и в случае осциллятора, в обсуждаемом уравнении удобно перейти к безразмерным переменным, введя атомную систему единиц:

$$v_0 = \frac{e^2}{\hbar}, \quad a_0 = \frac{\hbar}{\mu v_0} = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}, \quad E_0 = \frac{\hbar^2}{\mu a_0^2} = \frac{\mu e^4}{\hbar^2},$$

которую мы уже обсудили на первой лекции. А именно, вводя новые обозначения

$$\epsilon = \frac{E}{E_0}, \quad \rho = \frac{r}{a_0},$$

радиальное уравнение Шредингера (232) можно переписать в виде:

$$R'' + \frac{2}{\rho} R' + \left(-\frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{2Z}{\rho} - 2|\epsilon| \right) R = 0, \quad R'(\rho) = \frac{dR(\rho)}{d\rho}, \quad (236)$$

где мы учли, что $\epsilon < 0$ и для упрощения формул отбросили индексы у функции $R(\rho)$.

Чтобы понять как устроено решение уравнения (236) надо посмотреть его поведение в окрестности особых точек: в окрестности таких точек, где коэффициенты уравнения обращаются либо в ноль, либо в бесконечность. Это основа общего подхода при решении подобных уравнений. Очевидными особыми точками в случае (236) являются $\rho = 0$ и $\rho \rightarrow \infty$. Есть еще и не очевидные особые точки, где

$$-\frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{2Z}{\rho} - |\epsilon| = 0,$$

но их мы сейчас рассматривать не будем.

При стремлении $\rho \rightarrow 0$ в уравнении (236) можно оставить только лидирующие члены при каждой производной:

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR}{d\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} R \approx 0. \quad (237)$$

Это уравнение является однородным при перескаливании ρ . Действительно, левая сторона этого уравнения лишь умножается на константу $1/\lambda^2$ при преобразовании $\rho \rightarrow \lambda\rho$. Это значит, что решение (237) следует искать в виде $R \sim \rho^s$, где s — некоторое число. При подстановке такого R в (237) мы получаем, что

$$s(s+1) - l(l+1) = 0.$$

То есть мы имеем два решения $s_1 = l$ и $s_2 = -(l+1)$ и, соответственно, два возможных поведения радиальной волновой функции:

$$R|_{\rho \rightarrow 0} \sim \frac{1}{\rho^{l+1}}, \quad R|_{\rho \rightarrow 0} \sim \rho^l.$$

При этом, первый тип поведения не подходит, так как для таких функций нормировочный интеграл (234) расходится при $l \geq 1$. В результате остается только вариант $R|_{\rho \rightarrow 0} \sim \rho^l$.

В пределе же $\rho \rightarrow \infty$ уравнение (236) упрощается до:

$$R'' - 2|\epsilon| R \approx 0,$$

из чего следует известный нам ответ из анализа одномерного движения в классически запрещенной зоне:

$$R|_{\rho \rightarrow \infty} \sim e^{-\rho \sqrt{2|\epsilon|}}.$$

Аналогично ситуации с осциллятором, асимптотический вид $R(\rho)$ в окрестностях особых точек позволяет угадать удобное представление решения уравнения (236):

$$R(x) = x^l e^{-\frac{x}{2}} w(x), \quad \frac{x}{2} = \sqrt{2|\epsilon|} \rho, \quad (238)$$

где мы ввели новое обозначение и новую неизвестную функцию $w(x)$. После такой замены переменных и подстановки (238) в (236), мы получаем уравнение на новую неизвестную функцию $w(x)$:

$$x w'' + \left[2(l+1) - x \right] w' + \left(\frac{Z}{\sqrt{2|\epsilon|}} - l - 1 \right) w = 0. \quad (239)$$

Это уравнение гипергеометрического типа, но нам данное знание здесь не понадобится. Как и в случае с осциллятором, мы будем искать решение такого уравнения в виде ряда:

$$w(x) = \sum_{k=0}^{+\infty} c_k x^k. \quad (240)$$

После подстановки этого ряда в (239) и приравнивания к нулю коэффициентов при каждой степени x^k , мы получаем рекурсионное соотношение на c_k :

$$c_{k+1} = - \frac{\frac{Z}{\sqrt{2|\epsilon|}} - (k+l+1)}{(k+1)(k+2l+2)} c_k. \quad (241)$$

Если ряд (240) не обрывается, то в пределе $x \rightarrow \infty$ лидирующий вклад в него дают члены отвечающие $k \rightarrow \infty$. В этом пределе:

$$\frac{c_{k+1} x^{k+1}}{c_k x^k} = - \frac{\frac{Z}{\sqrt{2|\epsilon|}} - (k+l+1)}{(k+1)(k+2l+2)} x \rightarrow \frac{x}{k}.$$

Таким образом, если ряд (240) не обрывается, то при $x \rightarrow \infty$ мы получаем, что $w(x) \sim e^x$. Но это недопустимо, так как приводит к тому, что из (238) следует, что $R(x) \sim e^{x/2}$, при $x \rightarrow \infty$. А такая функция не является нормируемой.

Это значит, что ряд (240) должен обрываться, что может произойти только, если

$$\frac{Z}{\sqrt{2|\epsilon|}} \equiv n = n_r + l + 1, \quad (242)$$

где $n \geq 1$ — некоторое целое число, а $n_r \geq 0$ — соответствующее максимальное значение k , то есть степень полинома $w(x)$; n_r называется радиальным квантовым числом и определяет число нулей радиальной волновой функции. Из (242) также возникает ограничение на максимальное значение l при данном n : $0 \leq l \leq n - 1$.

