

МОСКОВСКИЙ ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

Л. П. СУХАНОВ

# Лекции по квантовой механике

прочитанные студентам ФРТК МФТИ в 2014 году

Редакция от 21 октября 2015 г.



# Оглавление

<b>1</b>	<b>Волновые свойства частиц</b>	<b>1</b>
§1.	Волна де Бройля . . . . .	1
§2.	Волновой пакет. Фазовая и групповая скорость волн, соответствующих свободной частице . . . . .	2
§3.	Уравнение Шрёдингера. Оператор Гамильтона. Общее решение уравнения Шрёдингера в случае, когда гамильтониан не зависит от времени. Стационарное уравнение Шрёдингера . . . . .	5
§4.	Статистическая интерпретация волновой функции. Стационарные состояния . . . . .	6
<b>2</b>	<b>Операторы физических величин</b>	<b>9</b>
§1.	Условие нормировки волн де Бройля . . . . .	9
§2.	Среднее значение координаты и импульса. Операторы координаты и импульса. . . . .	11
§3.	Постановка задачи на собственные функции и собственные значения операторов . . . . .	12
<b>3</b>	<b>Математический аппарат квантовой механики</b>	<b>15</b>
§1.	Состояние и волновая функция. Принцип суперпозиции состояний. Дираковская формулировка квантовой механики. Вектор состояния. . . . .	15
§2.	Наблюдаемые и операторы физических величин. Линейные и эрмитовы операторы . . . . .	19
§3.	Условие ортогональности и полноты для собственных функций операторов физических величин . . . . .	23
§4.	Нормировка собственных функций на единицу и $\delta$ -функцию . . . . .	27
<b>4</b>	<b>Совместная измеримость физических величин</b>	<b>31</b>
§1.	Условия одновременной измеримости физических величин. Коммутаторы. . . . .	31
§2.	Соотношение неопределённостей . . . . .	32
<b>5</b>	<b>Квантовая динамика частицы</b>	<b>35</b>
§1.	Уравнение непрерывности для плотности вероятности. Плотность тока вероятностей. Коэффициенты прохождения и отражения. . . . .	35
§2.	Оператор изменения во времени физической величины. Интегралы движения. Коммутаторы. Скобки Пуассона . . . . .	36
§3.	Производная по времени операторов координаты и импульсов частицы в потенциальном поле. Теоремы Эренфеста . . . . .	38
<b>6</b>	<b>Теория представлений</b>	<b>41</b>
§1.	Матричное представление . . . . .	41

§2.	Унитарное преобразование векторов-состояний и операторов . . . . .	42
§3.	Координатное и импульсное представления . . . . .	44
§4.	Оператор эволюции. Представление Шрёдингера и Гайзенберга. Уравнение Гайзенберга для операторов физических величин . . . . .	46
<b>7</b>	<b>Операторные методы в квантовой механике. Метод вторичного квантования</b>	<b>49</b>
§1.	Операторы уничтожения и рождения в теории линейного гармонического осциллятора . . . . .	49
§2.	Энергетический спектр линейного гармонического осциллятора. . . . .	50
§3.	Построение собственных функций осциллятора в координатном представлении с помощью операторов рождения и уничтожения. Связь $n$ -го состояния осциллятора с основным. . . . .	52
<b>8</b>	<b>Угловой момент</b>	<b>55</b>
§1.	Повороты и оператор углового момента. Изотропность пространства и сохранение углового момента в квантовой механике. . . . .	55
§2.	Коммутационные соотношения для оператора углового момента. Система собственных векторов операторов $\hat{j}^2$ и $\hat{j}_z$ . . . . .	56
§3.	Спин частицы. Матрицы Паули. . . . .	58
§4.	Оператор орбитального момента частицы в координатном представлении (декартовы и сферические координаты). . . . .	59
§5.	Сферические гармоники . . . . .	61
<b>9</b>	<b>Движение в центрально-симметричном поле</b>	<b>63</b>
§1.	Центрально-симметричное поле. Гамильтониан частицы в сферических координатах. Разделение переменных в центрально-симметричном поле. . . . .	63
§2.	Уравнение для радиальной функции . . . . .	63
<b>10</b>	<b>Атом водорода</b>	<b>65</b>
§1.	Атом водорода . . . . .	65
§2.	Энергетический спектр и радиальные волновые функции стационарных состояний атома водорода. Главное и радиальное квантовые числа . . . . .	66
§3.	Кратность вырождения уровней. Кулоновское (случайное) вырождение . . . . .	69
<b>11</b>	<b>Квазиклассическое приближение</b>	<b>71</b>
§1.	Критерий применимости квазиклассического приближения . . . . .	71
1.1	Переход к уравнению Гамильтона-Якоби . . . . .	71
§2.	Метод Вентцеля-Крамерса-Бриллюэна (ВКБ) . . . . .	72
2.1	Вид волновой функции в квазиклассическом приближении . . . . .	72
2.2	Связь между двумя решениями, взятыми по разные стороны от точки поворота . . . . .	74
§3.	Условие квантования Бора-Зоммерфельда . . . . .	77
§4.	Фазовый объём, приходящийся на одно квантовое состояние . . . . .	78
§5.	Вероятность проникновения частицы через барьер в квазиклассическом приближении . . . . .	79
<b>12</b>	<b>Теория возмущений</b>	<b>81</b>
§1.	Стационарная теория возмущений . . . . .	81
1.1	Первое приближение теории стационарных возмущений . . . . .	82

1.2	Энергетическая поправка второго приближения ТСВ . . . . .	83
1.3	Критерий применимость СТВ . . . . .	84
§2.	Стационарное возмущение вырожденных уровней дискретного спектра. Секулярное уравнение . . . . .	84
2.1	Правильные волновые функции нулевого приближения . . . . .	85
§3.	Квазивырождение, случай двух близких уровней энергии . . . . .	85
<b>13</b>	<b>Нестационарная теория возмущений</b>	<b>89</b>
§1.	Нестационарное возмущение дискретного спектра . . . . .	89
1.1	Метод вариации постоянных . . . . .	89
1.2	Приближения или метод Дирака (1927) . . . . .	90
§2.	Вероятность перехода . . . . .	91
§3.	Адиабатические и внезапные возмущения . . . . .	91
3.1	Адиабатическое изменение возмущения . . . . .	91
3.2	Внезапное включение возмущения . . . . .	92
§4.	Переходы во времени под влиянием постоянного во времени возмущения. «Золотое правило» Ферми . . . . .	93
§5.	Переходы под действием периодического возмущения в дискретном и непрерывном спектрах . . . . .	95
<b>14</b>	<b>Основы релятивистской теории</b>	<b>97</b>
§1.	Уравнение Дирака свободной релятивистской частицы . . . . .	97
1.1	«Линеаризация корня» . . . . .	98
1.2	Матрицы Дирака и их свойства . . . . .	99
§2.	Состояния с положительными и отрицательными энергиями . . . . .	99
§3.	Уравнение Дирака заряженной релятивистской частицы в электромаг- нитном поле. Уравнение Паули . . . . .	102
§4.	Релятивистские поправки к уравнению Шредингера частицы во внешнем электромагнитном поле. Спин-орбитальное взаимодействие . . . . .	104
<b>15</b>	<b>Сложение моментов</b>	<b>109</b>
§1.	Сложение моментов . . . . .	109
§2.	Коэффициенты Клебша-Гордана. Полный угловой момент. . . . .	110
<b>16</b>	<b>Тождественные частицы</b>	<b>113</b>
§1.	Симметрия волновой функции системы тождественных частиц. Бозоны и фермионы . . . . .	113
§2.	Детерминант Слэтера. Принцип Паули . . . . .	114
<b>17</b>	<b>Атом гелия</b>	<b>115</b>
§1.	Атом гелия. Спиновые функции двух электронов. Пара- и ортосостояния	115
§2.	Обменное взаимодействие . . . . .	116
<b>18</b>	<b>Сложный атом</b>	<b>119</b>
§1.	Вариационный принцип вычисления энергии основного состояния . . . . .	119
§2.	Метод Хартри-Фока. Приближения центрального поля. Электронные кон- фигурации . . . . .	121
§3.	Интегральное движение в сложных атомах. Термы. Правила Хунда . . . . .	122
§4.	$LS$ -связь. Тонкая структура уровней. Правило интервалов Ланде . . . . .	123
§5.	Гамильтониан сложного атома в магнитном поле . . . . .	124

§6.	Эффекты Зеемана и Пашена-Бака . . . . .	125
6.1	Слабое поле . . . . .	125
6.2	Сильное поле . . . . .	127
<b>19</b>	<b>Теория рассеяния</b>	<b>129</b>
§1.	Постановка задачи рассеяния. Упругое рассеяние . . . . .	129
§2.	Амплитуда и сечение рассеяния . . . . .	130
§3.	Функция Грина задачи рассеяния. Интегральное уравнение задачи рас- сеяния . . . . .	131

# Глава 1

## Волновые свойства частиц

### §1. Волна де Бройля

Развитие квантовой теории началось с того, что у света наряду с волновыми свойствами, характеризуемыми длиной волны  $\lambda$  и частотой  $\omega$ , были обнаружены также и корпускулярные. Значения для энергии  $E$  и импульса  $\mathbf{p}$  кванта света были установлены Альбертом Эйнштейном в 1905 г.

$$\begin{aligned} E &= \hbar\omega \\ \mathbf{p} &= \hbar\mathbf{k} \end{aligned} \tag{1.1.1}$$

Здесь  $\hbar = 1,05 \cdot 10^{-27}$  эрг·с – постоянная Планка, была впервые введена Максом Планком в 1900 г. для объяснения спектров испускания нагретых тел;  $\mathbf{k}$  – волновой вектор. В соотношениях (1.1.1) корпускулярные ( $E$  и  $\mathbf{p}$ ) и волновые ( $\omega$  и  $\mathbf{k}$ ) свойства света связаны постоянной Планка.

Анализируя эти соотношения, французский физик Луи Виктор де Бройль в 1923 г. выдвинул гипотезу о возможности их обобщения на всех массивные частицы (идея материальных волн или волн вещества). Иными словами, де Бройль предположил, что дуализм «волна-частица» должен быть свойственен не только свету, но и электронам и любым другим частицам («дуализм» означает двойственность).

Соответствующая частица и волновое число определяются при этом соотношениями, подобными эйнштейновским (1.1.1), т.е. длина де-бройлевской волны движущихся частиц будет равна

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{h}{mv} \tag{1.1.2}$$

Известно, что распространение фотонов (квантов света), т.е. распространение света с частотой  $\omega$  и волновым вектором  $\mathbf{k}$ , описывается плоской волной

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = Ae^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)} \tag{1.1.3}$$

В выражении (1.1.3) заменим  $\omega$  на  $\mathbf{k}$ , используя формулы (1.1.1)

$$\boxed{\Psi(\mathbf{r}, t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\mathbf{r} - Et)}} \tag{1.1.4}$$

Волновой функцией (1.1.4) фотона является световая волна; движущейся частице с энергией  $E$  и импульсом  $\mathbf{p}$ , согласно гипотезе де Бройля, соответствует волновая функция такого же вида (1.1.4) или волны де Бройля.

---

## §2. Волновой пакет. Фазовая и групповая скорость волн, соответствующих свободной частице

Пусть свободная частица с энергией  $E$  и импульсом  $\mathbf{p}$  движется вдоль оси  $x$ , т.е.  $\mathbf{p} \parallel \mathbf{x}$ . Сопоставим движущейся частице волну де Бройля

$$\Psi(x, t) = A e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)} \quad (1.2.1)$$

В ней поверхность востоянной фазы  $\alpha = kx - \omega t$  перемещается с фазовой скоростью

$$v_{\Phi} = \frac{dx}{dt} = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p} \quad (1.2.2)$$

В нерелятивистском случае  $E = p^2/2m$ , следовательно

$$v_{\Phi} = \frac{p}{2m} = \frac{v}{2}$$

т.е. фазовая скорость не совпадает с классической скоростью частицы  $v$ . Более того, в релятивистском случае  $p = Ev/c^2$ , или

$$v_{\Phi} = \frac{E}{p} = \frac{c^2}{v} > c$$

Эти результаты говорят о том, что плоская монохроматическая волна принципиально не может описывать свободную частицу.

Чтобы выйти из этого положения и в то же время сохранить за частицами их волновые свойства, нашедшие блестящие экспериментальные подтверждения<sup>1</sup>, необходимо, не отказываясь от волны де Бройля, выработать более глубокий подход к описанию свободной частицы. На первых же порах развития квантовой механики стали сопоставлять частицам не отдельные монохроматические волны, а набор волн, обладающий близкими частотами. Такой подход подсказывался ещё и тем обстоятельством, что наблюдаемые на опыте дифракционные линии электронных волн всегда характеризовались определённой шириной, т.е. дифрагировали как бы не одна, а ряд волн, очень близких друг к другу по частоте.

Кроме того, если использовать не отдельную монохроматическую волну, а набор волн с близкими частотами, то с их помощью всегда можно построить такой волновой пакет, результирующая амплитуда которого окажется заметно отличной от нуля лишь в некоторой небольшой области пространства, которую можно связать с местоположением частицы. Заметим, что плоская монохроматическая волна не локализована в пространстве, и потому она не может быть сопоставлена локализованному объекту, к каковому относится массивная частица.

Исходя из приведённых выше соображений, построим для описания движения частицы волновой пакет из непрерывной совокупности монохроматических плоских волн (1.1.3)

$$\Psi(x, t) = \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} A(k) e^{i(\mathbf{kr} - \omega(k)t)} dk, \quad \Delta k \ll k_0 \quad (1.2.3)$$

Здесь  $k_0$  – волновое число центра пакета, около которого сосредоточены волновые числа волн, образующих волновой пакет. Считаем, что  $\Delta k \ll k_0$ .

---

<sup>1</sup>Опыты Клинтон Джозефа Девисона и Лестера Халберта Джермера в 1927 г. по дифракции электронов, а также независимые опыты Джорджа Паджета Томсона в том же году.

В отличие от (1.1.3), волновой пакет – это группа волн с различными (хотя и близкими) величинами волнового числа  $k$ , а значит, и частоты

$$\omega(k) = \omega(k_0) + \left. \left( \frac{d\omega}{dk} \right) \right|_{k_0} (k - k_0) + \dots \approx \omega_0 + \left. \left( \frac{d\omega}{dk} \right) \right|_{k_0} (k - k_0) \quad (1.2.4)$$

С помощью (1.2.4) и (1.2.3) найдём

$$\psi(x, t) \approx e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} dk A(k) e^{i(k - k_0) \left[ x - \left. \left( \frac{d\omega}{dk} \right) \right|_{k_0} t \right]} \quad (1.2.5)$$

Т.е. волновая функция пакета есть плоская волна, отвечающая центру пакета  $(k_0, \omega_0)$ , амплитуда которой зависит от координаты и времени лишь через комбинацию

$$x - \left. \left( \frac{d\omega}{dk} \right) \right|_{k_0} t$$

Поэтому для всех точек  $x$  и моментов времени  $t$ , связанных условием

$$x - \left. \left( \frac{d\omega}{dk} \right) \right|_{k_0} t = \text{const} \quad (1.2.6)$$

амплитуда имеет одинаковое значение: волновой пакет движется как одно целое с групповой скоростью

$$v_{\text{гр}} = \frac{dx}{dt} = \left. \left( \frac{d\omega}{dk} \right) \right|_{k_0} = \left. \left( \frac{dE}{dp} \right) \right|_{p_0} \quad (1.2.7)$$

как в нерелятивистском случае, когда  $E = p^2/2m$

$$v_{\text{гр}} = \frac{p_0}{m} = v$$

так и в релятивистском случае, когда  $E = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}$

$$v_{\text{гр}} = \frac{c^2 2p}{2E} = \frac{c^2 \frac{E}{c^2} v}{E} = v$$

Таким образом, групповая скорость перемещения волнового пакета как целого точно совпадает со скоростью  $v$  движения соответствующей ему частицы.

Взяв  $k - k_0 = \xi$  в качестве новой переменной интегрирования и считая  $A(k)$  слабо меняющейся на ширине пакета функцией  $k$ , найдём, что  $\Psi(x, t)$  может быть представлена с учётом (1.2.5) и (1.2.7) в виде

$$\Psi(x, t) \approx A(k_0) e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \int_{-\Delta k}^{+\Delta k} e^{i(x - v_{\text{гр}} t) \xi} d\xi$$

Выполняя интегрирование по  $\xi$ , найдём

$$\Psi(x, t) = \underbrace{2A(k_0) \frac{\sin[(x - v_{\text{гр}} t) \Delta k]}{x - v_{\text{гр}} t}}_{B(x - v_{\text{гр}} t)} e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} = B(x - v_{\text{гр}} t) e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \quad (1.2.8)$$

Т.к. под знаком синуса стоит малая величина  $\Delta k$  ( $\Delta k \ll k_0$ ), то амплитуда волнового пакета  $B(x - v_{\text{гр}} t)$  будет медленно меняющейся функцией координаты и времени, поэтому её можно рассматривать как огибающую почти монохроматической волны, а

$(k_0x - \omega_0t)$  – как её фазу. Причём эта огибающая, как было показано выше, перемещается в пространстве с групповой скоростью  $v_{гр}$ .

Определим координату  $x$ , где амплитуда  $B(x - v_{гр}t)$  имеет максимум. Очевидно, искомый максимум будет находиться в точке

$$x = v_{гр}t$$

т.е. максимум амплитуды отвечает выбору  $\text{const} = 0$  в (1.2.6). График функции  $\text{Re}(\Psi(x, 0))$  представлен на рис. 1.1.

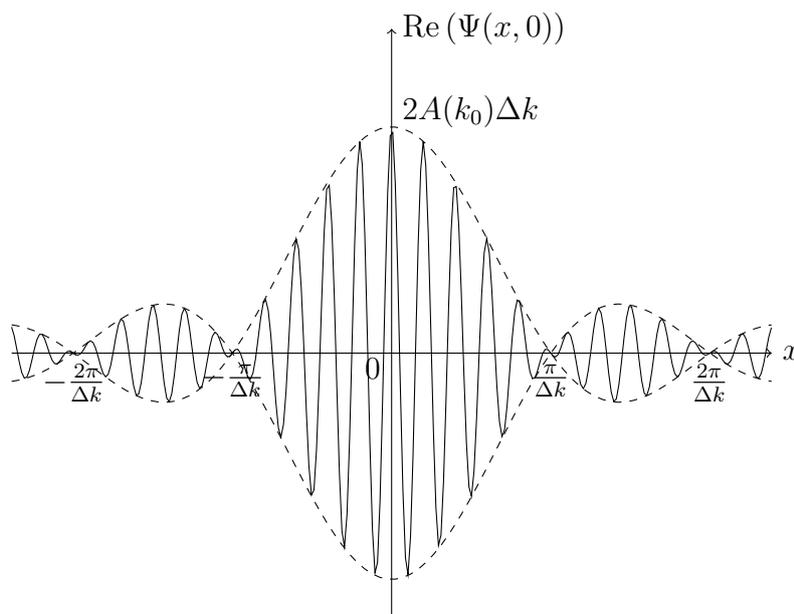


Рис. 1.1: Форма волнового пакета при  $t = 0$ .

При  $t = 0$  своего наибольшего значения  $B(0) = 2A\delta k$  амплитуда достигает в точке  $x = 0$ . Во всех остальных точках, соответствующих локальным максимумам, амплитуда будет существенно меньше. Таким образом, волновой пакет можно считать локализованным в области абсолютного максимума, т.е. в области шириной  $\Delta x = 2\pi/\Delta k$  (см. график). Т.к.  $k_0 \gg \Delta k$ , то для длины волны имеем

$$\lambda = \frac{2\pi}{k_0} \ll \frac{2\pi}{\Delta k} = \Delta x$$

т.е. длина де-бройлевской волны многократно укладывается на ширине пакета.

В силу модельного характера описания волнового пакета (1.2.3), т.е. принятия модельных соображений относительно зависимостей  $\omega(k)$  и  $A(k)$ , запишем соотношение между разбросом  $\Delta k$  волновых чисел и шириной области пространственной локализации пакета  $\Delta x$  по порядку величины:

$$\Delta x \cdot \Delta k \approx 1^2 \tag{1.2.9}$$

<sup>2</sup>Это соотношение справедливо для описания волнового процесса произвольной природы. Например, тот, кто знаком с радиофизикой, знает, что для посылки короткого радиосигнала (малое  $\Delta x$ ) требуется широкий набор волн различной длины. Поэтому такой сигнал будет принят приёмниками, настроенными на различные волны. Напротив, если мы желаем, чтобы его принимали приёмники, настроенные лишь определённым образом, то необходимо посылать достаточно длинные, почти монохроматические сигналы.

---

По уравнению (1.1.1) для группы волн де Бройля получим из (1.2.9) соотношение

$$\boxed{\Delta p \cdot \Delta x \approx \hbar} \quad (1.2.10)$$

Это соотношение было впервые установлено Вернером Карлом Гайзенбергом в 1927 г. Его принято называть соотношением неопределённостей Гайзенберга: «чем точнее определено положение, тем менее точно известен импульс, и наоборот». Таким образом, не существует состояния, в котором частица одновременно имела бы определённые значения координаты и импульса. Следовательно, теряет смысл понятие траектории микрочастицы, подразумевающее определение в каждый момент времени значений координаты и скорости (или импульса). Соотношение неопределённостей есть следствие и математическое выражение корпускулярно-волнового дуализма природы материи. Мы не можем в любой момент времени  $t$  приписать частице определённое положение  $\mathbf{r}$ . Вместо этого мы вводим волновую функцию частицы  $\Psi(\mathbf{r}, t)$ .

### §3. Уравнение Шрёдингера. Оператор Гамильтона. Общее решение уравнения Шрёдингера в случае, когда гамильтониан не зависит от времени. Стационарное уравнение Шрёдингера

Гипотеза де Бройля, согласно которой каждой частице сопоставляется волна, вскоре была развита, и на её основе была создана новая механика. Действительно, если есть волны, то должно быть и волновое уравнение. Поэтому надо было найти такое динамическое уравнение, которое описывало бы распространение волн де Бройля в пространстве и времени, т.е. эволюцию волновой функции  $\Psi(\mathbf{r}, t)$ . Ясно, что это уравнение не может быть выведено из предыдущих теорий, наоборот, их результаты должны получаться из решений искомого уравнения как предельные случаи. Эрвин Шрёдингер в 1926 г. фактически постулировал волновое уравнение, следуя оптико-механической аналогии Гамильтона и идее волн де Бройля

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r}, t) \right\} \Psi(\mathbf{r}, t)} \quad (1.3.1)$$

позже названное временным (нестационарным) уравнением Шрёдингера (УШ). Выражение в фигурных скобках интерпретируется как оператор полной нерелятивистской энергии, или оператор Гамильтона (гамильтониан):

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(\mathbf{r}, t) \\ i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= \hat{H} \Psi(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (1.3.2)$$

Пусть оператор Гамильтона не зависит явно от времени, т.е.

$$\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = \frac{\partial U}{\partial t} = 0$$

В классической механике это означало бы, что функция Гамильтона постоянна во времени и равна полной энергии системы (интеграл движения). В квантовой механике в

этом случае явная зависимость от времени может быть только у волновой функции (ВФ)  $\Psi(\mathbf{r}, t)$ , причём можно искать решение (1.3.2) методом разделения пространственных и временных переменных:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) \cdot \varphi(t) \quad (1.3.3)$$

Тогда, поставив такую функцию (1.3.3) в УШ (1.3.2), получим

$$i\hbar\psi(\mathbf{r})\frac{\partial}{\partial t}\varphi(t) = \varphi(t)\hat{H}\psi(\mathbf{r})$$

Поделив обе части на ВФ (1.3.3), придём к соотношению

$$i\hbar\frac{\partial\varphi/\partial t}{\varphi(t)} = \frac{\hat{H}\psi(\mathbf{r})}{\psi(\mathbf{r})} \quad (1.3.4)$$

Левая часть полученного соотношения зависит только от времени  $t$ , а правая – только от пространственных переменных  $\mathbf{r}$ . Поскольку время и пространственные переменные независимы, то для произвольных  $t$  и  $\mathbf{r}$  равенство возникает лишь в случае, когда обе части по отдельности равны одной и той же постоянной величине  $E$ . Как следует из (1.3.4), в этом случае мы приходим к двум уравнениям, определяющим отдельно функции  $\varphi(t)$  и  $\psi(\mathbf{r})$ :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi(t) = E\varphi(t) \quad (1.3.5)$$

$$\boxed{\hat{H}\psi(\mathbf{r}) \equiv \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\mathbf{r}) \right\} \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})} \quad (1.3.6)$$

Первое из этих уравнений имеет решение

$$\varphi(t) = Ce^{-iEt/\hbar}$$

где  $C$  – постоянная интегрирования, определяемая из начальных условий  $C = \varphi(0)$ . Координатная часть  $\psi(\mathbf{r})$  ВФ (1.3.3) удовлетворяет стационарному уравнению Шрёдингера. Входящая в него постоянная разделения переменных  $E$  имеет размерность энергии. С точки зрения уравнений математической физики, стационарное УШ есть частный случай задачи Штурма-Лиувилля на собственные значения гамильтониана и отвечающие им собственные функции, т.е. собственные пары  $\{E_k, \psi_k(\mathbf{r})\}$ . Таким образом, константа разделения  $E$  является собственным значением гамильтониана, а по физическому смыслу соответствует дискретным значениям полной энергии системы. Термин «стационарные состояния» означает состояния с определённой энергией.

## §4. Статистическая интерпретация волновой функции. Стационарные состояния

В отличие от уравнения Ньютона, из которого находится наблюдаемая траектория  $\mathbf{r}(t)$  материальной точки, из уравнения Шрёдингера находят в общем случае комплексную, т.е. ненаблюдаемую, волновую функцию  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  квантовой системы. Тем не менее, как будет показано ниже, с её помощью можно вычислить значения всех измеримых величин. Сразу же после открытия УШ, Макс Борн (1926 г.) дал статистическую интерпретацию ВФ  $\Psi(\mathbf{r}, t)$ .

Величина

$$dP = \Psi^*(\mathbf{r}, t)\Psi(\mathbf{r}, t)dv \equiv |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 dv \quad (1.4.1)$$

представляет вероятность нахождения частицы в момент времени  $t$  в элементе объёма  $dv$  в окрестности точки  $\mathbf{r}$ . Интенсивность волны

$$|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \frac{dP}{dv} = \rho(\mathbf{r}, t) \quad (1.4.2)$$

интерпретируется как плотность вероятности нахождения частицы в точке  $\mathbf{r}$  в момент времени  $t$ . Тогда ВФ  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  – амплитуда плотности вероятности, или просто амплитуда вероятности. Если произвести интегрирование (1.4.1) по всему бесконечному объёму, то мы получим вероятность достоверного события обнаружить частицы где-либо в пространстве, равную, очевидно, единице:

$$\int |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 dv = 1 \quad (1.4.3)$$

Это условие называется условием нормировки, а функция  $\Psi$ , удовлетворяющая этому условию, называется нормированной ВФ. Для выполнимости такой нормировки, интеграл от  $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$  должен существовать (говорят, что функция  $\Psi$  должна быть квадратично интегрируема). Соотношение (1.4.3) выполняется для волнового пакета (1.2.3), но не выполняется для волны де Бройля (1.1.4): интеграл

$$\int |\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t)|^2 dv = |A|^2 \int dv$$

не сходится. В дальнейшем мы дадим рациональную нормировку и для этого случая.

Нормировка имеет смысл лишь постольку, поскольку она сохраняется во времени, т.е. равенство (1.4.3) должно иметь силу для всех моментов времени, т.е. вероятность найти частицу где-либо в пространстве не должна зависеть от времени, т.е.

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \rho(\mathbf{r}, t)dv = 0$$

**Упражнение 1.** *Строго доказать, что  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  удовлетворяет волновому уравнению (1.3.1)*

Вероятностное толкование приводит к определённым требованиям для  $\Psi(\mathbf{r}, t)$ : она должны быть (i) однозначной, (ii) конечной и (как правило, исключение: задача 4с из 1-го задания) (iii) непрерывно дифференцируемой<sup>3</sup> функцией. Такими же свойствами должна обладать функция  $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ .

Если вернуться к анализу стационарного УШ (1.3.6), то на ВФ  $\psi_{\mathbf{r}}$ , как на решение задачи Штурма-Лиувилля, должны быть наложены условия i-iii с учётом её нормировки

$$\|\psi\| \equiv \int |\psi(\mathbf{r})|^2 dv = 1 \quad (1.4.4)$$

а также она должна удовлетворять заданным граничным условиям. Для временной части ВФ (1.3.3) имеем:  $|\varphi(t)|^2 = |C|^2$ . Всегда можно положить  $C = 1$ , т.е. условия нормировки (1.4.3) и (1.4.4) определяются интегрированием по пространственным переменным. Таким образом, в случае, когда  $\hat{H}$  не зависит от времени, состояние с определённой и сохраняющейся во времени энергией  $E$  (стационарное состояние) описывается волновой функцией

$$\Psi_E(\mathbf{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\psi_E(\mathbf{r})$$

<sup>3</sup>т.е.  $\Psi(\mathbf{r}, t) \in C^1(\Omega)$  во всей области изменения её аргументов  $\Omega$

---

где  $\hat{H}\psi_E(\mathbf{r}) = E\psi_E(\mathbf{r})$ . Волновая функция стационарного состояния зависит от времени, но эта зависимость входит только через фазу волны.

В заключении важно отметить, что статистическое описание характерно не для пучка частиц, а для каждой отдельной частицы. Например, в 1949 г. советские физики Л. Биберман, Н. Сушкин и В. Фабрикант прямыми опытами для электронов доказали, что при малых интенсивностях пучка волновые свойства электронов не исчезают. Следовательно,  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  следует рассматривать как синтез волновых, корпускулярных и статистических представлений о микрообъекте.

# Глава 2

## Операторы физических величин

### §1. Условие нормировки волн де Бройля

Согласно гипотезе де Бройля, состояние свободной частицы с импульсом  $\mathbf{p}$  описывается плоской волной (волной де Бройля)

$$\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = A e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\mathbf{r} - Et)} \quad (2.1.1)$$

Коэффициент  $A$  должен быть определён из условия нормировки волновой функции (1.4.3). Однако, рассматривая свободную частицу во всём пространстве, выше мы убедились, что нормировочный интеграл расходится. Это одна из трудностей квантовой механики.

Проблему расходимости нормировочного интеграла можно решить следующим образом. Рассмотрим интеграл по бесконечному объёму от двух волн де Бройля с импульсами  $\mathbf{p}'$  и  $\mathbf{p}$ :

$$\int \Psi_{\mathbf{p}'}^*(\mathbf{r}, t) \Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) dv = |A|^2 e^{\frac{i}{\hbar}(E' - E)t} \int e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} - \mathbf{p}')\mathbf{r}} dv$$

Интеграл в правой части этого равенства определён в классе обобщённых функций через трёхмерную  $\delta$ -функцию Дирака. Основные свойства  $\delta$ -функции:

- $\delta \mathbf{r} = \delta(x) \cdot \delta(y) \cdot \delta(z)$
- $\delta(\alpha x) = \frac{1}{|\alpha|} \delta(x)$ , где  $\alpha \neq 0$  – произвольная постоянная, см. § 5 т. III Л.Л..
- $f(x)\delta(x - a) = f(a)\delta(x - a)$

Применяя первые два свойства, получим:

$$\int e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} - \mathbf{p}')\mathbf{r}} dv \equiv (2\pi)^3 \delta\left(\frac{\mathbf{p} - \mathbf{p}'}{\hbar}\right) = (2\pi\hbar)^3 \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}')$$

Откуда, с помощью третьего свойства, следует

$$\int \Psi_{\mathbf{p}'}^*(\mathbf{r}, t) \Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) dv = |A|^2 e^{\frac{i}{\hbar}(E' - E)t} (2\pi\hbar)^3 \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') = |A|^2 (2\pi\hbar)^3 \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}')$$

Выбирая нормировочный множитель  $A = 1/(2\pi\hbar)^{3/2}$ , получим для волны де Бройля (2.1.1)

$$\boxed{\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\mathbf{r} - Et)}} \quad (2.1.2)$$

а для нормировочного соотношения

$$\boxed{\int \Psi_{\mathbf{p}'}^*(\mathbf{r}, t) \Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) dv = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}')} \quad (2.1.3)$$

Соотношение (2.1.3) называется условием нормировки волн де Бройля на  $\delta$ -функцию.

Если  $\mathbf{p} = \mathbf{p}'$ , то правая часть (2.1.3) обращается в бесконечность. В этом смысле, как уже ранее было указано, интеграл от квадрата модуля волны де Бройля расходится. Волна де Бройля  $\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t)$  – это волновая функция состояния, которое не может быть осуществлено (состояние свободного движения частицы со строго определённым импульсом  $\mathbf{p}$ ). Поэтому нет причин беспокоиться, что волна де Бройля не может быть нормирована на единицу.

Однако, из волн де Бройля можно построить волновой пакет

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \int d^3p C(\mathbf{p}) \Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) \quad (2.1.4)$$

с весовой функцией  $C(\mathbf{p})$ . Зная  $\Psi(\mathbf{r}, t)$ , можно найти соответствующую ей функцию  $C(\mathbf{p})$ , т.к.  $C(\mathbf{p})$  – это, по существу, Фурье-образ волновой функции  $\Psi(\mathbf{r}, t)$ . Действительно:

$$\begin{aligned} \int \Psi_{\mathbf{p}'}^*(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t) dv \Big|_{(2.1.4)} &= \int d^3p C(p) \int \Psi_{\mathbf{p}'}^*(\mathbf{r}, t) \Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) dv \Big|_{(2.1.3)} = \\ &= \int d^3p C(\mathbf{p}) \cdot \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') = C(\mathbf{p}') \end{aligned}$$

Таким образом,

$$C(\mathbf{p}) = \int \Psi_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t) dv \quad (2.1.5)$$

Для преобразования Фурье справедливо равенство

$$\int |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 dv = \int |c(\mathbf{p})|^2 d^3p \quad (2.1.6)$$

**Упражнение 1.** Доказать (2.1.6).

Поэтому, если волновой пакет (2.1.4) нормирован на единицу в координатном пространстве соотношением (1.4.3), то и для весовой функции  $C(\mathbf{p})$  выполняется условия нормировки

$$\int |C(\mathbf{p})|^2 d^3p = 1 \quad (2.1.7)$$

в импульсном пространстве. При нормировке (2.1.7) подынтегральное выражение можно интерпретировать как вероятность найти импульс частицы в интервале  $(\mathbf{p}, \mathbf{p} + d\mathbf{p})$ . Тогда  $C(\mathbf{p})$  – это волновая функция в импульсном пространстве, т.е. амплитуда вероятности того, что частица, волновая функция которой задана волновым пакетом, обладает импульсом  $\mathbf{p}$ .

## §2. Среднее значение координаты и импульса. Операторы координаты и импульса.

Поведение частиц в микромире описывается волновой функцией  $\Psi(\mathbf{r}, t)$ , которая носит вероятностный характер, причём даже в том случае, когда описываемая ею система состоит всего лишь из одной единственной частицы. В связи с этим квантовая механика позволяет определить лишь средние значения физических величин независимо от того, имеется много или одна микрочастица. В квантовой механике каждой физической (наблюдаемой) величине  $F$  ставится в соответствие оператор  $\hat{F}$ , действующий в пространстве волновых функций  $\Psi(\mathbf{r}, t)$ , описывающих состояний физической системы. При этом оператор  $\hat{F}$  определяется через среднее значение соответствующей ему величины  $\langle F \rangle$  в состоянии с волновой функцией  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  следующим образом:

$$\hat{F} = \langle \hat{F} \rangle_{\Psi} \equiv \int \Psi^*(\mathbf{r}, t) \hat{F} \Psi(\mathbf{r}, t) dv \quad (2.2.1)$$

где  $\langle \hat{F} \rangle_{\Psi}$  понимается в смысле квантово-механического среднего, при условии, что  $\int \Psi^*(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t) dv = 1$ . При таком определении оператора его квантовое среднее значение совпадает с наблюдаемым значением  $\langle F \rangle$  физической величины  $F$  в состоянии  $\Psi(\mathbf{r}, t)$ .

С точки зрения теории вероятности, среднее значения для некоторой функции  $F(\mathbf{r})$  координаты частицы есть её математическое ожидание

$$\begin{aligned} \langle F(\mathbf{r}) \rangle &= \int F(\mathbf{r}) dp = \int F(\mathbf{r}) \underbrace{\rho(\mathbf{r}, t)}_{dP} dv \Big|_{(1.4.1) \text{ и } (1.4.2)} = \\ &= \int F(\mathbf{r}) |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 dv = \int \Psi^*(\mathbf{r}, t) F(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}, t) dv \end{aligned} \quad (2.2.2)$$

Аналогично, для среднего значения некоторой функции  $F(\mathbf{p})$  (с учётом вероятностной интерпретации для функции  $C(\mathbf{p})$  предыдущего параграфа) получим

$$\langle F(\mathbf{p}) \rangle = \int F(\mathbf{p}) |c(\mathbf{p})|^2 d^3p = \int c^*(\mathbf{p}) F(\mathbf{p}) c(\mathbf{p}) d^3p \quad (2.2.3)$$

Примем  $F(\mathbf{r}) = \mathbf{r}$  – координатный радиус-вектор. Тогда среднее значение координаты частицы есть

$$\langle \mathbf{r} \rangle \Big|_{(2.2.2)} = \int \Psi^*(\mathbf{r}, t) \mathbf{r} \Psi(\mathbf{r}, t) dv \Big|_{(2.2.1)} = \langle \hat{\mathbf{r}} \rangle_{\Psi} \equiv \int \Psi^*(\mathbf{r}, t) \hat{\mathbf{r}} \Psi(\mathbf{r}, t) dv$$

Следовательно:

$$\boxed{\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}} \quad (2.2.4)$$

В координатном пространстве (координатном представлении) оператор координаты совпадает с самим значением координаты частицы. Аналогичное равенство имеет место для произвольных функций координат частицы и её оператора, например для оператора, например для оператора потенциальной энергии в гамильтониане:

$$\hat{U}(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r}) \quad (2.2.5)$$

<sup>1</sup>Здесь, согласно общему правилу, оператор действует на функцию, стоящую справа от него.

