

Рис. 3.9: В квантовой механике возможно движение по любой из траекторий. Выделена классическая траектория.

Иное дело в квантовой механике. В этом случае возможны все траектории, а классическая является только наиболее вероятной (жирная линия на Рис. 3.9). Для вычисления вероятности необходимо просуммировать переходы по всем возможным траекториям, причем каждая из них должна браться со своим статистическим весом. Такой подход называется методом *интегралов по траектории*. Используются и другие названия: метод *континуального интеграла* или метод *интегралов Фейнмана*.

В нашем курсе не будем далее использовать этот метод. Он приводит к тем же результатам, которые получаются в рамках традиционного подхода, основанного на уравнении Шредингера. Тем не менее метод фейнмановских интегралов становится незаменим в ряде задач квантовой теории поля.

3.10 Задачи

Задача 3.1.

Найти угол ϕ (см. Рис. 3.1) рассеяния электрона в процессе комптоновского рассеяния, если известны частота падающего света ω и угол θ рассеяния фотона. Найти энергию и импульс рассеянного

электрона.

Решение

Энергия рассеянного электрона находится из закона сохранения энергии

$$E'_e = E_{\text{фото}} + M_e c^2 - E'_{\text{фото}} = M_e c^2 + \hbar(\omega - \omega'). \quad (3.44)$$

Тогда импульс рассеянного электрона будет

$$p'_e = \frac{1}{c} \sqrt{E_e'^2 - M_e^2 c^4}. \quad (3.45)$$

Перепишем закон сохранения энергии-импульса в виде

$$p_{\text{фото}} - p'_e = p_e - p'_{\text{фото}} \quad (3.46)$$

и возводя обе части в квадрат получим

$$E'_e \hbar \omega - p'_e \hbar \omega c \cos \phi = -\hbar \omega M_e c^2. \quad (3.47)$$

Откуда

$$\cos \phi = \frac{E'_e - M_e c^2}{c p'_e}. \quad (3.48)$$

Задача 3.2.

Найти энергии и углы рассеяния электрона и фотона до и после столкновения в системе центра масс (СЦМ) сталкивающихся частиц, если известны частота падающего света ω и угол θ в лабораторной системе (Рис. 3.1).

Решение

По определению СЦМ это такая система, где полный 3-мерный импульс системы равен нулю. Следовательно полный 4-импульс системы фотон-электрон равен

$$p_{\text{фото}}^* + p_e^* = p_{\text{фото}}'^* + p_e'^* = \left(\frac{1}{c} E^*, 0, 0, 0\right), \quad (3.49)$$

где E^* — полная энергия как сталкивающихся, так и разлетающихся частиц в СЦМ. Здесь и далее все величины в СЦМ будем снабжать звездочкой. Соответствующие величины в лабораторной системе (т.е. системе, где до столкновения с фотоном электрон покоится) не будем снабжать никаким дополнительным индексом.

Возводя правую и левую части (3.49) в квадрат получим

$$E^{*2} = c^2 (p_{\text{фотон}}^* + p_e^*)^2. \quad (3.50)$$

Ввиду того, что в правой части (3.50) стоит релятивистский инвариант, она не зависит от выбора системы координат. Поэтому соответствующие импульсы можно заменить на импульсы в лабораторной системе

$$E^{*2} = (p_{\text{фотон}} + p_e)^2 = M_e^2 c^4 + 2\hbar c^2 M_e \omega. \quad (3.51)$$

Из (3.51) находим полную энергию в СЦМ

$$E^* = \sqrt{M_e^2 c^4 + 2\hbar c^2 M_e \omega}. \quad (3.52)$$

Из определения СЦМ следует

$$\vec{p}_{\text{фотон}}^* = -\vec{p}_e^* \equiv \vec{q}^*, \quad (3.53)$$

$$\vec{p}_{\text{фотон}}^{*'} = -\vec{p}_e^{*'} \equiv \vec{q}^{*'}, \quad (3.54)$$

причем $|\vec{q}^*| = |\vec{q}^{*'}| \equiv q^*$. Тогда

$$E_e^* = E_e^{*'} = \sqrt{M_e^2 c^4 + c^2 q^{*2}}, \quad (3.55)$$

$$E_{\text{фотон}}^* = E_{\text{фотон}}^{*'} = c q^* \quad (3.56)$$

Складывая (3.55) и (3.56) получаем уравнение для импульса q^*

$$E^* = \sqrt{M_e^2 c^4 + c^2 q^{*2}} + c q^*. \quad (3.57)$$

Решая алгебраическое уравнение (3.57) найдем

$$q^* = \frac{E^{*2} + M_e^2 c^4}{2cE^*}, \quad (3.58)$$

где E^* определено в (3.52). Энергии электрона и фотона в СЦМ определяем подставляя (3.58) в (3.55-3.56).

Для того, чтобы определить углы рассеяния θ^* фотона и ϕ^* электрона в СЦМ, воспользуемся тем, что скалярные произведения 4-векторов $p_{\text{фот}} p'_{\text{фот}}$ и $p_{\text{фот}} p'_e$ являются релятивистскими инвариантами. Следовательно

$$p_{\text{фот}} p'_{\text{фот}} = p_{\text{фот}}^* p'^*_{\text{фот}}, \quad (3.59)$$

$$p_{\text{фот}} p'_e = p_{\text{фот}}^* p'^*_e. \quad (3.60)$$

Откуда получаем уравнения для углов

$$\omega \omega' (1 - \cos \theta) = \omega^{*2} (1 - \cos \theta^*), \quad (3.61)$$

$$\omega m c^2 = \omega^* (E_e^* - c q^* \cos \phi^*), \quad (3.62)$$

где $\omega^* = \frac{c q^*}{\hbar}$.

Задача 3.3.

Определить условия обратного Комптон-эффекта

Решение

Для определенности будем считать, что импульсы фотона и электрона параллельны оси z и направлены в разные стороны

$$\begin{aligned} p &= \left(\frac{\hbar \omega}{c}, \vec{p} \right) \quad q = (\sqrt{M_e^2 c^2 + \vec{q}^2}, \vec{q}) \\ p' &= \left(\frac{\hbar \omega'}{c}, \vec{p}' \right) \quad q' = (\sqrt{M_e^2 c^2 + \vec{q}'^2}, \vec{q}'). \end{aligned} \quad (3.63)$$

При этом закон сохранения 4-импульса дает следующие соотношения

$$\begin{aligned} \vec{q}' &= \vec{p} + \vec{q} - \vec{p}' \\ \frac{\hbar \omega}{c} + \sqrt{M_e^2 c^2 + \vec{q}^2} &= \frac{\hbar \omega'}{c} + \sqrt{M_e^2 c^2 + \vec{q}'^2}. \end{aligned} \quad (3.64)$$

Решая эти уравнения находим

$$\omega' = \omega \frac{\sqrt{M_e^2 c^2 + q^2} + q}{\sqrt{M_e^2 c^2 + q^2} + \frac{\hbar \omega}{c} - \left(\frac{\hbar \omega}{c} - q \right) \cos \theta}, \quad (3.65)$$

где $q \equiv |\vec{q}|$. Из последнего выражения видим, что при $q > \frac{\hbar\omega}{c}$ будет иметь обратный Комптон-эффект $\omega' > \omega$.

Задача 3.4.

Волновой пакет задан в виде

$$\Psi(t, x) = A \exp \left[-i(\omega t - kx) - \frac{(x - x_0)^2}{2b^2} \right], \quad (3.66)$$

причем $k \gg \pi b^{-1}$. Считается, что средний размер пакета Δx соответствует такому отклонению $\frac{1}{2}\Delta x$ от x_0 , когда вероятность уменьшается от максимальной в e раз. Найти средний размер пакета и среднее отклонение импульса Δp от максимально вероятного. Показать, что для $\Delta x \Delta p$ выполняется принцип неопределенности Гайзенберга.

Решение

По определению вероятность

$$P(x) = |\Psi(t, x)|^2 = |A|^2 \exp \left[-\frac{(x - x_0)^2}{b^2} \right] \quad (3.67)$$

и тогда

$$\Delta x = b. \quad (3.68)$$

Разложим пакет (3.66) по плоским волнам $\psi(q, x) = (2\pi)^{-1/2} \exp[iqx]$:

$$\begin{aligned} \varphi(q) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(q, x) \Psi(t, x) = \\ &= (2\pi)^{-1/2} A \int_0^{\infty} dx \exp \left\{ -i[\omega t - (k - q)x] - \right. \\ &\quad \left. - \frac{(x - x_0)^2}{2b^2} \right\} = (2\pi)^{-1/2} A \int_{-\infty}^{\infty} dx \times \\ &\quad \times \exp \left\{ -i\omega t - \frac{1}{2b^2} \left[(x - x_0 - ib^2(k - q))^2 \right] + \right. \\ &\quad \left. + ix_0(k - q) - \frac{b^2}{2}(k - q)^2 \right\}. \end{aligned} \quad (3.69)$$

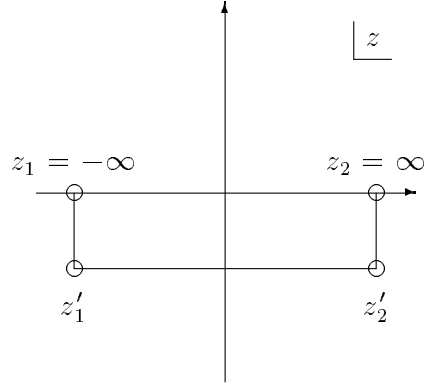


Рис. 3.10: Контур интегрирования (к Задаче 3.4.)

Делая замену переменных

$$x \rightarrow z = x - x_0 - ib^2(k - q) \quad (3.70)$$

мы получаем

$$\begin{aligned} \varphi(q) &= (2\pi)^{-1/2} A \int_{z'_1}^{z'_2} dz \times \\ &\times \exp \left\{ -i\omega t - \frac{1}{2b^2} z^2 + ix_0(k - q) - \frac{b^2}{2}(k - q)^2 \right\}, \end{aligned} \quad (3.71)$$

где z'_1 и z'_2 равны (см. Рис. 3.10)

$$\begin{aligned} z'_1 &= z_1 - ib^2(k - q), \quad z_1 \rightarrow -\infty, \\ z'_2 &= z_2 - ib^2(k - q), \quad z_2 \rightarrow +\infty. \end{aligned} \quad (3.72)$$

Ввиду того, что подынтегральное выражение в (3.71) при $|z| = \infty$ равно нулю, можно заменить пределы интегрирования $z'_1 \rightarrow -\infty$ и $z'_2 \rightarrow \infty$. Последний интеграл легко вычисляется и мы получаем

$$\varphi(q) = bA \exp \left\{ -i\omega t + ix_0(q - k) - \frac{b^2(k - q)^2}{2} \right\}. \quad (3.73)$$

Распределение по волновому числу q опять представляет собой осциллирующую функцию, амплитуда которой $bA \exp \left\{ -\frac{b^2(k-q)^2}{2} \right\}$ имеет максимум при $q = k$ и убывает в e раз когда $\Delta q \equiv q - k$ равно

$$\Delta q = b^{-1}. \quad (3.74)$$

Таким образом

$$\Delta p = \hbar b^{-1} \quad (3.75)$$

и следовательно

$$\Delta x \Delta p = \hbar. \quad (3.76)$$

Задача 3.5.

На основании принципа неопределенностей оценить радиус наиболее вероятной орбиты электрона в атоме водорода.