Итак, из (242) мы получаем дискретный спектр энергий, который ограничен снизу:

$$\epsilon_n = -\frac{Z^2}{2n^2}, \quad E_n = -\frac{Z^2 \mu e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (243)$$

Эти значения стационарных уровней энергии блестяще согласуются с экспериментальными наблюдениями — с линиями спектров излучения и поглощения водорода. Соответствующие радиальные волновые функции имеют вид:

$$R_{nl}(r) = \left(\frac{2Zr}{na_0}\right)^l w_{n_r} \left(\frac{2Zr}{na_0}\right) e^{-\frac{Zr}{na_0}}. \quad (244)$$

Полином $w_{n_r}(x)$ из (240) можно записать явно, используя рекурсию (241) и (242):

$$c_k = -\frac{n - (k + l)}{k(k + 2l + 1)} c_{k-1} = \dots = \frac{(l + 1 - n)(l + 1 - n + 1) \dots (l + k - n)}{k!(2l + 2)(2l + 3) \dots (2l + 1 + k)} c_0.$$

Тогда получаем, что

$$w_{n_r}(x) = c_0 \left(1 + \sum_{k=1}^{n_r} \frac{(l + 1 - n)(l + 1 - n + 1) \dots (l + k - n)}{(2l + 2)(2l + 3) \dots (2l + 1 + k)} \frac{x^k}{k!} \right),$$

где коэффициент c_0 можно зафиксировать из условия нормировки радиальной волновой функции. Получающиеся $w_{n_r}(x)$ оказываются так называемыми полиномами Лагерра и выражаются через вырожденную гипергеометрическую функцию:

$${}_1F_1(\alpha, \gamma; x) = 1 + \frac{\alpha}{\gamma} x + \frac{\alpha(\alpha+1)}{\gamma(\gamma+1)} \frac{x^2}{12} + \dots$$

В нашем случае $\alpha = -n + l + 1$, а $\gamma = 2(l + 1)$. Приведем несколько явных примеров радиальной волновой функции $R_{nl}(r)$ для наименьших значений n и l :

$$R_{10} = 2 \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}, \quad R_{20} = \left(\frac{Z}{2a_0} \right)^{3/2} e^{-Zr/2a_0} \left(2 - \frac{Zr}{a_0} \right),$$

$$R_{21} = \left(\frac{Z}{2a_0} \right)^{3/2} e^{-Zr/2a_0} \frac{Zr}{\sqrt{3}a_0}.$$

4. Итак, состояние атома водорода определяется волновой функцией вида

$$\psi_{nlm}(\vec{r}) \equiv \langle \vec{x} | n, l, m \rangle = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi).$$

Она характеризуется тремя квантовыми числами, где $n = 1, 2, 3, \dots$ — называется главным квантовым числом, $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$ — орбитальным моментом, а $|m| \leq l$ — проекцией момента или магнитным квантовым числом. Это все верно без учета спинов электрона и ядра.

При этом оказывается, что уровни энергии (243) зависят только от n , но не зависят ни от l , ни от m . Поэтому кроме известного уже нам $(2l + 1)$ -кратного вырождения по проекции момента m , имеется еще дополнительное вырождение по l . Это является спецификой потенциала Кулона и связано с наличием дополнительного интеграла движения:

$$\hat{A} = \frac{Z e^2 \vec{r}}{r} - \frac{[\hat{\vec{p}} \times \hat{\vec{M}}] - [\hat{\vec{M}} \times \hat{\vec{p}}]}{2\mu},$$

где вместо классического векторного произведения $[\vec{p} \times \vec{M}]$ в векторе Рунге–Ленца мы имеем $[\hat{\vec{p}} \times \hat{\vec{M}}] - [\hat{\vec{M}} \times \hat{\vec{p}}]$, так как операторы импульса и момента импульса не коммутируют друг с другом в квантовой механике. Заметим, что дополнительное вырождение, таким образом, связано с наличием замкнутых траекторий в соответствующей классической задаче.

Таким образом, кратность вырождения уровня энергии E_n равна:

$$N = \sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^{m=l} 1 = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2.$$

В заключении заметим, что в произвольном радиальном потенциале $V(r)$ (кроме осцилляторного $V(r) \sim r^2$) дополнительное кулоновское вырождение отсутствует и уровни энергии зависят и от орбитального момента, E_{nl} . То есть остается только $(2l+1)$ -кратное вырождение по проекции момента m .

Наконец, для обозначения уровней с разными l используют буквы:

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

В таком случае вместо уровня $|100\rangle$ пишут $|1s\rangle$, вместо $|200\rangle - |2s\rangle$ и $|21m\rangle - |2p\rangle$ и т.д..

Задачи.

I. Получите уравнение (235) из уравнения Шредингера.

II. Получите асимптотики решений уравнения (235) для дискретного спектра в пределах $r \rightarrow 0$ и $r \rightarrow \infty$ для потенциалов разного вида. Например, $V(r) = Ar^2, A/r^2, A/r^3$. Какой физический смысл различного поведения асимптотик?

III. Покажите, что вектор Рунге-Ленца сохраняется и на квантовом уровне.