Из общего определения оператора (2.2.1) для оператора импульса частицы  $\mathbf{p}$  и его среднего значения  $\langle \mathbf{p} \rangle$  с помощью (2.2.3) можно написать равенства

$$\langle \mathbf{p} \rangle \Big|_{(2.2.3)} = \int d^3p |C(\mathbf{p})|^2 \mathbf{p} \Big|_{(2.2.1)} = \int dv \Psi^*(\mathbf{r}, t) \widehat{\mathbf{p}} \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (2.2.6)$$

Преобразуем левую часть (2.2.6):

$$\langle \mathbf{p} \rangle = \int d^3p C^*(\mathbf{p}) \mathbf{p} C(\mathbf{p}) \Big|_{(2.1.5)} = \int d^3p C^*(\mathbf{p}) \left( \int dv \mathbf{p} \Psi_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t) \right)$$

Для волны де Бройля (2.1.2) справедливо соотношение

$$\mathbf{p} \Psi_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r}, t) = i\hbar \nabla \Psi_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r}, t)$$

с учётом которого

$$\langle \mathbf{p} \rangle = \int d^3p C^*(\mathbf{p}) \left( i\hbar \int dv \Psi(\mathbf{r}, t) \nabla \Psi_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r}, t) \right)$$

Возьмём интеграл в круглых скобках по частям:

$$\int dv \Psi(\mathbf{r}, t) \nabla \Psi_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r}, t) = \int dv \nabla (\Psi(\mathbf{r}, t) \Psi_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r}, t)) - \int dv \Psi_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r}, t) \nabla \Psi(\mathbf{r}, t)$$

Учтём квадратичную интегрируемость  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  из (1.4.3), в силу которой  $\Psi(\mathbf{r}, t)|_{r \rightarrow \infty} \rightarrow 0$ :

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p} \rangle &= \int d^3p C^*(\mathbf{p}) \left( \int dv \Psi_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r}, t) (-i\hbar \nabla) \Psi(\mathbf{r}, t) \right) = \\ &= \int dv \underbrace{\int d^3p C^*(\mathbf{p}) \Psi_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r}, t)}_{\Psi^*(\mathbf{r}, t) \text{ из (2.1.4)}} (-i\hbar \nabla) \Psi(\mathbf{r}, t) = \int dv \Psi^*(\mathbf{r}, t) (-i\hbar \nabla) \Psi(\mathbf{r}, t) \end{aligned}$$

Сравнивая полученное выражение с правой частью (2.2.6), получим вид оператора импульса частицы  $\mathbf{p}$  в координатном представлении:

$$\boxed{\widehat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla} \quad (2.2.7)$$

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

### §3. Постановка задачи на собственные функции и собственные значения операторов

Для волны де Бройля справедливо соотношения

$$\widehat{\mathbf{p}} \Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{p} \Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) \quad (2.3.1)$$

---

которое является частным случаем задачи на собственные значения и собственные функции (пары) в квантовой механике.

Пусть  $\mathbf{q} \equiv (q_1, \dots, q_n)$  – конфигурационное пространство (пространство обобщённых координат физической системы),  $\mathbf{q}$  – действительный вектор. Задача о поиске функций  $\psi_f(\mathbf{q})$  удовлетворяющих уравнению обобщённого вида

$$\hat{F}\psi_f(\mathbf{q}) = f\psi_f(\mathbf{q}), \quad (2.3.2)$$

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

Если спектр дискретен, т.е.  $\{f\} = f_1, f_2, \dots, f_n, \dots$ , то пользуются обозначением  $\psi_{f_n}(\mathbf{q}) \equiv \psi_n(\mathbf{q})$ . Тогда

$$\hat{F}\psi_n(\mathbf{q}) = f_n\psi_n(\mathbf{q}) \quad (2.3.3)$$

Однако спектр может быть и непрерывным. В частности, в одномерном случае (2.3.1) спектром оператора импульса  $\mathbf{p}$  является вся действительная ось:  $p \in (-\infty, +\infty)$ .



## Глава 3

# Математический аппарат квантовой механики

### §1. Состояние и волновая функция. Принцип суперпозиции состояний. Дираковская формулировка квантовой механики. Вектор состояния.

В квантовой механике понятие состояния шире понятия волновой функции, хотя бы потому, что иногда состояния может и не описываться полностью волновой функцией. Например, состояния движущейся частицы описывается ВФ  $\Psi(\mathbf{r}, t)$ . Однако, у частицы могут быть и внутренние степени свободы (или внутренние динамические переменные). В описании состояния фотона – элементарной составляющей луча света – присутствует ещё и поляризация. функция, которая описывает такое состояние не сводится к координатной. Поэтому каждому динамическому состоянию квантовой системы, к том числе не имеющей классических аналогов, будем в дальнейшем сопоставлять некоторый комплексный вектор в абстрактном пространстве. Согласно Полю А. М. Дираку (1938 г.), будем обозначать вектор состояния символом  $|\dots\rangle$ . Внутри скобок ставятся буквы или цифры, характеризующие это состояние, например  $|\mathbf{r}\rangle$ ,  $|\mathbf{p}\rangle$ ,  $|E\rangle$ ,  $|nlm_l\rangle$  и т.д. «Начинка» скобок, как правило, состоит из квантовых чисел (значений динамических переменных, характеризующих состояния системы). В общей квантовой теории эти символы играют ту же роль, что и волновые функции в волновой механике. Более того, теперь в понятие состояния входят не только состояния движения, описываемые переменными пространства, но и они могут зависеть от всех внутренних переменных, не относящихся к движению.

Каким должно быть векторное пространство состояний? Прежде всего оно должно соответствовать основополагающему принципу квантовой механики (или одному из её постулатов) – принципу суперпозиции состояний. На языке волновых функций этот принцип можно сформулировать следующим образом.

**Утверждение 1** (II постулат квантовой механики). *Если квантовая система может находиться в состояниях, описываемых волновыми функциями  $\Psi_1$  и  $\Psi_2$ , то она может находиться и в состоянии  $\Psi$ , описываемом их линейной комбинацией:*

$$\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2, \quad c_1, c_2 \in \mathbb{C}$$

где  $c_1, c_2$  – произвольные (с точностью до условия нормировки) комплексные числа.

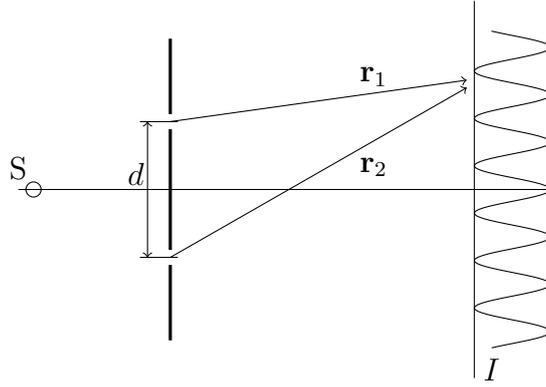


Рис. 3.1: К вопросу о суперпозиции состояний.

Этот постулат имеет много наблюдаемых следствий. Одно из них, а именно прохождение электрона через две близко расположенных щели ( $\lambda_{д.б.} = \frac{h}{p} \lesssim d$ ), обсуждается чаще других (см. рис. 3.1). Монохроматический пучок электронов падает на экран слева, проходит сквозь щели в перегородке и затем регистрируется на экране (или фотопластинке) справа. Если поочерёдно закрыть каждую из щелей, то на экране справа мы увидим изображение открытой щели. Но если открыть обе щели одновременно, то вместо изображения двух щелей на фотографии видна система интерференционных полос. Результаты этого опыта можно объяснить, если предположить, что электрон, проходящий через две открытые щели, находится в некотором состоянии суперпозиции

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = [\psi_1(\mathbf{r}_1) + \psi_2(\mathbf{r}_2)] e^{-iEt/\hbar} \quad (3.1.1)$$

Здесь две волны имеют одинаковую частоту  $\omega = E/\hbar$ , т.к. в противном случае интерференционная картина перестанет быть стационарной. Тогда плотность вероятности нахождения электрона вблизи точки  $(\mathbf{r}, t)$  равна

$$\begin{aligned} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 &= |\psi_1(\mathbf{r}_1) + \psi_2(\mathbf{r}_2)|^2 = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + \underbrace{(\psi_1^* \psi_2 + \psi_1 \psi_2^*)}_{2 \operatorname{Re}(\psi_1 \psi_2^*)} = \\ &= |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + 2 |\psi_1| |\psi_2| \cos(\varphi_1 - \varphi_2) \end{aligned} \quad (3.1.2)$$

т.е. наблюдается стационарная (не зависящая от времени) интерференционная картина. Последний член в сумме (3.1.2) представляет интерференцию двух волн вероятности, прошедших в данную точку экрана из разных щелей в перегородке, и зависит от разности фаз волновых функций  $\Delta\varphi = \varphi_1 - \varphi_2$ . В случае равных по модулю амплитуд вероятности ( $|\psi_1| = |\psi_2|$ ):

$$|\Psi|^2 = 4 |\psi_1|^2 \cos^2 \frac{\Delta\varphi}{2} \quad (3.1.3)$$

т.е. интенсивность изображения в разных точках экрана меняется от нуля до  $4 |\psi_1|^2$  в зависимости от разности фаз  $\Delta\varphi$ . Например, абсолютный максимум интенсивности расположен на центральной линии при  $\Delta\varphi = 0$ . Может оказаться и так, что при двух открытых щелях на месте изображения одиночной щели мы не обнаружим никакого сигнала, что с корпускулярной точки зрения абсурдно.

С чем же интерферирует электрон, если вся волновая функция  $\Psi$  отнесена к одному электрону? Каждый электрон интерферирует сам с собой, т.к. он вошёл частично в каждую волну и невозможно точно сказать, через какую из щелей он проходит. Если же попытаться установить, через какую фиксированную щель он проходит, поставив

дополнительный эксперимент, то интерференционная картина исчезнет. Дело в том, что при этом произойдёт трансформация волновой функции  $\psi(\mathbf{r}_1) \rightarrow \psi_1(\mathbf{r}_1)$ , и больше не будет интерференционного состояния.

Таким образом, для сохранения принципа суперпозиции состояний, векторное пространство состояний должно быть линейным, т.е. произвольная линейная композиция двух векторов  $|\psi_1\rangle$  и  $|\psi_2\rangle$  из этого пространства должна также принадлежать пространству состояний:

$$|\psi\rangle = c_1 |\psi_1\rangle + c_2 |\psi_2\rangle, \quad \text{при } c_1, c_2 \in \mathbb{C} \quad (3.1.4)$$

В качестве следствия принципа суперпозиции сделаем следующее замечание

**Утверждение 2** (I постулат квантовой механики в формализме Дирака). *Квантовое состояние системы полностью определяется вектором состояния  $|\psi\rangle$ . Векторы  $|\psi\rangle$  и  $C|\psi\rangle$  ( $C \neq 0$ ) определяют одно и то же состояние.*

Умножение на число отличное от нуля не меняет состояние, т.е. суперпозиция состояния с самим собой не даёт ничего нового с точки зрения квантовых измерений. В «начинке» скобки остаются те же самые квантовые числа – значения динамических переменных. Это следствие принципа суперпозиции трактуется как первый постулат квантовой механики на основе обобщения экспериментальных фактов. В частности, в опытах по интерференции электронов умножение на константу не меняет распределение волн вероятности, а лишь нормирует интерференционную картинку на общее число частиц в пучке.

Кроме того, векторное пространство состояний обладает обычными свойствами линейного (векторного) пространства:

1.  $|\psi\rangle + |\varphi\rangle = |\varphi\rangle + |\psi\rangle$  (аксиома коммутативности)
2.  $[|\psi\rangle + |\varphi\rangle] + |\chi\rangle = |\psi\rangle + [|\varphi\rangle + |\chi\rangle]$  (аксиома ассоциативности)
3.  $c(|\varphi\rangle + |\psi\rangle) = c|\varphi\rangle + c|\psi\rangle$  (аксиома дистрибутивности)
4.  $(c_1 + c_2)|\psi\rangle = c_1|\psi\rangle + c_2|\psi\rangle$  (аксиома дистрибутивности)
5.  $0 \cdot |\psi\rangle \equiv |0\rangle = 0$  (нулевой вектор не описывает никакого состояния квантовой системы. Действительно, если  $|\psi\rangle = 0$ , то и связанная с этим вектором вероятность найти частицу равна нулю, что означает отсутствие квантового объекта).

Векторное пространство состояний наделено скалярным произведением вектора  $|\varphi\rangle$  на вектор  $|\psi\rangle$ , которое в общем случае есть комплексное число  $\langle\varphi|\psi\rangle$ . По определению, скалярное произведение выражается через интеграл в конфигурационном пространстве  $\mathbf{q} = (q_1, \dots, q_n)$

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \int \underbrace{\varphi^*(q_1, \dots, q_n)}_{\mathbf{q}} \underbrace{\psi(q_1, \dots, q_n)}_{\mathbf{q}} \underbrace{dq_1 \dots dq_n}_{d\mathbf{q}} \quad (3.1.5)$$

который ещё называется проекцией  $\psi$  на  $\varphi$ . Если  $\langle\varphi|\psi\rangle = 0$ , то говорят, что функции  $\varphi$  и  $\psi$  ортогональны. Норма  $\|\psi\|$  функции  $\psi$  есть скалярное произведение функции на саму себя:  $\|\psi\| = \langle\psi|\psi\rangle$ .

Основные свойства скалярного произведения:

1. Из (3.1.5):  $\langle\varphi|\psi\rangle = \langle\psi|\varphi\rangle^*$ , т.е. порядок сомножителей существенен;
2. Если  $|\tilde{\varphi}\rangle = \lambda_1 |\varphi\rangle$  и  $|\tilde{\psi}\rangle = \lambda_2 |\psi\rangle$ , то  $\langle\tilde{\varphi}|\tilde{\psi}\rangle = \lambda_1^* \lambda_2 \langle\varphi|\psi\rangle$ , т.е. скалярное произведение линейно по второму и антилинейно по первому сомножителю;

3. норма функции  $\psi$  есть неотрицательное вещественное число:  $\langle \psi | \psi \rangle \geq 0$ , причём  $\langle \psi | \psi \rangle = 0$  только если  $|\psi\rangle = 0$ . Поэтому в математической литературе норма вектора  $|\psi\rangle$  определяется как  $\|\psi\| = \sqrt{\langle \psi | \psi \rangle}$

Помимо свойства линейности и возможности определения скалярного произведения, пространство состояний обладает ещё и свойством полноты. Это обстоятельство позволяет отождествить его с пространством Гильберта. В нём всегда можно ввести базис как полную ортонормированную систему функций. Следовательно, есть возможность произвольную функцию состояния  $\psi(x)$  представить в виде рядов или интегралов, т.е. в виде линейной комбинации базисных функций.

Отметим в конечномерной модели аналогию с линейной алгеброй. Пусть вектору состояний  $|\psi\rangle$  соответствует двухкомпонентный вектор-столбец  $\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$ . Тогда скалярному произведению  $\langle \varphi | \psi \rangle$  можно поставить в соответствие значение

$$(\varphi_1^*, \varphi_2^*) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \varphi_1^* \psi_1 + \varphi_2^* \psi_2$$

Поэтому наряду с  $\psi$  удобно ввести также  $\langle \psi |$  – аналог комплексно-сопряжённой вектор-строки:  $\langle \psi | \rightarrow (\psi_1^*, \psi_2^*)$ . Данный объект есть элемент дуального (или сопряженного) векторного пространства, хорошо известного в линейной алгебре. Операцию перехода к элементам дуального векторного пространства обозначим символом  $\dagger$ , так что

$$\langle \psi | = |\psi\rangle^\dagger$$

В терминах матриц это означает эрмитово сопряжение, т.е. операцию транспонирования и комплексного сопряжения. Таким образом, для любого вектора состояний  $|\psi\rangle$ , принадлежащего гильбертову пространству ( $|\psi\rangle \in \mathbb{H}$ ), вектор дуального пространства  $\langle \varphi | \in \mathbb{H}^*$  задаёт линейный функционал, аргумент которого сам вектор  $|\psi\rangle$ , а его значение  $\langle \varphi | \psi \rangle \in \mathbb{C}$ .

Вектор  $|\psi\rangle$  называют кет-вектором, а вектор  $\langle \psi |$  дуального пространства – бра-вектором. Дело в том, что эти обозначения, введённые Полем А. М. Дираком, соответствуют английскому слову «bracket» – скобка. «Скобка» (скалярное произведение)  $\langle \varphi | \psi \rangle$  состоит из двух векторов: «бра» и «кет».

В заключение этого параграфа ещё раз обратимся к принципу суперпозиции состояний, записанному в векторных обозначениях в виде (3.1.4):

$$|\psi\rangle = c_1 |\psi_1\rangle + c_2 |\psi_2\rangle$$

тогда:

$$\langle \psi | = c_1^* \langle \psi_1 | + c_2^* \langle \psi_2 |$$

Поскольку ранее мы договорились описывать состояния функциями нормированными на единицу, то для всех векторов состояний принимаем норму

$$\langle \psi | \psi \rangle = \langle \psi_1 | \psi_1 \rangle = \langle \psi_2 | \psi_2 \rangle = 1$$

отсюда:

$$\langle \psi | \psi \rangle = |c_1|^2 + |c_2|^2 + 2 \operatorname{Re} c_1^* c_2 \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = 1$$

Выбирая состояния  $|\psi_1\rangle$  и  $|\psi_2\rangle$  взаимно ортогональными, т.е.  $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = 0$ , получим  $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$ . В таком случае коэффициенты линейной комбинации (3.1.4) имеют вполне определённый физический смысл:  $|c_1|^2$  ( $|c_2|^2$ ) – вероятность обнаружить систему в состоянии  $|\psi_1\rangle$  ( $|\psi_2\rangle$ ). Мы получили важное дополнение к принципу суперпозиции состояний

**Утверждение 3.** Если измерение в состоянии (1) даёт результат (1), а измерение в состоянии (2) даёт результат (2), то измерение в суперпозиции этих состояний даёт либо результат (1), либо результат (2).

Термин «квантовая суперпозиция» означает, что при измерении нельзя получить «что-то третье», а лишь только «первое» или «второе» с той или иной вероятностью. В этом заключена ещё одна сторона статистической интерпретации волновой функции в квантовой механике.

## §2. Наблюдаемые и операторы физических величин. Линейные и эрмитовые операторы

В квантовой механике каждой физической величине  $F$  (или наблюдаемой  $F$ , по терминологии Дирака), ставится в соответствие линейный оператор  $\hat{F}$ , действующий в пространстве векторов состояний  $ket\psi$ , описывающих состояния физической системы. Линейный оператор  $\hat{F}$  задаёт в гильбертовом пространстве  $\mathbb{H}$  некоторое линейное отображение некоторого множества  $D_{\hat{F}}$  (области определения  $\hat{F}$ ) в множество значений  $R_{\hat{F}}$ :

$$|\varphi\rangle = \hat{F}|\psi\rangle \in R_{\hat{F}}, \quad \text{где } |\psi\rangle \in D_{\hat{F}}$$

**Определение 1.** Оператор  $\hat{F}$  называется линейным, если для него выполняется:

$$\hat{F}(c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle) = c_1\hat{F}|\psi_1\rangle + c_2\hat{F}|\psi_2\rangle \quad (3.2.1)$$

где  $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in D_{\hat{F}}$ , а  $c_1, c_2 \in \mathbb{C}$ .

В линейности оператора  $\hat{F}$  физической величины  $F$  находит отражение принцип суперпозиции состояний, т.к. он с самого начала заложен в квантовую теорию. По своему определению это оператор, который переводит линейную комбинацию (суперпозицию) одних векторов состояний в линейную комбинацию других векторов состояний:

$$c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle \xrightarrow{\hat{F}} c_1|\varphi_1\rangle + c_2|\varphi_2\rangle$$

Таким образом, применение линейных операторов не нарушает принципа суперпозиции состояний.

Линейные операторы образуют алгебру операторов, т.е. множество операторов, для которых справедливы следующие свойства:

1. Умножение на комплексное число:

$$(c\hat{F})|\psi\rangle \equiv \underbrace{c(\hat{F}|\psi\rangle)}_{\text{свойство однородности } \hat{F}} = \hat{F}(c|\psi\rangle)$$

2. Коммутативность операции сложения:

$$(\hat{F} + \hat{G})|\psi\rangle \equiv \underbrace{\hat{F}|\psi\rangle + \hat{G}|\psi\rangle}_{\text{из аксиомы коммутативности}} = \hat{G}|\psi\rangle + \hat{F}|\psi\rangle = (\hat{G} + \hat{F})|\psi\rangle \Rightarrow \hat{F} + \hat{G} = \hat{G} + \hat{F}$$

3. Произведение операторов:

$$\hat{P} = \hat{F}\hat{G} \Rightarrow \hat{P}|\psi\rangle = \hat{F}(\hat{G}|\psi\rangle)$$

В общем случае операция произведения некоммутативна:  $\hat{F}\hat{G}|\psi\rangle \neq \hat{G}\hat{F}|\psi\rangle$

**Определение 2.** Разность  $\hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F}$  называется коммутатором операторов  $\hat{F}$  и  $\hat{G}$  и обозначается квадратными скобками:

$$[\hat{F}, \hat{G}] \equiv \hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F} \quad (3.2.2)$$

Говорят, что операторы коммутируют, если  $[\hat{F}, \hat{G}] = 0$ .

Из свойства 1 следует, что любой оператор коммутирует с константой:  $[\hat{F}, C] = 0$ .

4. Пусть  $|\varphi\rangle = \hat{F}|\psi\rangle$ . Если имеется взаимно однозначное соответствие между векторами  $|\psi\rangle$  и  $|\varphi\rangle$ , то оно определяет два линейных оператора  $\hat{F}$  и  $\hat{G}$ :

$$|\varphi\rangle = \hat{F}|\psi\rangle \quad |\psi\rangle = \hat{G}|\varphi\rangle$$

При этом операторы  $\hat{F}$  и  $\hat{G}$  по определению обратны друг к другу, т.е. удовлетворяют операторным уравнениям

$$\hat{F}\hat{G} = \hat{G}\hat{F} = 1 \quad (3.2.3)$$

Эти два определения обратных операторов эквивалентны. Оператор, обратный данному, существует не всегда<sup>1</sup>. Когда он существует, его обозначают символом  $\hat{F}^{-1}$ , и альтернативным определению (3.2.3) будет

$$\hat{F}\hat{F}^{-1} = \hat{F}^{-1}\hat{F} = 1 \quad (3.2.3')$$

Если операторы  $\hat{F}$  и  $\hat{G}$  имеют обратные, тогда существует и обратный оператор из произведения:

$$(\hat{F}\hat{G})^{-1} = \hat{G}^{-1}\hat{F}^{-1} \quad (3.2.4)$$

Отметим перестановку сомножителей в правой части (3.2.4).

**Упражнение 1.** Доказать (3.2.4), используя (3.2.3').

Рассмотрим наряду с оператором  $\hat{F}$ , действующем в пространстве состояний  $\mathbb{H}$ , оператор  $\hat{F}^\dagger$ , действующий в сопряжённом пространстве  $\mathbb{H}^*$ . Пусть  $|\chi\rangle = \hat{F}|\psi\rangle$ , тогда по определению вектор в  $\mathbb{H}^*$  получается эрмитовым сопряжением:

$$|\chi\rangle^\dagger = (\hat{F}|\psi\rangle)^\dagger \Big|_{(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger} = \langle\psi| \hat{F}^\dagger$$

$$\boxed{\langle\chi| = \langle\psi| \hat{F}^\dagger} \quad (3.2.5)$$

<sup>1</sup>Это прояснится в дальнейшем при рассмотрении матричного представления операторов: обратную имеет только невырожденная матрица, т.е. с отличным от нуля определителем

Оператор  $\widehat{F}^\dagger$  эрмитово сопряжён по отношению к оператору  $\widehat{F}$  и действует «справа налево». В результате действия  $\widehat{F}^\dagger$  на бра-вектор  $\langle\psi|$  получается бра-вектор  $\langle\chi|$ . К нему можно справа «приставить» некоторый вектор  $|\varphi\rangle \in \mathbb{H}$ . А это значит, формально можно считать, что оператор  $\widehat{F}^\dagger$  действует не только «налево», но и «направо», т.е. на  $|\varphi\rangle$ . Тогда, получим

$$\langle\psi|\widehat{F}^\dagger|\varphi\rangle = \langle\chi|\varphi\rangle = \langle\varphi|\chi\rangle^*$$

Следовательно, из (3.2.5):

$$\boxed{\langle\psi|\widehat{F}^\dagger|\varphi\rangle = \langle\varphi|\widehat{F}|\psi\rangle^*} \quad (3.2.6)$$

**Определение 3.** Эрмитово сопряжённым к  $\widehat{F}$  называется оператор  $\widehat{F}^\dagger$ , удовлетворяющий (3.2.6).

Для эрмитово сопряжённых операторов легко убедиться в справедливости соотношений:

$$\begin{aligned} (c\widehat{F})^\dagger &= c^*\widehat{F}^\dagger \\ (\widehat{F}^\dagger)^\dagger &= \widehat{F} \\ (\widehat{F} + \widehat{G})^\dagger &= \widehat{F}^\dagger + \widehat{G}^\dagger \\ (\widehat{F}\widehat{G})^\dagger &= \widehat{G}^\dagger\widehat{F}^\dagger \end{aligned}$$

**Упражнение 2.** Доказать приведённые выше свойства.

**Определение 4.** Если  $\widehat{F}^\dagger = \widehat{F}$  или

$$\forall |\psi\rangle, |\varphi\rangle \in D_{\widehat{F}} \rightarrow \langle\psi|\widehat{F}|\varphi\rangle = \langle\varphi|\widehat{F}|\psi\rangle^* \quad (3.2.7)$$

то оператор  $\widehat{F}$  называется **эрмитовым** или **сопряжённым самому себе (самосопряжённым)**.

В литературе иногда используется другое эквивалентное определение эрмитово сопряжённого оператора. Пусть  $|\psi\rangle$  и  $|\varphi\rangle$  – два произвольных вектора состояний,  $\widehat{F}|\psi\rangle \equiv |\widehat{F}\psi\rangle$ . Тогда оператор  $\widehat{F}^\dagger$  называется эрмитово сопряжённым по отношению к оператору  $\widehat{F}$ , если оба оператора имеют одну и ту же область определения и выполняется равенство

$$\boxed{\langle\varphi|\widehat{F}\psi\rangle = \langle\widehat{F}^\dagger\varphi|\psi\rangle} = \langle\psi|\widehat{F}^\dagger\varphi\rangle^* \quad (3.2.6')$$

или

$$\boxed{\langle\psi|\widehat{F}^\dagger\varphi\rangle = \langle\widehat{F}\psi|\varphi\rangle} \quad (3.2.6'')$$

что эквивалентно:

$$\int \psi^*(\mathbf{q})\widehat{F}^\dagger\varphi(\mathbf{q})d\mathbf{q} = \int (\widehat{F}\psi(\mathbf{q}))^* \varphi(\mathbf{q})d\mathbf{q}$$

**Определение 5.**  $\widehat{F}$  называется **эрмитовым (самосопряжённым)**, если  $\widehat{F}^\dagger = \widehat{F}$ , т.е.:

$$\forall |\psi\rangle, |\varphi\rangle \in D_{\widehat{F}} \rightarrow \boxed{\langle\psi|\widehat{F}\varphi\rangle = \langle\widehat{F}\psi|\varphi\rangle} \quad (3.2.7')$$

или

$$\int \psi^*(\mathbf{q})\widehat{F}\varphi(\mathbf{q})d\mathbf{q} = \int (\widehat{F}\psi(\mathbf{q}))^* \varphi(\mathbf{q})d\mathbf{q}$$

Здесь область определения  $D_{\hat{F}}$  включает все векторы состояний  $|\psi\rangle$  и  $|\varphi\rangle$ , для которых

1.  $\|\psi\| < \infty, \|\varphi\| < \infty$
2.  $\|\hat{F}\psi\| < \infty, \|\hat{F}\varphi\| < \infty$

**Определение 6.** *Выражение:*

$$\langle\varphi|\hat{F}\psi\rangle \equiv \langle\varphi|\hat{F}|\psi\rangle = \int \varphi^*(\mathbf{q})\hat{F}\psi(\mathbf{q})d\mathbf{q}$$

называется **матричным элементом** оператора  $\hat{F}$  на функциях  $\varphi$  и  $\psi$ , или **матричным элементом**  $\hat{F}$  «в обкладках» векторов  $\langle\varphi|$  и  $|\psi\rangle$ .

Величина  $\langle\psi|\hat{F}\psi\rangle \equiv \langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle$  называется **диагональным матричным элементом**.

Из (2.2.1) оператора  $\hat{F}$  физической величины следует, что наблюдаемое значение  $\langle F \rangle$  физической величины  $F$  (её среднее или ожидаемое значение) совпадает с диагональным матричным элементом

$$\boxed{\langle F \rangle = \langle\psi|\hat{F}\psi\rangle = \langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle} \quad (3.2.8)$$

В квантовой механике средние значения физических величин в любом состоянии представляют собой измеряемые, а следовательно, действительные числа:  $\langle F \rangle = \langle F \rangle^*$ , или, в соответствии с (3.2.8):

$$\langle\psi|\hat{F}\psi\rangle = \langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle^* \Big|_{(3.2.6), (3.2.9)} = \langle\psi|\hat{F}^\dagger|\psi\rangle \quad (3.2.9)$$

или  $\hat{F}^\dagger = \hat{F}$ . То есть физическим (наблюдаемым) величинам соответствуют **эрмитовы операторы**.

Таким образом, в квантовой механике каждой физической величине  $F$  сопоставляется линейный и эрмитовый оператор  $\hat{F}$ , выбираемый так, чтобы среднее из многих измерений этой величины  $\langle F \rangle$  в состоянии, описываемом функцией  $\Psi(\mathbf{r}, t)$ , было равно

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

Здесь функция  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  является вектором пространства Гильберта и удовлетворяет условию нормировки  $\langle\Psi|\Psi\rangle = 1$ .

Об измеряемой величине  $F$ , помимо её среднего значения  $\langle F \rangle$ , судят ещё по её среднему квадратичному отклонению от  $\langle F \rangle$  (дисперсии)

$$\langle(\Delta F)^2\rangle \equiv \langle(F - \langle F \rangle)^2\rangle \quad (3.2.10)$$

Пользуясь общим определением (2.2.1) среднего значения, получим

$$\langle(\Delta F)^2\rangle = \langle\psi|(\hat{F} - \langle F \rangle)^2|\psi\rangle \quad (3.2.11)$$

Т.к. оператор  $\hat{F}$  – эрмитов, а  $\langle F \rangle$  – действительное число, то оператор  $\hat{F} - \langle F \rangle$  – также эрмитов поэтому

$$\langle(\Delta F)^2\rangle \Big|_{(3.2.7)} = \langle(F - \langle F \rangle)\psi|(F - \langle F \rangle)\psi\rangle = \int |(F - \langle F \rangle)\psi|^2 d\mathbf{q} \geq 0 \quad (3.2.12)$$

Следовательно, чтобы величина  $F$  не имела разброса в состоянии  $|\psi\rangle$ , т.е. чтобы  $\langle(\Delta F)^2\rangle = 0$ , необходимо выполнение условия

$$\widehat{F}|\psi\rangle = \langle F\rangle|\psi\rangle \quad (3.2.13)$$

Таким образом, условие  $\langle(\Delta F)^2\rangle = 0$  выполняется, если состояние  $|\psi\rangle$  является собственным для оператора  $\widehat{F}$  (см. § 3 гл. 2). При  $\langle F\rangle = f$  этому условию удовлетворяют собственные вектора оператора  $\widehat{F}$ , для которых вместо (2.3.2) можно записать

$$\widehat{F}|\psi_f\rangle = f|\psi_f\rangle \quad (3.2.14)$$

где  $f$  – собственные значения оператора  $\widehat{F}$ .

Поэтому далее будем считать, что никаких значений величины  $F$  нельзя наблюдать на опыте, кроме тех, которые являются собственными значениями оператора  $\widehat{F}$ . Иными словами, в квантовой механике постулируется:

**Утверждение 1** (III постулат квантовой механики). *Физическая величина  $F$  в любом квантовом состоянии может принимать только те значения, которые принадлежат спектру её оператора  $\widehat{F}$ .*

Наблюдаемые на опыте величины вещественны, значит, должны быть вещественными собственные значения  $f$  оператора  $\widehat{F}$  в (3.2.14). Докажем теорему

**Теорема 1.** *Если оператор  $\widehat{F}$  эрмитов, то он имеет вещественные собственные значения.*

*Доказательство.* Применим к левой части (3.2.14) условие эрмитовости (3.2.7) оператора  $\widehat{F}$ :

$$\langle\psi_f|\widehat{F}|\psi_f\rangle^* \Big|_{(3.2.7)} = \langle\psi_f|\widehat{F}|\psi_f\rangle$$

Отсюда:

$$f^*\langle\psi_f|\psi_f\rangle^* = f^*\langle\psi_f|\psi_f\rangle = f\langle\psi_f|\psi_f\rangle$$

Или  $f^* = f$ , что и требовалось доказать. ■

Этим полностью разъясняется роль эрмитовых операторов для квантовой механики: эрмитовы операторы изображают вещественные (наблюдаемые) величины. Поэтому в современной англоязычной литературе часто эрмитовы операторы называют наблюдаемыми (*observables*).

### §3. Условие ортогональности и полноты для собственных функций операторов физических величин

Уравнение (2.3.3) на собственные значения  $\widehat{F}$  для дискретного спектра в терминах собственных векторов принимает вид

$$\widehat{F}|\psi_n\rangle = f_n|\psi_n\rangle \quad \text{или} \quad \widehat{F}|n\rangle = f_n|n\rangle \quad (3.3.1)$$

где  $\psi_n \equiv |n\rangle$ ,  $n = 0, 1, 2, \dots$

Может оказаться так, что каждому собственному значению (СЗ)  $f_n$  отвечает один собственный вектор. В таком случае говорят о невырожденном (или простом) спектре оператора  $\widehat{F}$ . Может быть и так, что  $f_n$  соответствует несколько собственных векторов, например

$$f_n \rightarrow \{|\psi_n^{(1)}\rangle, |\psi_n^{(2)}\rangle, \dots, |\psi_n^{(g)}\rangle\}$$

Такое собственное значение называется вырожденным и говорят о вырожденном спектре оператора  $\widehat{F}$ .

**Определение 1.** *Максимальное количество линейно-независимых собственных векторов (собственных функций), отвечающих данному собственному значению, называется **кратностью вырождения** этого собственного значения.*

**Утверждение 1.** *Собственные функции (собственные векторы) эрмитового оператора, отвечающие различным собственным значениям, взаимно ортогональны.*

*Доказательство.* Рассмотрим случай, когда вырождение отсутствует. Имеем:

$$\widehat{F}|\psi_n\rangle = f_n|\psi_n\rangle, \quad \widehat{F}|\psi_m\rangle = f_m|\psi_m\rangle, \quad f_n \neq f_m \quad (3.3.2)$$

Умножим первое уравнение из (3.3.2) скалярно на  $\langle\psi_m|$ , второе уравнение – на  $\langle\psi_n|$ , и вычтем из первого уравнения комплексно сопряжённое второе:

$$\langle\psi_m|\widehat{F}|\psi_n\rangle - \langle\psi_n|\widehat{F}|\psi_m\rangle^{\dagger} \Big|_{(3.2.7)} = 0 = f_n\langle\psi_m|\psi_n\rangle - \underbrace{f_m^*}_{=f_m}\langle\psi_n|\psi_m\rangle^*$$

Из вещественности собственных значений  $\widehat{F}$  получаем

$$(f_n - f_m)\langle\psi_m|\psi_n\rangle = 0 \quad (3.3.3)$$

Т.к. по условию  $f_m \neq f_n$ , то  $\langle\psi_m|\psi_n\rangle = 0$ , что и требовалось доказать. ■

Т.к. функции дискретного спектра мы можем нормировать к единице

$$\langle\psi_n|\psi_n\rangle = 1 \quad (3.3.4)$$

это равенство можно объединить с равенством (3.3.3):

$$\boxed{\langle\psi_m|\psi_n\rangle = \langle m|n\rangle = \delta_{mn}} \quad (3.3.5)$$

В дальнейшем мы будем считать, что собственные векторы линейного эрмитового оператора образуют ортонормированную систему векторов.

Собственные векторы  $\{|\psi_n^{(i)}\rangle\}$   $i = \overline{1, g}$ , соответствующие вырожденному СЗ  $f_n$ , вообще говоря, не являются взаимно ортогональным (см., например, (3.3.3) при  $f_n = f_m$ ). Любая линейная комбинация этих векторов

$$|\psi_n^s\rangle = \sum_{i=1}^g c_i^{(s)} |\psi_n^{(i)}\rangle \quad (3.3.6)$$

также будет собственным вектором оператора  $\widehat{F}$  с тем же СЗ  $f_n$ . Из линейной алгебры известно, что линейные комбинации (3.3.6) можно выбрать так, чтобы все векторы нового набора  $\{|\psi_n^{(s)}\rangle\}$ ,  $s = \overline{1, g}$  составляли ортонормированную систему (например, с

помощью процедуры ортогонализации по Шмидту). Таким образом, даже в случае вырожденного спектра эрмитова оператора  $\hat{F}$  все его собственные векторы можно считать ортонормированными.

В математике доказывается, что системы всех ортонормированных собственных векторов линейного эрмитова оператора с дискретным спектром является полным набором в гильбертовом пространстве состояний, а значит, ортонормированным базисом этого пространства.

Следовательно,  $\forall |\psi\rangle \in \mathbb{H}$  мы можем разложить его по системе собственных векторов оператора  $\hat{F}$ :

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |\psi_n\rangle \quad (3.3.7)$$

где

$$\langle \psi_m | \psi \rangle = \sum_n c_n \underbrace{\langle \psi_m | \psi_n \rangle}_{=\delta_{mn} \text{ (из (3.3.5))}} = \sum_n c_n \delta_{mn} = c_m$$

т.е.  $c_n = \langle \psi_n | \psi \rangle$  – коэффициенты  $c_n$  разложения (3.3.7) есть проекции вектора  $|\psi\rangle$  на соответствующие собственные вектора оператора  $\hat{F}$ .

С помощью  $|\psi\rangle$  прямого пространства и  $\langle \varphi |$  сопряжённого было определено число – скалярное произведение этих векторов  $\langle \varphi | \psi \rangle$ . Однако, скалярное произведение – не единственный способ перемножения векторов бра и кет. Можно составить произведение

$$\hat{P}_\psi = |\psi\rangle \langle \varphi | \quad (3.3.8)$$

которое обладает свойствами оператора. Действительно, оператор ставит в соответствие произвольному вектору  $|\chi\rangle$  некоторый другой вектор по определённому правилу:

$$\hat{P}_\psi |\chi\rangle = |\psi\rangle \underbrace{\langle \varphi | \chi \rangle}_{=c} = c |\psi\rangle \quad (3.3.9)$$

Как видим, конструкция (3.3.8) обладает свойствами оператора проектирования: при действии на произвольный вектор  $|\chi\rangle$  она переводит его в вектор  $|\psi\rangle$  с числовым множителем  $c$ , или проектирует произвольное состояние  $|\chi\rangle$  на  $|\psi\rangle$  с весовым множителем  $c$ .