Решение

Энергия электрона в атоме водорода равна

$$E = \frac{p^2}{2M_e} - \frac{q_0^2}{r}. \quad (3.77)$$

Неопределенности импульса и координаты электрона, движущегося по круговой орбите вокруг ядра равны $\Delta p \approx p$ и $\Delta x \approx r$. Тогда, на основании принципа неопределенностей, следует положить

$$pr = \hbar, \text{ или } p = \frac{\hbar}{r} \quad (3.78)$$

$$E = \frac{\hbar^2}{2M_e r^2} - \frac{e^2}{r}. \quad (3.79)$$

Минимум энергии (3.79) определяет радиус нижней орбиты

$$\left. \frac{dE}{dr} \right|_{r=r_0} = -\frac{\hbar^2}{2M_e r^3} + \frac{q_0^2}{r^2} = 0 \quad (3.80)$$

$$r_0 = \frac{\hbar^2}{M_e q_0^2}. \quad (3.81)$$

Он представляет собой ни что иное, как боровский радиус водорода обычно обозначаемый как a_0 .

Глава 4

Уравнение Шредингера

4.1 Обоснование уравнения Шредингера

Выше было введено важнейшее понятие квантовой теории — волновая функция. Чтобы волновая функция имела конкретный смысл, следует найти дифференциальное уравнение, которое ее описывает. Таким уравнением является уравнение Шредингера. Сразу следует оговориться, что уравнение Шредингера вывести нельзя, исторически оно было угадано австрийским ученым Э. Шредингером и затем проверено, что вытекающие из него многочисленные следствия находятся в блестящем согласии с опытом. Можно только привести некоторые соображения позволяющие понять физическое обоснование выбора такого уравнения.

4.1.1 Аналогия с оптикой

Напомним, что в квантовой механике роль световой волны $\exp[i\varphi(t)]$ играет волна де Бройля. Из принципа соответствия следует, что квантовая механика содержит в себе классическую механику, как предельный вариант, когда постоянная Планка \hbar стремиться к нулю. Похожая ситуация имеет место в оптике — там из волновой оптики следует геометрическая, если длина волны света λ устремляется к нулю. Таким образом в используемой аналогии следует сопоставлять между собой постоянную Планка и длину волны света

$$\hbar \Leftrightarrow \lambda. \quad (4.1)$$

Таблица 4.1: Аналогия между механикой и оптикой: геометрическая оптика имеет аналогом классическую механику, а волновая — квантовую.

Оптика	Механика
геометрическая оптика	классическая механика
луч света	траектория частиц
принцип Ферма $\delta L = 0$	Уравнение Лагранжа-Эйлера $\delta S_{\text{кл.}} = 0$
волновая оптика	квантовая механика
$\lambda \rightarrow 0$ — переход от волновой оптики к геометрической	$\hbar \rightarrow 0$ — переход от квантовой механики к классической механике
световая волна $\exp[iL(t)/\lambda] = e^{-i\varphi(t)}$	волна де Бройля $\Psi = a \exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right)$

В оптике ход лучей определяется принципом Ферма, который гласит, что лучи распространяются по кривым, соответствующим минимуму оптического пути света L . В классической механике этому принципу соответствует принцип экстремума действия $S_{\text{кл.}}$. Отсюда вытекает, что в квантовой механике действие играет роль оптического пути света

$$S \Leftrightarrow L. \quad (4.2)$$

В оптике отношение $\frac{L}{\lambda}$ представляет фазу световой волны $\varphi(t)$. Тогда следет считать, что фаза волны де Бройля совпадает с отношением $\frac{S}{\hbar}$, причем в низайшем порядке по \hbar величина S должна сводиться к классическому действию $S_{\text{кл.}}$.

Следовательно, волновую функцию можно представить в виде

$$\Psi = a \exp\left\{\frac{i}{\hbar}S\right\}, \quad (4.3)$$

где $S = S_{\text{к.л}} + \hbar S_1 + \mathcal{O}(\hbar^2)$.

4.1.2 Операторы физических величин

Считается, что волновая функция $\Psi(t, \vec{x})$ полностью определяет состояние квантовой системы в любой момент времени t . Иными словами, задание волновой функции в момент времени $t = t_0$ должно полностью определять ее поведение в любой последующий момент времени t . Математически это выражается в том, что уравнение, описывающее развитие квантовой системы со временем, должно быть первого порядка по производной $\frac{\partial}{\partial t}$. Поэтому следует считать, что уравнение для волновой функции имеет следующую структуру

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{L} \Psi, \quad (4.4)$$

где \hat{L} — некоторый оператор, а мнимая единица i введена для удобства. Здесь и далее “шапочка” означает, что соответствующая величина является оператором.

Перечислим основные свойства оператора \hat{L} и функции Ψ , на которую он действует.

1. В общем случае \hat{L} представляет матрицу $n \times n$, элементами которой являются, дифференциальные операторы $\frac{\partial}{\partial \vec{x}}$. В свою очередь, волновая функция представляет комплексную матрицу-столбец из n элементов

$$\Psi(t, \vec{x}) = \begin{pmatrix} \Psi_1(t, \vec{x}) \\ \Psi_2(t, \vec{x}) \\ \vdots \\ \Psi_n(t, \vec{x}) \end{pmatrix}. \quad (4.5)$$

При этом матрица-строка

$$\Psi^\dagger(t, \vec{x}) = (\Psi_1^*(t, \vec{x}), \Psi_2^*(t, \vec{x}), \dots, \Psi_n^*(t, \vec{x})) \quad (4.6)$$

представляет эрмитово-сопряженную величину к волновой функции Ψ .

2. Физический смысл величины $\Psi^\dagger(t, \vec{x})\Psi(t, \vec{x}) = \sum_i^n |\Psi_i(t, \vec{x})|^2$ состоит в том, что она представляет плотность вероятности обнаружить систему в момент времени t в точке \vec{x} . В свою очередь величина

$$\int d^3x \Psi^\dagger(t, \vec{x})\Psi(t, \vec{x}) = \int d^3x \sum_i^n |\Psi_i(t, \vec{x})|^2 \quad (4.7)$$

является вероятностью обнаружить систему во всем пространстве.

3. Оператор \hat{L} эрмитов

$$\hat{L}^\dagger = \hat{L}. \quad (4.8)$$

Последнее свойство оператора \hat{L} доказывается следующим образом. Очевидно, что вероятностью обнаружить систему во всем пространстве $\int d^3x |\Psi(t, \vec{x})|^2$ не должна меняться со временем. Тогда на основании (4.4) получаем

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int d^3x |\Psi(t, \vec{x})|^2 &= \\ &= \int d^3x \left[\frac{\partial \Psi^\dagger(t, \vec{x})}{\partial t} \Psi(t, \vec{x}) + \Psi^\dagger(t, \vec{x}) \frac{\partial \Psi(t, \vec{x})}{\partial t} \right] = \\ &= \frac{1}{i} \int d^3x \left[-(\hat{L}\Psi)^\dagger \Psi + \Psi^\dagger \hat{L}\Psi \right] = \\ &= \frac{1}{i} \int d^3x \Psi^\dagger (\hat{L} - \hat{L}^\dagger) \Psi = 0. \end{aligned} \quad (4.9)$$

Ввиду того, что последнее равенство выполняться тождественно, получаем (4.8).

Используя (4.3) можно переписать (4.4) как

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\partial S}{\partial t} \Psi = \hbar \hat{L} \Psi. \quad (4.10)$$

В классическом имеет место уравнение Гамильтона-Якоби

$$\frac{\partial S_{\text{кл}}}{\partial t} + H = 0. \quad (4.11)$$

Значит для сохранения соответствия между классической и квантовой механиками, необходимо допустить, что в квантовой механике гамильтониан является оператором (далее он будет обозначаться \hat{H}), причем

$$\hat{H} = \hbar \hat{L}. \quad (4.12)$$

В результате формальное уравнение для волновой функции (которое называют уравнением Шредингера) принимает вид

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(t, \vec{x})}{\partial t} = \hat{H} \Psi(t, \vec{x}). \quad (4.13)$$

Однако уравнение Шредингера остается бессодержательным пока не определен оператор Гамильтона \hat{H} . Для его определения сформулируем следующие общие принципы:

1. в квантовой механике все физические величины описываются эрмитовыми операторами;
2. волновые функции представляют векторы гильбертового пространства, в котором действуют операторы физических величин;
3. экспериментально измеренные значения физических величин (их называют *наблюдаемыми*) являются собственными значениями соответствующих операторов

$$\hat{A}\Psi = A\Psi, \quad (4.14)$$

где здесь и далее величина без “шапочки” обозначает собственное значение оператора;

4. если две физические величины A и B могут быть одновременно измерены, то их операторы должны коммутировать

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0. \quad (4.15)$$

5. оператор Гамильтона \hat{H} выражается через операторы координаты $\hat{\vec{x}}$ и импульса $\hat{\vec{p}}$ по тем же формулам, что и в классической механике

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + U(\vec{x}). \quad (4.16)$$

Из классической физики известно, что для любой физической величины a полная производная по времени есть

$$\dot{a} = \frac{\partial a}{\partial t} + \{H, a\}, \quad (4.17)$$

где $\{\dots\}$ — скобка Пуассона. Получим аналог этого соотношения в квантовой механике. Сначала определим среднее значение физической величины как

$$\langle a \rangle \equiv \int d^3x \Psi^\dagger(t, \vec{x}) \hat{a} \Psi(t, \vec{x}). \quad (4.18)$$

Тогда

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle a \rangle &= \int d^3x \left\{ \Psi^\dagger(t, \vec{x}) \left(\frac{\partial \hat{a}}{\partial t} \right) \Psi(t, \vec{x}) + \right. \\ &= \left(\frac{\partial \Psi^\dagger(t, \vec{x})}{\partial t} \right) \hat{a} \Psi(t, \vec{x}) + \Psi^\dagger(t, \vec{x}) \hat{a} \left(\frac{\partial \Psi(t, \vec{x})}{\partial t} \right) \Bigg\} = \\ &= \left\langle \frac{\partial \hat{a}}{\partial t} \right\rangle + \frac{i}{\hbar} \int d^3x \Psi^\dagger(t, \vec{x}) (\hat{H}^\dagger \hat{a} - \hat{a} \hat{H}) \Psi(t, \vec{x}) = \\ &= \left\langle \frac{\partial \hat{a}}{\partial t} \right\rangle + \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{a}] \rangle. \end{aligned} \quad (4.19)$$

При этом заметим, что коммутатор двух операторов $\frac{i}{\hbar} [\hat{A}, \hat{B}]$ удовлетворяет тем же свойствам, что и скобка Пуассона $\{A, B\}$ в классической механике. Отсюда делаем вывод, что

6. в квантовой механике величина $\frac{i}{\hbar} [\hat{A}, \hat{B}]$ играет роль скобки Пуассона; в частности, коммутатор между i -й компонентой импульса и j -й компонентой координаты равен

$$[\hat{p}_i, \hat{x}_j] = \frac{\hbar}{i} \delta_{ij}. \quad (4.20)$$

Оказывается, что независимо от явного вида операторов координаты и импульса, наложение на них условия коммутации (4.20) полностью определяет квантовый гамильтониан \hat{H} и, следовательно, уравнение Шредингера. Такой метод квантования носит название метода *канонического квантования*.

4.1.3 Явный вид операторов импульса и координаты

Во многих задачах удобно использовать явный вид операторов $\hat{\vec{p}}$ и $\hat{\vec{x}}$. С целью их построения будем считать, что оператор координаты является просто оператором умножения

$$\hat{\vec{x}}\Psi(t, \vec{x}) = \vec{x}\Psi(t, \vec{x}). \quad (4.21)$$

Тогда чтобы выполнялось коммутационное соотношение (4.20) оператор импульса следует выбрать в виде

$$\hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{x}}. \quad (4.22)$$

В результате оператора Гамильтона представляет следующий дифференциальный оператор

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + U, \quad (4.23)$$

а уравнение Шредингера принимает вид

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(t, \vec{x})}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + U \right) \Psi(t, \vec{x}). \quad (4.24)$$

Отметим, что если считать оператор импульса оператором умножения, то волновая функция будет функцией импульса, а оператор координаты — оператором дифференцирования.