Теперь вернёмся к разложению (3.3.7) и подставим в него явный вид коэффициентов  $c_n$ :

$$|\psi\rangle = \sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n | \psi \rangle = \left( \sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n | \right) |\psi\rangle \quad (3.3.10)$$

Отсюда видно, что выражение в скобках должно быть единичным оператором

$$\boxed{\sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n | = \mathbf{1}} \quad (3.3.11)$$

Полученное соотношение (3.3.11) называется условием полноты системы собственных векторов оператора  $\hat{F}$ . (Иногда левую часть равенства (3.3.11) называют операторным разложением единицы по отношению к собственным векторам оператора  $\hat{F}$ .) Объясним смысл термина «условие полноты». Возьмём одно слагаемое из суммы  $|\psi_n\rangle \langle \psi_n |$  и подействуем этим оператором на вектор  $|\psi\rangle$ , получим

$$|\psi_n\rangle \underbrace{\langle \psi_n | \psi \rangle}_{=c_n} \equiv \widehat{P}_n |\psi\rangle = c_n |\psi_n\rangle \quad (3.3.12)$$

где, как и ранее,  $c_n = |\psi_n\rangle \langle \psi_n|$ . Таким образом,  $\widehat{P}_n$  – это проектор (оператор проектирования) произвольного вектора состояния  $|\psi\rangle$  на одномерное подпространство, натянутое на орт  $|\psi_n\rangle$ . В силу полноты системы собственных векторов  $\{|\psi_n\rangle\}$  сумма подобных проекторов должна представлять собой проектор на всё гильбертово пространство  $\mathbb{H}$ , т.е., очевидно, единичный оператор.

Сформулируем основные свойства проекторов

1. оператор  $\widehat{P}_n$  – эрмитов;
2.  $\widehat{P}_n^2 = \widehat{P}_n$ ; <sup>2</sup>
3. собственные значения  $\widehat{P}_n$ :  $\lambda = \{0, 1\}$

**Упражнение 1.** Доказать вышеперечисленные свойства.

Всё сказанное выше относилось к случаю, когда собственные значения дискретны и невырождены. Если они вырождены, то разложение (3.3.7) уместно трактовать не как разложение по собственным векторам, а по собственным подпространствам.

В заключение этого раздела обсудим физический смысл коэффициентов  $c_n$  в разложении (3.3.7). Проведём нормировку на единицу вектора состояния  $|\psi\rangle$  в разложении (3.3.7). Если

$$|\psi\rangle|_{(3.3.7)} = \sum_n c_n |\psi_n\rangle$$

то

$$\langle \psi | = \sum_m c_m^* \langle \psi_m |$$

$$\langle \psi | \psi \rangle = \sum_m \sum_n c_m^* c_n \underbrace{\langle \psi_m | \psi_n \rangle}_{\delta_{mn}} = \boxed{\sum_n |c_n|^2 = 1} \quad (3.3.13)$$

Подставляя разложение (3.3.7) в (3.2.8) для среднего значения физической величины  $F$  в состоянии  $|\psi\rangle$ , получим

$$\begin{aligned} \langle F \rangle &= \langle \psi | \widehat{F} | \psi \rangle = \sum_m \sum_n c_m^* c_n \underbrace{\langle \psi_m | F | \psi_n \rangle}_{\langle \psi_m | f_n | \psi_n \rangle \text{ из (3.3.1)}} = \sum_m \sum_n c_m^* c_n f_n \underbrace{\langle \psi_m | \psi_n \rangle}_{\delta_{mn}} = \\ &= \boxed{\sum_n f_n |c_n|^2 = \langle F \rangle} \end{aligned} \quad (3.3.14)$$

<sup>2</sup> Сколь физична вырожденная матрица? Иными словами, имеет ли физический смысл оператор, не имеющий обратного?

У проектора  $\widehat{P}_n$  нет обратного оператора. Действительно, если бы он был, то из

$$\widehat{P}_n^2 = \widehat{P}_n \rightarrow \widehat{P}_n \underbrace{\widehat{P}_n \widehat{P}_n^{-1}}_{\mathbb{1}} = \underbrace{\widehat{P}_n \widehat{P}_n^{-1}}_{\mathbb{1}}$$

или  $\widehat{P}_n = \mathbb{1}$ , что в общем случае противоречит определению оператора  $\widehat{P}_n$ .

Однако оператор  $\widehat{P}_n$  – эрмитов, а значит физичен, следовательно, эрмитов оператор не имеющий обратного имеет физический смысл!

Анализ соотношений (3.3.13) и (3.3.14) позволяет заключить, что квадрат модуля коэффициента  $|c_n|^2 = |\langle \psi_n | \psi \rangle|^2$  разложения  $|\psi\rangle$  по собственным векторам оператора  $\widehat{F}$  физической величины есть вероятность обнаружить при измерении физической величины  $F$  её значение равным одному из собственных значений оператора  $\widehat{F}$ , т.е.  $F = f_n$ .

Иными словами, если проделать  $N$  независимых измерений физической величины  $F$ , то в пределе больших  $N$  вероятность получения  $F = f_n$  будет равна

$$P_{|\psi\rangle}(F = f_n) = |\langle \psi_n | \psi \rangle|^2$$

Заметим, что вопрос о том, какова вероятность обнаружить  $F = f_n$  в состоянии  $|\psi\rangle$ , можно также сформулировать в терминах средних значений:

$$P_{|\psi\rangle}[F = f_n] = \langle \psi | \underbrace{|\psi_n\rangle\langle \psi_n|}_{\widehat{P}_n} | \psi \rangle \equiv \langle \widehat{P}_n \rangle_{|\psi\rangle}$$

т.е. как среднее значение проектора  $\widehat{P}_n$  в состоянии  $|\psi\rangle$

## §4. Нормировка собственных функций на единицу и $\delta$ -функцию

До сих пор мы предполагали дискретность спектра собственных значений наблюдаемых. Однако, спектр может быть и непрерывным. Например, для важнейшего в квантовой механике оператора импульса задача на собственные значения формально выглядит так, как она записывалась ранее соотношением (2.3.1):

$$\widehat{\mathbf{p}}\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{p}\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t), \quad (3.4.1)$$

Собственные функции этой задачи – волны де Бройля (2.1.2)

$$\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{(i/\hbar)(\mathbf{p}\mathbf{r} - Et)}$$

нормированы на  $\delta$ -функцию соотношением (2.1.3), или

$$\int \Psi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r}, t) \Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) d\mathbf{v} \equiv \langle \mathbf{p}' | \mathbf{p} \rangle = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \quad (3.4.2)$$

Эти функции не принадлежат к классу квадратично интегрируемых функций, т.е., вообще говоря, получается базис состояний, не принадлежащий исходному гильбертовому пространству состояний  $\mathbb{H}$ .

В таком случае вводится понятие оснащённого гильбертова пространства. В нём наряду с обычными векторами присутствуют и ненормируемые векторы типа плоских волн. В этом плане говорят об обобщённых собственных векторах или векторах непрерывного спектра:

$$\widehat{F}|f\rangle = f|f\rangle, \quad \text{где } \langle f|f'\rangle = \delta(f - f') \quad (3.4.3)$$

В функциональном анализе доказывается теорема:

**Теорема 1.** Самосопряжённый оператор обладает в оснащённом гильбертовом пространстве **полной** системой обобщённых собственных векторов, отвечающих вещественным собственным значениям.

В соответствии с её утверждением, любой вектор состояния  $|\psi\rangle$  можно задать в базисе оператора  $\hat{F}$ :

$$|\psi\rangle|_{(3.3.7)} = \sum_n c_n |\psi_n\rangle \equiv \sum_n c_n |n\rangle \quad (3.4.4)$$

если спектр оператора  $\hat{F}$  дискретен, или

$$|\psi\rangle = \int c(f) |f\rangle df \quad (3.4.5)$$

если спектр оператора  $\hat{F}$  непрерывен. Причём, как показано выше,  $c_n = \langle \psi_n | \psi \rangle \equiv \langle n | \psi \rangle$ , и выполняется

$$\langle f' | \psi \rangle = \int c(f) \underbrace{\langle f' | f \rangle}_{\delta(f-f') \text{ из (3.4.3)}} df = c(f')$$

или

$$\boxed{c(f) = \langle f | \psi \rangle}$$

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

$$\boxed{|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n | \psi \rangle + \int df |f\rangle \langle f | \psi \rangle} \quad (3.4.6)$$

– разложение произвольного вектора-состояний  $|\psi\rangle$  по полному базису оператора  $\hat{F}$ .

В случае непрерывного спектра (3.4.5)

$$|\psi\rangle = \int \langle f | \psi \rangle \cdot |f\rangle df = \int df \cdot |f\rangle \langle f | \psi \rangle$$

т.е. условие полноты принимает вид

$$\boxed{\int df |f\rangle \langle f| = \mathbf{1}}$$

Обобщённое условие полноты теперь записывается как:

$$\boxed{\sum_n |n\rangle \langle n| + \int df |f\rangle \langle f| = \mathbf{1}} \quad (3.4.7)$$

Обсудим теперь физический смысл коэффициентов  $c_n = \langle n | \psi \rangle$  и  $c(f) = \langle f | \psi \rangle$  в разложении (3.4.6). С учётом обобщённого условия ортонормировки (3.3.5) и (3.4.3)

$$\langle n | m \rangle = \delta_{nm}, \quad \langle f | f' \rangle = \delta(f - f')$$

а также взаимной ортогональности векторов состояний дискретного и непрерывного участков спектра

$$\langle n | f \rangle = 0$$

условие нормировки вектора состояния  $|\psi\rangle$  в разложении (3.4.6) принимает теперь вид

$$\langle \psi | \psi \rangle = \sum_n |c_n|^2 + \int |c(f)|^2 df = 1 \quad (3.4.8)$$

**Упражнение 1.** Доказать (3.4.8).

Подставляя разложение (3.4.6) в формулу (3.2.8) для среднего значения физической величины  $F$  в состоянии  $|\psi\rangle$ , с учётом обобщённой задачи на собственные значений (3.3.1) и (3.4.3)

$$\hat{F} |n\rangle = f_n |n\rangle, \quad \hat{F} |f\rangle = f |f\rangle$$

получаем

$$\langle F \rangle = \langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle = \sum_n f_n |c_n|^2 + \int f \underbrace{|c(f)|^2}_{df} df \quad (3.4.9)$$

**Упражнение 2.** Доказать (3.4.9).

Из (3.4.8) и (3.4.9) следует, что  $|c_n|^2 = |\langle n | \psi \rangle|^2$  имеет прежний (см. § 3 гл. 3) физический смысл – это вероятность того, что при измерении физической величины  $F$  в состоянии  $|\psi\rangle$  будет получено значение  $F = f_n$ .<sup>3</sup>

Если  $f_n$  – вырожденное собственное значение с кратностью вырождения вырождения  $g$ , то в сумме (3.4.9) имеется  $g$  слагаемых одним и тем же значением  $f_n$ . Тогда вероятность того, что в результате измерения будет получено значение  $f_n$  есть

$$P_{|\psi\rangle} [F = f_n] = \sum_{i=1}^g |c_n^{(i)}|^2 \equiv \sum_{i=1}^g |\langle n^{(i)} | \psi \rangle|^2 \quad (3.4.10)$$

где суммирование производится по всем тем значениям  $i$ , для которых  $f_n$  одинаково. Из (3.4.8) и (3.4.9) также следует, что плотность вероятности получить в результате измерения значение, лежащее в окрестности  $(f, f + df)$  точке непрерывного спектра  $f$  равна

$$\rho_{|\psi\rangle}(f) = \frac{dP}{df} = |c(f)|^2 = |\langle f | \psi \rangle|^2 \quad (3.4.11)$$

<sup>3</sup>См. § 3 т. III Л.Л.



# Глава 4

## Совместная измеримость физических величин

### §1. Условия одновременной измеримости физических величин. Коммутаторы.

Пусть  $\hat{F}, \hat{G}$  – наблюдаемые и имеют дискретные спектры.

$$\begin{aligned} \hat{F}, \hat{G}: \quad F &\rightarrow \hat{F} \rightarrow \{f_n\}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \\ G &\rightarrow \hat{G} \rightarrow \{g_m\}, \quad m = 0, 1, 2, \dots \end{aligned}$$

$|\varphi\rangle$  — общий собственный вектор операторов  $\hat{F}$  и  $\hat{G}$ .

$$\begin{cases} \hat{F}|\varphi\rangle = f_n|\varphi\rangle \\ \hat{G}|\varphi\rangle = g_m|\varphi\rangle \end{cases} \quad (4.1.1)$$

Обозначим  $F = f_n, G = g_m$ , тогда

$$|\varphi\rangle \equiv |f_n g_m\rangle \equiv |nm\rangle$$

$\{|nm\rangle\}$  — полная система собственных векторов.

Тогда:

$$\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H} \rightarrow |\psi\rangle = \underbrace{\sum_{n,m} |nm\rangle \langle nm|\psi\rangle}_{=1} \quad (4.1.2)$$

$$P_{|\psi\rangle}(F = f_n, G = g_m) = |\langle nm|\psi\rangle|^2$$

**Определение 1.** Физические величины  $F$  и  $G$  одновременно (совместно) измеримы, если их операторы  $\hat{F}$  и  $\hat{G}$  обладают общей полной системой собственных векторов (собственных функций).

**Теорема 1.** Для того, чтобы физические величины  $F$  и  $G$  были совместно измеримы необходимо и достаточно, чтобы операторы  $\hat{F}$  и  $\hat{G}$  коммутировали, то есть:

$$[\hat{F}, \hat{G}] \equiv \hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F} = 0$$

*Доказательство.* 1) Необходимость. Пусть  $F$  и  $G$  совместно измеримы, тогда:

$$\begin{aligned} \{|nm\rangle\} \in \mathcal{H}, \quad \forall |\psi\rangle \in \mathcal{H} \rightarrow \\ (\widehat{F}\widehat{G} - \widehat{G}\widehat{F})|\psi\rangle = \sum_{n,m} (\widehat{F}\widehat{G} - \widehat{G}\widehat{F})|nm\rangle \langle nm|\psi\rangle = \sum_{n,m} (f_n g_m - g_m f_n) |nm\rangle \langle nm|\psi\rangle = 0 \end{aligned}$$

Что и требовалось доказать

2) Достаточность.

а) Пусть  $[\widehat{F}, \widehat{G}] = 0$  и  $\widehat{F}$  имеет невырожденный спектр.

$$f_n \rightarrow |n\rangle : \widehat{F}|n\rangle = f_n |n\rangle \quad (4.1.3)$$

$$\widehat{G}(\widehat{F}|n\rangle) = \widehat{F}(\widehat{G}|n\rangle) \Big|_{(4.1.3)} = f_n(\widehat{G}|n\rangle)$$

$\widehat{G}|n\rangle$  — собственный вектор оператора  $\widehat{F}$  с собственным значением  $f_n$

Собственные векторы  $\widehat{G}|n\rangle$  и  $|n\rangle$  соответствуют одному собственному значению, а значит коллинеарны:  $\widehat{G}|n\rangle = g_m |n\rangle$

$$|n\rangle \equiv |f_n g_m\rangle \equiv |nm\rangle$$

(полная система)

б) Случай вырожденного спектра  $\widehat{F}$  доказан в гл.6

Таким образом, если  $[\widehat{F}, \widehat{G}] \neq 0$ , то  $\widehat{F}$  и  $\widehat{G}$  могут иметь общий собственный вектор. Но из теоремы следует, что из малого числа собственных векторов нельзя построить полную систему. ■

**Определение 2.** Число  $f$ , входящее в собственные значения оператора физической величины  $\widehat{F}$ , называют квантовым числом, характеризующим состояние системы  $|\psi_f\rangle \equiv |f\rangle$ .

Набор взаимно коммутирующих операторов  $(\widehat{G}_1, \widehat{G}_2, \dots)$  коммутирующих с  $\widehat{F}$  даёт полный набор квантовых чисел в случае вырожденного спектра.<sup>1</sup>

$\psi_{f g_1 g_2 \dots}(\mathbf{q})$  или собственные векторы  $|f g_1 g_2 \dots\rangle$  дают полное описание квантового состояния системы.

**Определение 3.** Набор взаимно коммутирующих операторов, собственные значения (квантовые числа) которых однозначно определяют квантовое состояние системы, называют полным набором совместных наблюдаемых.

## §2. Соотношение неопределённостей

Пусть  $\widehat{F}$  и  $\widehat{G}$  — операторы физических величин  $F$  и  $G$ , то есть  $\widehat{F}^+ = \widehat{F}$ ,  $\widehat{G}^+ = \widehat{G}$  и  $[\widehat{F}, \widehat{G}] = i\widehat{K}$ .

**Теорема 1.** В произвольном квантовом состоянии выполняется соотношение неопределённостей:

$$\left\langle \left( \widehat{F} - \langle \widehat{F} \rangle \right)^2 \right\rangle \left\langle \left( \widehat{G} - \langle \widehat{G} \rangle \right)^2 \right\rangle \geq \frac{\langle \widehat{K} \rangle^2}{4}$$

<sup>1</sup>Хм...

Доказательство. 1) Если  $[\widehat{F}, \widehat{G}] = i\widehat{K}$ , то  $\widehat{K}^+ = \widehat{K}$ , т.к.

$$[\widehat{F}, \widehat{G}]^+ = -i\widehat{K}^+ \quad (4.2.1)$$

С другой стороны:

$$[\widehat{F}, \widehat{G}]^+ = (\widehat{F}\widehat{G} - \widehat{G}\widehat{F})^+ = \widehat{G}^+\widehat{F}^+ - \widehat{F}^+\widehat{G}^+ = -[\widehat{F}^+, \widehat{G}^+] = -[\widehat{F}, \widehat{G}] = -i\widehat{K} \quad (4.2.2)$$

Сравнивая правые части (4.2.1) и (4.2.2), получаем  $\widehat{K}^+ = \widehat{K}$

2) В состоянии  $|\psi\rangle$ :  $\langle F \rangle = \langle \psi | \widehat{F} | \psi \rangle$ , то есть:

$$\left. \begin{aligned} \Delta\widehat{F} &= \widehat{F} - \langle \widehat{F} \rangle \cdot \mathbf{1} \\ \Delta\widehat{G} &= \widehat{G} - \langle \widehat{G} \rangle \cdot \mathbf{1} \end{aligned} \right\} \text{операторы отклонения от среднего}$$

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

3)  $|\varphi\rangle = (\Delta\widehat{F} - i\gamma\Delta\widehat{G})|\psi\rangle$ , где  $\gamma$  — вещественный параметр.

Проведём сопряжение:

$$\langle \varphi | = \langle \psi | (\Delta\widehat{F} - i\gamma\Delta\widehat{G})^+ = \langle \psi | (\Delta\widehat{F} + i\gamma\Delta\widehat{G})$$

$$4) \langle \varphi | \varphi \rangle = \| |\varphi\rangle \|^2 = \langle \psi | (\Delta\widehat{F} + i\gamma\Delta\widehat{G})(\Delta\widehat{F} - i\gamma\Delta\widehat{G}) | \psi \rangle = \langle \psi | \Delta\widehat{F}^2 | \psi \rangle + \gamma^2 \langle \psi | \Delta\widehat{G}^2 | \psi \rangle + \gamma \langle \psi | \widehat{K} | \psi \rangle \geq 0$$

Значит, у этого уравнения относительно  $\gamma$  не более одного корня, т.е. можно записать условие на его дискриминант:

$$\langle \widehat{K} \rangle^2 - 4\langle \Delta\widehat{F}^2 \rangle \langle \Delta\widehat{G}^2 \rangle \leq 0$$

Общее соотношение неопределённостей:

$$\boxed{\langle \Delta\widehat{F}^2 \rangle \langle \Delta\widehat{G}^2 \rangle \geq \frac{\langle \widehat{K} \rangle^2}{4}}$$

Дисперсия:

$$\langle \Delta\widehat{F}^2 \rangle = \langle (\widehat{F} - \langle \widehat{F} \rangle)^2 \rangle = \langle \widehat{F}^2 \rangle - \langle \widehat{F} \rangle^2$$

■

**Пример 1.** Выведем соотношение неопределённостей для координаты и импульса:

$$\widehat{F} = \widehat{x} = x$$

$$\widehat{G} = \widehat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

$$[\widehat{x}, \widehat{p}_x]\psi(x) = x(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x})\psi(x) - (-i\hbar \frac{\partial}{\partial x})x\psi(x) = i\hbar\psi(x) \rightarrow \widehat{K} = \hbar$$

$$\boxed{\langle (\Delta\widehat{x})^2 \rangle \langle (\Delta\widehat{p}_x)^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}}$$



# Глава 5

## Квантовая динамика частицы

### §1. Уравнение непрерывности для плотности вероятности. Плотность тока вероятностей. Коэффициенты прохождения и отражения.

$U(\mathbf{r})$  — стационарное потенциальное поле

$$\hat{H} = \frac{\widehat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(\mathbf{r}) \Big|_{\widehat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\mathbf{r})$$

См. (1.3.1) и (1.3.2):

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

— временное (нестационарное) уравнение Шрёдингера, 4-й постулат квантовой механики.

$$\begin{aligned} i\hbar \Psi^* \frac{\partial}{\partial t} \Psi &= \Psi^* \hat{H} \Psi \\ -i\hbar \Psi \frac{\partial}{\partial t} \Psi^* &= \Psi (\hat{H} \Psi)^* \end{aligned}$$

Складывая, получим:

$$i\hbar \left( \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right) = \Psi^* (\hat{H} \Psi) - \Psi (\hat{H} \Psi)^* \quad (5.1.1)$$

Преобразуем левую часть (5.1.1) с помощью выражений (1.4.1) и (1.4.2):

$$\frac{\partial}{\partial t} \Psi^*(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t) \Big|_{\rho(\mathbf{r}, t) = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2} = \frac{\partial \rho}{\partial t}$$

Правая часть (5.1.1):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (\psi^* \Delta \psi - \psi \Delta \psi^*) \Big|_{\Delta = \nabla \cdot \nabla} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) = -i\hbar \left( -\frac{i\hbar}{2m} \right) \nabla (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)$$

Отсюда (5.1.1) переходит в:

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

— уравнение непрерывности для плотности вероятности

где  $\mathbf{j} = -\frac{i\hbar}{2m}(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)$  — плотность потока (тока) вероятности.

$$-\frac{\partial}{\partial t} \int_v \rho(\mathbf{r}, t) dv = \int_v \operatorname{div} \mathbf{j} dv \Big|_{\text{т. Остр.-Гаусса}} = \oint_S \mathbf{j} d\mathbf{S}$$

Размерность плотности потока вероятности:  $[\mathbf{j}] = \left[ \frac{1}{\text{с}\cdot\text{см}^2} \right]$

**Упражнение 1.** Доказать, что  $\mathbf{j} = \frac{p}{m}$

Коэффициент прохождения:

$$T(E) = \frac{|\mathbf{j}_{\text{прош}}|}{|\mathbf{j}_{\text{пад}}|} \quad (5.1.2)$$

Коэффициент отражения:

$$R(E) = \frac{|\mathbf{j}_{\text{отр}}|}{|\mathbf{j}_{\text{пад}}|} \quad (5.1.3)$$

В одномерном случае  $\Psi(\mathbf{r}, t) \rightarrow \Psi(x, t)$ ,  $U(\mathbf{r}) \rightarrow U(x)$

$$j_x = -\frac{i\hbar}{2m} \left( \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) = \frac{1}{m} \operatorname{Re} [\psi^* (\hat{p}_x \psi)] \quad (5.1.4)$$

## §2. Оператор изменения во времени физической величины. Интегралы движения. Коммутаторы. Скобки Пуассона

В общем случае  $\hat{F} = \hat{F}(t)$

$$\langle F \rangle \equiv \langle \psi(t) | \hat{F}(t) | \psi(t) \rangle$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (5.2.1)$$

Пользуясь формулой (5.2.1), а также тем, что  $\hat{H}^+ = \hat{H}$ , получим:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle F \rangle &= \left\langle \frac{\partial \psi}{\partial t} \left| \hat{F} \right| \psi \right\rangle + \left\langle \psi \left| \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \right| \psi \right\rangle + \left\langle \psi \left| \hat{F} \right| \frac{\partial \psi}{\partial t} \right\rangle = \\ &= \frac{i}{\hbar} \left\langle \psi \left| \hat{H} \hat{F} \right| \psi \right\rangle + \left\langle \psi \left| \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \right| \psi \right\rangle - \frac{i}{\hbar} \left\langle \psi \left| \hat{F} \hat{H} \right| \psi \right\rangle = \left\langle \psi \left| \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}] \right| \psi \right\rangle \end{aligned} \quad (5.2.2)$$

$$\left[ \begin{array}{l} \langle F \rangle = \sum_n F_n P_n \rightarrow \frac{d}{dt} \langle F \rangle = \sum_n \frac{dF_n}{dt} P_n \equiv \left\langle \frac{dF}{dt} \right\rangle \\ \langle F \rangle = \int F dP \rightarrow \frac{d}{dt} \langle F \rangle = \int \frac{dF}{dt} dP \equiv \left\langle \frac{dF}{dt} \right\rangle \end{array} \right.$$

Следовательно:

$$\frac{d}{dt} \langle F \rangle \equiv \left\langle \frac{dF}{dt} \right\rangle \quad (5.2.3)$$

Из (2.2.1):

$$\left\langle \frac{dF}{dt} \right\rangle = \left\langle \frac{d\hat{F}}{dt} \right\rangle_\psi = \left\langle \psi \left| \frac{d\hat{F}}{dt} \right| \psi \right\rangle \quad (5.2.4)$$

Сравнивая (5.2.3) и (5.2.4) с (5.2.2):

$$\boxed{\frac{d}{dt} \langle F \rangle = \left\langle \psi \left| \frac{d\hat{F}}{dt} \right| \psi \right\rangle} \quad (5.2.5)$$

где

$$\boxed{\frac{d\hat{F}}{dt} = \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}]} \quad (5.2.6)$$

— оператор изменения физической величины во времени (уравнение движения оператора  $\hat{F}$ ).

Таким образом:

$$\left. \begin{array}{l} \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} = 0 \\ [\hat{H}, \hat{F}] = 0 \end{array} \right\} \langle F \rangle = \text{const}$$

**Определение 1.** Величина, сохраняющая свое значение во времени, называется интегралом движения.

Примеры интегралов движения:

1.  $\hat{F} = \hat{H}$  — гамильтониан замкнутой системы.  $\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0$ , т.е. полная энергия сохраняется.
2.  $\hat{F} = \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ . Если  $\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}$  (свободное движение), то  $\mathbf{p}$  — интеграл движения.

Частица в потенциальном поле:

$$[\hat{H}, \hat{\mathbf{p}}] = \left[ \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}, \hat{\mathbf{p}} \right] + [U(\mathbf{r}), \hat{\mathbf{p}}] = i\hbar\nabla U(\mathbf{r}) \neq 0 \quad (5.2.7)$$

то есть  $\mathbf{p}$  не сохраняется.

Обобщённые координаты:

$$\mathbf{q} = (q_1, \dots, q_n), \quad \mathbf{p} = (p_1, \dots, p_n), \quad F(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$$

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_{i=1}^s \left( \frac{\partial F}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial F}{\partial p_i} \dot{p}_i \right)$$

См. § 40 т. I Л.Л.: уравнения Гамильтона

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$$

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \underbrace{\sum_{i=1}^s \left( \frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial F}{\partial q_i} - \frac{\partial H}{\partial q_i} \frac{\partial F}{\partial p_i} \right)}_{\{H, F\}} = \frac{\partial F}{\partial t} + \{H, F\} \quad (5.2.8)$$

$\{H, F\}$  – скобка Пуассона для  $H$  и  $F$ .

**Принцип соответствия** (между классической и квантовой механикой):

$$|\Delta F| = |F - \langle F \rangle| \ll |\langle F \rangle|$$

(5.2.8)  $\sim$  (5.2.5), (5.2.6):

$$F \leftrightarrow \langle F \rangle$$

$$\frac{\partial F}{\partial t} \leftrightarrow \left\langle \psi \left| \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \right| \psi \right\rangle$$

$$\{H, F\} \leftrightarrow \frac{i}{\hbar} \left\langle \psi \left| [\hat{H}, \hat{F}] \right| \psi \right\rangle$$

Выражение  $i [\hat{H}, \hat{F}]$  иногда называют **квантовой скобкой Пуассона**.

При  $\hbar \rightarrow 0$ :

$$i [\hat{H}, \hat{F}] \rightarrow \hbar \{H, F\}$$

### §3. Производная по времени операторов координаты и импульсов частицы в потенциальном поле. Теоремы Эренфеста

Из (5.2.6):

$$\hat{\mathbf{v}} \equiv \frac{d\hat{\mathbf{r}}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\mathbf{r}}] = \frac{i}{\hbar} [\hat{T}, \hat{\mathbf{r}}] + \frac{i}{\hbar} [U(\hat{\mathbf{r}}), \hat{\mathbf{r}}]$$

$$U(\hat{\mathbf{r}}) \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{U^n(0)}{n!} \hat{\mathbf{r}}^n \rightarrow [U(\hat{\mathbf{r}}), \hat{\mathbf{r}}] = 0$$

$$[\hat{T}, \hat{\mathbf{r}}] = \left[ \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}, \hat{\mathbf{r}} \right] = -i\hbar \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m}$$

Оператор скорости в квантовой механике:

$$\hat{\mathbf{v}} = \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m} \quad (5.3.1)$$

$$\hat{\mathbf{F}} \equiv \frac{d\hat{\mathbf{p}}}{dt} \Big|_{(5.2.6)} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\mathbf{p}}] \Big|_{(5.2.7)} = -\nabla U(\hat{\mathbf{r}}) \quad (5.3.2)$$

Из (5.2.5):

$$\left. \frac{d}{dt} \langle \hat{\mathbf{r}} \rangle \right|_{(5.3.1)} = \frac{\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle}{m} \quad (5.3.3)$$

$$\left. \frac{d}{dt} \langle \hat{\mathbf{p}} \rangle \right|_{(5.3.2)} = -\langle \nabla U(\hat{\mathbf{r}}) \rangle \quad (5.3.4)$$

Из (5.3.3), (5.3.4) получается квантово-механический аналог уравнения Ньютона:

$$m \frac{d^2}{dt^2} \langle \hat{\mathbf{r}} \rangle = \langle \hat{\mathbf{F}} \rangle \quad (5.3.5)$$

Уравнения (5.3.3) - (5.3.5) – **теоремы Эренфеста** (принцип соответствия между квантовой и классической механикой). Уравнения классической механики – предельный случай квантовых уравнений.

Из (5.3.5):

$$\langle \hat{\mathbf{F}}(\mathbf{r}) \rangle \neq \mathbf{F}(\langle \hat{\mathbf{r}} \rangle) \quad (5.3.6)$$

$$\langle \hat{\mathbf{F}}(\mathbf{r}) \rangle = \left\langle \hat{F}(\langle \hat{\mathbf{r}} \rangle) + (\hat{\mathbf{r}} - \langle \hat{\mathbf{r}} \rangle) \nabla \mathbf{F}(\langle \hat{\mathbf{r}} \rangle) + \frac{1}{2} (\hat{r}_\alpha - \langle \hat{r}_\alpha \rangle) (\hat{r}_\beta - \langle \hat{r}_\beta \rangle) \cdot \frac{\partial^2 \mathbf{F}(\langle \hat{\mathbf{r}} \rangle)}{\partial r_\alpha \partial r_\beta} + \dots \right\rangle \quad (5.3.7)$$

$$\langle \hat{\mathbf{F}}(\mathbf{r}) \rangle \approx \mathbf{F}(\langle \hat{\mathbf{r}} \rangle) + \frac{1}{2} \langle (\hat{r}_\alpha - \langle \hat{r}_\alpha \rangle) (\hat{r}_\beta - \langle \hat{r}_\beta \rangle) \rangle \times \frac{\partial^2 \mathbf{F}(\langle \hat{\mathbf{r}} \rangle)}{\partial r_\alpha \partial r_\beta} \quad (5.3.8)$$

Если  $\mathbf{F} \equiv 0$  – свободное движение

Если  $\mathbf{F} = \text{const}$  – движение в однородном поле

$\mathbf{F} = -m\omega^2 \mathbf{r}$  – движение в поле упругой силы

Тогда:

$$\left. \langle \hat{\mathbf{F}}(\mathbf{r}) \rangle \right|_{(5.3.5)} = m \frac{d^2}{dt^2} \langle \hat{\mathbf{r}} \rangle = \mathbf{F}(\langle \hat{\mathbf{r}} \rangle) \quad (5.3.9)$$

Пусть  $\Delta r$  – размер области локализации частицы, а  $L$  – размер области существенного изменения силы. Тогда условие «классичности» движения состоит в том, что:

$$\Delta r \ll L \quad (5.3.10)$$

(т.е.  $|\psi|^2$  существенно отличен от нуля)



# Глава 6

## Теория представлений

### §1. Матричное представление

Пусть спектр оператора  $\hat{G}$  дискретный.

$$\hat{G}|n\rangle = g_n|n\rangle, \quad \text{где } |n\rangle \equiv |\psi_n\rangle, \quad n \in \mathbb{N}$$

Здесь  $n$  - индекс состояния.

Из (3.3.11) (условие полноты):

$$\sum_n |n\rangle \langle n| = \mathbf{1}$$

Разложим по базису оператора  $\hat{G}$ :

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

В  $g$ -представлении:

$$\begin{aligned} \langle n|\psi\rangle &= \begin{pmatrix} \langle 1|\psi\rangle \\ \langle 2|\psi\rangle \\ \dots \end{pmatrix} \\ \langle n|\hat{F}\psi\rangle &= \left\langle n|\hat{F}\left(\sum_{n'} |n'\rangle \langle n'|\right)\psi\right\rangle = \sum_{n'} \langle n|\hat{F}|n'\rangle \langle n'|\psi\rangle = \\ &= \begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} & \dots \\ F_{21} & F_{22} & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle 1|\psi\rangle \\ \langle 2|\psi\rangle \\ \dots \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (6.1.1)$$

$F_{nn'} = \langle n|\hat{F}|n'\rangle$  — матричное представление  $\hat{F}$  в базисе состояний  $\{|n\rangle\}$  собственных векторов  $\hat{G}$  (оператор  $\hat{F}$  в  $g$ -представлении). Если  $\hat{G} = \hat{H}$ , то это  $E$ -представление.

Матричное представление эрмитово-сопряжённого оператора:

$$\langle n'|\hat{F}^\dagger|n\rangle \Big|_{(3.2.6)} = \langle n|\hat{F}|n'\rangle^*$$

т.е.  $(F^\dagger)_{n'n} = F_{nn'}^*$

Эрмитово сопряжение := транспонирование + комплексное сопряжение.

Если  $\hat{F}^\dagger = \hat{F}$ , то  $F_{nn'}^*$  — эрмитова матрица

В случае  $n' = n$ :  $F_{nn} = F_{nn}^*$  (т.е. диагональные матричные элементы эрмитовой матрицы вещественны)

$$\langle n | \widehat{A}\widehat{B} | n'' \rangle = \sum_{n'} \langle n | \widehat{A} | n' \rangle \langle n' | \widehat{B} | n'' \rangle = \sum_{n'} A_{nn'} B_{n'n''} \text{ (произведение матриц)}$$

Задача на собственные значения и векторы:

$$\begin{aligned} \widehat{F} |f\rangle &= f |f\rangle \xrightarrow{(6.1.1)} \sum_{n'} F_{nn'} \langle n' | f \rangle = f \langle n | f \rangle = f \delta_{nn'} \langle n' | f \rangle \\ \sum_{n'} (F_{nn'} - f \delta_{nn'}) \langle n' | f \rangle &= 0 \end{aligned}$$

Корни  $f$  характеристического уравнения являются собственными значениями оператора:

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

В  $f$ -представлении оператора  $\widehat{F}$ :

$$\langle f' | \widehat{F} | f \rangle = f \langle f' | f \rangle = f \delta_{f'f}$$

т.е.  $F$  — диагональная матрица

## §2. Унитарное преобразование векторов-состояний и операторов

$$\begin{aligned} \widehat{L} |\lambda\rangle &= \lambda |\lambda\rangle, \quad |\lambda\rangle = |\chi_\lambda\rangle \\ \widehat{M} |\mu\rangle &= \mu |\mu\rangle, \quad |\mu\rangle = |\varphi_\mu\rangle \\ |\psi\rangle &= \sum_{\lambda} |\lambda\rangle \langle \lambda | \psi \rangle = \sum_{\mu} |\mu\rangle \langle \mu | \psi \rangle \end{aligned}$$

Обозначим:

$$\begin{aligned} \langle \lambda | \psi \rangle &= \langle \chi_\lambda | \psi \rangle = \psi_\lambda \\ \langle \mu | \psi \rangle &= \langle \varphi_\mu | \psi \rangle = \psi'_\mu \end{aligned}$$

(волновая функция в  $\lambda$  и  $\mu$  представлениях)

$$\psi'_\mu = \langle \mu | \psi \rangle = \sum_{\lambda} \underbrace{\langle \mu | \lambda \rangle}_{U_{\mu\lambda}} \langle \lambda | \psi \rangle = \sum_{\lambda} U_{\mu\lambda} \psi_\lambda \quad (6.2.1)$$

$$\langle \mu | = \sum_{\lambda} \underbrace{\langle \mu | \lambda \rangle}_{U_{\mu\lambda}} \langle \lambda | = \sum_{\lambda} U_{\mu\lambda} \langle \lambda |$$

$$|\mu\rangle = \sum_{\lambda} |\lambda\rangle \langle \lambda | \mu \rangle = \sum_{\lambda} U_{\mu\lambda}^* |\lambda\rangle$$

Условия ортонормировки:

$$\begin{aligned} \langle \mu | \mu' \rangle &= \delta_{\mu\mu'} \\ \langle \lambda | \lambda' \rangle &= \delta_{\lambda\lambda'} \end{aligned}$$

$$\delta_{\mu\mu'} = \langle \mu | \mu' \rangle = \sum_{\lambda} \sum_{\lambda'} \underbrace{\langle \mu | \lambda \rangle}_{U_{\mu\lambda}} \underbrace{\langle \lambda | \lambda' \rangle}_{\delta_{\lambda\lambda'}} \underbrace{\langle \lambda' | \mu' \rangle}_{(U^\dagger)_{\lambda'\mu'}} = \sum_{\lambda} U_{\mu\lambda} (U^\dagger)_{\lambda\mu'}$$

**Определение 1.**  $\widehat{U}$  называется унитарным, если  $\widehat{U}^\dagger = \widehat{U}^{-1}$ , т.е.  $\widehat{U}^\dagger \widehat{U} = \widehat{U} \widehat{U}^\dagger = \mathbb{1}$

Если  $\widehat{U}^\dagger \widehat{U} = \mathbb{1}$ , то:

$$\sum_{n'} U_{nn'} (U^\dagger)_{n'n''} = \delta_{nn''} \Rightarrow U^\dagger = U^{-1}$$

(т.е.  $U$  — унитарная матрица)

$$|\psi'\rangle = \widehat{U} |\psi\rangle \quad (6.2.2)$$

Преобразование вектора-состояния из одного представления в другое является унитарным.

Пусть  $\widehat{F}$  — оператор физической величины в  $\lambda$ -представлении, а  $\widehat{F}'$  — в  $\mu$ -представлении.

$$\begin{aligned} \langle \mu' | \lambda' \rangle^* &= U_{\mu'\lambda'}^* = (U^\dagger)_{\lambda'\mu'} \\ F_{\mu\mu'} &= \langle \mu | \widehat{F} | \mu' \rangle = \sum_{\lambda} \sum_{\lambda'} \underbrace{\langle \mu | \lambda \rangle}_{U_{\mu\lambda}} \underbrace{\langle \lambda | \widehat{F} | \lambda' \rangle}_{F_{\lambda\lambda'}} \langle \lambda' | \mu' \rangle = \sum_{\lambda} \sum_{\lambda'} U_{\mu\lambda} F_{\lambda\lambda'} (U^\dagger)_{\lambda'\mu'} \end{aligned} \quad (6.2.3)$$

$$\boxed{F' = U F U^\dagger} \quad (6.2.4)$$

$$\boxed{F = U^\dagger F' U} \quad (6.2.5)$$

$$\boxed{\widehat{F}' = \widehat{U} \widehat{F} \widehat{U}^\dagger} \quad (6.2.4')$$

$$\boxed{\widehat{F} = \widehat{U}^\dagger \widehat{F}' \widehat{U}} \quad (6.2.5')$$

В классе унитарных преобразований векторов и операторов справедливы следующие утверждения:

1. Скалярное произведение любых двух векторов инвариантно к унитарным преобразованиям:

$$\langle \psi'_1 | \psi'_2 \rangle = \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle$$

2. Унитарные преобразования не меняют собственные значения эрмитовых операторов: если  $\widehat{F} |f\rangle = f |f\rangle$ , то  $\boxed{\widehat{F}' |f'\rangle = f |f'\rangle}$

3. Унитарные преобразования не нарушают эрмитовости операторов: если  $\widehat{F}^\dagger = \widehat{F}$ , то  $(\widehat{F}')^\dagger = \widehat{F}'$

4. Унитарные преобразования сохраняют коммутационные соотношения: если  $[\widehat{F}, \widehat{G}] = \widehat{K}$ , то  $[\widehat{F}', \widehat{G}'] = \widehat{K}'$

5.  $\boxed{\langle \psi_1 | \widehat{F} | \psi_2 \rangle = \langle \psi'_1 | \widehat{F}' | \psi'_2 \rangle}$

**Упражнение 1.** Доказать утверждения 1-5.

Физическое содержание теории при унитарных преобразованиях не меняется. Аналогия в классической механике — канонические преобразования (см. § 45 т. I Л.Л.). Продолжение доказательства **теоремы** из лекции 4:  $[\widehat{F}, \widehat{G}] = 0$ ,  $\widehat{F}$  — вырожденный. Соответствующие собственные значения  $f_n \rightarrow \{|\psi_n^{(i)}\rangle\} \equiv |n^{(i)}\rangle$ ,  $i = 1..k$

$$\begin{aligned} \{|n^{(i)}\rangle\} &\xrightarrow{U} \{|n'^{(i)}\rangle\} \\ |n'^{(i)}\rangle &= \sum_j U_{ij} |n^{(j)}\rangle \\ G' &= UGU^\dagger \end{aligned}$$

Подходящим унитарным преобразованием любая эрмитова матрица приводится к диагональному виду:

$$G'_{ij} = g_i \delta_{ij} \quad \text{или} \quad \widehat{G} |n'^{(i)}\rangle = g_i |n'^{(i)}\rangle$$

$|n'^{(1)}\rangle, |n'^{(2)}\rangle \dots |n'^{(k)}\rangle$  — собственные векторы

Следовательно, величины совместно измеримы. (доказана достаточность теоремы)

### §3. Координатное и импульсное представления

Пусть  $\mathbf{r} \rightarrow |\mathbf{r}\rangle$  (а значит  $\mathbf{r} \rightarrow \widehat{\mathbf{r}}$ )

тогда  $\mathbf{p} \rightarrow |\mathbf{p}\rangle$

Задача на собственные значения:

$$\widehat{\mathbf{r}} |\mathbf{r}'\rangle = \mathbf{r}' |\mathbf{r}'\rangle \quad (6.3.1)$$

$$\widehat{\mathbf{p}} |\mathbf{p}'\rangle = \mathbf{p}' |\mathbf{p}'\rangle \quad (6.3.2)$$

Подействуем справа  $\langle \mathbf{p}'' |$ :

$$\langle \mathbf{p}'' | \widehat{\mathbf{p}} | \mathbf{p}' \rangle = \mathbf{p}' \langle \mathbf{p}'' | \mathbf{p}' \rangle$$

Из (3.4.3):

$$\langle \mathbf{p}'' | \mathbf{p}' \rangle = \delta(\mathbf{p}'' - \mathbf{p}')$$

Таким образом, «матрица» оператора импульса в импульсном ( $p$ -) представлении:

$$\boxed{\langle \mathbf{p}'' | \widehat{\mathbf{p}} | \mathbf{p}' \rangle = \mathbf{p}' \delta(\mathbf{p}'' - \mathbf{p}')} \quad (6.3.3)$$

Аналогично:

$$\boxed{\langle \mathbf{r}'' | \widehat{\mathbf{r}} | \mathbf{r}' \rangle = \mathbf{r}' \delta(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}')} \quad (6.3.4)$$

Из гл.3 §3:

$$\widehat{P}_{\mathbf{r}} = |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r}| \quad (6.3.5)$$

$$\widehat{P}_{\mathbf{r}} |\psi\rangle = |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r} | \psi \rangle = \langle \mathbf{r} | \psi \rangle |\mathbf{r}\rangle \quad (6.3.6)$$

$$\langle \mathbf{r} | \psi \rangle \equiv \psi(\mathbf{r}) \quad (6.3.7)$$

Из гл.3 §4:

$$\begin{aligned} \forall |\psi\rangle \in \mathcal{H} \quad \{|\mathbf{r}\rangle\} \\ |\psi\rangle = \int |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r}|\psi\rangle d\mathbf{r} \end{aligned} \quad (6.3.8)$$

$$|\Phi\rangle = \int |\mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p}|\Phi\rangle d\mathbf{p} \quad (6.3.8')$$

$$\boxed{\langle \mathbf{p}|\Phi\rangle \equiv \Phi(\mathbf{p})} \quad (6.3.7')$$

$|\Phi(\mathbf{p})|^2 d\mathbf{p}$  — вероятность обнаружить частицу с импульсом в интервале  $[\mathbf{p}, \mathbf{p} + d\mathbf{p}]$   
Пусть  $|\psi\rangle \equiv |\mathbf{p}\rangle$ , тогда из равенства (6.3.6):

$$\hat{P}_{\mathbf{r}} |\mathbf{p}\rangle = \langle \mathbf{r}|\mathbf{p}\rangle |\mathbf{r}\rangle \quad (6.3.6')$$

Волна де Бройля:

$$\boxed{\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t)|_{(2.1.2)} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{(3/2)}} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\mathbf{r} - Et)} \Big|_{(6.3.6')} = \langle \mathbf{r}|\mathbf{p}\rangle e^{\frac{-iEt}{\hbar}}} \quad (6.3.9)$$

$$\psi(\mathbf{r}) \equiv \langle \mathbf{r}|\psi\rangle = \int \underbrace{\langle \mathbf{r}|\mathbf{p}\rangle}_{\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})} \underbrace{\langle \mathbf{p}|\psi\rangle}_{\psi(\mathbf{p})} d\mathbf{p} = \int \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})\psi(\mathbf{p}) d\mathbf{p} \quad (6.3.10)$$

Формула (6.3.10) — аналог (2.1.4). Также можно записать:

$$\psi(\mathbf{p}) \equiv \langle \mathbf{p}|\psi\rangle = \int \underbrace{\langle \mathbf{p}|\mathbf{r}\rangle}_{\langle \mathbf{r}|\mathbf{p}\rangle^*} \langle \mathbf{r}|\psi\rangle d\mathbf{r} = \int \psi_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (6.3.11)$$

Формула (6.3.11) — аналог (2.1.5).

$$\hat{\mathbf{r}} |\psi\rangle = |\varphi\rangle \quad (6.3.12)$$

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}|\varphi\rangle \equiv \varphi(\mathbf{r})|_{(6.3.12)} &= \langle \mathbf{r}|\hat{\mathbf{r}}|\psi\rangle = \langle \mathbf{r}|\hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{1}_{\mathbf{r}'}|\psi\rangle = \left\langle \mathbf{r} \left| \hat{\mathbf{r}} \int d\mathbf{r}' \left| \mathbf{r}'\right\rangle \right. \right\rangle \langle \mathbf{r}'|\psi\rangle = \\ &= \int d\mathbf{r}' \langle \mathbf{r}|\hat{\mathbf{r}}|\mathbf{r}'\rangle \psi(\mathbf{r}') \Big|_{(6.3.4)} = \int d\mathbf{r}' \mathbf{r}' \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') = \mathbf{r}\psi(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r}) \\ &\quad \hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r} \end{aligned} \quad (6.3.13)$$

**Упражнение 1.** Следуя схеме (6.3.13), показать, что действие произвольной функции от оператора координаты  $U(\hat{\mathbf{r}}) \equiv \hat{U}(\mathbf{r})$  на волновую функцию  $\psi(\mathbf{r})$  сводится к умножению  $\psi(\mathbf{r})$  на вещественную функцию  $U(\mathbf{r})$ , т.е. что  $U(\hat{\mathbf{r}}) = U(\mathbf{r})$ .  
(Аналогия с §2 гл. 2: (2.2.4)  $\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}$  и (2.2.5)  $U(\hat{\mathbf{r}}) = U(\mathbf{r})$ )

$$\hat{\mathbf{p}} |\psi\rangle = |\chi\rangle \quad (6.3.14)$$

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p}|\chi\rangle \equiv \chi(\mathbf{p})|_{(6.3.14)} &= \langle \mathbf{p}|\hat{\mathbf{p}}|\psi\rangle = \langle \mathbf{p}|\hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{1}_{\mathbf{p}'}|\psi\rangle = \left\langle \mathbf{p} \left| \hat{\mathbf{p}} \int d\mathbf{p}' \left| \mathbf{p}'\right\rangle \right. \right\rangle \langle \mathbf{p}'|\psi\rangle = \\ &= \int d\mathbf{p}' \langle \mathbf{p}|\hat{\mathbf{p}}|\mathbf{p}'\rangle \psi(\mathbf{p}') \Big|_{(6.3.3)} = \int d\mathbf{p}' \mathbf{p}' \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \psi(\mathbf{p}') = \mathbf{p}\psi(\mathbf{p}) = \chi(\mathbf{p}) \\ &\quad \hat{\mathbf{p}} = \mathbf{p} \end{aligned} \quad (6.3.15)$$

**Упражнение 2.** Следуя схеме (6.3.15), показать, что действие произвольной функции от оператора импульса  $F(\hat{\mathbf{p}}) \equiv \hat{F}(\mathbf{p})$  на волновую функцию  $\psi(\mathbf{p})$  сводится к умножению, т.е. что  $F(\hat{\mathbf{p}}) = F(\mathbf{p})$ , где  $F(\mathbf{p})$  — вещественная функция.

Стационарное уравнение Шрёдингера в координатном ( $\mathbf{r}$ -) представлении:

$$\hat{H}|\psi\rangle = \left( \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \hat{U}(\mathbf{r}) \right) |\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (6.3.16)$$

$$\langle \mathbf{p} | \hat{H} | \psi \rangle = \langle \mathbf{p} | \hat{H} \cdot \mathbb{1}_{\mathbf{p}'} | \psi \rangle = \int d\mathbf{p}' \langle \mathbf{p} | \hat{H} | \mathbf{p}' \rangle \langle \mathbf{p}' | \psi \rangle = \int d\mathbf{p}' \left[ \langle \mathbf{p} | \hat{T} | \mathbf{p}' \rangle + \langle \mathbf{p} | \hat{U}(\mathbf{r}) | \mathbf{p}' \rangle \right] \psi(\mathbf{p}')$$

$$\begin{aligned} \int d\mathbf{p}' \langle \mathbf{p} | \hat{T} | \mathbf{p}' \rangle \psi(\mathbf{p}') \Big|_{\text{упр.2}} &= \int d\mathbf{p}' \langle \mathbf{p} | \frac{\mathbf{p}'^2}{2m} | \mathbf{p}' \rangle \psi(\mathbf{p}') = \\ &= \int d\mathbf{p}' \frac{\mathbf{p}'^2}{2m} \underbrace{\langle \mathbf{p} | \mathbf{p}' \rangle}_{\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}')} \psi(\mathbf{p}') = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \psi(\mathbf{p}) \end{aligned} \quad (6.3.17)$$

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p} | \hat{U}(\mathbf{r}) | \mathbf{p}' \rangle &= \langle \mathbf{p} | \mathbb{1}_{\mathbf{r}} \cdot \widehat{U}(\mathbf{r}) \cdot \mathbb{1}_{\mathbf{r}'} | \mathbf{p}' \rangle = \iint d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \underbrace{\langle \mathbf{p} | \mathbf{r} \rangle}_{\langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle^*} \underbrace{\langle \mathbf{r} | \hat{U}(\mathbf{r}) | \mathbf{r}' \rangle}_{U(\mathbf{r}')\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \langle \mathbf{r}' | \mathbf{p}' \rangle = \\ &= \int d\mathbf{r} \psi_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r}) \Big|_{(6.3.9)} = \boxed{\frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{r} e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\mathbf{r}} U(\mathbf{r}) = W(\mathbf{p} - \mathbf{p}')} \end{aligned} \quad (6.3.18)$$

— фурье-образ функции  $U(\mathbf{r})$

Объединяя (6.3.17) и (6.3.18), получим стационарное уравнение Шрёдингера в импульсном представлении (интегральное):

$$\boxed{\frac{p^2}{2m} \psi(\mathbf{p}) + \int W(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \psi(\mathbf{p}') d\mathbf{p}' = E\psi(\mathbf{p})} \quad (6.3.19)$$

Из упражнения 1 2-го задания:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{r}} &= i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \\ \hat{\mathbf{p}} &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \end{aligned}$$

## §4. Оператор эволюции. Представление Шрёдингера и Гайзенберга. Уравнение Гайзенберга для операторов физических величин

В квантовой механике роль уравнений движения играют уравнения эволюции во времени.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (6.4.1)$$

Введём новый оператор:

$$|\psi(t)\rangle = \widehat{U}(t) |\psi(0)\rangle \quad (6.4.2)$$

$$\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \langle \psi(0) | \widehat{U}^\dagger(t) \widehat{U}(t) | \psi(0) \rangle = \langle \psi(0) | \psi(0) \rangle$$

$$\widehat{U}^\dagger(t) \widehat{U}(t) = \mathbb{1} \quad (\text{см. §2 гл.6})$$

$\widehat{U}$  — оператор эволюции. Из вышеприведённой формулы видно, что он является унитарным.

Поставим (6.4.2) в (6.4.1):

$$\left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \widehat{U}(t) - \widehat{H} \widehat{U}(t) \right\} |\psi(0)\rangle = 0$$

где  $|\psi(0)\rangle$  — любой ненулевой вектор-состояние.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \widehat{U}(t) = \widehat{H} \widehat{U}(t) \quad (6.4.3)$$

Положим, что  $\frac{\partial \widehat{H}}{\partial t} = 0$ ,  $\widehat{U}(0) = \mathbb{1}$ . Тогда:

$$\boxed{\widehat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \widehat{H} t}} \quad (6.4.4)$$

— экспоненциальный оператор (решение (6.4.3))

**Определение 1.**

$$e^{-\frac{i}{\hbar} \widehat{H} t} \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left( -\frac{i}{\hbar} \widehat{H} t \right)^n \quad (6.4.5)$$

**Определение 2.** Описание временной эволюции квантовой системы, когда вектор-состояние (или волновая функция) зависит от времени, а операторы не зависят от времени, называется представлением Шрёдингера<sup>1</sup>

Обозначим вектор-состояние в представлении Гейзенберга через  $|\psi_H\rangle$ , а вектор-состояние в представлении Шрёдингера через  $|\psi_S\rangle$

$$|\psi_H\rangle \equiv |\psi_S(0)\rangle \Big|_{(6.4.2)} \equiv \widehat{U}^\dagger(t) |\psi_S(t)\rangle \Big|_{(6.4.4)} = e^{\frac{i}{\hbar} \widehat{H} S t} |\psi_S(t)\rangle \quad (6.4.6)$$

**Упражнение 1.** Доказать, что если  $\widehat{U}(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \widehat{H} t\right)$ , то  $\widehat{U}^\dagger(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \widehat{H} t\right)$ , используя явное определение (6.4.5).

Согласно (6.2.2) и (6.2.4):

$$\boxed{\widehat{F}_H(t) = \widehat{U}^\dagger(t) \widehat{F}_S \widehat{U}(t) = e^{(i/\hbar) \widehat{H} S t} \widehat{F}_S e^{-(i/\hbar) \widehat{H} S t}} \quad (6.4.7)$$

**Упражнение 2.** Доказать:

$$e^{\xi \widehat{A}} \widehat{B} e^{-\xi \widehat{A}} = \widehat{B} + \xi [\widehat{A}, \widehat{B}] + \frac{\xi^2}{2!} [\widehat{A}, [\widehat{A}, \widehat{B}]] + \dots$$

где  $\xi = \frac{i}{\hbar} t$ ,  $\widehat{A} = \widehat{H}_S$ ,  $\widehat{B} = \widehat{F}_S$

<sup>1</sup>В некоторой литературе вместо термина «представление» употребляется термин «картина»

$$\widehat{F}_H(t) = \widehat{F}_S + \frac{i}{\hbar} t [\widehat{H}_S, \widehat{F}_S] - \frac{t^2}{2\hbar^2} [\widehat{H}_S, [\widehat{H}_S, \widehat{F}_S]] + \dots \quad (6.4.8)$$

Если  $[\widehat{H}_S, \widehat{F}_S] = 0$ , т.е. (см §2 гл. 5)  $\widehat{F}_S$  является оператором интеграла движения, то

$$\widehat{F}_H(t) = \widehat{F}_S$$

т.е. гайзенберговские операторы интегралов движения не зависят от времени и совпадают с соответствующими в представлении Шрёдингера.

Гамильтониан в обоих представлениях совпадает и не зависит от времени:

$$\widehat{H}_H = \widehat{H}_S = \widehat{H}$$

Из (6.4.7):

$$\widehat{F}_H(t) = e^{(i/\hbar)\widehat{H}t} \widehat{F}_S e^{-(i/\hbar)\widehat{H}t} \quad (6.4.9)$$

Уравнение движения для гайзенберговского оператора  $\widehat{F}_H(t)$

$$\boxed{\frac{d}{dt} \widehat{F}_H(t) = \frac{i}{\hbar} [\widehat{H}, \widehat{F}_H]} \quad (6.4.10)$$

**Определение 3.** *Представление, в котором эволюция во времени переносится на операторы, а векторы-состояния от времени не зависят, называется представлением Гайзенберга*

Из (5.2.6):

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

Различные представления **унитарно-эквивалентны**, т.к. дают эквивалентные результаты, и переход между ними осуществляется с помощью унитарных преобразований. Таким образом, одна и та же задача может решаться проще в одном из представлений.

# Глава 7

## Операторные методы в квантовой механике. Метод вторичного квантования

### §1. Операторы уничтожения и рождения в теории линейного гармонического осциллятора

1

$$\underbrace{\left( \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2} \right)}_{\text{гамильтониан ГО}} |n\rangle = E_n |n\rangle \quad (7.1.1)$$

Введём обозначения:

$$\begin{aligned} \hat{\xi} &= \frac{\hat{x}}{a_0} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x} \\ \hat{p}_\xi &= \frac{\hat{p}_x}{p_0} = \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}} \hat{p}_x \end{aligned}$$

Здесь были введены **осцилляторные единицы** длины и импульса:

$$\begin{aligned} a_0 &= \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \\ p_0 &= \frac{\hbar}{a_0} = \sqrt{m\hbar\omega} \end{aligned}$$

Поделим (7.1.1) на осцилляторную единицу энергии  $\hbar\omega$ :

$$\frac{1}{2} \underbrace{\left( \hat{p}_\xi^2 + \hat{\xi}^2 \right)}_{\hat{h}} |n\rangle = \varepsilon_n |n\rangle, \quad \text{где } \varepsilon_n = \frac{E_n}{\hbar\omega}$$

$\hat{h}$  – безразмерный гамильтониан

$$\left[ \hat{\xi}, \hat{p}_\xi \right] = \frac{1}{\hbar} [\hat{x}, \hat{p}_x] = i \quad (7.1.2)$$

---

<sup>1</sup> «Линейность» осциллятора понимается в приближении одномерных малых колебаний вблизи положения равновесия

Введём эрмитово сопряжённые (**но не эрмитовые!**) операторы:

$$\begin{cases} \hat{a} \equiv \frac{\hat{\xi} + i\hat{p}_\xi}{\sqrt{2}} \\ \hat{a}^\dagger \equiv \frac{\hat{\xi} - i\hat{p}_\xi}{\sqrt{2}} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \hat{\xi} = \frac{\hat{a} + \hat{a}^\dagger}{\sqrt{2}} \\ \hat{p}_\xi = \frac{\hat{a} - \hat{a}^\dagger}{\sqrt{2}} \end{cases}$$

Перепишем гамильтониан через  $\hat{a}$  и  $\hat{a}^\dagger$ :

$$\hat{a}^\dagger \hat{a} = \frac{1}{2}(\hat{\xi} - i\hat{p}_\xi)(\hat{\xi} + i\hat{p}_\xi) = \frac{1}{2}(\hat{\xi}^2 + \hat{p}_\xi^2 + i[\hat{\xi}, \hat{p}_\xi]) \Big|_{(7.1.2)} = \frac{1}{2}(\hat{\xi}^2 + \hat{p}_\xi^2 - 1) \equiv \hat{h} - \frac{1}{2}$$

$$\hat{h} = \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2}$$

$$\hat{h} |n\rangle = \varepsilon_n |n\rangle \quad (7.1.3)$$

## §2. Энергетический спектр линейного гармонического осциллятора.

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \frac{1}{2} [\hat{\xi} + i\hat{p}_\xi, \hat{\xi} - i\hat{p}_\xi] = \frac{1}{2} (i[\hat{p}_\xi, \hat{\xi}] - i[\hat{\xi}, \hat{p}_\xi]) = -\frac{2i}{2} \underbrace{[\hat{\xi}, \hat{p}_\xi]}_{=i} = 1$$

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1 \quad (7.2.1)$$

Используя тождество  $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]$ , получим:

$$[\hat{a}^\dagger, \hat{h}] = [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger \hat{a}] = \underbrace{[\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger]}_{=0} \hat{a} + \hat{a}^\dagger \underbrace{[\hat{a}^\dagger, \hat{a}]}_{=-1} = -\hat{a}^\dagger \quad (7.2.2)$$

$$[\hat{a}, \hat{h}] = [\hat{a}, \hat{a}^\dagger \hat{a}] = \underbrace{[\hat{a}, \hat{a}^\dagger]}_{=1} \hat{a} + \hat{a}^\dagger \underbrace{[\hat{a}, \hat{a}]}_{=0} = \hat{a} \quad (7.2.3)$$

Домножим (7.1.3) на  $\hat{a}^\dagger$ :

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

Из (7.2.2):

$$\hat{h} (\hat{a}^\dagger |n\rangle) = (\varepsilon_n + 1) (\hat{a}^\dagger |n\rangle) \quad (7.2.4)$$

$(\hat{a}^\dagger |n\rangle)$  – собственный вектор гамильтониана  $\hat{h}$  с собственным значением  $(\varepsilon_n + 1)$

Из (7.1.3) и (7.2.4) введём обозначения:

$$\begin{cases} \varepsilon_{n+1} \equiv \varepsilon_n + 1 \\ \hat{a}^\dagger |n\rangle \equiv c_n |n+1\rangle \end{cases} \quad (7.2.5)$$

$\hat{a}^\dagger$  обычно называют **оператором рождения** (повышения) кванта колебаний (увеличивает их число на единицу)

$$|c_n|^2 = \langle \hat{a}^\dagger n | \hat{a}^\dagger n \rangle = \langle n | \hat{a} \hat{a}^\dagger | n \rangle \stackrel{(7.2.1)}{=} \langle n | \hat{a}^\dagger \hat{a} + 1 | n \rangle = \left\langle n \left| \hat{h} + \frac{1}{2} \right| n \right\rangle = \varepsilon_n + \frac{1}{2} \quad (7.2.6)$$

Домножим (7.1.3) на  $\hat{a}$ :

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

Из (7.2.3):

$$\hat{h}(\hat{a} | n \rangle) = (\varepsilon_n - 1)(\hat{a} | n \rangle) \quad (7.2.7)$$

Т.е.  $(\hat{a} | n \rangle)$  – собственный вектор гамильтониана  $\hat{h}$ , отвечающий собственному значению  $(\varepsilon_n - 1)$ .

Введём обозначения:

$$\begin{cases} \varepsilon_{n-1} \equiv \varepsilon_n - 1 \\ \hat{a} | n \rangle = c'_n | n - 1 \rangle \end{cases} \quad (7.2.8)$$

$\hat{a}$  – оператор уничтожения кванта колебаний.

$$|c'_n|^2 = \langle \hat{a} n | \hat{a} n \rangle = \langle n | \hat{a}^\dagger \hat{a} | n \rangle = \left\langle n \left| \hat{h} - \frac{1}{2} \right| n \right\rangle = \varepsilon_n - \frac{1}{2} \quad (7.2.9)$$

Из (7.2.9):  $|c'_n|^2 \geq 0 \Rightarrow \varepsilon \geq \frac{1}{2}$ , т.е.  $\varepsilon_0 = \frac{1}{2}$  (основное состояние).

Из (7.2.8) и (7.2.9):

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

где  $|0\rangle$  – собственный вектор, отвечающий собственному значению  $\varepsilon_0$ .

Из (7.2.5) и (7.2.8):

$$\varepsilon_n = n + \frac{1}{2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (7.2.10)$$

Спектр линейного гармонического осциллятора можно записать в виде:

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

т.е. такой спектр является эквидистантным

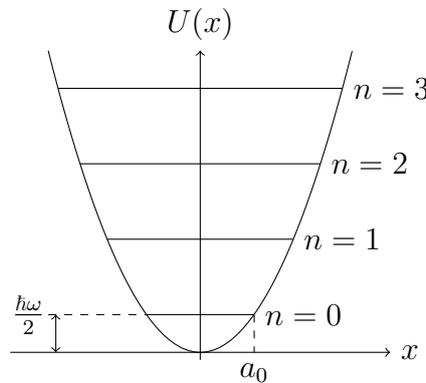


Рис. 7.1: Спектр гармонического осциллятора.

При  $n = 0$ :

$$\frac{\hbar\omega}{2} = \frac{m\omega^2}{2} a_0^2 \rightarrow a_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

– амплитуда нулевых колебаний.

Из (7.2.6), (7.2.9) и (7.2.10):

$$\boxed{\hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle} \quad (7.2.5')$$

$$\boxed{\hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle} \quad (7.2.8')$$

### §3. Построение собственных функций осциллятора в координатном представлении с помощью операторов рождения и уничтожения. Связь $n$ -го состояния осциллятора с основным.

Введём обозначение:  $|0\rangle \equiv |\psi_0\rangle$ :

$$\hat{a} |0\rangle = 0 \quad \text{или} \quad \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\xi} + i\hat{p}_\xi) |\psi_0\rangle = 0$$

В  $\xi$ -представлении:  $\hat{p}_\xi = -i\frac{d}{d\xi}$

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

Решение этого уравнения (волновая функция основного состояния гармонического осциллятора, нормированная на единицу):

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

Обозначим  $|n\rangle \equiv |\psi_n\rangle$

$$\begin{aligned} \hat{a}^\dagger |0\rangle &= \sqrt{1} |1\rangle \quad \rightarrow \quad |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{1}} \hat{a}^\dagger |0\rangle \\ \hat{a}^\dagger |1\rangle &= \sqrt{2} |2\rangle \quad \rightarrow \quad |2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{a}^\dagger |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2 \cdot 1}} (\hat{a}^\dagger)^2 |0\rangle \\ \hat{a}^\dagger |2\rangle &= \sqrt{3} |3\rangle \quad \rightarrow \quad |3\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \hat{a}^\dagger |2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3 \cdot 2 \cdot 1}} (\hat{a}^\dagger)^3 |0\rangle \\ &\dots \end{aligned}$$

$$\boxed{|\psi_n\rangle \equiv |n\rangle = \sqrt{\frac{1}{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle}$$

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

Или через полиномы Эрмита:

$$\boxed{\psi_n(\xi) = \sqrt{\frac{1}{2^n \cdot n! \cdot \sqrt{\pi}}} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}}$$

---

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

$$H_0(\xi) = 1, \quad H_1(\xi) = 2\xi, \quad H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2$$

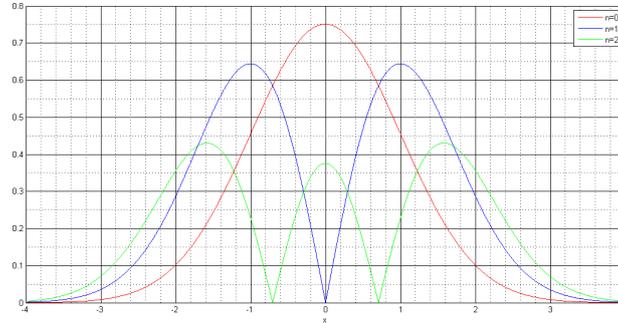


Рис. 7.2: Модуль волновых функций гармонического осциллятора

**Теорема 1** (Осцилляторная теорема квантовой механики). *Волновая функция  $\psi_n(x)$ , соответствующая собственным значениям  $E_n$ , имеет при конечных  $x$  ровно  $n$  нулей.*



# Глава 8

## УГЛОВОЙ МОМЕНТ

### §1. Повороты и оператор углового момента. Изотропность пространства и сохранение углового момента в квантовой механике.

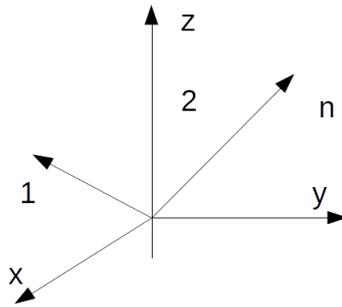


Рис. 8.1: Повороты в декартовой системе координат

(поворот можно осуществлять путём подбора единичного вектора  $\mathbf{n}$  и угла поворота  $\chi$ )

$$|\psi; 2\rangle = \widehat{R}(\chi) |\psi; 1\rangle$$

$\widehat{R}(\chi)$  – оператор поворота.

Примем, что  $\langle\psi; 2|\psi; 2\rangle = \langle\psi; 1|\psi; 1\rangle$ , тогда  $\widehat{R}^\dagger \widehat{R} = \mathbf{1}$ , т.е.  $\widehat{R}$  – унитарный оператор.

Введём  $\widehat{R}$  по аналогии с оператором эволюции (см. (6.4.4)):

$$\boxed{\widehat{R}(\chi) \equiv e^{-(i/\hbar)\widehat{\mathbf{J}}\chi}} \quad (8.1.1)$$

где  $\widehat{\mathbf{J}}$  – некоторый векторный эрмитовый оператор, не зависящий от времени.

Из изотропности пространства следует, что оба состояния удовлетворяют уравнению Шрёдингера:

$$i\hbar \frac{\partial |\psi; 2\rangle}{\partial t} = i\hbar \widehat{R}(\chi) \frac{\partial |\psi; 1\rangle}{\partial t} = \widehat{R}(\chi) \widehat{H} |\psi; 1\rangle$$

$$i\hbar \frac{\partial |\psi; 2\rangle}{\partial t} = \widehat{H} |\psi; 2\rangle = \widehat{H} \widehat{R}(\chi) |\psi; 1\rangle$$

Сравнивая правые части, легко видеть, что  $[\hat{H}, \hat{R}(\boldsymbol{\chi})] = 0$

Распишем экспоненту в (8.1.1) в виде ряда:

$$\hat{R}(\boldsymbol{\chi}) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left( -\frac{i}{\hbar} \hat{\mathbf{J}} \boldsymbol{\chi} \right)^k$$

Подставляя её в условие коммутации, получим:

$$\boxed{[\hat{H}, \hat{\mathbf{J}}] = 0} \quad (8.1.2)$$

**Упражнение 1.** доказать (8.1.2)

$\mathbf{J}$  – интеграл движения (см. §9 т.1 Л-Л «Сохранение углового момента»)

$\hat{\mathbf{J}}$  – оператор углового момента ( $\hat{\mathbf{J}} = \{\hat{L}, \hat{S}, \hat{L} + \hat{S}\}$ , где  $\hat{L}$  – оператор орбитального момента,  $\hat{S}$  – оператор спинового момента,  $(\hat{L} + \hat{S})$  – полный момент)

## §2. Коммутационные соотношения для оператора углового момента. Система собственных векторов операторов $\hat{\mathbf{j}}^2$ и $\hat{j}_z$

Обозначим:  $\boxed{\hat{\mathbf{j}} = \frac{\hat{\mathbf{J}}}{\hbar}}$

**Определение 1.** Векторный оператор  $\hat{\mathbf{j}} = \{\hat{j}_x, \hat{j}_y, \hat{j}_z\}$  называют оператором углового момента, если все его компоненты являются наблюдаемыми (эрмитовыми) и удовлетворяют коммутационным соотношениям:

$$\boxed{[\hat{j}_i, \hat{j}_k] = ie_{ikl} \hat{j}_l} \quad (8.2.1)$$

(где  $e_{ikl}$  – антисимметричный тензор)

$$\hat{\mathbf{j}}^2 = \hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2 + \hat{j}_z^2$$

Совместная измеримость  $\hat{\mathbf{j}}^2$  возможна только с одной компонентой:

$$\boxed{[\hat{\mathbf{j}}^2, \hat{j}_i] = 0} \quad (8.2.2)$$

**Упражнение 1.** Доказать (8.2.2) с помощью (8.2.1)

$|jm\rangle$  - полная общая система собственных векторов:

$$\begin{cases} \hat{\mathbf{j}}^2 |jm\rangle = \lambda(j) |jm\rangle \\ \hat{j}_z |jm\rangle = m |jm\rangle \end{cases} \quad (8.2.3)$$

Условие ортонормировки:

$$\langle jm | j'm' \rangle = \delta_{jj'} \delta_{mm'}$$

$$\langle \hat{\mathbf{j}}^2 \rangle = \langle \hat{j}_x^2 \rangle + \langle \hat{j}_y^2 \rangle + \langle \hat{j}_z^2 \rangle \geq \langle \hat{j}_z^2 \rangle$$

То есть:

$$\lambda(j) \geq m^2 \rightarrow \begin{cases} m_{min} \leq m \leq m_{max} \\ m_{max} = -m_{min} \end{cases}$$

$m_{max} \equiv j$ , тогда  $m_{min} = -j$

Обозначим:

$$\begin{cases} \hat{j}_+ = \hat{j}_x + i\hat{j}_y \\ \hat{j}_- = \hat{j}_x - i\hat{j}_y = (\hat{j}_+)^{\dagger} \end{cases} \quad (8.2.4)$$

$$[\hat{j}_z, \hat{j}_{\pm}] = \pm \hat{j}_{\pm} \quad (8.2.5)$$

**Упражнение 2.** Доказать (8.2.5) с использованием (8.2.4) и (8.2.1)

Из (8.2.5):

$$\hat{j}_z (\hat{j}_{\pm} |jm\rangle) = (\hat{j}_{\pm} \hat{j}_z \pm \hat{j}_{\pm}) |jm\rangle = (m \pm 1) (\hat{j}_{\pm} |jm\rangle)$$

Будем называть  $\hat{j}_+$  оператором повышения, а  $\hat{j}_-$  оператором понижения

$$\begin{cases} \hat{j}_+ |j, m-1\rangle = \alpha_m |j, m\rangle \\ \hat{j}_- |j, m\rangle = \beta_m |j, m-1\rangle \end{cases} \quad (8.2.6)$$

Заметим, что:

$$\begin{aligned} \hat{j}_+ |jj\rangle &= 0, \quad \text{или} \quad \alpha_{j+1} = 0 \\ \hat{j}_- |j, -j\rangle &= 0, \quad \text{или} \quad \beta_{-j} = 0 \end{aligned}$$

Цепочка понижения:

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{j}_- |jj\rangle \sim |j, j-1\rangle \\ (\hat{j}_-)^2 |jj\rangle \sim |j, j-2\rangle \\ \dots \\ (\hat{j}_-)^N |jj\rangle \sim |j, j-N\rangle, \quad N \in \mathbb{N} \cup \{0\} \end{array} \right.$$

$j - N = -j$ , т.е.  $j = \frac{N}{2}$ , следовательно  $j$  принимает только целые и полуцелые значения:

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$$

Если  $j$  фиксировано:

$$\underbrace{m = -j, -j+1, \dots, j}_{(2j+1) \text{ значения}}$$

$j$  – квантовое число момента количества движения частицы

$m$  – магнитное квантовое число

Значение  $\lambda(j)$  пока неизвестно. При его определении будем считать, что  $m_{max} = -m_{min} = j$ .

$$\begin{aligned} \hat{j}_- \hat{j}_+ |jj\rangle &= 0 \\ \hat{j}_- \hat{j}_+ &= \hat{\mathbf{j}}^2 - \hat{j}_z^2 - \hat{j}_z \end{aligned}$$