4.1.4 Уравнение непрерывности

Домножим уравнение Шредингера (4.24) слева на $\Psi^*(t, \vec{x})$. В результате получим

$$\begin{aligned} i\hbar \Psi^*(t, \vec{x}) \frac{\partial \Psi(t, \vec{x})}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \{ \nabla [\Psi^*(t, \vec{x}) \nabla \Psi(t, \vec{x})] - \\ &- \nabla \Psi^*(t, \vec{x}) \nabla \Psi(t, \vec{x}) \} + U |\Psi(t, \vec{x})|^2. \end{aligned} \quad (4.25)$$

Далее сделаем комплексное сопряжение уравнения Шредингера и затем умножим получившееся уравнение справа на $\Psi(t, \vec{x})$

$$-i \frac{\partial \Psi^*(t, \vec{x})}{\partial t} \hbar \Psi(t, \vec{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \{ \nabla [\nabla \Psi^*(t, \vec{x}) \Psi(t, \vec{x})] - \nabla \Psi^*(t, \vec{x}) \nabla \Psi(t, \vec{x}) \} + U |\Psi(t, \vec{x})|^2. \quad (4.26)$$

Отнимая от первого уравнения второе получим

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j} = 0, \quad (4.27)$$

где введены следующие обозначения

$$\begin{aligned} \rho &= \hbar |\Psi(t, \vec{x})|^2, \\ \vec{j} &= \frac{\hbar}{2mi} \{ [\Psi^*(t, \vec{x}) \nabla \Psi(t, \vec{x})] - [\nabla \Psi^*(t, \vec{x}) \Psi(t, \vec{x})] \}. \end{aligned} \quad (4.28)$$

Исходя из физического смысла волновой функции этим величинам можно придать смысл *плотности вероятности* и *плотности тока вероятности*. В свою очередь уравнение (4.27) имеет смысл уравнения непрерывности.

В том случае, если волновую функцию можно представить как действительную функцию умноженную на фазовый множитель $e^{i\phi}$, где фаза ϕ не зависит от координаты, плотность тока вероятности $\vec{j} = 0$.

4.1.5 Процесс измерения и редукция волнового пакета

Уравнение Шредингера, как следует из его явного вида (4.24), описывает изменение волновой функции со временем под действием взаимодействия в квантовой системе. Теперь рассмотрим, что происходит с квантовой системой в процессе измерения. Процесс измерения какой-либо характеристики квантовой системы представляет взаимодействие квантовой системы с макроскопическим прибором. В результате этого меняются начальные условия определяющие значение волновой функции во все последующие моменты времени, и квантовая система переходит из одного квантового состояния в другое. Отсюда следует, что в квантовой механике процесс измерения

меняет само квантовое состояние, а, следовательно, и его волновую функцию. Такое изменение волновой функции называют *редукцией волнового пакета*.

Пусть, например, волновая функция электрона представляет плоскую волну (3.37). В этом случае, как мы уже говорили, электрон имеет определенное значение импульса $\vec{p} = \hbar \vec{k}$, а его координата не известна. В опыте по дифракции электрона можно в принципе измерить импульс \vec{p} с любой наперед заданной точностью Δp . Однако эту цель может достигнуть исследователь только зафиксировав прибор положение электрона \vec{x} в пространстве. Таким образом электрон из состояния с определенным значением импульса и неопределенным значением координаты перейдет в состояние с определенным значением координаты \vec{x} и неопределенным значением импульса. В свою очередь волновая функция электрона из плоской волны редуцируется в волновой пакет, размер которого станет порядка $\Delta x \sim \frac{\hbar}{\Delta p}$.

4.2 Стационарные решения уравнения Шредингера

4.2.1 Стационарное уравнение Шредингера

Рассмотрим частный пример уравнения Шредингера для случая, когда потенциал $U = U(\vec{x})$ явным образом не зависит от времени (*стационарная задача*).

Из классической механики известно, что если гамильтониан системы явным образом не зависит от времени, то энергия является интегралом движения. Очевидно, что это же имеет место и в квантовом случае, т.к. полная производная по времени от оператора Гамильтона равна нулю:

$$\frac{d\hat{H}}{dt} = \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{H}] = 0. \quad (4.29)$$

Квантовые состояния с энергией не изменяющейся со временем называют *стационарными состояниями*. Они должны описываться волновыми функциями являющимися собственными функциями опера-

тора Гамильтона

$$\hat{H}\Psi_n(t, \vec{x}) = E_n\Psi_n(t, \vec{x}), \quad (4.30)$$

где индекс n нумерует возможные энергетические состояния. Этот индекс может быть дискретным и непрерывным. В первом случае набор энергий представляет *дискретный энергетический спектр*. Во втором случае энергия квантовой частицы меняется непрерывно и образует *непрерывный спектр*. Дискретным он бывает всегда для случая связанного состояния, т.е. такого состояния, когда квантовое движение частицы ограничено и вероятность обнаружить последнюю на бесконечно большом расстоянии от притягивающего центра равна нулю. Примерами таких состояний могут быть энергетические уровни электрона в атоме водорода. В свою очередь непрерывный спектр бывает, когда квантовое движение частицы не ограничено в пространстве, например свободный электрон.

Уравнение Шредингера (4.24) для волновой функции $\Psi_n(t, \vec{x})$ сводится к линейному дифференциальному уравнению

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_n(t, \vec{x})}{\partial t} = E_n \Psi_n(t, \vec{x}), \quad (4.31)$$

которое имеет следующее решение

$$\Psi_n(t, \vec{x}) = \exp\left[-i\frac{E_n t}{\hbar}\right] \psi_n(\vec{x}). \quad (4.32)$$

При этом функция $\psi_n(\vec{x})$ тоже называется волновой функцией. Она удовлетворяет *стационарному уравнению Шредингера*

$$\left(-\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + U\right) \psi_n(\vec{x}) = E_n \psi_n(\vec{x}). \quad (4.33)$$

В случае, когда каждому значению энергии E_n соответствует одна собственная функция $\psi_n(\vec{x})$, говорят, что спектр энергий невырожден. Однако часто встречается ситуация, когда одному значению энергии E_n соответствует несколько или бесконечно много линейно-независимых собственных функций $\psi_{n\alpha}(\vec{x})$, где индекс α нумерует различные функции, отвечающие одной энергии E_n . В этом случае

говорят, что *спектр вырожден*, волновые функции $\psi_{n\alpha}(\vec{x})$ называют *вырожденными решениями*, а соответствующие квантовые состояния *вырожденными состояниями*. Как правило наличие вырожденных состояний связано с симметрией гамильтониана¹.

4.2.2 Выбор нормировки для дискретного и непрерывного спектров

Конечно, волновая функция $\tilde{\psi}_n(\vec{x}) = N\psi_n(\vec{x})$, где N — постоянный множитель (называемый *нормировкой*), тоже является решением уравнения (4.33). Чтобы определить нормировку необходимы дополнительные физические соображения.

Начнем с дискретного спектра. Как говорилось выше, квадрат модуля волновой функции представляет вероятность обнаружить квантовое состояние в точке пространства \vec{x} . Полагая, что вероятность обнаружить квантовое состояние во всем пространстве равна единице, следует положить, что

$$\int d^3x |\Psi_n(t, \vec{x})|^2 = \int d^3x |\psi_n(\vec{x})|^2 = 1. \quad (4.34)$$

Это фиксирует выбор модуля нормировочного множителя N . Однако фаза остается произвольной и не влияет на физический ответ.

Отметим, что для дискретного спектра интеграл (4.34) сходится, т.к. вероятность обнаружить частицу бесконечно далеко от притягивающего центра равна нулю: $|\psi_n(\vec{x})|^2 \rightarrow 0$, когда $|\vec{x}| \rightarrow \infty$ ².

Кроме того, можно показать, что решения стационарного уравнения Шредингера взаимноортогональны (см. *Задачу 4.2*). Таким образом получается следующее общее условие нормировки для состояний дискретного спектра

$$\int d^3x \psi_n^*(\vec{x}) \psi_m(\vec{x}) = \delta_{nm}, \quad (4.35)$$

где δ_{nm} — символ Кронекера.

¹В случае, когда вырождение не связано с симметрией гамильтониана говорят о *случайном вырождении*.

²Всегда считается, что волновая функция не имеет особенностей во всем пространстве.

Для непрерывного спектра вероятность обнаружить частицу бесконечно далеко от данной точки не равна нулю и поэтому интеграл типа (4.34) расходится. Поэтому условие нормировки выбирается как обобщение формулы (4.35):

$$\int d^3x \psi_k^*(\vec{x}) \psi_q(\vec{x}) = \delta(k - q), \quad (4.36)$$

где символ Кронекера заменен на δ -функцию Дирака.

4.2.3 Суперпозиция квантовых состояний

Заметим, что для потенциала не зависящего явно от времени общее решение уравнения Шредингера (4.24) может быть записано как линейная суперпозиция решений (4.32)

$$\Psi(t, \vec{x}) = \sum_n a_n \exp \left[-i \frac{E_n t}{\hbar} \right] \psi_n(\vec{x}). \quad (4.37)$$

Условие нормировки для волновой функции (4.37) сведется к условию

$$\sum_n |a_n|^2 = 1. \quad (4.38)$$

Его физический смысл состоит в том, что сумма всех вероятностей обнаружить квантовую систему в различных состояниях n равна единице. Отметим, что для такого решения уже нет смысла говорить об определенном значении энергии. Можно только говорить о ее среднем значении

$$\langle E \rangle = \sum_n |a_n|^2 E_n. \quad (4.39)$$

В случае непрерывного спектра суммирование в (4.37)-(4.39) следует заменить на интегрирование по непрерывному индексу

$$\begin{aligned} \Psi(t, \vec{x}) &= \int dk a(k) \exp \left[-i \frac{E(k)t}{\hbar} \right] \psi_k(\vec{x}), \\ \int dk |a(k)|^2 &= 1, \\ \langle E \rangle &= \int dk |a(k)|^2 E(k). \end{aligned} \quad (4.40)$$

4.3 Задачи

Задача 4.1.

Доказать, что для коммутатора $[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]]$ выполняется тождество Якоби.

Задача 4.2.

Построить ортонормированный набор собственных функций эрмитового оператора, который соответствует дискретному спектру.

Решение³

Пусть $\psi_{n\alpha}(\vec{x})$ — нормированная собственная функция эрмитового оператора \hat{F} , которая соответствует собственному значению F_n

$$\begin{aligned}\hat{F}\psi_{n\alpha}(\vec{x}) &= F_n\psi_{n\alpha}(\vec{x}) \\ \int |\psi_{n\alpha}(\vec{x})|^2 d^3x &= 1,\end{aligned}\tag{4.41}$$

причем оба индекса дискретны. Индекс n нумерует собственные значения, а индекс α введен для нумерации вырожденных состояний при фиксированном n . Пусть F_{n_1} и F_{n_2} — два собственных значения оператора. Умножим слева уравнение на собственные значения для n_1 на функцию $\psi_{n_2\alpha_2}^*(\vec{x})$ и проинтегрируем по объему

$$\int \psi_{n_2\alpha_2}^*(\vec{x})\hat{F}\psi_{n_1\alpha_1}(\vec{x})d^3x = F_{n_1} \int \psi_{n_2\alpha_2}^*(\vec{x})\psi_{n_1\alpha_1}(\vec{x})d^3x.\tag{4.42}$$

Возьмем эрмитовое сопряжение для второго уравнения на собственные значения

$$\psi_{n_2\alpha_2}^*(\vec{x})\hat{F} = F_{n_2}\psi_{n_2\alpha_2}^*(\vec{x}),\tag{4.43}$$

где мы воспользовались эрмитовостью оператора и условием, что его собственные значения действительны. Далее умножим справа условие (4.43) на $\psi_{n_1\alpha_1}(\vec{x})$ и проинтегрируем

$$\int \psi_{n_2\alpha_2}^*(\vec{x})\hat{F}\psi_{n_1\alpha_1}(\vec{x})d^3x = F_{n_2} \int \psi_{n_2\alpha_2}^*(\vec{x})\psi_{n_1\alpha_1}(\vec{x})d^3x.\tag{4.44}$$

³В изложении этого вопроса мы следуем книге: А.С. Давыдов, Квантовая механика. М, Наука, 1973 г.