**Упражнение 3.** Доказать предыдущее равенство используя (8.2.4) и (8.2.1)

$$(\hat{\mathbf{j}}^2 - \hat{j}_z^2 - \hat{j}_z) |jj\rangle = 0 \rightarrow \lambda(j) = j(j+1)$$

$$\boxed{\hat{\mathbf{j}}^2 |jm\rangle = j(j+1) |jm\rangle} \quad (8.2.7)$$

Из (8.2.6):

$$\alpha_m = \langle jm | \hat{j}_+ |j, m-1\rangle = \langle \hat{j}_- jm | j, m-1\rangle = \langle j, m-1 | \hat{j}_- |jm\rangle^* \Big|_{(8.2.6)} = \beta_m^*$$

Теперь необходимо найти  $\beta_{-j+1}, \beta_{-j+2}, \dots, \beta_j$

$$\hat{j}_+ \hat{j}_- |jm\rangle \Big|_{(8.2.6)} = \beta_m \hat{j}_+ |j, m-1\rangle = |\beta_m|^2 |jm\rangle$$

С другой стороны:

$$\hat{j}_+ \hat{j}_- = \hat{\mathbf{j}}^2 - \hat{j}_z^2 + \hat{j}_z$$

**Упражнение 4.** Доказать предыдущее равенство используя (8.2.4) и (8.2.1)

$$\hat{j}_+ \hat{j}_- |jm\rangle = (\hat{\mathbf{j}}^2 - \hat{j}_z^2 + \hat{j}_z) |jm\rangle \Big|_{(8.2.7), (8.2.3)} = (j(j+1) - m^2 + m) |jm\rangle$$

Фазу  $|jm\rangle$  можно подобрать так, чтобы  $\alpha_m = \beta_m = |\beta_m|$

$$\beta_m = \sqrt{j^2 + j - m^2 + m} = \sqrt{(j+m)(j-m+1)} = \alpha_m$$

$$\hat{j}_- |jm\rangle = \sqrt{(j+m)(j-m+1)} |j, m-1\rangle$$

$$\hat{j}_+ |jm\rangle = \beta_{m+1} |j, m+1\rangle = \sqrt{(j-m)(j+m+1)} |j, m+1\rangle$$

$$\boxed{(\hat{j}_x \pm i\hat{j}_y) |jm\rangle = \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} |j, m \pm 1\rangle} \quad (8.2.8)$$

### §3. Спин частицы. Матрицы Паули.

Спиновый оператор:

$$\hat{\mathbf{s}} = \{\hat{s}_x, \hat{s}_y, \hat{s}_z\}$$

будем рассматривать частицу с  $s = 1/2$ :

$$\begin{cases} \hat{\mathbf{s}}^2 |sm_s\rangle = s(s+1) |sm_s\rangle \\ \hat{s}_z |sm_s\rangle = m_s |sm_s\rangle \end{cases} \quad (8.3.1)$$

$2s + 1 = 2$ :  $m_s = \pm 1/2$

$$\begin{aligned} \chi_{\frac{1}{2}m_s} &\equiv \left| \frac{1}{2}m_s \right\rangle \\ \chi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}} &\equiv \left| \frac{1}{2}\frac{1}{2} \right\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \equiv |\alpha\rangle \equiv |+\rangle \\ \chi_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} &\equiv \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv |\beta\rangle \equiv |-\rangle \end{aligned} \quad (8.3.2)$$

$|\alpha\rangle$  и  $|\beta\rangle$  – базисные векторы спиновых состояний.

$$\boxed{|\chi\rangle = a_+ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + a_- \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_+ \\ a_- \end{pmatrix}} \quad (8.3.3)$$

где  $|a_-|^2$  и  $|a_+|^2$  – вероятности обнаружить проекцию в  $s_z = -1/2$  и  $1/2$  соответственно.

$$\langle \chi, \chi \rangle = 1 \rightarrow |a_+|^2 + |a_-|^2 = 1$$

$$\hat{\mathbf{s}}^2 = \frac{3}{4} \begin{pmatrix} \langle + | & \langle - | \\ | + \rangle & | - \rangle \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \hat{s}_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \langle + | & \langle - | \\ | + \rangle & | - \rangle \\ 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (8.3.4)$$

Операторы повышения и понижения:

$$\hat{s}_\pm = \hat{s}_x \pm i\hat{s}_y$$

Из (8.2.8):

$$\begin{aligned} \hat{s}_+ |+\rangle &= 0 & \hat{s}_+ |-\rangle &= |+\rangle \\ \hat{s}_- |-\rangle &= 0 & \hat{s}_- |+\rangle &= |-\rangle \end{aligned}$$

Можно записать повышающий и понижающий операторы в виде матриц:

$$\hat{s}_+ = \begin{pmatrix} \langle + | & \langle - | \\ | + \rangle & | - \rangle \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{s}_- = \begin{pmatrix} \langle + | & \langle - | \\ | + \rangle & | - \rangle \\ 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (8.3.5)$$

Из (8.3.5):

$$\hat{s}_x = \frac{\hat{s}_+ + \hat{s}_-}{2} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (8.3.6)$$

$$\hat{s}_y = \frac{\hat{s}_+ - \hat{s}_-}{2i} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

Из (8.3.4) и (8.3.6)  $\hat{\mathbf{s}} = \{\hat{s}_x, \hat{s}_y, \hat{s}_z\}$  можно выразить через матрицы Паули:

$$\hat{\sigma} = \{\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z\}$$

$$\hat{\mathbf{s}} = \frac{1}{2} \hat{\sigma}$$

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

#### §4. Оператор орбитального момента частицы в координатном представлении (декартовы и сферические координаты).

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$$

По принципу соответствия между классической механикой и квантовой:

$$\mathbf{L} \rightarrow \boxed{\hat{\mathbf{L}} = \hbar \hat{\mathbf{l}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}} \quad (8.4.1)$$

$$\hat{\mathbf{L}} = \hbar \hat{\mathbf{l}} = -i\hbar(\mathbf{r} \times \nabla) \quad (8.4.2)$$

$$\hat{\mathbf{l}} = \frac{\hat{\mathbf{L}}}{\hbar} = -i(\mathbf{r} \times \nabla) = -i \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ x & y & z \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \end{vmatrix}$$

- безразмерный оператор орбитального момента.

$$\hat{\mathbf{l}} = \{\mathbf{l}_x, \mathbf{l}_y, \mathbf{l}_z\} \rightarrow \mathbf{l}_z = -i \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$$

Иначе можно записать:

$$\mathbf{l}_\alpha = -ie_{\alpha\beta\gamma} x_\beta \frac{\partial}{\partial x_\gamma}, \quad \alpha, \beta, \gamma = 1, 2, 3 \quad (8.4.3)$$

Из (8.4.3) получим:

$$[\hat{l}_\alpha, \hat{l}_\beta] = ie_{\alpha\beta\gamma} \hat{l}_\gamma \quad (8.4.4)$$

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

Подставим в (8.4.4):

$$\boxed{[\hat{\mathbf{l}}^2, \hat{l}_\alpha] = 0}. \quad (8.4.5)$$

Это аналог (8.2.2) в теории углового момента.

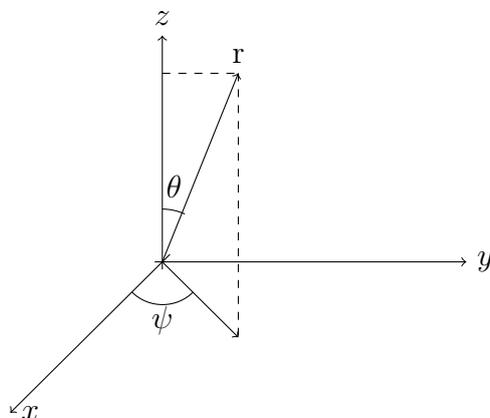


Рис. 8.2: Сферическая система координат

$$x = r \sin \theta \cos \varphi$$

$$y = r \sin \theta \sin \varphi$$

$$z = r \cos \theta$$

$$0 \leq r \leq \infty, \quad 0 \leq \theta \leq \pi, \quad 0 \leq \varphi \leq 2\pi$$

Запишем частную производную по углу  $\varphi$ :

$$\frac{\partial}{\partial \varphi} = \underbrace{\frac{\partial x}{\partial \varphi}}_{-r \sin \theta \sin \varphi} \cdot \frac{\partial}{\partial x} + \underbrace{\frac{\partial y}{\partial \varphi}}_{r \sin \theta \cos \varphi} \cdot \frac{\partial}{\partial y} + \underbrace{\frac{\partial z}{\partial \varphi}}_{=0} \cdot \frac{\partial}{\partial z}$$

Получим:

$$\frac{\partial}{\partial \varphi} = x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x}$$

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

Аналогично можно получить выражения для других компонент орбитального момента:

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

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

$$\hat{\mathbf{I}}^2 = - \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] = -\Delta_{\theta, \varphi}$$

Введем лапласиан в сферических координатах:

$$\Delta_{\mathbf{r}} = \underbrace{\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right)}_{\text{радиальная часть}} + \underbrace{\frac{1}{r^2} \Delta_{\theta, \varphi}}_{\text{угловая часть}}$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\mathbf{I}^2}{r^2} \right) + U(\mathbf{r}) \quad (8.4.6)$$

## §5. Сферические гармоники

Запишем уравнение на собственные функции оператора  $\hat{l}_z$ :

$$-i \frac{\partial}{\partial \varphi} \underbrace{\langle \varphi | m \rangle}_{=\Phi_m(\varphi)} = m \langle \varphi | m \rangle \quad (8.5.1)$$

Здесь

$$\Phi_m(\varphi) = C e^{im\varphi} \quad (8.5.2)$$

Найдем возможные значения  $m$ :

$$\begin{aligned} \varphi \rightarrow \varphi + 2\pi : \Phi_m(\varphi) &= \Phi_m(\varphi + 2\pi) \Rightarrow \\ e^{im2\pi} &= 1 \Rightarrow \boxed{m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots} \end{aligned}$$

Константа  $C$  определяется из условия нормировки:

$$C = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \Rightarrow \int_0^{2\pi} d\varphi \Phi_m^*(\varphi) \Phi_{m'}(\varphi) = \delta_{mm'}$$

Запишем задачу на собственные значения  $\hat{l}_z$  и  $\hat{\mathbf{I}}^2$ :

$$\begin{cases} \hat{\mathbf{I}}^2 |lm\rangle = l(l+1) |lm\rangle \\ \hat{l}_z |lm\rangle = m |lm\rangle \end{cases} \quad (8.5.3)$$

$$\begin{cases} -\Delta_{\theta, \varphi} Y_{lm}(\theta, \varphi) = l(l+1) Y_{lm}(\theta, \varphi) \\ -i \frac{\partial}{\partial \varphi} Y_{lm}(\theta, \varphi) = m Y_{lm}(\theta, \varphi) \end{cases} \quad (8.5.3')$$

$Y_{lm}(\theta, \varphi)$  - сферические функции (сферические гармоники), решения задачи на собственные функции для  $\hat{l}_z$  и  $\hat{I}^2$  в сферических координатах.

Проекция  $|lm\rangle$  на  $(\theta, \varphi)$  :  $Y_{lm}(\theta, \varphi) = \langle \theta\varphi | lm \rangle$ .

Найдем явный вид сферических функций. Для этого воспользуемся методом разделения переменных:

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \theta_{lm}(\theta)\Phi_m(\varphi)$$

Подставляя в (8.5.3') можно получить уравнение на  $\theta_{lm}(\theta)$ . В итоге получим:

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = C_{lm} e^{im\varphi} P_l^m(\cos \theta)$$

$P_l^m(\cos \theta)$  - присоединенные полиномы Лежандра.

$$l = |m|, |m| + 1, \dots, \quad (l \geq |m|)$$

Для  $l = 0, 1, 2, \dots$   $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$ .

$$l = \begin{matrix} 0 & 1 & 2 & 3 & \dots \\ s & p & d & f & \dots \end{matrix} \text{ - состояния}$$

$$\langle Y_{lm} | Y_{l'm'} \rangle = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta Y_{lm}^*(\theta, \varphi) Y_{l'm'}(\theta, \varphi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

$$(r = 1, \theta \in [0, \pi], \varphi \in [0, 2\pi]) - \tag{8.5.4}$$

полный ортонормированный базис.

# Глава 9

## Движение в центрально-симметричном поле

### §1. Центрально-симметричное поле. Гамильтониан частицы в сферических координатах. Разделение переменных в центрально-симметричном поле.

**Определение 1.** Если поле центрально-симметрично, то  $U(\mathbf{r}) \equiv U(r)$

Произведём переход к координатам  $(r, \theta, \varphi)$ .

Из (8.4.6):

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(r) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hat{\mathbf{I}}^2}{r^2} \right] + U(r) \quad (9.1.1)$$

Интегралы движения (из упр. 5 задания 2 и упр. 6 задания 1):

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

Из (8.4.5):

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

$$\langle \mathbf{r} | nlm \rangle \equiv \psi_{nlm}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r) \cdot Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (9.1.2)$$

где  $n$  – главное,  $l$  – орбитальное, а  $m$  – магнитное квантовые числа.

### §2. Уравнение для радиальной функции

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hat{\mathbf{I}}^2}{r^2} \right] \psi(r, \theta, \varphi) + U(r)\psi(r, \theta, \varphi) = E\psi(r, \theta, \varphi)$$

Будем искать решение в виде:

$$\begin{cases} \psi(r, \theta, \varphi)|_{(9.1.2)} = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi) \\ \hat{\mathbf{I}}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = l(l+1)Y_{lm}(\theta, \varphi) \end{cases}$$

---

Подставляем их в уравнение:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} R_{nl}(r) \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} R_{nl}(r) \right] + U(r) R_{nl}(r) = E R_{nl}(r)$$

Уравнение для радиальной волновой функции:

$$\boxed{\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{d}{dr} R_{nl}(r) \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} R_{nl}(r) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(r)) R_{nl}(r) = 0} \quad (9.2.1)$$

$$\int |\psi_{nlm}(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = \iiint |R_{nl}(r)|^2 \cdot |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 r^2 dr d\Omega = \int_0^\infty |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr \underbrace{\oint |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 d\Omega}_{=1 \text{ из (8.5.4)}} = 1$$

Отсюда получаем условие нормировки для радиальной части волновой функции:

$$\boxed{\int_0^\infty |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr = 1} \quad (9.2.2)$$

# Глава 10

## Атом водорода

### §1. Атом водорода

Движение электрона ( $e, m$ ) в поле  $-Ze$ :

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

( $Z > 1$ : водородоподобный атом (ион),  $Z = 1$ : атом водорода)

Из упр. 11 2-го задания:

$$\mu = \frac{mM}{m+M} \Big|_{M \rightarrow \infty} = m$$

где  $M$  – масса ядра.

Из (9.2.1):

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right] R(r) + \left\{ -\frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2mZe^2}{\hbar^2 r} + \frac{2mE}{\hbar^2} \right\} R(r) = 0 \quad (10.1.1)$$

Для упрощения такого рода выражений существует *атомная система единиц* (а.е.), в которой

$$\hbar = m = e = 1$$

В таких единицах боровский радиус (атомная единица длины):

$$a = \frac{\hbar^2}{me^2} = 1 \text{ а.е.} = 0.529 \cdot 10^{-8} \text{ см} = 0.529 \text{ \AA}$$

Атомная единица энергии:

$$E_a = \frac{e^2}{a} = \frac{me^4}{\hbar^2} = 1 \text{ а.е.} = 27.21 \text{ эВ}$$

Безразмерные переменные:

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

Из (10.1.1) в атомных единицах:

$$\boxed{\left\{ \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right\} R(\rho) + \left\{ -\frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{2Z}{\rho} - \varkappa^2 \right\} R(\rho) = 0} \quad (10.1.2)$$

где  $-\varkappa^2 = 2\frac{E}{E_a} = 2\varepsilon < 0$

## §2. Энергетический спектр и радиальные волновые функции стационарных состояний атома водорода. Главное и радиальное квантовые числа

В силу условия нормировки (9.2.2) не должно быть неограниченных решений (10.1.2), т.е. на краях области определения  $\rho \rightarrow 0$  и  $\rho \rightarrow \infty$  необходимо наложить граничные условия:

1.  $R(\rho)|_{\rho \rightarrow 0} \rightarrow \text{const}$
2.  $R(\rho)|_{\rho \rightarrow \infty} \rightarrow 0$

В пределе  $\rho \rightarrow 0$  уравнение (10.1.2) принимает форму:

$$\left( \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) R_0(\rho) = 0$$

Ищем решение этого уравнения в виде степенной функции  $R_0(\rho) \sim \rho^q$ , тогда для показателя  $q$  получается:

$$\underbrace{q(q-1) + 2q}_{q(q+1)} - l(l+1) = 0$$

т.е. возможны два решения:  $q_1 = l$ ,  $q_2 = -(l+1)$ . Очевидно, второе решение не удовлетворяет поставленному граничному условию: оно обращается в бесконечность при  $\rho \rightarrow 0$  (напомним, что  $l \geq 0$ ). Поэтому:

$$\boxed{R(\rho)|_{\rho \rightarrow 0} \sim \rho^l}$$

Найдём теперь асимптотику решения (10.1.2) при  $\rho \rightarrow \infty$ :

$$\frac{d^2}{d\rho^2} R_\infty(\rho) - \kappa^2 R_\infty(\rho) = 0$$

Отсюда  $\boxed{R(\rho)|_{\rho \rightarrow \infty} \sim e^{-\kappa\rho}}$ , т.к. другое решение ( $\sim e^{\kappa\rho}$ ) при  $\rho \rightarrow \infty$  неограниченно возрастает. Очевидно, что решение уравнения (10.1.2) во всей области определения  $\rho$  следует искать в виде:

$$\boxed{R(\rho) = e^{-\kappa\rho} \rho^l v(\rho)} \quad (10.2.1)$$

где для искомой функции  $v(\rho)$  есть ограничения на её экспоненциальный рост на бесконечности. Имеем:

$$\begin{aligned} R'(\rho) &= e^{-\kappa\rho} \rho^l \left[ v' + \left( \frac{l}{\rho} - \kappa \right) v \right] \\ R''(\rho) &= e^{-\kappa\rho} \rho^l \left[ v'' + \left( \frac{l}{\rho} - \kappa \right) v' - \frac{l}{\rho^2} v + \left( \frac{l}{\rho} - \kappa \right) \left[ v' + \left( \frac{l}{\rho} - \kappa \right) v \right] \right] = \\ &= e^{-\kappa\rho} \rho^l \left[ v'' + 2 \left( \frac{l}{\rho} - \kappa \right) v' + \left( \frac{l(l-1)}{\rho^2} - \frac{2\kappa l}{\rho} + \kappa^2 \right) v \right] \end{aligned}$$

Из (10.1.2) получаем:

$$v'' + 2 \left( \frac{l}{\rho} - \kappa \right) v' + \left( \frac{l(l-1)}{\rho^2} - \frac{2\kappa l}{\rho} + \kappa^2 \right) v + \frac{2}{\rho} v' + \frac{2}{\rho} \left( \frac{l}{\rho} - \kappa \right) v +$$

$$+ \left( -\frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{2Z}{\rho} - \varkappa^2 \right) v = 0$$

В итоге:

$$\boxed{\rho v'' + v' (2(l+1) - 2\varkappa\rho) + v (2Z - 2\varkappa(l+1)) = 0} \quad (10.2.2)$$

Решение (10.2.2) будем искать в виде степенного ряда:

$$v(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k \quad (10.2.3)$$

Отсюда:

$$v'(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k k \rho^{k-1} = \sum_{k=0}^{\infty} a_{k+1} (k+1) \rho^k$$

$$v''(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k k(k-1) \rho^{k-2} = \sum_{k=0}^{\infty} a_{k+1} (k+1) k \rho^{k-1}$$

Подставляя в (10.2.2), получаем:

$$\sum_{k=0}^{\infty} \rho^k [a_{k+1} (k(k+1) + 2(l+1)(k+1)) + a_k (2Z - 2\varkappa(l+1) - 2\varkappa k)] = 0$$

откуда следует рекуррентное соотношение для коэффициентов ряда:

$$\boxed{a_{k+1} = a_k \frac{2(\varkappa(l+1+k) - Z)}{(k+1)(k+2(l+1))}} \quad (10.2.4)$$

Из соотношения (10.2.4) видно, что при  $k \gg 1$  все слагаемые будут одного знака. Значит, при  $\rho \rightarrow \infty$  основной вклад в  $v(\rho)$  будут давать слагаемые с большими  $k$ . При  $k \gg 1$ :

$$\left| \frac{a_{k+1}}{a_k} \right|_{k \gg 1} \sim \frac{2\varkappa k}{k^2} = \frac{2\varkappa}{k}$$

однако:

$$e^{2\varkappa\rho} = 1 + \frac{2\varkappa\rho}{1!} + \dots + \frac{(2\varkappa\rho)^k}{k!} + \dots$$

и для ряда растущей экспоненты:

$$\left| \frac{a_{k+1}}{a_k} \right|_{k \gg 1} \sim \frac{(2\varkappa)^{k+1} k!}{(k+1)! (2\varkappa)^k} \sim \frac{2\varkappa}{k}$$

Таким образом, полученный ряд (10.2.3) для  $v(\rho)$  асимптотически ведёт себя как

$$v(\rho)|_{\rho \rightarrow \infty} \sim e^{2\varkappa\rho}$$

При такой асимптотике, согласно (10.2.1), радиальная волновая функция расходится на бесконечности, т.е.:

$$R(\rho)|_{\rho \rightarrow \infty} \sim e^{\varkappa\rho}$$

Поэтому суммирование в (10.2.3) может происходить только в конечных пределах, иными словами, ряд (10.2.3) должен «обрываться» и переходить в конечный полином некоторой степени  $k = n_r$ , т.е.  $a_{n_r} \neq 0$ , но при любом  $k > n_r$   $a_k \equiv 0$ .

Из (10.2.4) следует условие «обрыва» ряда (10.2.3):

$$\boxed{\frac{Z}{\varkappa} - l - 1 = n_r = 0, 1, 2, \dots} \quad (10.2.5)$$

Число  $n_r \geq 0$  определяет степень полинома (10.2.3) и соответственно число его нулей (или число узлов радиальной волновой функции  $R(\rho)$  в (10.2.1), не считая точки  $\rho = 0$ ). Число  $n_r$  называют **радиальным квантовым числом**. Здесь мы имеем частный случай *осцилляционной теоремы* одномерного движения (см. конец §3 главы VII).

Следуя (10.2.5), положим по определению:

$$\boxed{n = n_r + l + 1 = 1, 2, \dots} \quad (10.2.6)$$

натуральное число  $n \in \mathbb{N}$ , которое называют **главным квантовым числом**. При этом  $\boxed{n_r = n - l - 1 \geq 0}$  и получается ограничение на возможные значения орбитального момента:  $\boxed{0 \leq l \leq n - 1}$ . Тогда из (10.1.2), (10.2.5) и (10.2.6) получается **энергетический спектр водородоподобного атома**:

$$\varepsilon_n = \frac{E_n}{E_a} = -\frac{\varkappa^2}{2} = \boxed{-\frac{Z^2}{2n^2}} = \varepsilon_n \quad (10.2.7)$$

$$\boxed{E_n = -\frac{Z^2 m e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}}$$

Соответственно (10.2.1) радиальная волновая функция имеет вид

$$R_{nl}(\rho) = R_{n_r l}(\rho) = C_{nl} e^{-\varkappa \rho} \rho^l v_{n_r l}(\rho)$$

где определяемые рекуррентными соотношениями (10.2.4) полиномы называют **обобщёнными (присоединёнными) полиномами Лагерра**

$$\boxed{v_{n_r l}(\rho) = L_{n_r}^{2l+1}(2\varkappa\rho)}, \text{ где}$$

$$L_s^k(x) = e^x x^{-s} \frac{d^k}{dx^k} (e^{-x} x^{s+k})$$

Коэффициент  $C_{nl}$  определяется из условия нормировки (9.2.2) для радиальной волновой функции:

$$\int_0^\infty |R_{nl}(\rho)|^2 \rho^2 d\rho = 1$$

Состояние атома водорода определяется волновой функцией

$$\Psi_{nlm}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

которая, например, для основного 1s-состояния имеет вид

$$\boxed{\Psi_{100}(\mathbf{r})} = \underbrace{R_{10}(r)}_{\frac{2}{\sqrt{a^3}} e^{-r/a}} \underbrace{Y_{00}(\theta, \varphi)}_{\frac{1}{\sqrt{4\pi}}} = \boxed{\frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}}$$

### §3. Кратность вырождения уровней. Кулоновское (случайное) вырождение

Из (10.2.7) видно, что спектр водородоподобного атома является **вырожденным**. Энергия определяется только **главным квантовым числом**, а кроме него есть ещё 2 квантовых числа:

- $l = 0, 1, \dots, n - 1$  – орбитальное
- $m = 0, \pm 1, \dots, \pm l$  – магнитное

**Уровни энергии не зависят от этих квантовых чисел!** Кратность вырождения  $n$ -го уровня равна

$$g(n) = \sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^l 1 = \sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n \frac{1 + (2n - 1)}{2} = n^2$$

(из суммы арифметической прогрессии).

Дальнейший анализ удобно провести, если воспользоваться утверждением следующей теоремы.

**Теорема 1.** Если  $[\hat{A}, \hat{H}] = 0$ ,  $[\hat{B}, \hat{H}] = 0$ , но  $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$ , то спектр оператора  $\hat{H}$  вырожден.

**Упражнение 1.** Доказать теорему 1

В рамках этой теоремы **вырождение по магнитному квантовому числу  $m$**  характерно для **любого** центрально-симметричного поля, т.к.

$$[\hat{H}, \hat{l}_\alpha] = 0 \rightarrow \begin{cases} [\hat{H}, \hat{l}_z] = 0 \\ [\hat{H}, \hat{l}_\pm] = 0 \end{cases} \quad \text{но: } [\hat{l}_z, \hat{l}_\pm] \neq 0$$

Поэтому все  $2l + 1$  состояний, где  $m = -l, (-l + 1), (-l + 2), \dots, l$ , отвечают одному уровню энергии.

Однако, помимо вырождения по магнитному квантовому числу  $m$ , **обязательному для любого сферически симметричного поля, в кулоновом поле** для всех уровней имеет место **дополнительное вырождение по орбитальному квантовому числу  $l$** , которое называют ещё **случайным**. Природа кулоновского вырождения связана с высокой симметрией кулоновского поля и наличием ещё одного интеграла движения – вектора Рунге–Ленца:

$$\hat{\mathbf{A}} = \frac{\hat{\mathbf{r}}}{r} + \frac{1}{2Z} (\hat{\mathbf{l}} \times \hat{\mathbf{p}} - \hat{\mathbf{p}} \times \hat{\mathbf{l}}) \quad (\text{в а.е.})$$

коммутирующего с  $\hat{H} = \hat{\mathbf{p}}^2/2 - Z/r$  (в а.е.), но не коммутирующего с  $\hat{\mathbf{l}}^2$ . Тогда, в соответствии с теоремой, если  $[\hat{H}, \hat{A}_\alpha] = 0$  (доказательство приведено в Приложении),  $[\hat{H}, \hat{\mathbf{l}}^2] = 0$ , но  $[\hat{\mathbf{l}}^2, \hat{A}_\alpha] \neq 0$ , то это автоматически ведёт к вырождению собственных значений  $\hat{H}$  по  $l$ .

**Упражнение 2.** Доказать, что  $[\hat{\mathbf{l}}^2, \hat{A}_\alpha] \neq 0$



# Глава 11

## Квазиклассическое приближение

### §1. Критерий применимости квазиклассического приближения

$\hbar \rightarrow 0$  («жаргон», т.к. физическую константу нельзя устремить к нулю). Принцип соответствия (§§2,3 гл. 5).

#### 1.1 Переход к уравнению Гамильтона-Якоби

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r}) \right\} \Psi(\mathbf{r}, t)$$
$$\Psi = \mathcal{A} e^{\frac{i}{\hbar} S(\mathbf{r}, t)}$$

где  $S \in \mathbb{C}$  имеет размерность действия.

$$\nabla \Psi(\mathbf{r}, t) = \left( \frac{i}{\hbar} \nabla S \right) \Psi$$

Подставим  $\Psi$  и  $\nabla \Psi$  в уравнение Шрёдингера:

$$i\hbar \left( \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial t} \right) \Psi = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \left( \frac{i}{\hbar} \nabla S \right)^2 + \frac{i}{\hbar} \nabla^2 S \right] + U(\mathbf{r}) \right\} \Psi$$

$$\boxed{-\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{(\nabla S)^2}{2m} + U(\mathbf{r}) - \frac{i\hbar}{2m} (\nabla^2 S)}$$
 (11.1.1)

Последний член в этом уравнении называется квантовой поправкой.

Мы получили уравнение Гамильтона-Якоби (см. т.1 Л.-Л., §47):

$$\boxed{\frac{\partial S}{\partial t} + H(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = 0}$$
$$H(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U(\mathbf{r})$$
$$\mathbf{p} = \nabla S$$

Критерий применимости квазиклассического приближения:

$$|i\hbar (\nabla^2 S)| \ll |(\nabla S)^2| \quad \rightarrow \quad \frac{\hbar |\nabla^2 S|}{(\nabla S)^2} \ll 1$$

Подставив  $\nabla S = \mathbf{p}$ :

$$\frac{\hbar}{p^2} |\operatorname{div} \mathbf{p}| \ll 1$$

Или в одномерном случае:

$$\boxed{\frac{\hbar}{p^2} \left| \frac{dp}{dx} \right| \ll 1}$$

Перепишем критерий в другой форме:

$$\frac{\hbar}{p^2} \left| \frac{dp}{dx} \right| = \left| \frac{d}{dx} \left( \frac{\hbar}{p} \right) \right|_{(1.1.2)} = \left| \frac{d\lambda}{dx} \right| \ll 1$$

$$\boxed{\Delta\lambda \approx \lambda \left| \frac{d\lambda}{dx} \right| \ll \lambda}$$

Существует также формальный признак (т.е. необходимое, но недостаточное условие) квазиклассичности (см. § 46 т. III Л.Л.):

$$\boxed{\frac{\lambda}{L} \ll 1}$$

Выразим критерий квазиклассичности через потенциальную энергию:

$$\frac{p^2(x)}{2m} + U(x) = E \rightarrow p(x) = \sqrt{2m(E - U(x))}$$

$$\frac{dp}{dx} = \frac{2m}{2p} \left( -\frac{dU}{dx} \right) = \frac{m}{p} F,$$

где  $F$  — классическая сила.

$$\boxed{\Delta\lambda \ll \lambda, \quad \left| \frac{d\lambda}{dx} \right| \ll 1, \quad \frac{\hbar}{p^2} \left| \frac{dp}{dx} \right| \ll 1, \quad \left| \frac{\hbar m}{p^3} \frac{dU}{dx} \right| \ll 1}$$

— критерий квазиклассичности, который удобно использовать при решении задач.

Выводы:

1. Квазиклассическое приближение не применимо при малых  $p$ , а также при  $p(x) = 0$  (классическая точка поворота).
2. В квазиклассическом приближении  $U(x)$  не должна иметь резких скачков

Квазиклассичность = большие импульсы + плавный ход потенциала.

## §2. Метод Вентцеля-Крамерса-Бриллюэна (ВКБ)

### 2.1 Вид волновой функции в квазиклассическом приближении

Раскладывая  $S(\mathbf{r}, t)$  по степеням малого безразмерного параметра, в который входит  $\hbar$  (например по  $\hbar/pL \sim \lambda/L \sim 1/kL \ll 1$ ), получим:

$$S(\mathbf{r}, t) = S_0 + S_1 + S_2 + \dots$$

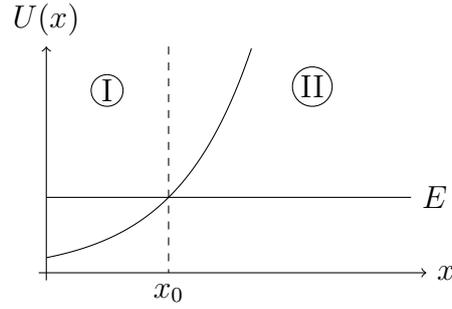


Рис. 11.1: Классически разрешённая (I) и запрещённая (II) области

(обычно будем ограничиваться 1-м порядком)

Область применимости метода ВКБ шире, чем классической теории: он работает при  $E < U(x)$ .

Рассмотрим консервативную систему (см. т.1 Л.-Л., §47):

$$S(x, t) = -Et + S(x)$$

Подставим в (11.1.1):

$$(S')^2 - i\hbar S'' = 2m(E - U(x)) \equiv p^2(x)$$

Здесь  $p^2(x)$  - просто обозначение, которое не подразумевает, что  $p^2(x) > 0$ . Разложим  $p^2(x)$  до первой степени по  $\hbar$ :

$$p^2(x) = (S'_0 + S'_1 + \dots)^2 - i\hbar(S''_0 + S''_1 + \dots) \approx (S'_0)^2 + 2S'_0 S'_1 - i\hbar S''_0$$

Рассмотрим две области на графике:

(a) Область I,  $p^2(x) > 0$

Нулевой порядок по  $\hbar$ :

$$(S'_0)^2 = p^2(x) \rightarrow S'_0 = \mp p(x)$$

$$S_0(x) = \pm \int_x^{x_0} p(x') dx', \quad x < x_0$$

$S_0(x_0)$  здесь отсутствует, так как будет входить в постоянную  $\mathcal{A}$ .

Первый порядок по  $\hbar$ :

$$2S'_0 S'_1 - i\hbar S''_0 = 0$$

$$S'_1 = \frac{i\hbar S''_0}{2 S'_0} = \frac{i\hbar}{2} \left( \frac{\mp p'(x)}{\mp p(x)} \right) = \frac{i\hbar}{2} \frac{d}{dx} [\ln p(x)]$$

$$S_1 = \frac{i\hbar}{2} \ln p(x) = \boxed{i\hbar \ln \sqrt{p(x)}}$$

Вид квазиклассической волновой функции в классически разрешённой области:

$$\Psi(x)|_{x < x_0} = \mathcal{A} e^{\frac{i}{\hbar} S(x)} \approx \frac{\mathcal{A}}{\sqrt{p(x)}} \exp\left(\pm \frac{i}{\hbar} \int_x^{x_0} p(x') dx'\right)$$

(b) Область II (классически запрещенная),  $E < U(x)$ ,  $p^2(x) < 0$

$$p^2(x) = 2m(E - U(x)) = -2m(U(x) - E)$$

$$p(x) = \pm i\sqrt{2m(U(x) - E)} = \pm i|p(x)|$$

Вид квазиклассической волновой функции в классически запрещенной области:

$$\psi(x)|_{x>x_0} = \mathcal{A}e^{\frac{i}{\hbar}S(x)} \approx \frac{\mathcal{A}}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(\pm \frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x |p(x')| dx'\right)$$

Выводы:

- 1) При  $x < x_0$   $\psi(x) \sim \cos, \sin$   
При  $x > x_0$   $\psi(x) \sim$  затухающей экспоненте
- 2) При  $p(x_0) = 0$  квазиклассическое приближение не применимо
- 3)  $W(x_0) \sim \frac{1}{p(x_0)} \rightarrow \infty$

**Упражнение 1.** Показать, что волновая функция в областях I и II имеет вид:

$$\psi_I(x) \simeq \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \{a \sin(z + \gamma_1) + b \cos(z + \gamma_2)\}, \quad z = \frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} p(x') dx'$$

$$\psi_{II}(x) \simeq \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} \{Ae^{-|z|} + Be^{|z|}\}, \quad |z| = \frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} |p(x')| dx'$$

## 2.2 Связь между двумя решениями, взятыми по разные стороны от точки поворота

Заменяем в окрестности  $x_0$  функцию  $U(x)$  ее линейным приближением:

$$U(x)|_{|x-x_0| \rightarrow 0} \simeq U(x_0) + U'(x_0)(x - x_0) + \dots$$

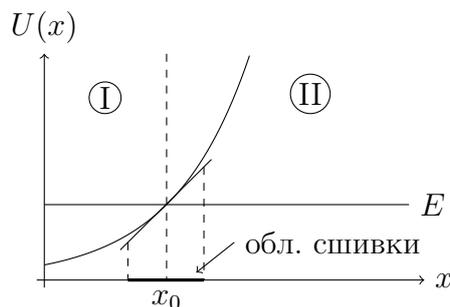


Рис. 11.2: Классически разрешённая (I) и запрещённая (II) области,  $x_0$  - точка поворота.

$$p^2(x) = 2m(E - U(x)) \simeq 2mU'(x_0)(x_0 - x) \equiv \alpha\hbar^2(x_0 - x)$$

$$\psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U(x))\psi(x) = 0 \rightarrow \psi''(x) - \alpha(x - x_0)\psi(x) = 0$$

$$\xi = \alpha^{\frac{1}{3}}(x - x_0)$$

$$\frac{d^2}{d\xi^2} \psi(\xi) - \xi \psi(\xi) = 0$$

— уравнение Эйри (см. §24, §b, мат. дополнение т.III Л.-Л.)

$$\begin{cases} \text{Ai}(\xi) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \cos \left[ \xi t + \frac{t^3}{3} \right] dt \\ \text{Bi}(\xi) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \left[ \sin \left( \xi t + \frac{t^3}{3} \right) + \exp \left( \xi t - \frac{t^3}{3} \right) \right] dt \end{cases}$$

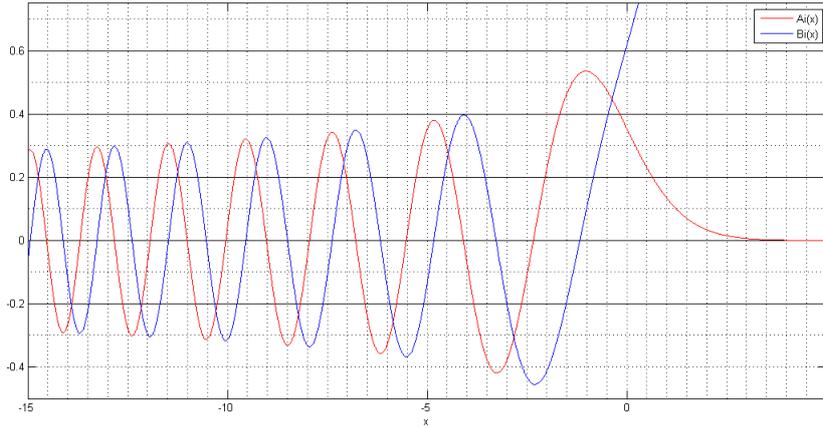


Рис. 11.3: графики функций Эйри

Асимптотическая область: Эйри + ВКБ приближения.

Эйри-приближение верно при  $|x - x_0| < L$ , где  $L$  — характерный размер (длина, на которой существенно меняется потенциал).