Отнимая от (4.42) условие (4.44) получим

$$(F_{n_1} - F_{n_2}) \int \psi_{n_2\alpha_2}^*(\vec{x}) \psi_{n_1\alpha_1}(\vec{x}) d^3x = 0. \quad (4.45)$$

Если $n_1 \neq n_2$ то $F_{n_1} - F_{n_2} \neq 0$ и из (4.45) находим

$$\int \psi_{n_2\alpha_2}^*(\vec{x}) \psi_{n_1\alpha_1}(\vec{x}) d^3x = \delta_{n_1n_2} f_{\alpha_1\alpha_2}. \quad (4.46)$$

При $n_1 = n_2 = n$ выражение $F_{n_1} - F_{n_2}$ обращается в нуль и функции $\psi_{n\alpha_1}(\vec{x})$ и $\psi_{n\alpha_2}(\vec{x})$ не обязаны быть ортогональными. Тем не менее вместо набора функций $\psi_{n1}(\vec{x})$, $\psi_{n2}(\vec{x})$, ..., $\psi_{nr}(\vec{x})$, которые соответствуют одному r -кратно вырожденному собственному состоянию можно найти набор из r других волновых функций $\tilde{\psi}_{n1}(\vec{x})$, $\tilde{\psi}_{n2}(\vec{x})$, ..., $\tilde{\psi}_{nr}(\vec{x})$, которые соответствуют тому же собственному значению E_n и взаимно ортогональны.

Убедимся в этом на примере, когда вырожденность уровня равна $r = 2$. Положим, что новые функции суть

$$\tilde{\psi}_{n1}(\vec{x}) = \psi_{n1}(\vec{x}) \text{ и } \tilde{\psi}_{n2}(\vec{x}) = N_2[\psi_{n1}(\vec{x}) + \alpha\psi_{n2}(\vec{x})]. \quad (4.47)$$

Вследствии линейности оператора \hat{F} эти функции будут его собственными функциями с собственными значениями F_n . Потребуем чтобы

$$\int \tilde{\psi}_{n1}^*(\vec{x}) \tilde{\psi}_{n2}(\vec{x}) d^3x = 0, \quad (4.48)$$

откуда

$$\alpha = - \left[\int \psi_{n1}^*(\vec{x}) \psi_{n2}(\vec{x}) d^3x \right]^{-1}. \quad (4.49)$$

Константу N_2 легко найти из условия нормировки. В результате для функций $\tilde{\psi}_{n\alpha}(\vec{x})$ имеем условие ортонормированности

$$\int \tilde{\psi}_{n_1\alpha_1}^*(\vec{x}) \tilde{\psi}_{n_2\alpha_2}(\vec{x}) d^3x = \delta_{n_1n_2} \delta_{\alpha_1\alpha_2}. \quad (4.50)$$

Глава 5

Квантовая механика в простейших одномерных системах

5.1 Свободное движение частицы

В качестве первого примера рассмотрим случай, когда потенциал $U = 0$ и квантовая частица является свободной. Движение является стационарным и уравнение Шредингера (4.33) сводится к

$$-\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} \psi(\vec{x}) = E \psi(\vec{x}). \quad (5.1)$$

Для простоты обсудим сначала поведение частицы в одномерном пространстве. Одномерное уравнение Шредингера имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = E \psi(x). \quad (5.2)$$

Оно имеет два решения

$$\psi_p(x) = A \exp\{\pm i k x\}, \text{ где } k = \frac{p}{\hbar}, \quad (5.3)$$

причем волновое число k принимает любые реальные значения, а энергия $E(p)$ согласно уравнению Шредингера (5.1) представляет кинетическую энергию частицы массы m

$$E(p) = \frac{p^2}{2m}. \quad (5.4)$$

Ввиду того, что фаза нормировочного множителя не влияет на физический ответ, положим константу нормировки A действительной величиной и зафиксируем нормировку из условия (4.36)

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_{p'}^*(x) \psi_p(x) &= A^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp \left\{ \pm i \frac{(p - p')x}{\hbar} \right\} = \\ &= 2\pi A^2 \hbar \delta(p - p') = \delta(p - p').\end{aligned}\quad (5.5)$$

Откуда

$$A = \sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}}. \quad (5.6)$$

Окончательно получаем два выражения для волновой функции $\Psi(t, x)$, которые соответствуют одной энергии (5.4)

$$\begin{aligned}\Psi_1(t, x) &= \sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} (E(p)t - px) \right\}, \\ \Psi_2(t, x) &= \sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} (E(p)t + px) \right\}.\end{aligned}\quad (5.7)$$

Подействуем на найденные решения оператором импульса (4.22)

$$\begin{aligned}\hat{p}\Psi_1(t, x) &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} (E(p)t - px) \right\} = \\ &= p \sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} (E(p)t - px) \right\} = \\ &= p\Psi_1(t, x), \\ \hat{p}\Psi_2(t, x) &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} (E(p)t + px) \right\} = \\ &= -p\Psi_2(t, x).\end{aligned}\quad (5.8)$$

Таким образом, решения $\Psi_1(t, x)$ и $\Psi_2(t, x)$ соответствуют свободным частицам с одинаковой энергией и импульсами p и $-p$. Причем оба решения представляют плоскую волну. Однако в первом случае волна распространяется из точки $x = -\infty$ в точку $x = +\infty$. Во втором случае она распространяется в обратном направлении.

Уже говорилось, что наличие вырождения, как правило, связано с симметрией гамильтониана. В данном случае гамильтониан $\hat{H} = -\frac{\hbar^2 \Delta}{2m}$ не изменяется при инверсии пространства, т.е. при дискретном преобразовании $x \rightarrow -x$, что и приводит к вырождению спектра. Действительно легко видеть, что при таком преобразовании одно из решений (5.7) переходит в другое

$$\begin{aligned}\Psi_1(t, x) &\rightarrow \Psi_1(t, -x) = \Psi_2(t, x), \\ \Psi_2(t, x) &\rightarrow \Psi_2(t, -x) = \Psi_1(t, x).\end{aligned}\quad (5.9)$$

Теперь рассмотрим движения свободной частицы в трехмерном пространстве. В уравнении Шредингера (5.1) разделяются переменные x , y и z и полная волновая функция принимает вид

$$\begin{aligned}\Psi_{\vec{p}}(t, \vec{x}) &= e^{-\frac{i}{\hbar} E(\vec{p})t} \psi_{p_x}(t, x) \psi_{p_y}(t, y) \psi_{p_z}(t, z) = \\ &= \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} [E(\vec{p})t - \vec{p}\vec{x}] \right\},\end{aligned}\quad (5.10)$$

где

$$E(\vec{p}) = \frac{\vec{p}^2}{2m}. \quad (5.11)$$

Отметим, что в отличие от одномерной задачи теперь одному значению энергии соответствует континуум волновых функций, которые отличаются направлением импульса и имеют модуль фиксированный соотношением (5.11). Наличие этого вырождения связано с непрерывной симметрией гамильтониана относительно вращений системы координат.

В заключение этого раздела рассмотрим еще один способ нормировки плоской волны, который используется в теории рассеяния. В этом случае удобно нормировать волновую функцию так, чтобы поток вероятности \vec{j} равнялся скорости частицы \vec{v} :

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} [\Psi_{\vec{p}}^*(t, \vec{x}) \nabla \Psi_{\vec{p}}(t, \vec{x}) - \nabla \Psi_{\vec{p}}^*(t, \vec{x}) \Psi_{\vec{p}}(t, \vec{x})] = \vec{v}, \quad (5.12)$$

где $\vec{v} = \frac{\vec{p}}{m}$. Откуда получаем

$$\Psi_{\vec{p}}(t, \vec{x}) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} [E(\vec{p})t - \vec{p}\vec{x}] \right\}. \quad (5.13)$$

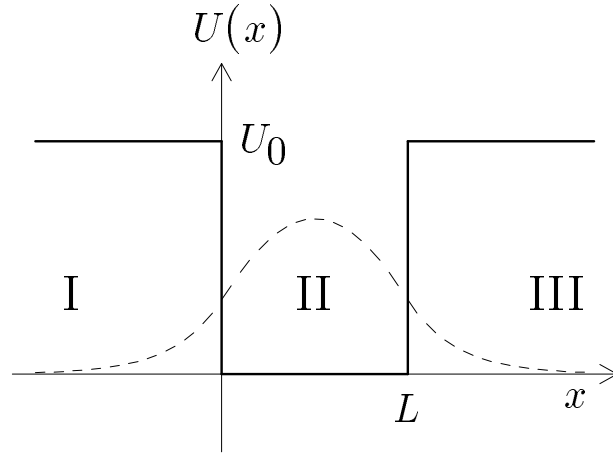


Рис. 5.1: Прямоугольная потенциальная яма с конечной глубиной. Пунктир изображает волновую функцию низжайшего энергетического состояния для случая $E < U_0$. Волновая функция не пропадает вне области ямы и поэтому имеет место конечная вероятность обнаружить здесь квантовую частицу.

5.2 Частица в одномерной прямоугольной яме

Пусть потенциал имеет форму изображенную на Рис. 5.1. Будем рассматривать решения стационарного уравнения Шредингера в трех отдельных областях I, II и III.

Внутри ямы (область II) уравнение Шредингера сводится к

$$\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + E\psi = 0. \quad (5.14)$$

Оно имеет два решения (5.3). Поэтому общее решение в этой области запишем как их суперпозицию. Очевидно, что решение всегда можно преобразовать к виду

$$\psi_{II}(x) = C \sin(xk + \delta), \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}. \quad (5.15)$$

Параметры C и δ следует определить из условий “сшивки” с решениями в областях I и III. В этих областях уравнение Шредингера имеет вид

$$\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + (E - U_0)\psi = 0. \quad (5.16)$$

Его решения суть

$$\psi_{I,III}(x) = A \exp(\pm iqx), \text{ где } q = \sqrt{\frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2}}. \quad (5.17)$$

В зависимости от того, энергия меньше или больше величины U_0 , решения (5.17) имеют разный характер. В первом случае они бесконечно убывают или возрастают на бесконечности. Во втором случае они осциллируют на бесконечности. Рассмотрим отдельно каждый из этих случаев.