ВКБ:

$$\left| \frac{\hbar m}{p^3} \frac{dU}{dx} \right| \ll 1$$

$$|p^3(x)| \simeq \left( 2m |U'(x_0)| \cdot |x - x_0| \right)^{\frac{3}{2}}$$

$$|x - x_0|^{\frac{3}{2}} \gg \frac{\hbar m |U'|}{(2m |U'|)^{3/2}} \sim \frac{\hbar}{(m |U'(x_0)|)^{1/2}}$$

$$|x - x_0| \gg \frac{\hbar^{2/3}}{(m |U'(x_0)|)^{1/3}} \quad (11.2.1)$$

$$m |U'(x_0)| \sim \left. \frac{p^2(x)}{|x - x_0|} \right|_{|x - x_0| \lesssim L} \rightarrow (m |U'(x_0)|)^{\frac{1}{3}} \sim \left( \frac{p^2(x)}{L} \right)^{\frac{1}{3}}$$

$$\begin{cases} |x - x_0| \gg \left( \frac{\hbar}{p(x)} \right)^{\frac{2}{3}} L^{\frac{1}{3}} = \left( \frac{\lambda}{L} \right)^{\frac{2}{3}} L \\ |x - x_0| < L \end{cases}$$

Эта система совместна только если выполняется условие  $\lambda/L \ll 1$ , то есть:

$$\left( \frac{\lambda}{L} \right)^{\frac{2}{3}} L \ll |x - x_0| < L, \quad \text{если } \frac{\lambda}{L} \ll 1$$

Из (11.2.1):  $|\xi| \gg 1$ . Приведём асимптотические оценки функций Эйри (см. §b, мат. дополнение т.III Л.-Л.)

$$\begin{cases} \text{Ai}(|\xi|)|_{|\xi| \rightarrow \infty} \simeq \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \xi^{-\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{2}{3}\xi^{\frac{3}{2}}\right) \\ \text{Bi}(|\xi|)|_{|\xi| \rightarrow \infty} \simeq \frac{1}{\sqrt{\pi}} \xi^{-\frac{1}{4}} \exp\left(\frac{2}{3}\xi^{\frac{3}{2}}\right) \end{cases} \quad \begin{cases} \text{Ai}(-|\xi|)|_{|\xi| \rightarrow \infty} \simeq \frac{1}{\sqrt{\pi}} |\xi|^{-\frac{1}{4}} \sin\left[\frac{2}{3}|\xi|^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4}\right] \\ \text{Bi}(-|\xi|)|_{|\xi| \rightarrow \infty} \simeq \frac{1}{\sqrt{\pi}} |\xi|^{-\frac{1}{4}} \cos\left[\frac{2}{3}|\xi|^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4}\right] \end{cases}$$

$$z_{(x \rightarrow x_0-0)} \rightarrow \frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} \alpha^{\frac{1}{2}} \hbar (x_0 - x')^{\frac{1}{2}} dx' = \frac{2}{3} \alpha^{\frac{1}{2}} (x_0 - x')^{\frac{3}{2}} \equiv \frac{2}{3} \alpha^{\frac{1}{2}} |x - x_0|^{\frac{3}{2}} \equiv \frac{2}{3} |\xi|^{\frac{3}{2}}$$

$$z_{(x \rightarrow x_0+0)} \rightarrow \frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x \alpha^{\frac{1}{2}} \hbar (x' - x_0)^{\frac{1}{2}} dx' = \dots = \frac{2}{3} \xi^{\frac{3}{2}}$$

$$\begin{aligned} \psi_I(x)|_{x < x_0} &\xrightarrow{\text{ВКБ}} \frac{1}{\sqrt{p}} \left\{ a \sin[z + \gamma_1] + b \cos[z + \gamma_2] \right\} \Big|_{(x \rightarrow x_0-0)} = \\ &= \frac{1}{\alpha^{\frac{1}{6}} \hbar^{\frac{1}{2}} |\xi|^{\frac{1}{4}}} \left\{ a \sin\left[\frac{2}{3} |\xi|^{\frac{3}{2}} + \gamma_1\right] + b \cos\left[\frac{2}{3} |\xi|^{\frac{3}{2}} + \gamma_2\right] \right\} \end{aligned}$$

$$\psi_{II}(x)|_{x > x_0} \xrightarrow{\text{ВКБ}} \frac{1}{\sqrt{p}} \left\{ A e^{-|z|} + B e^{|z|} \right\} \Big|_{(x \rightarrow x_0+0)} = \frac{1}{\alpha^{\frac{1}{6}} \hbar^{\frac{1}{2}} \xi^{\frac{1}{4}}} \left\{ A \exp\left(-\frac{2}{3}\xi^{\frac{3}{2}}\right) + B \exp\left(\frac{2}{3}\xi^{\frac{3}{2}}\right) \right\}$$

Сравнивая с асимптотическими оценками, получаем значения констант:

$$\begin{aligned} \gamma_1 = \gamma_2 = \frac{\pi}{4} \\ \frac{A}{a} = \frac{1}{2}, \quad \frac{B}{b} = 1 \quad \rightarrow \quad \boxed{A = \frac{a}{2}, \quad B = b} \end{aligned}$$

Общее решение:

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &\simeq \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \left\{ a \sin\left[\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right] + b \cos\left[\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right] \right\} \\ \psi_{II}(x) &\simeq \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} \left\{ \frac{a}{2} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x |p(x')| dx'\right) + b \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x |p(x')| dx'\right) \right\} \end{aligned}$$

**Правило I:**

$B = b = 0, \text{Ai}(|\xi|)|_{|\xi| \rightarrow \infty}$

$$\boxed{\psi(x)_{(x \gg x_0)} = \frac{a}{2\sqrt{|p|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x |p(x')| dx'\right) \quad \rightarrow \quad \psi(x)_{(x \ll x_0)} = \frac{a}{\sqrt{p}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right)}$$

В обратную сторону данный переход не будет корректным.

**Правило II:**

$\varphi$  — поправка от приближения

$$\begin{aligned} \psi(x)_{(x \ll x_0)} &= \frac{c}{\sqrt{p}} \left\{ \sin\left(z + \frac{\pi}{4} + \varphi\right) \right\} \equiv \frac{c}{\sqrt{p}} \left\{ \sin\left(z + \frac{\pi}{4}\right) \cos \varphi + \cos\left(z + \frac{\pi}{4}\right) \sin \varphi \right\} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{p}} \left\{ a \sin\left(z + \frac{\pi}{4}\right) + b \cos\left(z + \frac{\pi}{4}\right) \right\} \end{aligned}$$

где  $c \sin \varphi = b$ ,  $c \cos \varphi = a$

$$\psi(x)_{(x \ll x_0)} = \frac{c}{\sqrt{p}} \sin \left( \frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} p(x') dx' + \frac{\pi}{4} + \varphi \right) \rightarrow \psi(x)_{(x \gg x_0)} = \frac{c \sin \varphi}{\sqrt{|p|}} \exp \left( \frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x |p(x')| dx' \right)$$

Переход не работает, когда  $\varphi \rightarrow \pi n$ , а также в обратную сторону.

### Правило III:

Сделаем замену в II:  $\varphi \rightarrow \varphi + \frac{\pi}{2}$ :

$$\frac{c}{\sqrt{p}} \cos \left[ z + \frac{\pi}{4} + \varphi \right] \rightarrow \frac{c \cos \varphi}{\sqrt{|p|}} e^{|z|}$$

Домножим (II) на  $\pm i$  и сложим с предыдущим результатом:

$$\frac{c}{\sqrt{p}} e^{\pm i(z + \frac{\pi}{4} + \varphi)} = \frac{c}{\sqrt{p}} e^{\pm i\varphi} e^{\pm i(z + \frac{\pi}{4})} \rightarrow \frac{c}{\sqrt{|p|}} e^{\pm i\varphi} e^{|z|}$$

$$\psi(x)_{(x \ll x_0)} = \frac{C}{\sqrt{p}} \exp \left( \frac{i}{\hbar} \int_x^{x_0} p(x') dx' + \frac{i\pi}{4} \right) + \frac{D}{\sqrt{p}} \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \int_x^{x_0} p(x') dx' - \frac{i\pi}{4} \right) \rightarrow$$

$$\rightarrow \psi(x)_{(x \gg x_0)} = \frac{C + D}{\sqrt{|p|}} \exp \left( \frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x |p(x')| dx' \right)$$

Поменяем области местами. Что произойдёт с правилами соответствия? Если грубо, то  $x_0$  поменяется местами с  $x$  в пределах интегрирования и отношениях типа  $\ll$ .

## §3. Условие квантования Бора-Зоммерфельда

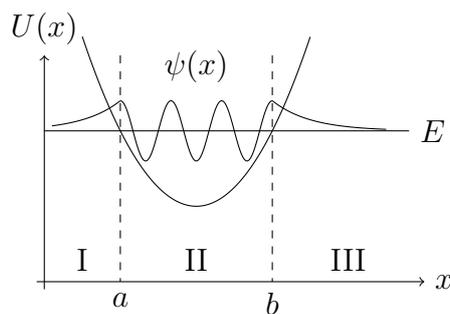


Рис. 11.4: К выводу условий квантования Бора-Зоммерфельда

Применим правило соответствия I:

$$\psi(x)_{x < b} = \frac{a_1}{\sqrt{p}} \sin \left[ \frac{1}{\hbar} \int_x^b p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right] \equiv \frac{a_1}{\sqrt{p}} \sin(z_1 + \frac{\pi}{4})$$

$$\psi(x)_{x > a} = \frac{a_2}{\sqrt{p}} \sin \left[ \frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right] \equiv \frac{a_2}{\sqrt{p}} \sin(z_2 + \frac{\pi}{4})$$

$$z_1 + z_2 = \frac{1}{\hbar} \int_a^b p(x') dx' \equiv \frac{1}{\hbar} \int_a^b p(x) dx$$

«Сшивка» (на интервале  $(a, b)$  волновые функции обязаны совпадать):

$$\begin{aligned} \frac{a_1}{\sqrt{p}} \sin\left(z_1 + \frac{\pi}{4}\right) &= \frac{a_2}{\sqrt{p}} \sin\left(z_2 + \frac{\pi}{4}\right) = \frac{a_2}{\sqrt{p}} \sin\left[\frac{1}{\hbar} \int_a^b p(x) dx - z_1 + \frac{\pi}{4}\right] = \\ &= -\frac{a_2}{\sqrt{p}} \sin\left[z_1 - \frac{1}{\hbar} \int_a^b p(x) dx - \frac{\pi}{4}\right] \end{aligned}$$

Условия совпадения решений:

$$z_1 + \frac{\pi}{4} = z_1 - \frac{1}{\hbar} \int_a^b p(x) dx - \frac{\pi}{4} + \pi(n+1) \quad (11.3.1)$$

$$a_1 = (-1)(-1)^{n+1} a_2 \rightarrow a_2 = a_1(-1)^n \quad (11.3.2)$$

Отсюда получаем **условия квантования Бора-Зоммерфельда** (1915-й год):

$$\boxed{\int_a^b p(x) dx = \pi \hbar \left(n + \frac{1}{2}\right)} \quad (11.3.3)$$

$$\boxed{\oint p(x) dx \equiv 2 \int_a^b p(x) dx = 2\pi \hbar \left(n + \frac{1}{2}\right)} \quad (11.3.4)$$

Напомним:

$$p(x) = \sqrt{2m(E_n - U(x))}$$

Выводы:

- 1)  $\oint p(x) dx$  — адиабатический инвариант (система сохраняет квантовый уровень при медленном (адиабатическом) изменении параметров системы)
- 2)  $n : n \rightarrow E_n$

$$\sin\left(z + \frac{\pi}{4}\right) : a \rightarrow b : \frac{\pi}{4} \rightarrow \frac{1}{\hbar} \int_a^b p(x) dx + \frac{\pi}{4} \Big|_{(11.3.3)} = \pi n + \frac{3}{4}\pi$$

Следовательно, волновая функция на промежутке от  $a$  до  $b$  меняет знак  $n$  раз, что является частным случаем осцилляционной теоремы (гл. 7 §3)

Малый параметр ВКБ:

$$\frac{\lambda}{L} \sim \frac{1}{n} \ll 1 \sim \frac{1}{2} \rightarrow n \gg 1$$

т.е. условия квантования Бора-Зоммерфельда пригодны при больших  $n$ .

## §4. Фазовый объём, приходящийся на одно квантовое состояние

Рассмотрим фазовую плоскость  $(p, x)$ :

$$\oint p(x) dx = \Gamma(E_n) = 2\pi \hbar \left[n + \frac{1}{2}\right]$$

$$E_n \rightarrow E_{n+1} : \Delta\Gamma = \Gamma(E_{n+1}) - \Gamma(E_n) = 2\pi\hbar$$

т.е. на одно квантовое состояние в фазовом пространстве частицы приходится объём  $2\pi\hbar$

Число квантовых состояний в некотором фазовом объёме:

$$\Delta N = \frac{\Delta p \Delta x}{2\pi\hbar}$$

## §5. Вероятность проникновения частицы через барьер в квазиклассическом приближении

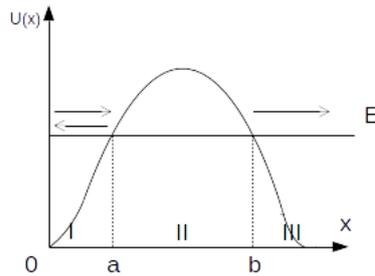


Рис. 11.5: Проникновение частицы через барьер

1) Область III:

$$\psi(x)_{x>b} \simeq \frac{A}{\sqrt{p(x)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_b^x p(x') dx' + i\frac{\pi}{4}\right)$$

Проверим, что данная волновая функция действительно соответствует прошедшей волне: найдём плотность потока вероятности:

$$\begin{aligned} j_x^{\text{прош}} &= \frac{i\hbar}{2m} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi) = \left( \text{члены} \sim \nabla \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \text{ компенсируются} \right) = \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \left\{ \frac{A}{\sqrt{p(x)}} e^{i[z(x)+\frac{\pi}{4}]} \frac{A^*}{\sqrt{p(x)}} e^{-i[z(x)+\frac{\pi}{4}]} \left( -i \frac{dz}{dx} \right) - (\text{компл-сопр}) \right\} = \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \left\{ \frac{-i |A|^2 2}{\hbar} \right\} = \frac{|A|^2}{m} = j_x^{\text{прош}} > 0 \end{aligned}$$

т.е.  $\psi(x)_{x>b}$  действительно описывает прошедшую волну.

2) Область II, по правилу соответствия III:

$$\begin{aligned} \psi(x)_{a<x<b} &\simeq \frac{A}{\sqrt{|p|}} \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int_x^b |p(x')| dx'\right) \equiv \\ &\equiv \frac{A}{\sqrt{|p|}} \underbrace{\exp\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^b |p(x')| dx'\right)}_{e^\gamma} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_a^x |p(x')| dx'\right) \end{aligned}$$

3) Область I, правило соответствия I:

$$\begin{aligned} \psi(x)_{x < a} &\simeq \frac{2A}{\sqrt{p}} \sin \left[ \frac{1}{\hbar} \int_x^a p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right] e^\gamma = \\ &= \frac{2Ae^\gamma}{\sqrt{p}} \left\{ \underbrace{\exp \left( \frac{i}{\hbar} \int_x^a p(x') dx' + \frac{i\pi}{4} \right)}_{\text{отраженная волна}} - \underbrace{\exp \left( -\frac{i}{\hbar} \int_x^a p(x') dx' - \frac{i\pi}{4} \right)}_{\text{падающая волна}} \right\} \\ j_x^{\text{пад}} &= \frac{i\hbar}{2m} \{ \Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi \} = \frac{i\hbar}{2m} \left\{ \frac{Ae^\gamma}{i\sqrt{p}} e^{-i(z(x)+\frac{\pi}{4})} \frac{A^* e^\gamma}{(-i)\sqrt{p}} e^{i(z(x)+\frac{\pi}{4})} \left( i \frac{dz}{dx} \right) - \text{K.C.} \right\} = \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \left\{ \frac{-2i |A|^2 e^{2\gamma}}{\hbar} \right\} = \frac{|A|^2 e^{2\gamma}}{m} \end{aligned}$$

4) Формула Гамова (1928г):

$$D \equiv \frac{|j_x^{\text{прош}}|}{|j_x^{\text{пад}}|} = e^{2\gamma} = e^{-\frac{2}{\hbar} \int_a^b |p(x)| dx}$$

Коэффициент отражения:

$$R \equiv \frac{|j_x^{\text{отр}}|}{|j_x^{\text{пад}}|} = 1(!)$$

Это свойство имеет место в квазиклассике, т.к. при установлении правил соответствия растущая экспонента компенсирует падающую экспоненту.

$$D \ll 1 \rightarrow 2\gamma \ll 1$$

# Глава 12

## Теория возмущений

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{V} = \hat{H}^{(0)} + \lambda \hat{U} \quad (12.0.1)$$

$\hat{H}^{(0)}$  - гамильтониан невозмущенной задачи.

$\hat{V}$  - оператор возмущения с  $\lambda \ll 1$ .

$$\hat{H}^{(0)} |\psi^{(0)}\rangle = E^{(0)} |\psi^{(0)}\rangle - \text{стационарное УШ}$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi^{(0)}\rangle = \hat{H}^{(0)} |\psi^{(0)}\rangle - \text{нестационарное УШ}$$

Оба этих уравнения допускают точное решение. Будем считать, что оно нам известно.

$$\hat{H} |\psi_n\rangle = (\hat{H}^{(0)} + \lambda \hat{U}) |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle \quad (12.0.2)$$

### §1. Стационарная теория возмущений

$$\hat{H}^{(0)} |\psi^{(0)}\rangle = E^{(0)} |\psi^{(0)}\rangle - \text{стационарное УШ} \quad (12.1.1)$$

$$E_m^{(0)}, \psi_m^{(0)} \rightarrow E_m |\psi_m\rangle$$

$$|\psi_n\rangle = \sum_{p=0}^{\infty} \lambda^p |\varphi_n^{(p)}\rangle = |\varphi_n^{(0)}\rangle + \lambda |\varphi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\varphi_n^{(2)}\rangle + \dots = \quad (12.1.2)$$

$$= |\psi_n^{(0)}\rangle + |\psi_n^{(1)}\rangle + |\psi_n^{(2)}\rangle + \dots \quad (12.1.2')$$

$$E_n = \sum_{p=0}^{\infty} \lambda^p \varepsilon_n^{(p)} = \varepsilon_n^{(0)} + \lambda \varepsilon_n^{(1)} + \lambda^2 \varepsilon_n^{(2)} + \dots = \quad (12.1.3)$$

$$= E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \dots \quad (12.1.3')$$

При

$$\lambda \rightarrow 0 \quad E_n \rightarrow E_n^{(0)} \equiv \varepsilon_n^{(0)}, |\psi_n\rangle \rightarrow |\varphi_n^{(0)}\rangle \equiv |\psi_n^{(0)}\rangle$$

Ряды ТВ Релея-Шредингера

Подставим (12.1.2') и (12.1.3') в (12.0.2):

$$\left( \hat{H}^{(0)} + \hat{V} \right) (|\psi_n^{(0)}\rangle + |\psi_n^{(1)}\rangle + \dots) = (E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + \dots) \cdot (|\psi_n^{(0)}\rangle + |\psi_n^{(1)}\rangle + \dots)$$

Порядок ТВ	Уравнение	
0	$(\hat{H}^{(0)} - E_n^{(0)})  \psi_n^{(0)}\rangle = 0$	(12.1.4)

1	$(\hat{H}^{(0)} - E_n^{(0)})  \psi_n^{(1)}\rangle = (E_n^{(1)} - \hat{V})  \psi_n^{(0)}\rangle$	(12.1.5)
---	---	----------

... ..

$s$	$(\hat{H}^{(0)} - E_n^{(0)})  \psi_n^{(s)}\rangle = (E_n^{(1)} - \hat{V})  \psi_n^{(s-1)}\rangle + E_n^{(2)}  \psi_n^{(s-2)}\rangle + \dots + E_n^{(s)}  \psi_n^{(0)}\rangle$	(12.1.6)
-----	---	----------

(12.1.1) - спектр дискретный и невырожденный.

$$\begin{aligned}
 E_n^{(0)} &\rightarrow |\psi_n^{(0)}\rangle \\
 \{|\psi_n^{(0)}\rangle\} &\langle \psi_m | \psi_n \rangle = \delta_{mn} \\
 |\psi_n\rangle &= \sum_m c_{mn} |\psi_m^{(0)}\rangle,
 \end{aligned}$$

где  $c_{mn} = c_{mn}^{(0)} + c_{mn}^{(1)} + \dots$

$$c_{mn}^{(1)} \rightarrow \hat{V}_1$$

## 1.1 Первое приближение теории стационарных возмущений

$$\boxed{c_{mn}^{(0)} = \delta_{mn}} \rightarrow c_{nn}^{(0)} = 1, c_{mn}^{(0)} = 0, m \neq n$$

Умножим (12.1.5) на  $\langle \psi_n^{(0)} |$ :

$$\begin{aligned}
 \underbrace{\langle \psi_n^{(0)} |}_{\text{эрмитов}} (\hat{H}^{(0)} - E_n^{(0)}) |\psi_n^{(1)}\rangle &= \langle \psi_n^{(0)} | (E_n^{(1)} - \hat{V}) |\psi_n^{(0)}\rangle \\
 \langle \psi_n^{(0)} | \underbrace{(E_n^{(0)} - E_n^{(0)})}_{=0} |\psi_n^{(0)}\rangle &= 0
 \end{aligned}$$

$$\boxed{E_n^{(1)} = \langle \psi_n^{(0)} | \hat{V} | \psi_n^{(0)} \rangle \equiv \langle n | \hat{V} | n \rangle \equiv V_{nn}} \quad (12.1.7)$$

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_m c_{mn}^{(1)} |\psi_m^{(0)}\rangle \equiv \underbrace{\sum_m |\psi_m^{(0)}\rangle \langle \psi_m^{(0)} |}_{=1} |\psi_n^{(1)}\rangle$$

Подставим (12.1.7) в (12.1.5):

$$\sum_m c_{mn}^{(1)} (\hat{H}^{(0)} - E_n^{(0)}) |\psi_m^{(0)}\rangle = (E_n^{(1)} - \hat{V}) |\psi_n^{(0)}\rangle$$

Домножим обе части на  $\langle \psi_k^{(0)} |$ :

$$\sum_m c_{mn}^{(1)} (E_k^{(0)} - E_n^{(0)}) \langle \psi_k^{(0)} | \psi_m^{(0)} \rangle = E_n^{(1)} \langle \psi_k^{(0)} | \psi_n^{(0)} \rangle - V_{kn}$$

$$c_{nk}^{(1)} (E_k^{(0)} - E_n^{(0)}) = E_n^{(1)} \delta_{kn} - V_{kn} \quad (12.1.8)$$

Из (12.1.8) при  $k \neq n$  получаем:

$$c_{nk}^{(1)} = \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \quad (12.1.9)$$

Найдем  $c_{nn}$ .

$$\begin{aligned} |\psi_n\rangle &= |\psi_n^{(0)}\rangle + |\psi_n^{(1)}\rangle \\ \langle\psi_n|\psi_n\rangle &= 1 = \langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle + \underbrace{\langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle}_{=0} + \underbrace{\langle\psi_n^{(1)}|\psi_n^{(0)}\rangle}_{=0} + \langle\psi_n^{(1)}|\psi_n^{(1)}\rangle \\ \langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle &= 0 = |_{(12.1.7)} c_{nn}^{(1)} \end{aligned}$$

$$\boxed{|\psi_n^{(1)}\rangle = |_{(12.1.9)} \sum_{k \neq n} \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} |\psi_k^{(0)}\rangle} \quad (12.1.10)$$

## 1.2 Энергетическая поправка второго приближения ТСВ

$$\begin{aligned} &\langle\psi_n^{(0)}| \cdot (12.1.6) \\ \underbrace{\langle\psi_n^{(0)}|\widehat{H}^{(0)} - E_n^{(0)}|\psi_n^{(s)}\rangle}_{\langle\psi_n^{(0)}|E_n^{(0)} - E_n^{(0)}|\psi_n^{(s)}\rangle} &= E_n^{(1)}\langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(s-1)}\rangle - \langle\psi_n^{(0)}|\widehat{V}|\psi_n^{(s-1)}\rangle + E_n^{(2)}\langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(s-2)}\rangle + \dots + E_n^{(s)} \\ E_n^{(s)} &= \langle\psi_n^{(0)}|\widehat{V}|\psi_n^{(s-1)}\rangle - \sum_{t=1}^{s-1} E_n^{(t)}\langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(s-t)}\rangle \end{aligned}$$

Подставим  $s = 1$  и  $s = 2$ :

$$\begin{aligned} s = 1 : \quad E_n^{(1)} &= \langle\psi_n^{(0)}|\widehat{V}|\psi_n^{(0)}\rangle \\ s = 2 : \quad E_n^{(2)} &= \langle\psi_n^{(0)}|\widehat{V}|\psi_n^{(1)}\rangle - E_n^{(1)} \underbrace{\langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle}_{=c_{nn}^{(1)}=0} \end{aligned} \quad (12.1.11)$$

Подставим (12.1.10) в (12.1.11):

$$\begin{aligned} E_n^{(2)} &= \sum_{k \neq n} \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \cdot \underbrace{\langle\psi_n^{(0)}|\widehat{V}|\psi_k^{(0)}\rangle}_{V_{nk}} \\ \underbrace{\widehat{H}}_{\text{эрмитов}} &= \underbrace{\widehat{H}^{(0)}}_{\text{эрмитов}} + \underbrace{\widehat{V}}_{\text{эрмитов}} \rightarrow V_{kn} = V_{nk}^* \\ \boxed{E_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} \frac{|V_{nk}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}} & \quad (12.1.12) \end{aligned}$$

Как наличие одних уровней влияет на энергетическое положение других?

[картинка]

1)  $E_k^{(0)} - E_n^{(0)} > 0 \rightarrow E_n^{(0)} - E_k^{(0)} < 0$ , т.е.  $E_n^{(2)} < 0$ . Во втором приближении ТВ верхний уровень углубляет нижний.

2)  $E_n^{(0)} > E_k^{(0)} \rightarrow E_n^{(0)} - E_k^{(0)} > 0$ , т.е.  $E_n^{(2)} > 0$ . Нижний уровень выталкивает верхний. Во втором приближении ТВ соседние уровни энергии взаимно отталкиваются.

3)  $E_n^{(0)} = E_0^{(0)} \rightarrow E_n^{(2)} < 0!$ . Основной уровень энергии опускается вниз.

### 1.3 Критерий применимость СТВ

$$|\psi_n\rangle = \sum_k c_{nk} |\psi_k^{(0)}\rangle,$$

где  $c_{nk} = c_{nk}^{(0)} + c_{nk}^{(1)} + \dots$

$$\left| c_{nk}^{(1)} \right| \ll \left| c_{nk}^{(0)} \right| = 1$$

Из (12.1.9)

$$\boxed{|V_{kn}| \ll |E_n^{(0)} - E_k^{(0)}|} \quad (12.1.13)$$

- необходимое условие применимости стационарной теории возмущений (невырожденный случай).

## §2. Стационарное возмущение вырожденных уровней дискретного спектра. Секулярное уравнение

$$E_n^{(0)} \rightarrow \left\{ | \psi_{n\beta}^{(0)} \rangle \right\}, \beta = 1 \div k$$

Из (12.1.4)

$$\left( \widehat{H}^{(0)} - E_n^{(0)} \right) | \psi_{n\beta}^{(0)} \rangle = 0 \quad (12.2.1)$$

$$| \psi_n^{(0)} \rangle = \sum_{\beta=1}^k c_{\beta} | \psi_{n\beta}^{(0)} \rangle$$

Из (12.1.5)

$$\left( \widehat{H}^{(0)} - E_n^{(0)} \right) | \psi_n^{(1)} \rangle = \left( E_n^{(1)} - \widehat{V} \right) | \psi_n^{(0)} \rangle$$

Из соображений удобства опустим индекс  $n$ .

$$| \psi^{(0)} \rangle = \sum_{\beta=1}^k c_{\beta} | \psi_{\beta}^{(0)} \rangle$$

Тогда:

$$\left( \widehat{H}^{(0)} - E^{(0)} \right) | \psi^{(1)} \rangle = \left( E^{(1)} - \widehat{V} \right) | \psi^{(0)} \rangle \quad (12.2.2)$$

$\langle \psi_{\alpha}^{(0)} | \cdot$  (12.2.2), где  $\alpha \in \beta = 1 \div k$ :

$$\langle \psi_{\alpha}^{(0)} | \underbrace{\widehat{H}^{(0)} - E^{(0)}}_{=0 \text{ из эрмитовости}} | \psi^{(1)} \rangle = \langle \psi_{\alpha}^{(0)} | E^{(1)} - \widehat{V} | \psi^{(0)} \rangle$$

(надо помнить про эрмитовость операторов невозмущенных задач)

Получим

$$\sum_{\beta=1}^k c_{\beta} \langle \psi_{\alpha}^{(0)} | E^{(1)} - \widehat{V} | \psi_{\beta}^{(0)} \rangle = 0$$

или

$$\sum_{\beta=1}^k \{V_{\alpha\beta} - E^{(1)}\delta_{\alpha\beta}\} c_{\beta} = 0 \quad (12.2.3)$$

Система линейных уравнений (12.2.3) имеет нетривиальные решения относительно  $c_{\beta}$ , если

$$\boxed{\det \|V_{\alpha\beta} - E^{(1)}\delta_{\alpha\beta}\| = 0} \quad (12.2.4)$$

- секулярное (вековое) уравнение.

Собственные значения эрмитова оператора физической величины действительные (см. пункт в конце §2 главы III, §1 главы VI).

В результате  $k$  кратным уровням энергии соответствуют энергии:

$$E_n^{(0)} + E_{n\mu}^{(1)}, \mu = 1 \div k.$$

Если все корни  $E_{n\mu}$  - различны, то возмущение полностью снимает вырождение. Если есть кратные корни, то вырождение снимается частично. (задача 8 1-го задания)

## 2.1 Правильные волновые функции нулевого приближения

$$E_{n\mu}^{(1)} \rightarrow (12.2.3) \rightarrow c_{\mu\beta}$$

$$|\tilde{\psi}_{n\mu}^{(0)}\rangle = \sum_{\beta=1}^k c_{\mu\beta} |\psi_{n\beta}^{(0)}\rangle, \mu = 1 \div k$$

Сделаем  $|\tilde{\psi}_{n\mu}^{(0)}\rangle$  ортонормированными за счет ограничений на  $c_{\mu\beta}$ :

$$\langle \psi_{n\nu}^{(0)} | \psi_{n\mu}^{(0)} \rangle = \delta_{\nu\mu}$$

Полученные волновые функции называются правильными волновыми функциями нулевого приближения.

**Упражнение 1.** Доказать, что в базисе правильных волновых функций нулевого приближения вырожденная часть матрицы оператора возмущения  $\hat{V}$  имеет диагональный вид.

## §3. Квазивырождение, случай двух близких уровней энергии

Это случай нарушения критерия (12.1.13), т.к.  $\Delta E$  мала.

$$\begin{cases} \hat{H}^{(0)} |\psi_1^{(0)}\rangle = E_1^{(0)} |\psi_1^{(0)}\rangle \\ \hat{H}^{(0)} |\psi_2^{(0)}\rangle = E_2^{(0)} |\psi_2^{(0)}\rangle \end{cases} \quad (12.3.1)$$

Обозначим  $\Delta = E_2^{(0)} - E_1^{(0)} > 0$ .

$$\hat{H} |\psi\rangle = (\hat{H}^{(0)} + \hat{V}) |\psi\rangle = E |\psi\rangle \quad (12.3.2)$$

$$|\psi\rangle = c_1 |\psi_1^{(0)}\rangle + c_2 |\psi_2^{(0)}\rangle \quad (12.3.3)$$

Подставим (12.3.3) в (12.3.2):

$$\begin{aligned} (\hat{H}^{(0)} + \hat{V}) (c_1 |\psi_1^{(0)}\rangle + c_2 |\psi_2^{(0)}\rangle) &= E (c_1 |\psi_1^{(0)}\rangle + c_2 |\psi_2^{(0)}\rangle) \\ \begin{pmatrix} \langle \psi_1^{(0)} | \\ \langle \psi_2^{(0)} | \end{pmatrix} : \begin{pmatrix} E_1^{(0)} + V_{11} - E & V_{12} \\ V_{21} & E_2^{(0)} + V_{22} - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} &= 0 \\ \det \begin{vmatrix} E_1^{(0)} + V_{11} - E & V_{12} \\ \underbrace{V_{21}}_{=V_{12}^*} & E_2^{(0)} + V_{22} - E \end{vmatrix} &= 0 \end{aligned} \quad (12.3.4)$$

Из (12.3.4):

$$E^2 - (E_2^{(0)} + E_1^{(0)} + V_{22} + V_{11}) E + (E_1^{(0)} + V_{11})(E_2^{(0)} + V_{22}) - |V_{12}|^2 = 0$$

$$\begin{aligned} E &= \frac{E_2^{(0)} + E_1^{(0)} + V_{22} + V_{11}}{2} \pm \\ &\pm \left\{ \frac{1}{4} [(E_1^{(0)} + V_{11}) + (E_2^{(0)} + V_{22})]^2 - (E_1^{(0)} + V_{11})(E_2^{(0)} + V_{22}) + |V_{12}|^2 \right\}^{1/2} = \\ &= \frac{1}{2}(E_2^{(0)} + E_1^{(0)} + V_{22} + V_{11}) \pm \frac{1}{2} \sqrt{\underbrace{(E_2^{(0)} - E_1^{(0)})}_{=\Delta} + V_{22} - V_{11})^2 + 4|V_{12}|^2} \end{aligned}$$

Если  $V_{11} = V_{22} = 0$ , то

$$E = \frac{E_2^{(0)} + E_1^{(0)}}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{\Delta^2 + 4|V_{12}|^2} \rightarrow \Delta E = E_2 - E_1 = \sqrt{\Delta^2 + 4|V_{12}|^2} > \Delta$$

Общий вывод: под действием возмущения близкие уровни энергии «расталкиваются».

Вывод два: возмущенные уровни энергии двухуровневой задачи нигде не пересекаются и максимально сближаются в точке квазипересечения (см. рис. 12.1).

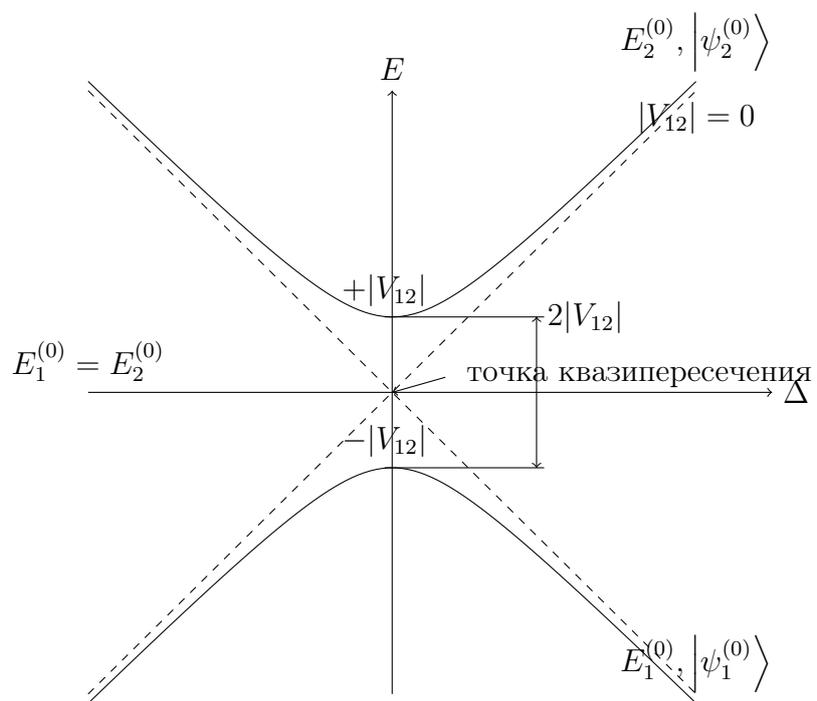


Рис. 12.1: ТВ в случае двух близких по энергии уровней



# Глава 13

## Нестационарная теория возмущений

### §1. Нестационарное возмущение дискретного спектра

Переходы под влиянием возмущения, действующего в течение конечного времени.

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{V}(t),$$

где  $\hat{V}(t)$  мал.

Здесь нет стационарных состояний, поэтому говорить о поправках к собственным значениям нельзя.

$$\hat{V}(t) = \begin{cases} \hat{w}(t), & 0 < t < T \\ 0, & t \leq 0, t \geq T \end{cases}$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_n^{(0)}(t)\rangle = \hat{H}^{(0)} |\psi_n^{(0)}(t)\rangle \quad (\S 4, \text{ главы I})$$

Общий вид решения временного уравнения Шредингера:

$$\begin{aligned} |\psi_n^{(0)}(t)\rangle &= e^{-i\frac{E_n^{(0)}t}{\hbar}} |\psi_n^{(0)}\rangle, \text{ где} \\ \hat{H}^{(0)} |\psi_n^{(0)}\rangle &= E_n^{(0)} |\psi_n^{(0)}\rangle \\ \hbar\omega_n &= E_n^{(0)} \end{aligned}$$

В соответствии с правилами суперпозиции:

$$|\psi^{(0)}(t)\rangle = \sum_k c_k |\psi_k^{(0)}(t)\rangle = \sum_k c_k e^{-i\omega_k t} |\psi_k^{(0)}\rangle$$

#### 1.1 Метод вариации постоянных

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = (\hat{H}^{(0)} + \hat{V}(t)) |\psi(t)\rangle \quad (13.1.1)$$

$$|\psi(t)\rangle = \sum_k c_k(t) |\psi_k^{(0)}(t)\rangle \quad (13.1.2)$$

Подставим (13.1.2) в (13.1.1):

$$i\hbar \sum_k \left( \dot{c}_k \left| \psi_k^{(0)}(t) \right\rangle + c_k \frac{\partial}{\partial t} \left| \psi_k^{(0)}(t) \right\rangle \right) = \sum_k c_k \left( \widehat{H}^{(0)} \left| \psi_k^{(0)}(t) \right\rangle + \widehat{V} \left| \psi_k^{(0)}(t) \right\rangle \right)$$

$$i\hbar \sum_k \dot{c}_k \left| \psi_k^{(0)}(t) \right\rangle = \sum_k c_k \widehat{V}(t) \left| \psi_k^{(0)}(t) \right\rangle \quad (13.1.3)$$

Спроектируем (13.1.3) на  $\left\langle \psi_m^{(0)}(t) \right|$  и учтем, что  $\langle \psi_m^{(0)}(t) | \psi_k^{(0)}(t) \rangle = \delta_{km}$ .

$$i\hbar \dot{c}_m = \sum_k c_k(t) V_{mk}(t) e^{i\omega_{mk}t}, \quad (13.1.4)$$

где  $\omega_{mk} = (E_m^{(0)} - E_k^{(0)})/\hbar$ ,  $V_{mk} = \langle \psi_m^{(0)} | \widehat{V}(t) | \psi_k^{(0)} \rangle$ .