1. Случай $E < U_0$. Связанные состояния

Решения бесконечнорастущие на бесконечности не являются физическими. Поэтому следует выбрать следующие решения в областях I и III

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &= A \exp(\kappa x), \quad \psi_{III}(x) = B \exp(-\kappa x), \\ \text{где } \kappa &= \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}. \end{aligned} \quad (5.18)$$

Таким образом, в отличие от классической механики, где частица не может находиться вне области ямы, в квантовом случае имеет место ненулевая вероятность обнаружить частицу в областях I и III. Для определения четырех действительных констант A , B , C и δ необходимо наложить пять условий — непрерывности волновой функции и ее производной во всей области значений x

$$\begin{aligned} \psi_I(0) &= \psi_{II}(0), \quad \psi'_I(0) = \psi'_{II}(0), \\ \psi_{II}(L) &= \psi_{III}(L), \quad \psi'_{II}(L) = \psi'_{III}(L) \end{aligned} \quad (5.19)$$

и условие нормировки

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2 = 1. \quad (5.20)$$

Получается переопределенная система, которая имеет решения только при определенных (квантованных) значениях энергии E_n . Для

определения энергии достаточно рассмотреть условие сшивки логарифмических производных волновой функции в точках $x = 0$ и $x = L$

$$\begin{aligned}\frac{\psi_I(0)}{\psi'_I(0)} &= \frac{\psi_{II}(0)}{\psi'_{II}(0)}, \\ \frac{\psi_{II}(L)}{\psi'_{II}(L)} &= \frac{\psi_{III}(L)}{\psi'_{III}(L)}.\end{aligned}\tag{5.21}$$

Откуда получаем систему двух уравнений для двух неизвестных E и δ (напомним, что κ и k выражаются через E по формулам (5.15) и (5.18))

$$\begin{cases} \kappa = k \operatorname{ctg} \delta \\ -\kappa = k \operatorname{ctg}(Lk + \delta), \end{cases}\tag{5.22}$$

которая эквивалентна системе

$$\begin{cases} \sin \delta = \frac{\hbar k}{\sqrt{2mU_0}} \\ \sin(Lk + \delta) = -\frac{\hbar k}{\sqrt{2mU_0}}. \end{cases}\tag{5.23}$$

Далее ограничимся рассмотрением предельного случая, когда $U_0 \rightarrow \infty$ (Рис. 5.2). Тогда уравнения (5.23) сводятся к

$$\begin{cases} \sin \delta = 0 \\ \sin(Lk + \delta) = 0. \end{cases}\tag{5.24}$$

Из верхнего уравнения следует $\delta = 0$, а из нижнего

$$k = \frac{n\pi}{L}, \quad n = 1, 2, \dots.\tag{5.25}$$

Соответственно энергия равна

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{L} \right)^2,\tag{5.26}$$

а волновая функция имеет вид

$$\psi_n(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } x \leq 0 \\ \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) & \text{при } 0 < x < L \\ 0 & \text{при } x \geq L \end{cases}\tag{5.27}$$

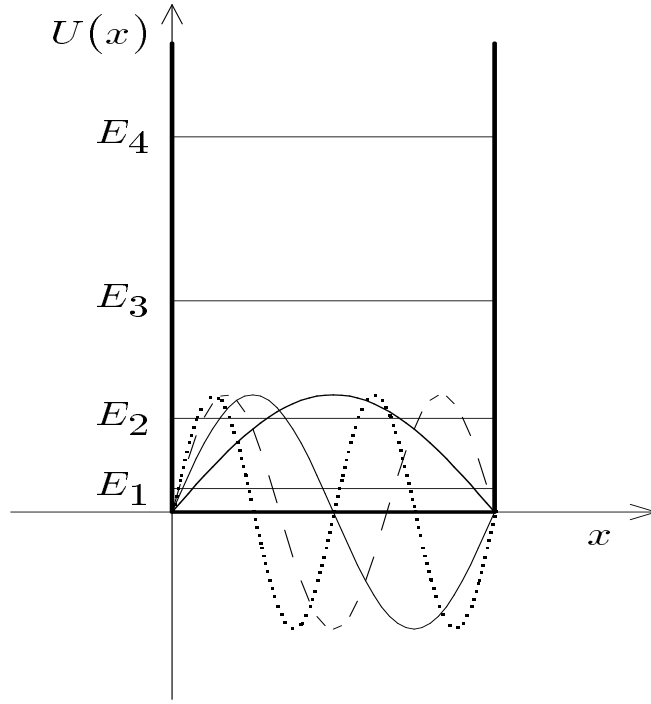


Рис. 5.2: Прямоугольная потенциальная яма бесконечной глубины. Кривые изображают волновые функции нижайших четырех энергетических состояний E_1 , E_2 , E_3 и E_4 . Непрерывная жирная кривая — $\psi_1(x)$, непрерывная тонкая кривая — $\psi_2(x)$, пунктир — $\psi_3(x)$ и точечная кривая — $\psi_4(x)$. Число узлов у волновой функции равно $n - 1$.

Спецификой ямы бесконечной глубины является то, что в ней вероятность обнаружить частицу вне ямы равна нулю.

Из (5.27) видим, что число узлов волновой функции определяется квантовым числом n и равно $n - 1$.

Если в выражении для энергии перейти к пределу $L \rightarrow 0$, то произойдет “выталкивание” уровней $E_n \rightarrow \infty$. Это явление легко понять с точки зрения принципа неопределенностей: в указанном пределе $\Delta x \rightarrow 0$ и, следовательно, $\Delta p = \frac{\hbar}{\Delta x} \rightarrow \infty$, а, значит, и $E \rightarrow \infty$.

2. Случай $E > U_0$. Рассеяние на потенциальной яме

В этом случае решения вне ямы имеют осциллирующий характер и содержит не одну, а две константы

$$\psi_{I,III}(x) = A_1^{I,III} \exp \left\{ \frac{ix}{\hbar} \sqrt{2mE} \right\} + A_2^{I,III} \exp \left\{ -\frac{ix}{\hbar} \sqrt{2mE} \right\}. \quad (5.28)$$

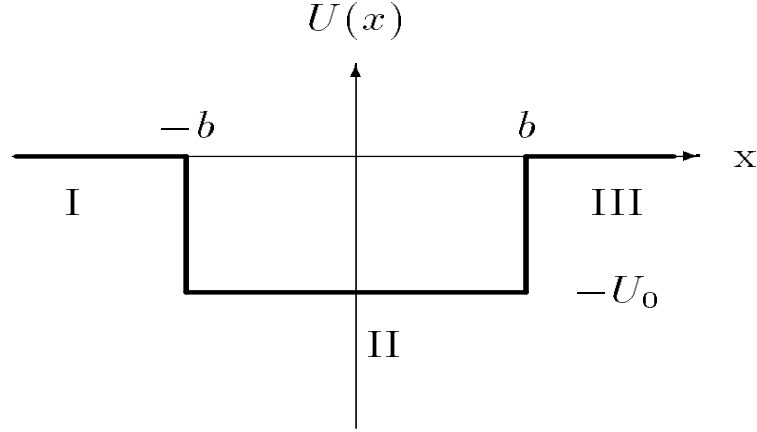


Рис. 5.3: Прямоугольная потенциальная яма. В случае, когда $E > 0$, классическая частица движется свободно во всем пространстве ускоряясь в области действия потенциала. Волна частично проходит через область действия потенциала, а частично отражается.

Поэтому граничные условия разрешены при любых значениях k и квантование энергии отсутствует.

Чтобы решить эту задачу будем отсчитывать энергию не от дна ямы, а от ее поверхности. Кроме того удобно расположить яму симметрично относительно начала координат (Рис. 5.3).

Решения уравнения Шредингера для трех областей имеют вид

$$\begin{aligned}
 \psi_I &= A_1 e^{ik_0 x} + B_1 e^{-ik_0 x}, \quad k_0 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \\
 \psi_{II} &= A_2 e^{ikx} + B_2 e^{-ikx}, \quad k = \sqrt{\frac{2m(E + U_0)}{\hbar^2}}, \\
 \psi_{III} &= A_3 e^{ik_0 x} + B_3 e^{-ik_0 x}, \quad k_0 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}},
 \end{aligned} \tag{5.29}$$

Пусть частица двигается слева направо вдоль оси x . Достигая потенциальной ямы она испытывает действие сил. Причем она либо отразится, либо пройдет через яму. Значит в области III будет только падающая волна и необходимо положить коэффициент $B_3 = 0$.

По физическому смыслу волновой функции величина $D = \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2$ равна вероятности прохождения волны через потенциал. Ее будем называть *коэффициентом прохождения*, а величину $R = \left| \frac{B_1}{A_1} \right|^2$ — *коэффициентом отражения*. Для того, чтобы их вычислить необходимо решить уравнения на границах областей:

$$\begin{aligned} A_1 e^{-ik_0 b} + B_1 e^{ik_0 b} &= A_2 e^{-ikb} + B_2 e^{ikb} \\ k_0 (A_1 e^{-ik_0 b} - B_1 e^{ik_0 b}) &= k (A_2 e^{-ikb} - B_2 e^{ikb}) \\ A_2 e^{ikb} + B_2 e^{-ikb} &= A_3 e^{ik_0 b} \\ k (A_2 e^{ikb} - B_2 e^{-ikb}) &= k_0 A_3 e^{ik_0 b} \end{aligned} \quad (5.30)$$

Из первых двух уравнений получаем

$$A_1 = \frac{k + k_0}{2k_0} A_2 e^{i(k_0 - k)b} + \frac{k_0 - k}{2k_0} B_2 e^{i(k_0 + k)b}, \quad (5.31)$$

$$B_1 = \frac{k_0 - k}{2k_0} A_2 e^{-i(k + k_0)b} + \frac{k_0 + k}{2k_0} B_2 e^{i(k - k_0)b}. \quad (5.32)$$

Из двух последних

$$\begin{aligned} A_2 &= \frac{k + k_0}{2k} A_3 e^{i(k_0 - k)b}, \\ B_2 &= \frac{k - k_0}{2k} A_3 e^{i(k_0 + k)b}. \end{aligned} \quad (5.33)$$

Подставляя эти выражения в (5.31) выразим коэффициент A_1 через A_3 . В результате для коэффициента прохождения D получим

$$D = \left[1 + \frac{1}{4} \left(\frac{k_0}{k} - \frac{k}{k_0} \right)^2 \sin^2(2bk) \right]^{-1}. \quad (5.34)$$

Аналогично вычисляется коэффициент отражения

$$R = 1 - D. \quad (5.35)$$

Из (5.34) следует, что при резонансных энергиях

$$\begin{aligned} E_n &= \frac{(\hbar n \pi)^2}{8b^2 m} - U_0 \\ n^2 &\geq \frac{8b^2 m U_0}{(\hbar \pi)^2} \end{aligned} \quad (5.36)$$

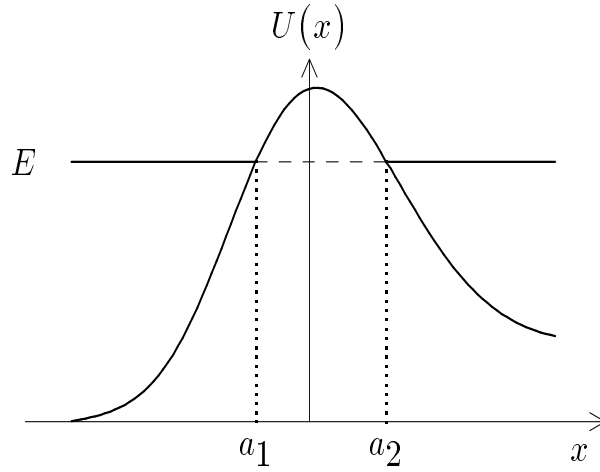


Рис. 5.4: Прохождение квантовой частицы через потенциальный барьер (туннельный эффект). Область $a_1 < x < a_2$ запрещена для движения классической частицы.

в яме укладывается целое число волн, а волновое число удовлетворяет соотношению $2kb = n\pi$. В этом случае $D = 1$, $R = 0$, т.е. волна полностью проходит через потенциал.

5.3 Туннельный эффект

Рассмотрим теперь, что произойдет, если происходит рассеяние на положительном потенциале

$$U(x) = \begin{cases} 0, & \text{если } x < -b \\ U_0 > 0, & \text{если } -b < x < b \\ 0, & \text{если } x > b \end{cases} \quad (5.37)$$

Для этого можно воспользоваться формулами (5.29-5.36) заменив в них $U_0 \rightarrow -U_0$. Следует отдельно рассмотреть два случая: когда $E > U_0$ и $E < U_0$.

В первом случае коэффициент прохождения описывается формулой (5.34) с новым выражением для волнового числа $k = \sqrt{\frac{2m(E-U_0)}{\hbar^2}}$. Особый интерес представляет второй случай. В классической механике частица, движущаяся с энергией $E < U_0$ не может перепрыгнуть потенциальный барьер и будет полностью отражена от него. Иное место имеет в квантовой механике. Действительно, в этом случае

волновое число k станет мнимым $k = i\kappa$, где $\kappa = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}$ и выражение (5.34) для коэффициента прохождения преобразуется к

$$D = \left[1 + \frac{1}{4} \left(\frac{k_0}{\kappa} - \frac{\kappa}{k_0} \right)^2 \operatorname{sh}^2(2b\kappa) \right]^{-1}. \quad (5.38)$$

Физически это означает, что в квантовой механике частица может проникать через потенциальный барьер даже в случае, если ее энергия меньше высоты энергетического барьера. Этот эффект называют *туннельным эффектом*.

Если $\kappa b \gg 1$, то

$$D \approx 16 \left(\frac{\kappa k_0}{k_0^2 - \kappa^2} \right)^2 \exp \left[-\frac{4b}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} \right]. \quad (5.39)$$

Отсюда видно, что вероятность проникновения частицы через барьер экспоненциально убывает с увеличением ширины барьера. Она также убывает с увеличением его высоты U_0 и массы частицы.

Полезно еще привести формулу для коэффициента прохождения в случае потенциала произвольной формы. Пренебрегая предэкспоненциальным множителем получается следующее выражение

$$D \approx \exp \left[-\frac{2}{\hbar} \int_{a_1}^{a_2} \sqrt{2m(U(x) - E)} dx \right], \quad (5.40)$$

где интеграл берется по классически недопустимой области (см. Рис. 5.4).

Туннельный эффект лежит в основе многих явлений в физике твердого тела, атомной, молекулярной и ядерной физики. Так в атомной физике туннельный эффект ответственен за автоионизацию атома в сильном электрическом поле. В ядерной физике он определяет α -распад ядер. В физике твердого тела туннельный эффект приводит к таким явлениям, как автоэлектронная эмиссия, эффект Джозефсона и др.

5.3.1 Автоэлектронная эмиссия

Рассмотрим в качестве примера явление автоэлектронной эмиссии (еще называется туннельная или полевая эмиссия), т.е. явление ис-

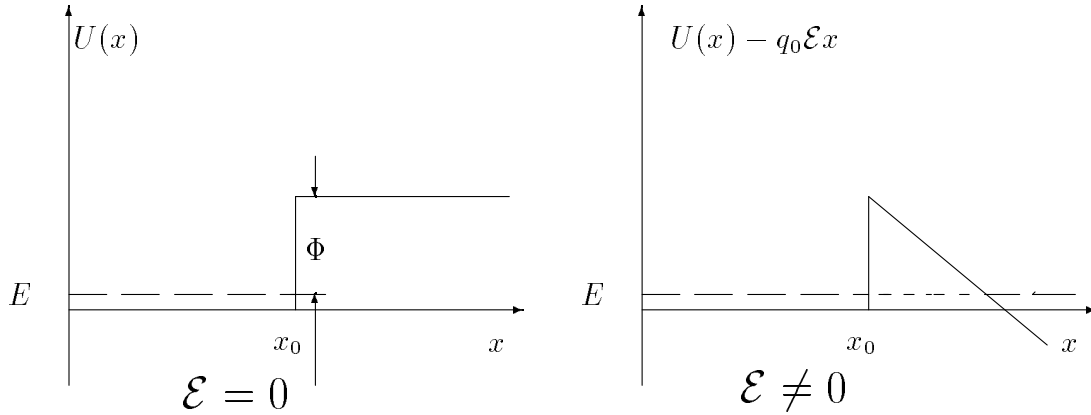


Рис. 5.5: При включении внешнего электрического поля \mathcal{E} электрон получает возможность туннелировать из металла.

пускания электронов веществом под действием внешнего электрического поля высокой напряженности.

В отсутствии внешнего электрического поля электрону для выхода из металла необходимо сообщить дополнительную энергию Φ (работу выхода). Поэтому можно представить электрон, как квантовую частицу с энергией E , находящуюся в потенциальном ящике граница которого x_0 совпадает с границей металла (Рис. 5.5, левый). При включении внешнего электрического поля \mathcal{E} с правой стороны от потенциальной ямы создается дополнительный потенциал $-q_0\mathcal{E}x$ (Рис. 5.5, правый) и электрон получает возможность покинуть металл посредством туннельного перехода без сообщения ему дополнительной энергии.

5.4 Гармонический осцилятор

В классической механике устойчивому равновесию соответствует такое положение системы ρ_0 , в котором потенциальная энергия минимальна $U(\rho_0)$. Будучи отклоненной от положения ρ_0 система начинает совершать колебания, причем в общем случае эти колебания не обязательно будут гармоническими. Однако они становятся таковы-

ми, если ограничиться малыми отклонениями $x = \rho - \rho_0$. Действительно, в этом случае потенциал можно разложить в ряд

$$U(\rho) = U(\rho_0) + \frac{1}{2}\kappa x^2 + \mathcal{O}(x^3), \quad (5.41)$$

где $\kappa = \left. \frac{d^2 U}{d\rho^2} \right|_{\rho=\rho_0}$. Будем в дальнейшем отсчитывать энергию от уровня $U(\rho_0)$, т.е. положим $U(\rho_0) = 0$ (Рис. 5.6). Лагранжиан системы примет вид

$$L = \frac{M\dot{x}^2}{2} - \frac{1}{2}\kappa x^2 \quad (5.42)$$

и классическое уравнение движения

$$\ddot{x} = -\omega^2 x, \quad \omega^2 = \frac{\kappa}{M} \quad (5.43)$$

имеет решение

$$x = a \cos(\omega t + \delta), \quad (5.44)$$

где амплитуда a и фазовый сдвиг δ определяются из начальных условий. Отсюда легко находятся классические энергия и среднеквадратичное отклонение от положения равновесия

$$E_{\text{класс.}} = \frac{1}{2}Ma^2\omega^2, \quad \langle x^2 \rangle_{\text{класс.}} = \frac{1}{2}a^2. \quad (5.45)$$

Из (5.45), в частности, следует соотношение между энергией и среднеквадратичным отклонением для классического осциллятора

$$E_{\text{класс.}} = M\omega^2 \langle x^2 \rangle_{\text{класс.}}. \quad (5.46)$$

В результате если классическое среднеквадратичное отклонение от точки равновесия равно нулю $\langle x^2 \rangle_{\text{класс.}} = 0$, то соответствующая энергия тоже равна нулю $E_{\text{класс.}} = 0$.

Однако в квантовой механике это не так: если устраним колебания, то в силу принципа неопределенностей импульс должен быть бесконечно большим. Отвечающая ему энергия тоже окажется бесконечной. Поэтому даже для нижайшего энергетического уровня среднеквадратичное отклонение должно быть ненулевым. Это можно представить как раскачку частицы вакуумом. Такие колебания

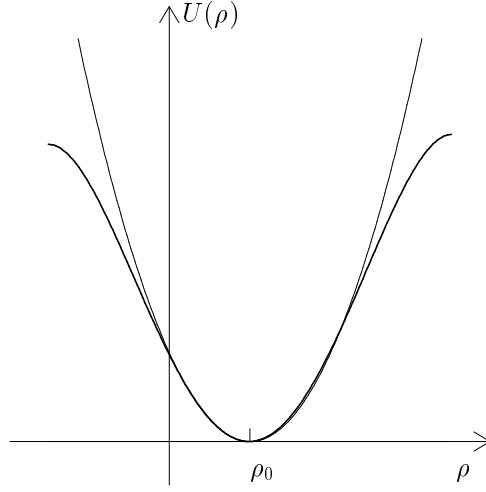


Рис. 5.6: В окрестности минимума $\rho \sim \rho_0$ потенциал $U(\rho)$ может быть заменен на $\frac{\kappa}{2}(\rho - \rho_0)^2$ (изображен тонкой кривой).

называют *нулевыми*, а соответствующая им энергия *нулевой энергией* E_0 . Покажем это решив соответствующее уравнение Шредингера:

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2M} + \frac{1}{2}\kappa x^2 \right) \Psi(x) = E\Psi(x). \quad (5.47)$$

Вводя безразмерные “импульс”, “координату” и “энергию”

$$\hat{Q} = \frac{\hat{p}}{\sqrt{\hbar\omega M}}, \quad \xi = \sqrt{\frac{\omega M}{\hbar}}x, \quad \varepsilon = \frac{2E}{\hbar\omega} \quad (5.48)$$

получим

$$(\hat{Q}^2 + \xi^2)\varphi(\xi) = \varepsilon\varphi(\xi). \quad (5.49)$$

Найдем коммутационное соотношение для новых канонических переменных

$$[\hat{Q}, \xi] = \left[\frac{\hat{p}}{\sqrt{\hbar\omega M}}, \sqrt{\frac{\omega M}{\hbar}}x \right] = \frac{1}{\hbar}[\hat{p}, x] = -i. \quad (5.50)$$

Из коммутационного соотношения (5.50) следует, что

$$\hat{Q} = \frac{1}{i} \frac{d}{d\xi} \quad (5.51)$$

и уравнение Шредингера примет вид

$$\left(-\frac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2\right) \varphi(\xi) = \varepsilon \varphi(\xi). \quad (5.52)$$

При $\xi \rightarrow \pm\infty$ это уравнение сводится к

$$\left(-\frac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2\right) \varphi(\xi) = 0, \text{ при } \xi \rightarrow \pm\infty \quad (5.53)$$

и имеет два решения

$$\varphi(\xi) = A_{\pm} e^{\pm \frac{1}{2}\xi^2}. \quad (5.54)$$

Ввиду того, что волновая функция должна убывать на бесконечности, следует положить $A_+ = 0$. Будем искать решение уравнения Шредингера (5.52) в виде

$$\varphi(\xi) = \sum_{j=0} a_j \xi^j e^{-\frac{1}{2}\xi^2}. \quad (5.55)$$

Задача состоит в

- выяснении условий, когда решения уравнения Шредингера, представленные в виде ряда (5.55), приводят к функциям, убывающих на бесконечности $\xi \rightarrow \pm\infty$ и
- нахождении коэффициентов a_j .

Первое выполняется, если ряд (5.55) обрывается при $j = n$, где $n = 0, 1, 2, \dots$. Найдем условие, при котором коэффициент $a_{n+1} = 0$. С этой целью представим производную $\varphi'(\xi)$ в виде

$$\varphi'(\xi) = \left[\sum_{j=0}^{n-2} b_j \xi^j + (na_n - a_{n-2})\xi^{n-1} - a_{n-1}\xi^n - a_n\xi^{n+1} \right] e^{-\frac{1}{2}\xi^2}, \quad (5.56)$$

где мы не уточняем явный вид коэффициентов b_j . Соответственно вторая производная равна:

$$\begin{aligned} \varphi''(\xi) = & \left\{ \sum_{j=0}^{n-1} c_j \xi^j - [(2n+1)a_n - a_{n-2}]\xi^n + \right. \\ & \left. + a_{n-1}\xi^{n+1} + a_n\xi^{n+2} \right\} e^{-\frac{1}{2}\xi^2}, \end{aligned} \quad (5.57)$$

где нам не важен явный вид коэффициентов c_j . Подставляя (5.57) в уравнение Шредингера получим:

$$-\sum_{j=0}^{n-1} c_j \xi^j + (2n+1)a_n \xi^n + \sum_{j=0}^{n-3} a_j \xi^{j+2} = \varepsilon \sum_{j=0}^{n-1} a_j \xi^j + \varepsilon a_n \xi^n. \quad (5.58)$$

Приравнивая координаты при старших степенях получим квантование безразмерной “энергии”

$$\varepsilon = 2n + 1, \quad (5.59)$$

что соответствует энергии представленной в обычных единицах

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega, \quad (5.60)$$

причем $n = 0, 1, 2, \dots$. Таким образом основному состоянию соответствует значение квантового числа $n = 0$. При этом нулевая энергия $E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega \neq 0$. Согласно (5.55) волновая функция основного состояния гармонического осциллятора равна

$$\varphi_0(\xi) = \left(\frac{1}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}\xi^2}, \quad (5.61)$$

где коэффициент перед экспонентой определяется из условия нормировки

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi \varphi_0^2(\xi) = 1. \quad (5.62)$$

Можно показать, что для произвольного n волновые функции выражаются через полиномы Эрмита

$$\varphi_n(\xi) = A_n H_n(\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi^2}, \quad \text{где } A_n = (\sqrt{\pi} 2^n n!)^{-\frac{1}{2}} \quad (5.63)$$

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}. \quad (5.64)$$

Определенные так волновые функции удовлетворяют условию ортонормированности

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi \varphi_{n'}(\xi) \varphi_n(\xi) = \delta_{nn'}. \quad (5.65)$$

Используя свойства полиномов Эрмита можно показать (см. *Задачу 5.1*), что

$$\langle x^2 \rangle_n \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 |\Psi_n(x)|^2 = \left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{\hbar}{M\omega} \quad (5.66)$$

и, следовательно, в квантовом случае выполняется соотношение

$$E_n = M\omega^2 \langle x^2 \rangle_n. \quad (5.67)$$

Важным отличием этого результата от его классического аналога (5.46) является то, что теперь (согласно (5.66)) среднее-квадратичное отклонение от положения равновесия не может равняться нулю.