До сих пор у нас были точные соотношения, но для решения (13.1.4) нужны приближения.

## 1.2 Приближения или метод Дирака (1927)

$$c_k(t) = c_k^{(0)}(t) + c_k^{(1)}(t) + \dots$$

Пусть  $c_k$  можно представить рядом убывающих функций времени.

При  $t = 0, t < 0$   $\widehat{H} \equiv \widehat{H}^{(0)}$ .

Пусть система находилась в  $E = E_m^{(0)}$ .

$$c_k(0) = c_k^{(0)}(0) = c_k^{(0)} = \delta_{km},$$

т.е.  $c_m^{(0)} = 1$  (до включения возмущения система находилась в этом состоянии).

$$c_k^{(0)} = 0, k \neq m$$

Из (13.1.4):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \cancel{c_{nm}^{(0)}} + c_{nm}^{(1)}(t) + \dots \right\} = \sum_k V_{mk} e^{i\omega_{mk}t} \cdot \left\{ \underbrace{c_{nk}^{(0)}}_{=\delta_{nk}} + \underbrace{\cancel{c_{nk}^{(1)}}}_{\text{дает второе приближение}} + \dots \right\}$$

$s = 1$  - первое приближение НТВ.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} c_{nm}^{(1)} = V_{mn}(t) e^{i\omega_{mn}t} \quad (13.1.5)$$

или

$$c_{nm}^{(1)} = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' V_{mn}(t') e^{i\omega_{mn}t'}$$

Найдена поправочная функция в первом приближении.

$0 < t < T$ , где  $T$  - длительность возмущения.

## §2. Вероятность перехода

Какой смысл имеет функция  $c_{mn}^{(1)}(t)$ ?

Если вернуться к общему решению возмущенной задачи, то

$$|\psi_n(t)\rangle = \sum_m c_{nm}(t) e^{-i\omega_m t} |\psi_m^{(0)}\rangle$$

а) при  $t \leq 0$ :  $c_{nm} = c_{nm}^{(0)} = \delta_{nm}$  с  $E = E_n^{(0)}$ .

б) при  $t > 0$ :  $c_{nm}(t)$  при  $m \neq n$ :  $c_{nm}^{(1)}(t) \neq 0$ .

$$\boxed{|c_{nm}^{(1)}(t)|^2 = P_{nm}(t)}$$

вероятность того, что в результате действия возмущения произошел квантовый переход из начального состояния  $n$  в состояние  $m$  за время  $t$ .

Дискретный переход между уровнями энергии:

$$P_{nm}(t) = \left| \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt' V_{mn}(t') e^{i\omega_{mn}t'} \right|^2, 0 < t < T$$

Если взять промежуток  $-\infty < t < \infty$ , то

$$P_{nm} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} dt' V_{mn}(t') e^{i\omega_{mn}t'} \right|^2 = \frac{(2\pi)^2}{\hbar^2} |V_{mn}(\omega_{mn})|^2 -$$

формула для вероятности перехода, где  $V_{mn}(\omega_{mn}) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt' V_{mn}(t') e^{i\omega_{mn}t'}$  - компонента Фурье матричного элемента  $V_{mn}(t)$  оператора возмущения.

## §3. Адиабатические и внезапные возмущения

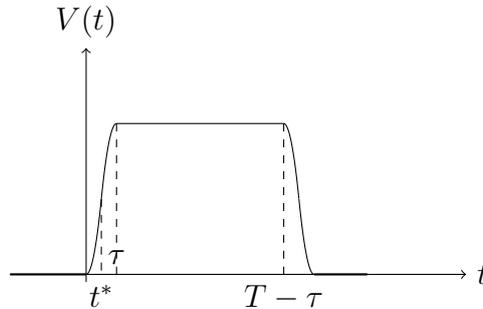


Рис. 13.1: Изменения возмущения во времени.  $T$  - длительность возмущения,  $\tau$  - время включения,  $t^*$  - точка перегиба.

### 3.1 Адиабатическое изменение возмущения

Преобразуем (13.1.5):

$$\frac{1}{i\hbar} \int_0^T dt' V_{mn}(t') e^{i\omega_{mn}t'} = -\frac{V_{mn}(t') e^{i\omega_{mn}t'}}{\hbar\omega_{mn}} \Big|_0^T + \int_0^T dt' \frac{dV_{mn}(t')}{dt'} \frac{e^{i\omega_{mn}t'}}{\hbar\omega_{mn}}$$

$$P_{nm}(T) = \frac{1}{(\hbar\omega_{mn})^2} \left| \int_0^T dt' \frac{dV_{mn}(t')}{dt'} e^{i\omega_{mn}t'} \right|^2 \quad (13.3.1)$$

**Определение 1.** Матричный элемент оператора возмущения  $V_{mn}(t')$  изменяется адиабатически (медленно), если за характерное время перехода в квантовой системе  $T_{mn} = \frac{2\pi}{\omega_{mn}}$  изменение  $V_{mn}$  мало по сравнению с самой величиной  $V_{mn}(t')$  (по модулю).

$$\Delta V_{mn} \simeq T_{mn} \left| \frac{dV_{mn}}{dt'} \right| \ll |V_{mn}| \quad (13.3.2)$$

См. рис. 13.1. Там указано  $\tau$  - характерное время включения (выключения) возмущения.

$$T_{mn} \frac{|V_{mn}|}{\tau} \sim \Delta V_{mn} \ll |V_{mn}|$$

или

$$\boxed{\frac{T_{mn}}{\tau} \ll 1}$$

условие адиабатичности изменения матричного элемента  $V_{mn}$ .

$$\rightarrow \omega_{mn}\tau \gg 1$$

$e^{i\omega_{mn}t}$  - быстро осциллирующая функция по сравнению с  $\frac{dV_{mn}(t)}{dt}$ .

$$P_m(T) = \left| \frac{d}{dt} V_{mn}(t') \right|_{t=t^*}^2 \left( \frac{2}{\hbar\omega_{mn}^2} \right)^2 \sin^2 \left( \frac{\omega_{mn}T}{2} \right)$$

$|\Delta V_{mn}| \ll \hbar\omega_{mn}$ <sup>1</sup> - мало по сравнению с энергией перехода.

Из (13.3.2):

$$\frac{1}{\omega_{mn}} \left| \frac{dV_{mn}}{dt'} \right|_{t'=t^*} \ll \hbar\omega_{mn} \quad (13.3.3)$$

Из (13.3.3):  $\boxed{P_{nm}(T) \ll 1}$ .

То есть при медленном (адиабатическом) включении и выключении возмущения, квантовая система, находившаяся первоначально в невырожденном состоянии с  $E_n^{(0)}$ , будет в первом приближении теории возмущений оставаться в нем же.

## 3.2 Внезапное включение возмущения

$$\tau \ll T_{mn} \sim 1/\omega_{mn} \rightarrow \omega_{mn}\tau \ll 1$$

$$\frac{dV_{mn}}{dt} \sim \delta(t') : \quad \boxed{P_{mn} \simeq \frac{|V_{mn}|^2}{\hbar^2\omega_{mn}^2}}$$

здесь  $|V_{mn}|$  - максимальное значение матричного элемента включенного возмущения.

<sup>1</sup>Кажется, все должно быть именно так

$$\begin{array}{ccc}
\hat{H}^{(0)} & \longrightarrow & \hat{H} \quad \text{за время } \tau \ll \frac{1}{\omega_{mn}} \\
\downarrow & & \downarrow \\
\psi_n^{(0)} & & \{|\psi_f\rangle\} \\
|\psi_n^{(0)}\rangle = \sum_f \underbrace{|\psi_f\rangle \langle\psi_f|}_{\hat{1}} |\psi_n^{(0)}\rangle & & \\
\boxed{P_{nm} = |\langle\psi_m|\psi_n^{(0)}\rangle|^2} & & (13.3.5)
\end{array}$$

(13.3.5)  $\rightarrow \hat{V}$  (13.3.4) (§4, т. III Л.-Л.).

#### §4. Переходы во времени под влиянием постоянного во времени возмущения. «Золотое правило» Ферми

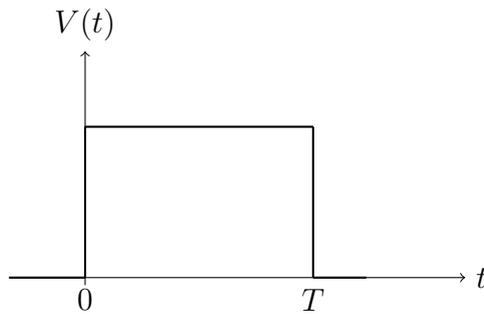


Рис. 13.2: Постоянное во времени возмущение

Из (13.1.5)

$$\begin{aligned}
P_{nm} &= \left| \frac{1}{i\hbar} \int_0^T dt' V_{mn} e^{i\omega_{mn}t'} \right|^2 = \left| \frac{1}{i\hbar} V_{mn} \frac{e^{i\omega_{mn}T} - 1}{\omega_{mn}} \right|^2 = \\
&= \frac{|V_{mn}|^2}{\hbar^2} \frac{2(1 - \cos \omega_{mn}T)}{\omega_{mn}^2} = \frac{|V_{mn}|^2}{\hbar^2} f(\omega_{mn}, T)
\end{aligned}$$

где  $f(\omega_{mn}, T)$  — спектральная функция:

$$f(\omega, T) = \frac{2(1 - \cos \omega T)}{\omega^2}$$

График спектральной функции представлен на рис. 13.3.

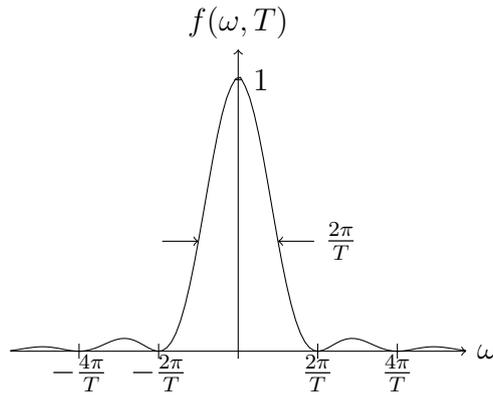


Рис. 13.3: График спектральной функции.

Вероятность квантовых переходов в единицу времени:

$$\begin{aligned}
 w_{mn} &= \left. \frac{P_{nm}}{T} \right|_{T \rightarrow \infty} = \frac{|V_{mn}|^2}{\hbar^2} \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{f(\omega_{mn}, T)}{T} \Big|_{\S 42 \text{ т. III Л.Л. (42.4)}} = \\
 &= \frac{|V_{mn}|^2}{\hbar^2} 2\pi \delta(\omega_{mn}) = \frac{|V_{mn}|^2}{\hbar^2} 2\pi \delta\left(\frac{E_m - E_n}{\hbar}\right) = \\
 &= \boxed{\frac{|V_{mn}|^2}{\hbar} 2\pi \delta(E_m - E_n)} \quad (13.4.1)
 \end{aligned}$$

Из графика видно, что основная часть переходов происходит в диапазоне

$$\delta E \sim \frac{2\pi}{T} \hbar$$

Можно сказать, что на нём не выполняется закон сохранения энергии, а точнее,  $\delta E$  — это точность, с которой энергия сохраняется.

Отсюда можно получить соотношение неопределенностей «энергия–время» (см. § 44 т. III Л.Л.):

$$\boxed{\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}} \quad (13.4.2)$$

Т.е. за время  $\Delta t$  энергия системы не может быть измерена точнее величины  $\Delta E$ , определяемой соотношением (13.4.2).

Из  $\Delta t \rightarrow \infty$  следует  $\Delta E \rightarrow 0$  (стационарное состояние).

(13.4.1) тяжело применять на практике. Для прикладных задач необходимо выполнение следующих условий:

1. Спектр (либо конечных, либо начальных и конечных состояний) должен быть непрерывен (или квазинепрерывен);
2. Постановка задачи: полная вероятность квантовых переходов в единицу времени из начального состояния ‘ $n$ ’ в континуальную группу состояний ‘ $m$ ’, обладающих почти одинаковой энергией в окрестности  $E_m$  и близкими значениями матричных элементов  $V_{mn}$ .

**Пример 1.** Гл. 19 - теория рассеяния, борновское приближение. (см. зад. 7 второго задания)

$$W_n = \sum_m w_{nm} \rightarrow \int w_{mn} d\nu_m,$$

$d\nu_m$  - число квантовых состояний в интервале энергий  $E_m \div E_m + dE_m$

$d\nu_m = \rho(E_m)dE_m$ , где  $\rho(E_m) = \frac{d\nu_m}{dE_m}$  - плотность энергетического спектра конечных состояний - число конечных состояний на единичный интервал энергий вблизи  $E_m$ .

$$W_n = \int w_{mn}\rho(E_m)dE_m = \left|_{(13.4.1)} \frac{2\pi}{\hbar} \int |V_{mn}|^2 \delta(E_m - E_n)\rho(E_m)dE_m = \right. \\ \left. = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{mn}|^2 \rho(E_m) \right|_{E_n=E_m} = W_n \quad (13.4.3)$$

- «золотое правило» Ферми. Полная вероятность квантового перехода в единицу времени под действием возмущения не зависит от длительности возмущения.

Выводы из (13.4.3):

- 1) сохраняется энергия
- 2) определяет полную вероятность квантовых переходов в единицу времени из начального состояния 'n' во все состояния 'm' континуальной группы.
- 3) если спектр существенно дискретный, то  $P_{nm} \not\rightarrow W_n$ . (13.4.3) применима, когда  $\rho$  - плавная,  $f$  - подобие  $\delta$ -функции.

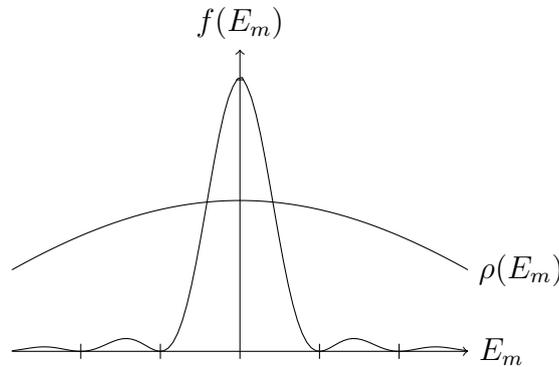


Рис. 13.4: К применимости (13.4.3).

## §5. Переходы под действием периодического возмущения в дискретном и непрерывном спектрах

$$\widehat{V}(t) = \widehat{V}e^{-i\omega t} + \widehat{V}^\dagger e^{i\omega t} \quad (13.5.1)$$

- эрмитов оператор возмущения. Для удобства введем обозначение  $\widehat{V}^- \equiv \widehat{V}$ .

Как и в §4  $\widehat{V}(t) \in [0, T]$ .

(13.5.1)  $\rightarrow$  (13.1.5) для  $c_{nm}^{(1)}(t)$ :

$$c_{nm}^{(1)} = \frac{1}{i\hbar} \int_0^T dt \left\{ V_{mn} e^{i(\omega_{mn}-\omega)t} + \underbrace{V_{mn}^\dagger}_{V_{nm}^*} e^{i(\omega_{mn}+\omega)t} \right\} =$$

$$= \frac{V_{mn} [e^{i(\omega_{mn}-\omega)T} - 1]}{i\hbar(\omega_{mn} - \omega)} + \frac{V_{mn}^\dagger [e^{i(\omega_{mn}+\omega)T} - 1]}{i\hbar(\omega_{mn} + \omega)}$$

$$\omega \rightarrow \pm\omega_{mn} = \pm(E_m - E_n)/\hbar$$

- резонансный случай

$$w_{nm} = |_{(13.4.1)} \frac{2\pi}{\hbar} |V_{mn}^\pm|^2 \delta(E_m - E_n \pm \hbar\omega), \quad (13.5.2)$$

где  $E_m$  - конечная энергия,  $E_n$  - начальная энергия,  $V_{mn}^- = V_{mn}$ .

$$W_n = \frac{2\pi}{\hbar} \left\{ |V_{mn}^\pm|^2 \rho(E_m) \right\} \Big|_{E_m = E_n \mp \hbar\omega} - \quad (13.5.3)$$

аналог (13.4.3).

(13.4.2) - переходы в дискретном спектре.

(13.4.3) - переходы в непрерывном спектре + из дискретного  $n$  в непрерывный спектр  $m$ .

$$E_m = E_n \mp \hbar\omega$$

1)  $E_m - E_n = \mp \hbar\omega$  - эти частоты соответствуют частотам Бора - использование частот Бора получило обоснование.

2)  $\widehat{V} e^{-i\omega t}$  - переход из  $E_n \rightarrow E_m = E_n + \hbar\omega$  - увеличение энергии системы (поглощение энергии квантовой системой).

# Глава 14

## Основы релятивистской теории

Уравнение Шредингера + теория спина Паули

1. Теория не является лоренц-ковариантной, т.к. уравнение Шредингера - нерелятивистское
2. Спин вводится «руками»:  
электрон имеет  $s = 1/2 \rightarrow$  гипотеза Уленбека-Гаудсмита (1925)

Релятивистская квантовая механика:

1. Частицы - точечные. Точечность электрона до  $10^{-18}$  см.
2. Частицы изолированные.
3. Сохранение числа частиц. Физика высоких энергий ( $E > mc^2$ ).  
Квантованные поля  $\rightarrow$  квантовая теория поля

Т.е. мы рассматриваем релятивистскую квантовую механику одной изолированной частицы. ( $E \geq m_e c^2 = 0.5$  МэВ)

### §1. Уравнение Дирака свободной релятивистской частицы

электрон  $\leftrightarrow$  позитрон  
 $s = 1/2$

Запишем спинор Паули:  $\psi(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$  - многокомпонентная волновая функция.

$$\Psi(\mathbf{r}, t, s) = \Psi_s(\mathbf{r}, t) = \langle \mathbf{r}, s | \psi(t) \rangle \quad (\S 3, \text{гл. VI})$$

- здесь  $s$  - дискретный индекс,  $\langle \mathbf{r}, s |$  - точка спин-орбитального пространства.

$$|\Psi(t)\rangle \rightarrow \mathcal{H} = \mathcal{H}^{\text{орб}} \otimes \mathcal{H}^{\text{спин}}$$

- прямое произведение.

**Определение 1.** *Прямым (тензорным) произведением пространств  $\varepsilon_a$  и  $\varepsilon_b$  называют  $n_a n_b$ -мерное пространство  $\varepsilon_a \oplus \varepsilon_b$ , базисными векторами которого являются векторы  $|a\mu b\nu\rangle = |a\mu\rangle |b\nu\rangle$ ,  $\mu = 1, 2, \dots, n_a; \nu = 1, 2, \dots, n_b$ .*

$\Psi_s$  - одна из компонент релятивистской волновой функции  $\Psi(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \dots \\ \Psi_N \end{pmatrix}$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \hat{H}_D \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (14.1.1)$$

- здесь  $\hat{H}_D$  - гамильтониан Дирака.

$$\hat{H}_D : E = \sqrt{c^2 \mathbf{p}^2 + m^2 c^4} \quad (14.1.2)$$

Получающееся уравнение первого порядка по времени ( $\frac{\partial}{\partial t}$ ), а значит, оно должно быть первого порядка и по координате ( $\frac{\partial}{\partial x}$ ).

$$\hat{p}_i = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i}$$

## 1.1 «Линеаризация корня»

Введем операторы  $\hat{\alpha}_i$  и  $\hat{\beta}$ .  
 $\hat{\alpha}_i (i = 1, 2, 3), \hat{\beta} \rightarrow (14.1.2)$ .

$$E_{N \times N} \hat{1} = \sqrt{c^2 \mathbf{p}^2 + m^2 c^4} \hat{1} = c \sum_{i=1}^3 \hat{\alpha}_i p_i + \hat{\beta} m c^2 \equiv c(\hat{\boldsymbol{\alpha}}, \mathbf{p}) + \hat{\beta} m c^2 \quad (14.1.3)$$

$\hat{\alpha}_i = ?$ ,  $\hat{\beta} = ?$

$$\begin{aligned} (14.1.3)^2 : E^2 \hat{1} &= (c^2 \mathbf{p}^2 + m^2 c^4) \hat{1} = \left\{ c \sum_{i=1}^3 \hat{\alpha}_i p_i + \hat{\beta} m c^2 \right\} \times \left\{ c \sum_{j=1}^3 \hat{\alpha}_j p_j + \hat{\beta} m c^2 \right\} = \\ &= c^2 \underbrace{\sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 (\hat{\alpha}_i, p_i) (\hat{\alpha}_j, p_j)}_{(I)} + m c^2 \sum_{i=1}^3 (\hat{\alpha}_i \hat{\beta} + \hat{\beta} \hat{\alpha}_i) p_i + \hat{\beta}^2 m^2 c^4 \end{aligned} \quad (14.1.4)$$

$$(I) : c^2 \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \frac{\hat{\alpha}_i \hat{\alpha}_j + \hat{\alpha}_j \hat{\alpha}_i}{2} p_i p_j$$

$$\begin{aligned} \{\hat{\alpha}_i, \hat{\alpha}_j\} &\equiv \hat{\alpha}_i \hat{\alpha}_j + \hat{\alpha}_j \hat{\alpha}_i = 2\delta_{ij} \hat{1} - \text{антикоммутиатор} \\ \{\hat{\alpha}_i, \hat{\beta}\} &\equiv \hat{\alpha}_i \hat{\beta} + \hat{\beta} \hat{\alpha}_i = 0, \quad \hat{\beta}^2 = \hat{1} = \hat{\alpha}_i^2 \end{aligned} \quad (14.1.5)$$

$$\boxed{\hat{H}_D = c(\hat{\boldsymbol{\alpha}}, \hat{\mathbf{p}}) + \hat{\beta} m c^2} \quad (14.1.6)$$

$\hat{H}_D = \hat{H}_D^\dagger \rightarrow \hat{\alpha}_i^\dagger = \hat{\alpha}_i \quad (i = 1, 2, 3), \quad \hat{\beta}^\dagger = \hat{\beta}$  - доказать самостоятельно.

Из (14.1.6)  $\hat{\alpha}_i$  и  $\hat{\beta}$  действуют в спиновом пространстве (иначе они были бы коммутативны).

$\mathcal{H}^{\text{спин}} = ?$

## 1.2 Матрицы Дирака и их свойства

Эрмитову матрицу можно привести к диагональному виду унитарным преобразованием.

$$\widehat{U}^\dagger \widehat{U} = \widehat{U} \widehat{U}^\dagger = \widehat{1}$$

- унитарность.

$$\widehat{\beta}' = \widehat{U} \widehat{\beta} \widehat{U}^\dagger = \text{diag}$$

Из (14.1.5)

$$\widehat{\alpha}_i^2 = \widehat{\beta}^2 = \widehat{1} \rightarrow \text{CЗ } \widehat{\alpha}_i, \widehat{\beta} - \pm 1$$

Напомним, как определяется след матрицы:  $\text{sp } \widehat{A} = \sum_i A_{ii}$ . Отсюда:

$$\text{sp } \widehat{A} \widehat{B} = \sum_i \sum_j A_{ij} B_{ji} = \sum_j \sum_i B_{ji} A_{ij} = \text{sp } \widehat{B} \widehat{A}$$

$$\widehat{\beta} \cdot \widehat{\alpha}_i \widehat{\beta} = -\widehat{\beta} \widehat{\alpha}_i$$

$$\widehat{\beta} \widehat{\alpha}_i \widehat{\beta} = -\widehat{\alpha}_i$$

$$\text{sp}(\widehat{\alpha}_i) = -\text{sp}(\widehat{\beta} \widehat{\alpha}_i \widehat{\beta}) = -\text{sp}(\widehat{\beta} \widehat{\beta} \widehat{\alpha}_i) = -\text{sp}(\widehat{\alpha}_i) \rightarrow \text{sp}(\widehat{\alpha}_i) = 0$$

Таким образом,  $\boxed{\text{sp } \widehat{\alpha}_i = 0}, i = 1, 2, 3, \boxed{\text{sp } \widehat{\beta} = 0}$ .

В случае матриц  $4 \times 4$ , явный вид матриц Дирака можно получить с использованием матриц Паули.

Матрицы Паули:

$$\widehat{\sigma}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \widehat{\sigma}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \widehat{\sigma}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Свойства матриц Паули:

$$\widehat{\sigma}_i^\dagger = \widehat{\sigma}_i, \quad \{\widehat{\sigma}_i, \widehat{\sigma}_j\} = 0 \quad (i \neq j, \widehat{\sigma}_i^2 = \widehat{1})$$

Тогда можно записать следующие выражения для матриц Дирака:

$$\boxed{\widehat{\alpha} = \begin{pmatrix} \widehat{0} & \widehat{\sigma} \\ \widehat{\sigma} & \widehat{0} \end{pmatrix}, \widehat{\beta} = \begin{pmatrix} \widehat{1} & \widehat{0} \\ \widehat{0} & -\widehat{1} \end{pmatrix}}$$

Теперь можно сказать, что  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  - четырехкомпонентный спинор  $\equiv$  дираковский спинор или биспинор.

## §2. Состояния с положительными и отрицательными энергиями

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \widehat{H}_D \Psi = (c(\widehat{\alpha}, \mathbf{p}) + \widehat{\beta} m c^2) \Psi \quad (14.2.1)$$

$E = \text{const}$  - стационарное состояние.

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \psi(\mathbf{r}),$$

где

$$\widehat{H}_D \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}) \quad (14.2.2)$$

**Упражнение 1.** Показать, что  $[\widehat{H}_D, \mathbf{p}] = 0$

Отсюда следует, что

$$\widehat{\mathbf{p}} \psi(\mathbf{r}) = \mathbf{p} \psi(\mathbf{r}), \quad (14.2.3)$$

то есть, мы знаем вид собственных функций.

$$\psi(\mathbf{r}) = \underbrace{u(\mathbf{p}, E)}_{\text{биспинор}} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}, \mathbf{r})} \quad (14.2.4)$$

- уравнение плоской волны.

$$\boxed{\Psi(\mathbf{r}, t) = u(\mathbf{p}, E) e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\mathbf{r} - Et)}$$

Подставим (14.2.4) в (14.2.2):

$$\{c(\widehat{\boldsymbol{\alpha}}, \mathbf{p}) + \widehat{\beta} mc^2\} u(\mathbf{p}, E) e^{\frac{i\mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar}} = E \widehat{1} u(\mathbf{p}, E) e^{\frac{i\mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar}}$$

Напомним вид матриц Дирака:

$$\widehat{\boldsymbol{\alpha}} = \begin{pmatrix} \widehat{0} & \widehat{\boldsymbol{\sigma}} \\ \widehat{\boldsymbol{\sigma}} & \widehat{0} \end{pmatrix}, \widehat{\beta} = \begin{pmatrix} \widehat{1} & \widehat{0} \\ \widehat{0} & -\widehat{1} \end{pmatrix}$$

Продолжим преобразования:

$$\{c(\widehat{\boldsymbol{\alpha}}, \mathbf{p}) + \widehat{\beta} mc^2\} u(\mathbf{p}, E) = E \widehat{1} u(\mathbf{p}, E)$$

Подставим матрицы Дирака:

$$\left[ c \begin{pmatrix} \widehat{0} & (\widehat{\boldsymbol{\sigma}}, \mathbf{p}) \\ (\widehat{\boldsymbol{\sigma}}, \mathbf{p}) & \widehat{0} \end{pmatrix} + mc^2 \begin{pmatrix} \widehat{1} & \widehat{0} \\ \widehat{0} & -\widehat{1} \end{pmatrix} - E \begin{pmatrix} \widehat{1} & \widehat{0} \\ \widehat{0} & \widehat{1} \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = 0,$$

где  $u(\mathbf{p}, E) = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}$ ,  $\varphi = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}$ ,  $\chi = \begin{pmatrix} u_3 \\ u_4 \end{pmatrix}$ .

Можно записать эту систему уравнений в виде:

$$c(\widehat{\boldsymbol{\sigma}}, \mathbf{p}) \chi = (E - mc^2) \widehat{1} \varphi \quad (14.2.5)$$

$$c(\widehat{\boldsymbol{\sigma}}, \mathbf{p}) \varphi = (E + mc^2) \widehat{1} \chi \quad (14.2.6)$$

В матричной виде:

$$\begin{pmatrix} (E - mc^2) \widehat{1} & -c(\widehat{\boldsymbol{\sigma}}, \mathbf{p}) \\ c(\widehat{\boldsymbol{\sigma}}, \mathbf{p}) & -(E + mc^2) \widehat{1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = 0$$

Условие существования ненулевых решений этой системы:

$$c^2(\widehat{\boldsymbol{\sigma}}, \mathbf{p})^2 - (E^2 - (mc^2)^2) \widehat{1} = 0$$

Надо определить  $(\widehat{\boldsymbol{\sigma}}, \mathbf{p})^2$ . Для этого воспользуемся результатом упражнения 6 из предыдущего семестра:

$$(\widehat{\boldsymbol{\sigma}}, \mathbf{A})(\widehat{\boldsymbol{\sigma}}, \mathbf{B}) = (\mathbf{A}, \mathbf{B}) \widehat{1} + i(\widehat{\boldsymbol{\sigma}}, [\mathbf{A}, \mathbf{B}])$$

Положим  $\mathbf{A} = \mathbf{B} = \mathbf{p} \rightarrow (\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \mathbf{p})^2 = p^2 \hat{1}$ .

В итоге получим условие разрешимости системы (14.2.5), (14.2.6):

$$E = \pm \sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4} = \xi \sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4} = \xi E_p, \quad (14.2.7)$$

где  $\xi = \pm 1$  - знак энергии.

Согласно уравнению Дирака, в квантовой релятивистской теории присутствуют состояния не только с положительными, но и с отрицательными энергиями (рис. 14.1).

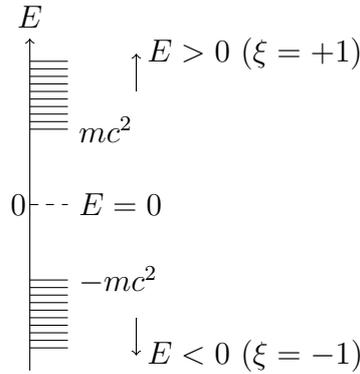


Рис. 14.1: Состояния с положительными и отрицательными энергиями.

$E < 0$  (отсутствуют основные состояния) - система неустойчива, так как электроны всегда могут перейти в состояние с меньшей энергией. (Дирак, 1930)

Чтобы устранить это противоречие, вводится понятие «моря Дирака»: все уровни с отрицательными энергиями заняты виртуальными частицами. Так как в системе электронов в одном и том же квантовом состоянии не может находиться более одного электрона, атомные электроны не могут переходить на уровни с отрицательными энергиями, система устойчива.

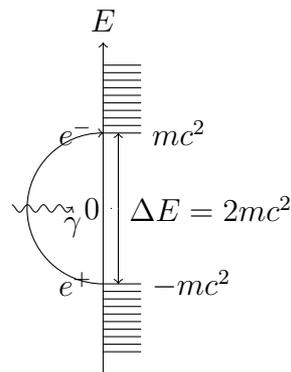


Рис. 14.2: Образование электрон-позитронной пары по действием  $\gamma$ -кванта.

$\Delta E = 2mc^2$  - порог образования электрон-позитронной пары (рис. 14.2). Она может образоваться под действием  $\gamma$ -кванта: электрон из «моря Дирака» перейдет в положительную энергетическую область, а на его месте образуется «дырка». Таким образом, Дирак предсказал существование позитрона.

Для частицы со спином  $\frac{1}{2}$ :

$$\Psi(\mathbf{r}, t), \quad (\xi = \pm 1) \times (m_s = \pm \frac{1}{2})$$

- 2 состояния с положительной энергией, 2 - с отрицательной.

### §3. Уравнение Дирака заряженной релятивистской частицы в электромагнитном поле. Уравнение Паули

$$A^i = (\Phi, \mathbf{A})$$

- четырехкомпонентный потенциал.

$$H(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = E = \sqrt{c^2 \left( \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right)^2 + m^2 c^4 + e\Phi(\mathbf{r}, t)},$$

где  $\mathbf{P} = \mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ .

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left[ c(\hat{\boldsymbol{\alpha}}, \left( \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)) + \hat{\beta} m c^2 + e\Phi \right] \Psi(\mathbf{r}, t)} \quad (14.3.1)$$

- уравнение Дирака для заряженной частицы во внешнем электромагнитном поле.

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

$$\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \equiv \hat{\mathcal{P}}$$

- оператор удлиненного импульса. Напомним, что мы считаем заряд электрона отрицательным:  $e < 0$ .

Перейдем к нерелятивистскому пределу в (14.3.1):

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \psi(\mathbf{r}) \rightarrow \left[ E - c(\hat{\boldsymbol{\alpha}}, \hat{\mathcal{P}}) - \hat{\beta} m c^2 - e\Phi \right] \psi(\mathbf{r}) = 0 \quad (14.3.2)$$

В (14.3.2)  $\psi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \varphi(\mathbf{r}) \\ \chi(\mathbf{r}) \end{pmatrix}$ .

Из (14.3.2):

$$(E - m c^2 - e\Phi)\varphi(\mathbf{r}) = c(\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \hat{\mathcal{P}})\chi(\mathbf{r}) \quad (14.3.3)$$

$$(E + m c^2 - e\Phi)\chi(\mathbf{r}) = c(\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \hat{\mathcal{P}})\varphi(\mathbf{r})$$

В (14.3.3) нерелятивистский предел + слабое поле.

$$E = m c^2 + \varepsilon,$$

где  $\varepsilon$  - полная нерелятивистская энергия и

$$|\varepsilon - e\Phi| \ll m c^2 \leftarrow \frac{|\varepsilon - e\Phi|}{m c^2} \sim \left( \frac{v}{c} \right)^2 \ll 1$$

Из (14.3.3)

$$(\varepsilon - e\Phi)\varphi(\mathbf{r}) = c(\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \hat{\mathcal{P}})\chi(\mathbf{r}) \quad (14.3.4)$$

$$(2m c^2 + \varepsilon - e\Phi)\chi(\mathbf{r}) = c(\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \hat{\mathcal{P}})\varphi(\mathbf{r}) \quad (14.3.5)$$

Из (14.3.5)

$$\chi(\mathbf{r}) \approx \frac{\not{\epsilon}(\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \hat{\mathcal{P}})}{2mc^2} \varphi(\mathbf{r}) \quad (14.3.6)$$

$E > 0$ :

$$\underbrace{\frac{|\chi(\mathbf{r})|}{|\varphi(\mathbf{r})|}}_{\text{«большой» или «верхний» спинор}} \sim \frac{p}{mc} \sim \frac{v}{c} \ll 1$$

При этом  $\chi(\mathbf{r})$  - «малый» или «нижний» спинор.

Подставим (14.3.6) в (14.3.4):

$$(\varepsilon - e\Phi)\varphi(\mathbf{r}) = \frac{1}{2m}(\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \hat{\mathcal{P}})(\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \hat{\mathcal{P}})\varphi(\mathbf{r}) \quad (14.3.7)$$

**Упражнение 1.** Доказать, что

$$(\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \hat{\mathcal{P}})(\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \hat{\mathcal{P}}) = \hat{\mathcal{P}}^2 \hat{1} - \frac{e\hbar}{c}(\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \vec{\mathcal{H}}),$$

где  $\vec{\mathcal{H}} = \text{rot}\mathbf{A}$ .

$$\left[ \frac{1}{2m}(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A})^2 - \frac{e\hbar}{2mc}(\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \vec{\mathcal{H}}) + e\Phi \right] \varphi(\mathbf{r}) = \varepsilon\varphi(\mathbf{r}) \quad (14.3.8)$$

- уравнение Паули.

При этом  $\frac{e\hbar}{2mc}(\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \vec{\mathcal{H}})$  описывает взаимодействие магнитного момента электрона с магнитным полем.

$$\varphi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix}$$

$$\xi = +1, \Lambda = \pm 1$$

- спиральность. Проекция спина на направление движения. Это дает 2 спиновых состояния частицы.

$$\xi = -1, \Lambda = \pm 1$$

- это дает 2 спиновых состояния античастицы.

$$-(\hat{\boldsymbol{\mu}}, \vec{\mathcal{H}}) = -\frac{e\hbar}{2mc}(\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \vec{\mathcal{H}}) = \mu_B(\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \vec{\mathcal{H}}),$$

здесь  $\mu_B = -\frac{e\hbar}{2mc}$  - магнетон Бора.

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = \frac{e\hbar}{2mc}\hat{\boldsymbol{\sigma}} = 2\left(\frac{e}{2mc}\right)\underbrace{\left(\frac{\hbar\hat{\boldsymbol{\sigma}}}{2}\right)}_{\hat{\mathbf{s}}} = 2 \times \underbrace{\left(\frac{e}{2mc}\right)}_{\text{гиромангнитное отношение}} \times \hat{\mathbf{s}} \quad (14.3.9)$$

Гипотеза Уленбека-Гаудсмита: магнитный момент связан с моментом частицы с  $g = 2$ .

## §4. Релятивистские поправки к уравнению Шредингера частицы во внешнем электромагнитном поле. Спин-орбитальное взаимодействие

$$e\Phi = U(\mathbf{r}) = -\frac{e^2}{r}, \quad \mathbf{A} = 0 \quad \vec{\mathcal{H}} = 0$$

Из (14.3.8)  $\frac{v}{c} \ll 1$ .

$$\left[ \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(\mathbf{r}) \right] \varphi(\mathbf{r}) = \varepsilon \varphi(\mathbf{r})$$

- уравнение Шредингера.

Точность здесь  $\left(\frac{v}{c}\right)^2$ .

$$\frac{v_{\text{отн}}}{c} \sim \frac{p}{mc} \sim \frac{e^2}{\hbar c} = \alpha = \frac{1}{137}$$

$\alpha$  - постоянная тонкой структуры.

Скорость электрона в атоме много меньше скорости света.