5.4.1 Гармонический осциллятор в представлении чисел заполнения

Рассмотрим другой способ решения уравнения Шредингера (5.49), при котором не используется явный вид операторов импульса \hat{Q} и координаты $\hat{\xi}$, а только их коммутационное соотношение (5.50).

Введем новые операторы

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{1}{2}}(i\hat{Q} + \hat{\xi}), \hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{1}{2}}(-i\hat{Q} + \hat{\xi}). \quad (5.68)$$

Из (5.50) находим коммутационное соотношение между операторами \hat{a} и \hat{a}^\dagger

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1. \quad (5.69)$$

Перепишем уравнение Шредингера через новые операторы

$$(2\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1)\varphi = \varepsilon\varphi. \quad (5.70)$$

Пусть $|n\rangle \equiv \varphi_n$ — собственная функция оператора Гамильтона записанного в новых переменных, которые соответствуют “энергии” ε_n . Эрмитово сопряженное состояние будем в дальнейшем обозначать $\langle n|$. Докажем, что волновая функция $a|n\rangle$ тоже будет собственной функцией гамильтониана, но с собственным значением $\varepsilon - 2$. Используя коммутационное соотношение (5.68) получим

$$(2\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1)a|n\rangle = a(2\hat{a}^\dagger\hat{a} - 1)|n\rangle = (\varepsilon_n - 2)a|n\rangle. \quad (5.71)$$

Тогда волновая функция $a^2|n\rangle$ соответствует “энергии” $\varepsilon_n - 4$ и т.д. Однако энергия не может быть отрицательна. Отсюда заключаем, что на каком-то этапе волновая функция превратится в ноль и процедура оборвется. Очевидно, что последняя ненулевая волновая функция соответствует минимальной энергии гармонического осциллятора. Обозначим его $|0\rangle$:

$$a|0\rangle = 0. \quad (5.72)$$

При этом сопряженное ему состояние определяется как таковое, для которого выполняется

$$\langle 0|\hat{a}^\dagger = 0, \text{ причем } \langle 0|0\rangle = 1. \quad (5.73)$$

Используя коммутационные соотношения для операторов \hat{a} и \hat{a}^\dagger можно убедиться (см. *Задачу 5.2*), что ортонормированные функции равны

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle, \quad \langle n'|n\rangle = \delta_{nn'} \quad (5.74)$$

и являются собственными функциями оператора $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ с собственными значениями n :

$$\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = n|n\rangle. \quad (5.75)$$

Эрмитово-сопряженная функция к $|n\rangle$ есть

$$\langle n| = \frac{1}{\sqrt{n!}}\langle 0|\hat{a}^n. \quad (5.76)$$

Теперь безразмерная “энергия” легко вычисляется и дает результат (5.59). На основании свойства (5.75) оператор $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ принято называть *оператором числа частиц*. Действительно согласно (5.60) n -му возбуждению осциллятора формально соответствует энергия n квантов с частотой ω плюс энергия нулевого возбуждения (“вакуума”, $n = 0$) $E_n = \frac{1}{2}\hbar\omega$. Соответственно состояние с $n = 0$ называется *вакуумным состоянием*, а волновая функция $|0\rangle$ — волновой функцией вакуума.

Оператор \hat{a}^\dagger называется *оператором рождения*, а оператор \hat{a} — *оператором уничтожения*, т.к. первый, действуя на волновую функцию состояния с n квантами, преобразует ее в волновую функцию состояния с $n + 1$ квантами. В свою очередь второй оператор преобразует n -квантовое состояние в $(n - 1)$ -квантовое состояние.

Подчеркнем, что мы решили уравнение Шредингера основываясь только на коммутационных соотношениях между операторами импульса и координаты не используя явный их вид. Это означает, что можно использовать разные представления для этих операторов. Ранее рассматривался случай, когда \hat{x} был оператором умножения на x , а \hat{p} был оператором дифференцирования. Эту реализацию называют *координатным представлением*. Можно использовать и *импульсное представление*, в котором оператор импульса является оператором умножения на p , а оператор координаты — дифференциальный оператор:

$$\hat{p} = p, \quad \hat{x} = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial}{\partial p}. \quad (5.77)$$

В импульсном представлении волновая функция будет функцией импульса p .

Есть еще одно важное представление, которое называют *представлением чисел заполнения*. В этом представлении оператор числа частиц представляет бесконечную диагональную матрицу

$$\hat{N} \equiv \hat{a}\hat{a}^\dagger = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 2 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 3 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 4 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix}, \quad (5.78)$$

а операторы рождения и уничтожения следующие бесконечномерные матрицы

$$\hat{a} = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix}, \quad (5.79)$$

$$\hat{a}^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix}. \quad (5.80)$$

Прямým вычислением можно убедиться, что для операторов рождения и уничтожения выполняется необходимое перестановочное соотношение. Вектор состояния $|n\rangle$ в представлении чисел заполнения являет собой бесконечную матрицу-столбец, где всюду кроме $n+1$ -й строки стоят нули, а на $n+1$ -й строке — 1. Например,

$$|2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (5.81)$$

представляет двухквантовый вектор состояния.

5.5 Задачи

Задача 5.1.

Доказать, что среднее значение $\langle x^2 \rangle_n$ по волновым функциям гармонического осциллятора равно $\frac{\hbar}{M\omega} \left(n + \frac{1}{2}\right)$.

Решение

Сначала отметим, что из определения полиномов Эрмита сразу вытекает

$$\xi H_n(\xi) = \frac{1}{2} H_{n+1}(\xi) + n H_{n-1}(\xi). \quad (5.82)$$

Тогда

$$\xi^2 \varphi_n^2(\xi) = \frac{1}{4} [(n+1) \varphi_{n+1}^2(\xi) + n \varphi_{n-1}^2(\varphi) + \dots], \quad (5.83)$$

где многоточие означает член пропорциональный произведению $\varphi_{n+1}(\xi)\varphi_{n-1}(\xi)$. Последний в силу ортогональности волновых функций пропадает после интегрирования по $d\xi$. Интегрируя правую и левую части по $d\xi$ получим

$$\langle \xi^2 \rangle = n + \frac{1}{2}. \quad (5.84)$$

Далее используя связь безразмерной переменной ξ с отклонением от положения равновесия x получаем требуемый результат.

Покажем также как можно получить этот результат в формализме операторов рождения и уничтожения. По определению

$$\hat{\xi} = \sqrt{\frac{1}{2}}[\hat{a} + \hat{a}^\dagger], \quad (5.85)$$

а значит

$$\begin{aligned} (\hat{\xi})^2 &= \frac{1}{2}[\hat{a}^2 + (\hat{a}^\dagger)^2 + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}] = \\ &= \frac{1}{2}[\hat{a}^2 + (\hat{a}^\dagger)^2 + 2\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1]. \end{aligned} \quad (5.86)$$

Далее усредняя правую и левую части (5.86) с использованием того факта, что

$$\begin{aligned} \langle n|\hat{a}^2|n\rangle &\sim \langle n+2|n\rangle = 0 \\ \langle n|(\hat{a}^\dagger)^2|n\rangle &\sim \langle n|n+2\rangle = 0. \end{aligned} \quad (5.87)$$

и заменяя в (5.86) оператор числа частиц $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ на его собственное значение n получаем результат (5.84).

Задача 5.2.

Показать, что функции $|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle$ являются собственными функциями оператора $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ с собственными значениями n . Показать, что эти функции ортонормированы.

Решение

Воспользуемся коммутационным соотношением (5.69)

$$\begin{aligned}
\hat{a}^\dagger \hat{a} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle &= (\hat{a}^\dagger)^2 \hat{a} (\hat{a}^\dagger)^{(n-1)} |0\rangle + (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle = \\
&= (\hat{a}^\dagger)^3 \hat{a} (\hat{a}^\dagger)^{(n-2)} |0\rangle + 2(\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle = \dots = \\
&+ (\hat{a}^\dagger)^{(n+1)} \hat{a} |0\rangle + n(\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle.
\end{aligned} \tag{5.88}$$

Используя определение (5.73) вакуума $|0\rangle$ получаем окончательно

$$\hat{a}^\dagger |n\rangle = n |n\rangle. \tag{5.89}$$

Теперь надо показать, что состояния $|n\rangle$ ортонормированы. Рассмотрим величину $\langle 0 | \hat{a}^m (\hat{a}^\dagger)^n \rangle$ и будем сначала считать, что $m \geq n$. Производя последовательную перестановку последнего оператора рождения с операторами уничтожения найдем, что

$$\begin{aligned}
\langle 0 | \hat{a}^m (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle &= \\
&= \langle 0 | \hat{a}^{(m-1)} \hat{a}^\dagger \hat{a} (\hat{a}^\dagger)^{(n-1)} |0\rangle + \langle 0 | \hat{a}^{(m-1)} (\hat{a}^\dagger)^{(n-1)} |0\rangle = \\
&= \langle 0 | \hat{a}^{(m-1)} (\hat{a}^\dagger)^2 \hat{a}^2 (\hat{a}^\dagger)^{(n-2)} |0\rangle + \\
&\quad + 2 \langle 0 | \hat{a}^{(m-1)} (\hat{a}^\dagger)^{(n-1)} |0\rangle = \dots = \\
&= \langle 0 | \hat{a}^{(m-1)} (\hat{a}^\dagger)^{(n-m)} \hat{a} |0\rangle + n \langle 0 | \hat{a}^{(m-1)} (\hat{a}^\dagger)^{(n-1)} |0\rangle \\
&= n \langle 0 | \hat{a}^{(m-1)} (\hat{a}^\dagger)^{(n-1)} |0\rangle
\end{aligned} \tag{5.90}$$

Повторяя эту процедуру мы уменьшим число операторов рождения и уничтожения еще на единицу и получим дополнительный множитель $n - 1$ и т.д. В результате

$$\begin{aligned}
\langle 0 | \hat{a}^m (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle &= n! \langle 0 | \hat{a}^{(m-n)} |0\rangle = \\
&= \begin{cases} n! & \text{если } m = n \\ 0 & \text{если } m > n \end{cases}
\end{aligned} \tag{5.91}$$

В случае, когда $n \geq m$ будем поступать точно также, но только перемещая оператор рождения налево. Таким образом

$$\begin{aligned}
\langle 0 | \hat{a}^m (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle &= n! \langle 0 | (\hat{a}^\dagger)^{(n-m)} |0\rangle = \\
&= \begin{cases} n! & \text{если } m = n \\ 0 & \text{если } m < n \end{cases}
\end{aligned} \tag{5.92}$$

С учетом (5.91) и (5.92) убеждаемся в том, что наши состояния ортонормированы.

Глава 6

Момент импульса в квантовой теории

6.1 Момент импульса в классической механике

Из классической механики известно, что момент импульса

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}, \quad (6.1)$$

(где \vec{r} — радиус-вектор определяющий положение частицы и \vec{p} — ее импульс) является такой же равноправной переменной, как координата и импульс.

Для изолированной системы сохранение момента импульса является одним из важнейших законов природы. Кроме того момент импульса сохраняется и при движении частицы в сферически-симметричном поле, т.е. в поле зависящем только от расстояния r между некоторой точкой \vec{x}_0 пространства и местом положения частицы \vec{x} : $U(|\vec{x}_0 - \vec{x}|) = U(r)$. В этом случае удобно перейти к сферическим координатам. В них выражения для компонент момента импульса суть

$$\begin{aligned} L_1 &= -Mr^2(\dot{\theta}\sin\varphi + \dot{\varphi}\sin\theta\cos\theta\cos\varphi), \\ L_2 &= Mr^2(\dot{\theta}\cos\varphi - \dot{\varphi}\sin\theta\cos\theta\sin\varphi), \\ L_3 &= Mr^2\dot{\varphi}\sin^2\theta, \end{aligned} \quad (6.2)$$

а его квадрат записывается как

$$\vec{L}^2 = M^2r^4(\dot{\theta}^2 + \dot{\varphi}^2\sin^2\theta). \quad (6.3)$$

В свою очередь в сферических координатах энергия частицы равна

$$E = \frac{M\dot{\vec{x}}^2}{2} + U(r) = \frac{p_r^2}{2M} + \frac{\vec{L}^2}{2Mr^2} + U(r), \quad (6.4)$$

где $p_r = M\dot{r}$ — радиальный импульс.

Для дальнейшего также понадобятся скобки Пуассона для компонент вектора момента импульса

$$\{L_1, L_2\} = -L_3, \quad \{L_2, L_3\} = -L_1, \quad \{L_3, L_1\} = -L_2, \quad (6.5)$$

или в общем виде

$$\{L_i, L_j\} = -\varepsilon_{ijk} L_k. \quad (6.6)$$

Далее попытаемся придать квантовый характер формулам (6.1)-(6.6) и обсудим к каким физическим следствиям это приведет.

6.1.1 Оператор момента импульса. Коммутационные соотношения между его компонентами

Сначала займемся обобщение выражения (6.1) на квантовый случай. Согласно общим правилам запишем оператор момента импульса $\hat{\vec{L}}$ подставив в выражение (6.1) вместо координаты и импульса их операторы

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i} \vec{r} \times \frac{\partial}{\partial \vec{r}}. \quad (6.7)$$

Распишем это выражение по компонентам:

$$\begin{aligned} \hat{L}_1 &= x_2 \hat{p}_3 - x_3 \hat{p}_2, \\ \hat{L}_2 &= x_3 \hat{p}_1 - x_1 \hat{p}_3, \\ \hat{L}_3 &= x_1 \hat{p}_2 - x_2 \hat{p}_1 \end{aligned} \quad (6.8)$$

или

$$\hat{L}_i = \varepsilon_{ijk} x_j \hat{p}_k. \quad (6.9)$$

Далее вычислим коммутационные соотношения между двумя проекциями момента импульса, например:

$$\begin{aligned} [\hat{L}_1, \hat{L}_2] &= [x_2 \hat{p}_3 - x_3 \hat{p}_2, x_3 \hat{p}_1 - x_1 \hat{p}_3] = [x_2 \hat{p}_3, x_3 \hat{p}_1] - \\ &- [x_2 \hat{p}_3, x_1 \hat{p}_3] - [x_3 \hat{p}_2, x_3 \hat{p}_1] + [x_3 \hat{p}_2, x_1 \hat{p}_3]. \end{aligned} \quad (6.10)$$

Ввиду того, что оператор \hat{p}_i пропорционален частной производной $\frac{\partial}{\partial x_i}$, заключаем, что в этом выражении второе и третье слагаемые равны нулю. Пользуясь коммутационными соотношениями между операторами координаты и импульса преобразуем оставшиеся в (6.10) коммутаторы

$$[x_2\hat{p}_3, x_3\hat{p}_1] = \frac{i}{\hbar}x_2\hat{p}_1, \quad [x_3\hat{p}_2, x_1\hat{p}_3] = -\frac{i}{\hbar}x_1\hat{p}_2. \quad (6.11)$$

Таким образом имеем

$$[\hat{L}_1, \hat{L}_2] = i\hbar\hat{L}_3. \quad (6.12)$$

Остальные коммутаторы получаются циклической перестановкой в (6.12)

$$[\hat{L}_2, \hat{L}_3] = i\hbar\hat{L}_1, \quad [\hat{L}_3, \hat{L}_1] = i\hbar\hat{L}_2, \quad (6.13)$$

или

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{L}_k. \quad (6.14)$$

Сопоставляя этот результат со скобками Пуассона в классической механике для компонент момента импульса (6.5)-(6.6) видим, что с точки зрения общих принципов квантования соотношения (6.13)-(6.14) представляют ни что иное как “квантовые скобки Пуассона”.

Теперь обсудим к каким физическим следствиям приводит этот результат. При обсуждении общих правил квантования говорилось, что на языке квантово-механического формализма принцип неопределенностей выражается в том, что операторы физических величин, которые не могут быть измерены одновременно, не коммутируют между собой. Отсюда делаем заключение, что

для квантовой частицы невозможно измерить одновременно две проекции момента импульса. Можно только измерить одну из проекций, например, L_3 , тогда проекции L_1 и L_2 будут иметь принципиально неустрашимый статистический разброс.

Выпишем операторы компонент момента импульса в сферических координатах

$$\hat{L}_1 = i\hbar \left(\sin\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} + \cos\varphi \operatorname{ctg}\theta \frac{\partial}{\partial\varphi} \right),$$

$$\begin{aligned}\hat{L}_2 &= -i\hbar \left(\cos\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} - \sin\varphi \operatorname{ctg}\theta \frac{\partial}{\partial\varphi} \right), \\ \hat{L}_3 &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial\varphi}.\end{aligned}\tag{6.15}$$

Отметим, что в классической механике угол φ и момент импульса L_3 представляют канонически-сопряженные переменные — вращательную координату и вращательный “импульс”. В квантовой механике им должны соответствовать операторы, для которых выполняется обычное коммутационное соотношение

$$[\varphi, \hat{L}_3] = i\hbar.\tag{6.16}$$

Используя явный вид оператора \hat{L}_3 легко убедиться в справедливости этого соотношения.

Используя (6.15) легко также найти выражение для оператора квадрата момента импульса в сферических координатах

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right].\tag{6.17}$$

6.2 Гамильтониан частицы, находящейся в сферически-симметричном поле

Возникает вопрос, можно ли измерить одновременно энергию микрочастицы движущейся в поле $U(r)$ и одну из проекций ее момента импульса, например, L_3 ? Для ответа на этот вопрос необходимо выяснить, коммутирует ли гамильтониан частицы с \hat{L}_3 или нет.

Запишем в сферических координатах гамильтониан частицы, находящейся в сферически-симметричном поле

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta + U(r),\tag{6.18}$$

где оператор Лапласа есть

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \Lambda(\theta, \varphi),\tag{6.19}$$

причем

$$\Lambda(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}. \quad (6.20)$$

Сравнивая это выражение с (6.17) получим

$$\Lambda(\theta, \varphi) = -\frac{1}{\hbar^2} \hat{L}^2. \quad (6.21)$$

В результате гамильтониан (6.18) принимает вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{L}^2}{2Mr^2} + U(r). \quad (6.22)$$

В свою очередь это выражение можно переписать

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_r^2}{2M} + \frac{1}{2M} \frac{\hat{L}^2}{r^2} + U(r), \quad (6.23)$$

где $\hat{p}_r \equiv \frac{\hbar}{i} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r$ — оператор радиального импульса. Для гамильтониана записанного в этом виде становится очевидной связь с его классическим аналогом (6.4). Так же как и в классическом аналоге первый член в (6.23) представляет оператор части кинетической энергии частицы связанной с ее радиальным движением. Второй член представляет энергию вращения.

Теперь вычислим коммутатор между гамильтонианом (6.23) и оператором одной из проекций момента импульса, например, \hat{L}_3 . Прежде всего заметим, что из явного вида \hat{L}_3 (6.15) следует, что этот оператор не зависит от радиальной переменной и поэтому коммутирует как с оператором радиальной кинетической энергии, так и потенциалом. Поэтому

$$[\hat{H}, \hat{L}_3] = \frac{1}{2Mr^2} [\hat{L}^2, \hat{L}_3]. \quad (6.24)$$

Далее на основании явного вида операторов \hat{L}^2 и \hat{L}_3 заключаем, что

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_3] = 0 \quad (6.25)$$

и, следовательно,

$$[\hat{H}, \hat{L}_3] = 0 \text{ и } [\hat{H}, \hat{\vec{L}}^2] = 0. \quad (6.26)$$

Таким образом делаем вывод, что одновременно могут быть измерены энергия, квадрат и одна из компонент момента импульса.

6.3 Квантовая частица в сферически-симметричном поле

Теперь рассмотрим уравнение Шредингера для частицы в сферически-симметричном поле

$$\left[\frac{\hat{p}_r^2}{2M} + \frac{1}{2M} \frac{\hat{\vec{L}}^2}{r^2} + U(r) \right] \Psi(r, \theta, \varphi) = E \Psi(r, \theta, \varphi). \quad (6.27)$$

В нем разделяются радиальная r и угловые θ, φ переменные

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = \mathcal{Y}(\theta, \varphi) \Phi(r), \quad (6.28)$$

где $\mathcal{Y}(\theta, \varphi)$ является собственной функцией операторов $\hat{\vec{L}}^2$ и \hat{L}_3 , а $\Phi(r)$ — решение радиального уравнения Шредингера

$$\left[\frac{\hat{p}_r^2}{2M} + \frac{1}{2M} \frac{L^2}{r^2} + U(r) \right] \Phi(r) = E \Phi(r). \quad (6.29)$$

В (6.29) L^2 обозначает собственное значение оператора квадрата момента количества движения $\hat{\vec{L}}^2$.

Теперь найдем собственные значения L^2 , L_3 и собственные функции операторов $\hat{\vec{L}}^2$ и \hat{L}_3 .

6.3.1 Спектр собственных значений и собственные функции операторов \hat{L}^2 и \hat{L}_3

1. Собственные значения и собственные функции оператора \hat{L}_3

Для того, чтобы справиться с этой задачей необходимо решить следующее уравнение на собственные значения

$$\hat{L}_3 \mathcal{Y}(\theta, \varphi) = L_3 \mathcal{Y}(\theta, \varphi). \quad (6.30)$$

Подставляя в (6.30) явный вид оператора \hat{L}_3 в сферических координатах (6.15) получим

$$-i \frac{\partial}{\partial \varphi} \mathcal{Y}(\theta, \varphi) = L_3 \mathcal{Y}(\theta, \varphi). \quad (6.31)$$

Таким образом можно разделить переменные θ и φ

$$\mathcal{Y}(\theta, \varphi) = \Theta(\theta) \phi(\varphi) \quad (6.32)$$

и уравнение (6.31) сведется к

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \phi(\varphi) = L_3 \phi(\varphi). \quad (6.33)$$

Ввиду того, что при повороте на угол 2π система возвращается в прежнее состояние дифференциальное уравнение (6.33) необходимо дополнить условием периодичности функции $\phi(\varphi + 2\pi) = \phi(\varphi)$.

Решая уравнение (6.33) находим

$$\phi(\varphi) = N \exp \left[\frac{i}{\hbar} L_3 \right], \quad (6.34)$$

причем для того, чтобы выполнялось условие периодичности на собственные значения следует наложить условие

$$L_3 = \hbar m, \text{ где } m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (6.35)$$

и волновая функция $\phi(\varphi)$ примет вид

$$\phi_m(\varphi) = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \exp[im], \quad (6.36)$$