Из (14.3.5):

$$\chi(\mathbf{r}) = \frac{c(\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \hat{\mathbf{p}})}{2mc^2 + \varepsilon - e\Phi} \varphi(\mathbf{r}) \quad (14.4.1)$$

$$(2mc^2 + \varepsilon - e\Phi)^{-1} = \left\{ 2mc^2 \left( 1 + \underbrace{\left( \frac{\varepsilon - e\Phi}{2mc^2} \right)}_{\sim \frac{v^2}{c^2} \ll 1} \right) \right\}^{-1} = \frac{1}{2mc^2} \left( 1 - \frac{\varepsilon - e\Phi}{2mc^2} \right)$$

Из (14.3.4) и (14.4.1):

$$(\varepsilon - e\Phi) \varphi(\mathbf{r}) = (\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \hat{\mathbf{p}}) \chi(\mathbf{r}) = \left\{ \frac{\cancel{\mathcal{L}}(\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \hat{\mathbf{p}})}{2m\cancel{\mathcal{L}}} \left( 1 - \frac{\varepsilon - e\Phi}{2mc^2} \right) (\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \hat{\mathbf{p}}) \right\}$$

Как мы знаем,  $(\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \mathbf{p})^2 = \hat{\mathbf{p}}^2$ .

Тогда

$$\left[ \varepsilon - U(r) - \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} \right] \varphi(\mathbf{r}) = - \left[ (\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \hat{\mathbf{p}}) \left( \frac{\varepsilon - U(\mathbf{r})}{4m^2c^2} \right) (\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \hat{\mathbf{p}}) \right] \varphi(\mathbf{r}) \quad (14.4.2)$$

При этом  $\langle \varphi | \varphi \rangle \neq 1$ ,  $\left(\frac{v}{c}\right)^2 \ll 1$ .

Теперь  $\Psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}$ .

$$1 = \int d\mathbf{r} \Psi^\dagger \Psi = \int d\mathbf{r} (\varphi^\dagger \varphi + \chi^\dagger \chi),$$

где  $\varphi^\dagger = (\varphi_1^* \quad \varphi_2^*)$ .

Из (14.3.6):

$$\chi(\mathbf{r}) = \frac{(\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \hat{\mathbf{p}})}{2mc} \varphi(\mathbf{r})$$

$$\int d\mathbf{r} \left( \varphi^\dagger \varphi + \varphi^\dagger \frac{(\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \hat{\mathbf{p}})^\dagger (\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \hat{\mathbf{p}})}{2mc} \varphi \right) = 1$$

Заметим, что  $(\hat{\sigma}, \hat{\mathbf{p}})^\dagger = (\hat{\sigma}, \hat{\mathbf{p}})$  и  $(\hat{\sigma}, \hat{\mathbf{p}})^2 = \hat{\mathbf{p}}^2$ .

Тогда

$$\int d\mathbf{r} \varphi^\dagger \left( \hat{1} + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{4m^2c^2} \right) \varphi = 1$$

Получается, что  $\langle \varphi | \varphi \rangle \neq 1$ . Но если мы будем считать, что  $\langle \varphi | \varphi \rangle = 1$ , то

$$\left\langle \varphi \left| \left( \hat{1} + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{4m^2c^2} \right) \right| \varphi \right\rangle = 1 + \underbrace{\frac{v^2}{c^2}}_{\ll 1}$$

$$\left\langle \varphi \left| \left( \hat{1} + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m^2c^2} \right)^2 \right| \varphi \right\rangle = 1$$

- отличие от 1 со вторым порядком малости.

Введем спинор Паули  $\psi_\Pi$ :

$$\psi_\pi = \left( \hat{1} + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m^2c^2} \right) \varphi$$

Для спинора Паули выполняется:  $\langle \psi_\Pi | \psi_\Pi \rangle = 1$ . Можно получить, что:

$$\varphi = \left( \hat{1} - \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m^2c^2} \right) \psi_\Pi \quad (14.4.3)$$

**Упражнение 1.** Используя  $[\hat{\sigma}\hat{\mathbf{p}}, f(r)\hat{\sigma}\hat{\mathbf{p}}] = -i\hbar(\hat{\sigma}, \nabla f)(\hat{\sigma}, \hat{\mathbf{p}})$ , показать, что

$$(\hat{\sigma}, \hat{\mathbf{p}})U(r)(\hat{\sigma}, \hat{\mathbf{p}}) = U(r)\hat{\mathbf{p}}^2 - i\hbar(\nabla U(r), \hat{\mathbf{p}}) + \hbar\hat{\sigma}[\nabla U(r) \times \hat{\mathbf{p}}]$$

Подставим результат упражнения 1 в (14.4.2).

$$\left[ \varepsilon - U(r) - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \right] \varphi(\mathbf{r}) = \left[ -\frac{\varepsilon - U(r)}{4m^2c^2} \hat{\mathbf{p}}^2 + \frac{1}{4m^2c^2} (-i\hbar(\nabla U(r)\hat{\mathbf{p}}) + \hbar\hat{\sigma}[(\nabla U) \times \hat{\mathbf{p}}]) \right] \varphi(\mathbf{r})$$

С учетом (14.4.3) выразим  $\varphi(\mathbf{r})$ :

$$\begin{aligned} \left[ \varepsilon - U(r) - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \right] \psi_\Pi &= \left[ -\frac{\varepsilon - U(r)}{4m^2c^2} \hat{\mathbf{p}}^2 + \frac{1}{4m^2c^2} (\dots) \right] \psi_\Pi \\ (\dots) &= -i\hbar(\nabla U(r), \hat{\mathbf{p}}) + \hbar\hat{\sigma}[(\nabla U) \times \hat{\mathbf{p}}] \end{aligned} \quad (14.4.4)$$

$$\nabla U(r) = \frac{dU}{dr} \frac{\mathbf{r}}{r}; \quad \hbar\hat{\sigma}[(\nabla U) \times \hat{\mathbf{p}}] = \hbar \frac{1}{r} \frac{dU}{dr} \hat{\sigma}[\mathbf{r} \times \mathbf{p}]$$

$\mathbf{L} = \hbar\mathbf{l}$  - оператор орбитального момента частицы.

Продолжим равенство выше:

$$\hbar \frac{1}{r} \frac{dU}{dr} \hat{\sigma}[\mathbf{r} \times \mathbf{p}] = \hbar \frac{1}{r} \frac{dU}{dr} (\hat{\sigma}, \hat{\mathbf{L}}) = \frac{2}{r} \frac{dU}{dr} (\hat{\mathbf{S}}, \hat{\mathbf{L}})$$

Теперь правая часть (14.4.4) обретает вид:

$$\frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dU}{dr} (\hat{\mathbf{S}}, \hat{\mathbf{L}}) = \widehat{V}_{SO}$$

- оператор спин-орбитального взаимодействия.  
В поле ядра:

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

$$A_{SO}(r) = \frac{Ze^2\hbar^2}{2m^2c^2r^3} > 0$$

- коэффициент перед  $(\widehat{\mathbf{S}}, \widehat{\mathbf{L}})$  в операторе спин-орбитального взаимодействия для атома водорода.

Природа спин-орбитального взаимодействия. Рассмотрим электрон.

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{e}{mc} \hbar \widehat{\mathbf{S}}$$

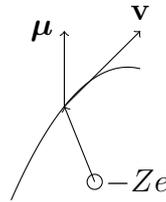


Рис. 14.3: К вопросу о спин-орбитальном взаимодействии.

$$\mathbf{L} = m[\mathbf{r} \times \mathbf{v}]$$

$$\mathbf{E} = -\nabla\Phi(r) = -\frac{d\Phi}{dr} \frac{\mathbf{r}}{r}$$

(см. Теорию поля)

$$\vec{\mathcal{H}} = \frac{1}{c} [\mathbf{E} \times \mathbf{v}]$$

$$\widehat{V}_m = -\mu \vec{\mathcal{H}} = \left(-\frac{e\hbar}{mc}\right) \frac{1}{r} \left(-\frac{1}{c} \frac{d\Phi}{dr}\right) (\widehat{\mathbf{S}}[\mathbf{p} \times \mathbf{v}]) = \underbrace{\frac{\hbar^2}{m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dU(r)}{dr}}_{\widehat{V}_{SO}}(\mathbf{s}, \mathbf{l})$$

Спин-орбитальное взаимодействие можно трактовать, как взаимодействие спина с магнитным полем ядра (рис. 14.3).

**Упражнение 2.** Доказать, что в пределах требуемой точности  $(\frac{v}{c})^2$ :

$$(\varepsilon - U(r))\widehat{\mathbf{p}}^2 = \frac{\widehat{\mathbf{p}}^4}{2m} - \hbar^2 \Delta U(r) - 2i\hbar(\nabla U(r), \widehat{\mathbf{p}})$$

Подставим результат упражнения 2 в (14.4.4):

$$\left[\varepsilon - U(r) - \frac{\mathbf{p}^2}{2m}\right] \psi_{\Pi} = \left[-\frac{\widehat{\mathbf{p}}^4}{8m^3c^2} + \frac{1}{8} \left(\frac{\hbar}{mc}\right)^2 \Delta U(r) + \widehat{V}_{SO}\right] \psi_{\Pi}$$

или

$$\left[ \varepsilon - U(r) - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \right] \psi_{\Pi} = \widehat{V}_{\text{кв. рел.}} \psi_{\Pi}$$

где

$$\widehat{V}_{\text{кв. рел.}} = \widehat{V}_1 + \widehat{V}_2 + \widehat{V}_{SO} \quad (14.4.5)$$

$\left(\frac{v}{c}\right)^2$  - квазирелятивистское приближение.

$V_1 = -\frac{\widehat{\mathbf{p}}^4}{8m^3c^2}$  - релятивистская поправка к параметру потенциальной энергии.

$$K = \sqrt{m^2c^4 + c^2p^2} - mc^2 = mc^2 \left(1 + \frac{\widehat{\mathbf{p}}^2}{m^2c^2}\right)^{1/2} - mc^2 \approx mc^2 \left(1 + \frac{\widehat{\mathbf{p}}^2}{2m^2c^2} - \frac{\widehat{\mathbf{p}}^4}{8m^2c^4}\right) - mc^2 = \frac{\widehat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{\widehat{\mathbf{p}}^4}{8m^3c^2}$$

$$\widehat{V}_2 = \frac{1}{8} \left(\frac{\hbar}{mc}\right)^2 \Delta U(r)$$

- оператор контактного взаимодействия электрона с ядром

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{r} \rightarrow \Delta U(r) = -Ze^2 \Delta \left(\frac{1}{r}\right) = 4\pi Ze^2 \delta(\mathbf{r})$$

$$\widehat{V}_2 = \frac{\pi}{2} \left(\frac{\hbar}{mc}\right)^2 Ze^2 \delta(\mathbf{r}) \rightarrow \langle \widehat{V}_2 \rangle \neq 0, \mathbf{r} = 0$$

Таким образом, получаем:

$$\langle \widehat{V}_2 \rangle \sim |\psi(0)|^2 \neq 0$$

Вспомним, что  $R_{nl}(r) \sim r^l$ ,  $l = 0$ , т.е. для s-состояний:  $\langle \widehat{V}_{SO} \rangle$  и  $\langle (\widehat{\mathbf{s}}, \widehat{\mathbf{l}}) \rangle \neq 0$  при  $l \neq 0$ .



# Глава 15

## Сложение моментов

### §1. Сложение моментов

Пусть есть два момента  $j_1$  и  $j_2$ , а пространство представимо в виде:  $\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}$ .  $[\hat{j}_{1\alpha}, \hat{j}_{2\beta}] = 0$  при  $\alpha, \beta = x, y, z$ , так как моменты действуют в разных подпространствах.

Как мы уже знаем,

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{j}}_1^2 |j_1 m_1\rangle &= j_1(j_1 + 1) |j_1 m_1\rangle \\ \hat{j}_{1z} |j_1 m_1\rangle &= m_1 |j_1 m_1\rangle,\end{aligned}$$

где  $m_1 = -j_1, -j_1 + 1, \dots, j_1 - 1, j_1$ .

Аналогично

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{j}}_2^2 |j_2 m_2\rangle &= j_2(j_2 + 1) |j_2 m_2\rangle \\ \hat{j}_{2z} |j_2 m_2\rangle &= m_2 |j_2 m_2\rangle,\end{aligned}$$

где  $m_2 = -j_2, -j_2 + 1, \dots, j_2 - 1, j_2$ .

Размерность пространства  $\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}$  равна  $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ .

Введем оператор полного углового момента для систем 1 и 2:

$$\hat{\mathbf{j}} = \hat{\mathbf{j}}_1 + \hat{\mathbf{j}}_2$$

Перейдем от базиса  $|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle$  к базису  $|j m j_1 j_2\rangle$ .

**Упражнение 1.** Доказать, что это можно сделать, т.е. что  $\hat{\mathbf{j}}^2, \hat{j}_z, \hat{\mathbf{j}}_1^2, \hat{\mathbf{j}}_2^2$  взаимно коммутируют.

Рассмотрим базис  $\{|j m j_1 j_2\rangle\}$ .

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{j}}_1^2 |j m j_1 j_2\rangle &= \lambda_1 |j m j_1 j_2\rangle \\ \hat{\mathbf{j}}_2^2 |j m j_1 j_2\rangle &= \lambda_2 |j m j_1 j_2\rangle \\ \hat{\mathbf{j}}^2 |j m j_1 j_2\rangle &= j(j + 1) |j m j_1 j_2\rangle \\ \hat{j}_z |j m j_1 j_2\rangle &= m |j m j_1 j_2\rangle,\end{aligned}$$

где  $\lambda_1, \lambda_2, j(j + 1), m$  требуется найти.

Дано:  $j_1, j_2, |j_1 m_1\rangle, |j_2 m_2\rangle$ .

Найти:  $j, \lambda_1, \lambda_2, |jm\rangle$  - собственные векторы.

$j$  - целое или полуцелое число.

$m = -j, -j + 1, \dots, j - 1, j$ .

## §2. Коэффициенты Клебша-Гордана. Полный угловой момент.

$$|jm j_1 j_2\rangle = \sum_{m_1, m_2} C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{jm} |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle \quad (15.2.1)$$

$C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{jm}$  - коэффициенты Клебша-Гордана.

Из (15.2.1):

$$\lambda_1 = j_1(j_1 + 1)$$

$$\lambda_2 = j_2(j_2 + 1)$$

$$1) \hat{j}_z = \hat{j}_{1z} + \hat{j}_{2z}.$$

$$m |jm\rangle = \sum_{m_1, m_2} C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{jm} (m_1 + m_2) |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle \quad (15.2.2)$$

Сравнивая (15.2.1) и (15.2.2), получим, что  $C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{jm} = 0, m \neq m_1 + m_2$ .

$$C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{jm} \neq 0, \text{ если } m = m_1 + m_2$$

$$|jm\rangle = \sum_{m_1} C_{j_1 m_1 j_2 m - m_1}^{jm} |j_1 m_1\rangle |j_2 m - m_1\rangle \quad (15.2.3)$$

$$2) m_{max} = j_{max} = m_{1max} + m_{2max} = j_1 + j_2.$$

Тогда  $j = j_{max}, m = m_{max} = j_{max}, m_1 = j_1, m_2 = j_2$ .

Из (15.2.1):

$$|j_{max} j_{max}\rangle = C_{j_1 j_1 j_2 j_2}^{j_1+j_2, j_1+j_2} |j_1 j_1\rangle |j_2 j_2\rangle$$

$$\langle j_{max} j_{max} | j_{max} j_{max} \rangle = 1 \rightarrow C_{j_1 j_1 j_2 j_2}^{j_1+j_2, j_1+j_2} = 1$$

$$3) j_{min} - ?$$

Применим векторную модель сложения моментов (см. § 31 т. III Л.Л.).

$$\hat{\mathbf{j}} = \hat{\mathbf{j}}_1 + \hat{\mathbf{j}}_2$$

$$j_{min} = |j_1 - j_2|$$

Пусть  $j_1 > j_2$ . Тогда  $j_{min} = j_1 - j_2$ .

$$\sum_{j=j_1-j_2}^{j_1+j_2} (2j+1) = 2 \sum_{j=j_1-j_2}^{j_1+j_2} j + \sum_{j=j_1-j_2}^{j_1+j_2} 1 = (2j_1+1)(2j_2+1)$$

---

- размерность  $\mathcal{H}$ .

Таким образом,  $|jmj_1j_2\rangle$  - система собственных векторов операторов  $\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_z, \hat{\mathbf{J}}_1^2, \hat{\mathbf{J}}_2^2$ .

$$\boxed{j = |j_1 - j_2|, |j_1 - j_2| + 1, \dots, j_1 + j_2} \quad (15.2.4)$$

- правило сложения моментов.

$$m = -j, -j + 1, \dots, j - 1, j$$

Остальные коэффициенты Клебша-Гордана можно получить, используя повышающий и понижающий операторы:

$$\hat{j}_- = \hat{j}_x - i\hat{j}_y = \hat{j}_{1x} + \hat{j}_{2x} - i\hat{j}_{1y} - i\hat{j}_{2y} = \hat{j}_{1-} + \hat{j}_{2-}$$

и учитывая, что  $C_{j_1 j_1 j_2 j_2}^{j_1+j_2 j_1+j_2} = 1$ .



# Глава 16

## Тождественные частицы

### §1. Симметрия волновой функции системы тождественных частиц. Бозоны и фермионы

[картинка]

В квантовой механике частицы теряют свою индивидуальность.

Пусть система из  $N$  тождественных частиц характеризуется одной волновой функцией:

$$N \quad \Psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N), \quad \xi_i = (\mathbf{r}_i, \sigma_i)$$

Принцип тождественности или неразличимости частиц: состояние системы тождественных частиц не меняется при обмене частиц местами.

Введем  $\hat{P}$  - оператор перестановки произвольной пары тождественных частиц (от англ. permutation).

Пусть  $\hat{P}$  меняет местами первую и вторую частицы.

$$\begin{aligned} \hat{P}\Psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) &\equiv \Psi(\xi_2, \xi_1, \dots, \xi_N) \\ \hat{P}\Psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) &= \Psi(\xi_2, \xi_1, \dots, \xi_N) = P\Psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) \end{aligned} \quad (16.1.1)$$

$P$  - собственное значение оператора перестановки.

Подействуем  $\hat{P}$  на (16.1.1):

$$\begin{aligned} \hat{P}^2\Psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) &= \hat{P}\Psi(\xi_2, \xi_1, \dots, \xi_N) = \Psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) = \\ &= \hat{P}P\Psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) = P^2\Psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) \end{aligned}$$

Отсюда получаем  $P^2 = 1$ , т.е.  $P = \pm 1$ .

а) Если  $P = +1$ , то  $\Psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) = \Psi(\xi_2, \xi_1, \dots, \xi_N)$  - симметричная волновая функция относительно перестановки частиц.

б) Если  $P = -1$ , то  $\Psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) = -\Psi(\xi_2, \xi_1, \dots, \xi_N)$  - антисимметричная волновая функция относительно перестановки частиц.

а) Такая частица называется бозоном (подчиняется статистике Бозе-Эйнштейна). Бозоны имеют симметричную волновую функцию и обладают целым спином ( $s = 0$  включается).

б) Такая частица называется фермионом (подчиняется статистике Ферми-Дирака). Фермионы имеют антисимметричную волновую функцию и обладают полуцелым спином.

---

## §2. Детерминант Слэтера. Принцип Паули

Пусть есть система из  $N$  тождественных фермионов, которые слабо взаимодействуют между собой (взаимодействия можно описывать в гамильтониане  $\hat{H}$  по теории возмущений).

В нулевом порядке ТВ:

$$\hat{H} = \sum_{i=0}^N \hat{H}_i$$

Пусть  $\{\psi_{n_i}(\xi_i)\}$  - полная система собственных функций  $\hat{H}_i$ .

$n_i$  - мультииндекс. Мультииндекс - полный набор квантовых чисел  $i$ -го фермиона.

$$\Psi(\xi_1, \dots, \xi_N) = \psi_{n_1}(\xi_1) \cdot \dots \cdot \psi_{n_N}(\xi_N) \quad (16.2.1)$$

Пусть  $\Psi^A$  - антисимметричная волновая функция. Она равна:

$$\Psi^A(\xi_1, \dots, \xi_N) = \frac{1}{\sqrt{(N!)}} \begin{vmatrix} \psi_{n_1}(\xi_1) & \psi_{n_2}(\xi_1) & \dots & \psi_{n_N}(\xi_1) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \psi_{n_1}(\xi_N) & \psi_{n_2}(\xi_N) & \dots & \psi_{n_N}(\xi_N) \end{vmatrix} \quad (16.2.2)$$

- детерминант Слэтера.

**Упражнение 1.** Из условия ортонормированности одночастичных волновых функций:

$$\int \psi_{n_i}^*(\xi_k) \psi_{n_j}(\xi_k) d\xi_k = \delta_{n_i n_j}$$

и

$$\langle \psi_n | \psi_n \rangle = 1$$

получить нормировочный множитель в (16.2.2).

Принцип запрета Паули: два и более фермиона не могут находиться в одном и том же квантовом состоянии.

# Глава 17

## Атом гелия

### §1. Атом гелия. Спиновые функции двух электронов. Пара- и ортосостояния

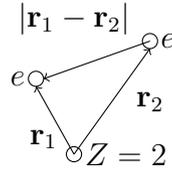


Рис. 17.1: Атом гелия.

Запишем гамильтониан для атома гелия:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_1} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \quad (17.1.1)$$

$$\hat{H}\Psi(\xi_1, \xi_2) = E\Psi(\xi_1, \xi_2) \quad (17.1.2)$$

Мы находимся в рамках релятивистского приближения  $(\frac{v}{c})^2 \ll 1$ .

$$\Psi(\xi_1, \xi_2) = \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\chi(\sigma_1, \sigma_2)$$

Из главы XVI, §1:

$$\Psi_1 = \Phi^S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\chi^A(\sigma_1, \sigma_2)$$

$$\Psi_2 = \Phi^A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\chi^S(\sigma_1, \sigma_2)$$

Из упр. 2 II задания мы знаем собственные функции системы из двух частиц со спинами  $\frac{1}{2}$ .

$$s_1 = \frac{1}{2}, \quad s_2 = \frac{1}{2} \quad \hat{\mathbf{s}} = \hat{\mathbf{s}}_1 + \hat{\mathbf{s}}_2$$

Из правила (15.2.4):

$$s = |s_1 - s_2|, |s_1 - s_2| + 1, \dots, s_1 + s_2$$

В нашем случае  $s = 0, 1$ .

Найдем собственные векторы  $|ss_z\rangle$  операторов  $\hat{\mathbf{s}}^2, \hat{s}_z, \hat{\mathbf{s}}_1^2, \hat{\mathbf{s}}_2^2$ .

$$s = 0, s_z = 0 \text{ или } s = 1, s_z = -1, 0, 1$$

Выпишем собственные функции:

$$\chi(0, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2))$$

- синглетная спиновая волновая функция «S».

$$\chi(1, 1) = \alpha(1)\alpha(2)$$

$$\chi(1, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2))$$

$$\chi(1, -1) = \beta(1)\beta(2)$$

- триплетная спиновая волновая функция «Т».

$\chi^S(\sigma_1, \sigma_2)$  - симметричная волновая функция,  $s = 1$ .

$\chi^A(\sigma_1, \sigma_2)$  - антисимметричная волновая функция,  $s = 0$ .

Состояние с  $s = 0$  - парагелий - синглетные уровни.

Состояние с  $s = 1$  - ортогелий - триплетные уровни.

Переход между парагелием и ортогелием запрещен правилами отбора т.к.  $\Delta S \neq 0$ .

В макроскопическом масштабе гелий – «два индивидуальных вещества».

## §2. Обменное взаимодействие

В (17.1.2)

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}^{(0)} + \hat{V} \\ \hat{H}^{(0)} &= \hat{H}_1 + \hat{H}_2 \\ \hat{H}_i &= \frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_i} \\ \hat{V} &= \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \end{aligned}$$

$\nu_1 = (n_1, l_1, m_1)$ ,  $\nu_2 = (n_2, l_2, m_2)$  - мультииндексы.

Если  $\nu_1 \neq \nu_2$ , то такие электроны называются неэквивалентными.

Если  $\nu_1 = \nu_2$ , то такие электроны называются эквивалентными.

Запишем пространственную часть волновой функции.

$$\begin{aligned} \Phi^{A,S}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \varphi_{\nu_1}(\mathbf{r}_1)\varphi_{\nu_2}(\mathbf{r}_2) \mp \varphi_{\nu_2}(\mathbf{r}_1)\varphi_{\nu_1}(\mathbf{r}_2) \}, \quad \nu_1 \neq \nu_2 \\ \Phi^S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \varphi_{\nu}(\mathbf{r}_1)\varphi_{\nu}(\mathbf{r}_2), \quad \nu_1 = \nu_2 = \nu \end{aligned} \quad (17.2.1)$$

Воспользуемся выводами §1 главы XVI. Возможные волновые функции:

$$\underbrace{\Phi^S \chi(0, 0)}_{s=0} \quad \underbrace{\Phi^A \chi(1, 1) \quad \Phi^A \chi(1, 0) \quad \Phi^A \chi(1, -1)}_{s=1} \quad (17.2.2)$$

Запишем энергию в нулевом порядке ТВ:

$$E_{\nu_1, \nu_2}^{(0)} = E_{\nu_1} + E_{\nu_2} = E_{n_1} + E_{n_2}$$

Если  $\nu_1 = \nu_2 = \nu$ , то  $\Phi^A \equiv 0$  и возмущение дает сдвиг для  $E_{\nu\nu}^{(1)}$ .

Если  $\nu_1 \neq \nu_2$ , то

$$E_{\nu_1 \nu_2}^{(1)} = \langle \Phi^{A,S} | \widehat{V} | \Phi^{A,S} \rangle = J_{\nu_1 \nu_2} \pm K_{\nu_1 \nu_2} \quad (17.2.3)$$

Знак + соответствует  $s = 0$ , - -  $s = 1$ .

$$J_{\nu_1 \nu_2} = \int \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 |\varphi_{\nu_1}(\mathbf{r}_1)|^2 \left| \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right| |\varphi_{\nu_2}(\mathbf{r}_2)|^2 = \int \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 |\varphi_{\nu_1}(\mathbf{r}_1)|^2 \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \cdot |\varphi_{\nu_2}(\mathbf{r}_2)|^2 \quad (17.2.4)$$

- кулоновский интеграл.  $e\rho_{\nu_1}(\mathbf{r}_1) \times e\rho_{\nu_2}(\mathbf{r}_2)$  ( $e < 0$ ).

$$J_{\nu_1 \nu_2} > 0$$

$$\begin{aligned} K_{\nu_1 \nu_2} &= \int \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \varphi_{\nu_1}^*(\mathbf{r}_1) \varphi_{\nu_2}(\mathbf{r}_1) \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \varphi_{\nu_2}^*(\mathbf{r}_2) \varphi_{\nu_1}(\mathbf{r}_2) = \\ &= \int \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \varphi_{\nu_2}^*(\mathbf{r}_1) \varphi_{\nu_1}(\mathbf{r}_1) \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \varphi_{\nu_1}^*(\mathbf{r}_2) \varphi_{\nu_2}(\mathbf{r}_2) \end{aligned} \quad (17.2.5)$$

- обменный интеграл.

$$K_{\nu_1 \nu_2} > 0$$

(доказательство в п. 15.43 [4]).

Из (17.2.3):

$$\begin{aligned} E_{\nu\nu}^{(1)} &= J_{\nu\nu} \\ E_{\nu_1 \nu_2}^{(1), s=0} &= J_{\nu_1 \nu_2} + K_{\nu_1 \nu_2} \\ E_{\nu_1 \nu_2}^{(1), s=1} &= J_{\nu_1 \nu_2} - K_{\nu_1 \nu_2} \end{aligned}$$



# Глава 18

## СЛОЖНЫЙ атом

### §1. Вариационный принцип вычисления энергии основного состояния

Пусть для системы с гамильтонианом  $\hat{H}$  задача решена, то есть найдены значения энергии  $E_n$  и волновые функции  $\Psi_n$ , такие что:

$$\hat{H}\Psi_n = E_n\Psi_n, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Волновые функции  $\Psi_n$  ортонормированы,

$$\langle \Psi_n | \Psi_m \rangle = \delta_{nm}$$

и образуют полный базис.

$N \geq 2$

Рассмотрим произвольную волновую функцию  $\Phi$ , нормированную на единицу:

$$\langle \Phi | \Phi \rangle = 1$$

её разложение по базису  $\Psi_n$  имеет вид:

$$\Phi = \sum_n a_n \Psi_n$$

В силу условий нормировки для коэффициентов  $a_n$  имеем:

$$\sum_n |a_n|^2 = 1$$

Оценим среднюю энергию  $\langle E \rangle$  системы в состоянии, описываемой произвольной волновой функцией  $\Phi$ :

$$\langle E \rangle \equiv \langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle \equiv \mathcal{E}[\Phi] = \sum_n \sum_m \langle a_n \Psi_n | \hat{H} | a_m \Psi_m \rangle = \sum_n \sum_m a_n^* a_m E_m \delta_{nm} = \sum_n |a_n|^2 E_n \quad (18.1.1)$$

В (18.1.1)  $E_1, E_2, \dots \rightarrow E_0, \quad E_n \geq E_0$  при  $\forall n$

$$\boxed{\mathcal{E}[\Phi] \geq E_0 \sum_n |a_n|^2 = E_0} \quad (18.1.2)$$

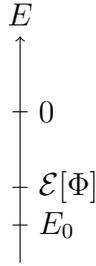


Рис. 18.1: Соотношение между энергиями.

Средние значения, вычисленные с пробными функциями  $\Phi$ , являются оценками сверху для точной энергии основного состояния (рис. 18.1).

Если  $\Phi = \Psi_0$ , то  $\mathcal{E}[\Psi_0] = E_0$ .

Другая формулировка:

$$\mathcal{E}[\Phi] \rightarrow \min \quad (18.1.3)$$

Метод вариационного исчисления:

$$\delta\mathcal{E} = 0 \quad \forall \delta\Phi : \langle \Phi | \Phi \rangle = 1 \quad (18.1.4)$$

1. Выбирается пробная функция  $\Phi = \Phi(q, \alpha_1, \alpha_2 \dots)$ , зависящая от полного набора координат  $q$  и вариационных параметров  $\alpha_i$ ;
2. Вычисляется средняя энергия в состоянии, описываемом данной функцией:

$$\langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle = \mathcal{E}(\alpha_1, \alpha_2 \dots)$$

3. Минимизируем  $E$  по вариационным параметрам:

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \alpha_1} = 0, \quad \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \alpha_2} = 0, \dots$$

Находим соответствующие  $\alpha_i^0$ .

После этого можно утверждать, что функция  $\Phi(q, \alpha_1^0, \alpha_2^0, \alpha_2^0 \dots)$  есть наилучшее приближение к  $\Psi_0(q)$  в выбранном классе функций. (см. задачи 2 и 3 из II задания)

В (§2.):  $\nu = 1s$ ,  $S = 0 \uparrow\downarrow$

$$\Phi_{g.s}^S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \varphi_{1s}(\mathbf{r}_1)\varphi_{1s}(\mathbf{r}_2) = \frac{1}{\pi} \left( \frac{Z}{a} \right)^3 e^{-\frac{Z(r_1+r_2)}{a}} \quad (18.1.5)$$

— отсутствуют вариационные параметры.

Эффективный заряд  $\tilde{Z} < Z = 2$

$$\Phi_{g.s}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = C e^{-\frac{\tilde{Z}(r_1+r_2)}{a}} \quad (18.1.6)$$

$$\langle \Phi_{g.s}^S | \hat{H} | \Phi_{g.s}^S \rangle = \mathcal{E}(\tilde{Z})$$

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \tilde{Z}} = 0 \rightarrow \tilde{Z} = Z - \frac{5}{16}$$

— задача 3а из второго задания. В задаче 3б два вариационных параметра:  $\alpha$  и  $\beta$ .

## §2. Метод Хартри-Фока. Приближения центрального поля. Электронные конфигурации

$N$  электронов, заряд  $-Ze$  ( $e < 0$ )

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left( \frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_i} \right) + \sum_{i<j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \quad (18.2.1)$$

Эффективное среднее поле — метод Хартри-Фока (1928-1930).

1.

$$\mathcal{E} [\{\psi_{\{n_j\}}(\xi_i)\}] = \langle \Psi^{HF} | \hat{H} | \Psi^{HF} \rangle \quad (18.2.2)$$

2.  $\psi_{\{n_j\}}(\xi_i)$  - спин-орбиталь,  $\Psi^{HF}(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) = \text{Slater determinant}$  (см. (16.2.2))

3.

$$\mathcal{E} [\{\psi_{\{n_j\}}(\xi_i)\}] = \min \forall \delta \psi_{\{n_j\}}(\xi_i)$$

Система из  $N$  уравнений  $\rightarrow$  уравнения Хартри-Фока. Каждое из них описывает движение выделенного  $i$ -го электрона в некотором эффективном среднем поле  $U_{cc}(\mathbf{r}_i)$ , созданным ядром и остальными электронами атома.

$U_{cc}(\mathbf{r}_i)$  — центральное, самосогласованное поле (ССП, SCF).

Из (18.2.1):

$$\hat{H} = \underbrace{\sum_{i=1}^N \left( \frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m} + U_{cc}(\mathbf{r}_i) \right)}_{\hat{H}^{(0)}} + \hat{V}$$

где  $\hat{H}^{(0)}$  — центральная, а  $\hat{V}$  — нецентральная части гамильтониана:

$$\hat{V} = \sum_{i<j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} + \sum_{i=1}^N \left( -\frac{Ze^2}{r_i} - U_{cc}(\mathbf{r}_i) \right)$$

Пусть поле центрально-симметрично:  $U_{cc}(\mathbf{r}_i) = U_{cc}(r_i)$

$$U_{cc}(r_i) = \begin{cases} -\frac{Ze^2}{r_i}, & r_i \rightarrow 0 \\ -\frac{(Z-(N-1))e^2}{r_i}, & r_i \rightarrow \infty \end{cases}$$

В сложных атомах энергия зависит от  $n$  и  $l$  ( $E_{nl}$ ), то есть вырождение по  $l$  снимается.

$$\psi_{\{n_j\}}(\xi_i) = R_{n_j l_j}(r_i) Y_{l_j m_j}(\theta_i, \varphi_i) \chi_{\frac{1}{2}} \lambda_j(\sigma_i)$$

**Определение 1.** Совокупность состояний с заданными  $n$  и  $l$  называется электронной оболочкой атома.

Таких состояний  $2(2l+1)$ .

**Определение 2.** Электроны, находящиеся в состояниях с одинаковыми  $n$  и  $l$ , называются эквивалентными.

Например, в основном состоянии  $He$  его электронная конфигурация  $1s^2$ , в первом возбужденном —  $1s^1 2s^1$ .

**Определение 3.** Распределение электронов по электронным оболочкам называется электронной конфигурацией.

$$\begin{aligned}
 M_L &= \sum_{i=1}^{2(2l+1)} m_i = 2 \sum_{i=-l}^l m_i = 0 \\
 M_S &= \sum_{i=1}^{2(2l+1)} m_{si} \\
 \hat{\mathbf{L}} &= \sum_{i=1}^N \hat{\mathbf{l}}_i \\
 \hat{\mathbf{S}} &= \sum_{i=1}^N \hat{\mathbf{s}}_i
 \end{aligned} \tag{18.2.3}$$

### §3. Интегральное движение в сложных атомах. Термы. Правила Хунда

**Упражнение 1.** Доказать, что  $\hat{\mathbf{L}}$  и  $\hat{\mathbf{S}}$  коммутируют с  $\hat{H}$  (18.2.1).

Для операторов  $\hat{H}$ ,  $\hat{\mathbf{L}}^2$ ,  $\hat{L}_z$ ,  $\hat{\mathbf{S}}^2$ ,  $\hat{S}_z$  собственными векторами будут  $|LM_LSM_S\rangle$ . Энергия задается выражением:

$$E = E(S, L) = \langle LM_LSM_S | \hat{H} | LM_LSM_S \rangle$$

Уровни энергии сложного атома называются термами.

Термы обозначаются:  $\boxed{2s+1L}$ .

$2s + 1$  - мультиплетность.

Кратность вырождения терма равна  $(2s + 1)(2l + 1)$ .

Различные значения орбитального момента обозначаются буквами:

$$\begin{array}{cccc}
 L = & 0 & 1 & 2 & \dots \\
 & & s & p & d & \dots
 \end{array}$$

Полный момент задается формулой:

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}} \tag{18.3.1}$$

Из (15.2.4):

$$J = |L - S|, |L - S| + 1, \dots, L + S$$

Если мы хотим учесть спин-орбитальное взаимодействие, то правильной системой собственных векторов будет  $\{|JM_JLS\rangle\}$ , общая для операторов  $\hat{H}$ ,  $\hat{\mathbf{J}}^2$ ,  $\hat{J}_z$ ,  $\hat{\mathbf{L}}^2$ ,  $\hat{\mathbf{S}}^2$

$$\hat{H}^{SO} = \hat{H} \Big|_{(18.2.1)} + \hat{V}^{SO},$$

где  $\hat{V}^{SO} = A(\mathbf{L}, \mathbf{S})$ .

**Упражнение 2.** Доказать, что  $[\widehat{V}^{SO}, \widehat{L}_z] \neq 0$  и  $[\widehat{V}^{SO}, \widehat{S}_z] \neq 0$ .

Для проекции полного момента верно:

$$\widehat{J}_z = \widehat{L}_z + \widehat{S}_z$$

Для такой системы собственных векторов терм записывается:  $\boxed{{}^{2s+1}L_J}$ .

При каких  $J, L, S$  энергия достигает минимума?

Ответ дают правила Хунда (1925):

1. Для заданной электронной конфигурации наименьшей энергией обладает терм с наибольшим возможным значением  $S$  и наибольшим (возможным при этом  $S$ ) значением  $L$ .
2. Минимальной энергией обладает терм с  $J = |L - S|$ , если оболочка заполнена менее, чем наполовину, и с  $J = L + S$  в противном случае.

## §4. $LS$ -связь. Тонкая структура уровней. Правило интервалов Ланде

(18.2.3) - (18.3.1) –  $LS$ -связь (связь Рассела-Саундреса).

Термы:  ${}^{2s+1}L_J$ .

Спин-орбитальное взаимодействие можно рассматривать, как возмущение:

$$|V_{SO}| \ll \Delta E_T, \quad (18.4.1)$$

где  $\Delta E_T$  - разность энергий между соседними термами.

Для тяжелых элементов существенны релятивистские эффекты:

$$\frac{v_s \text{ электрона}}{c} \sim \alpha Z = \frac{Z}{137}$$

Эти эффекты становятся существенны около никеля ( $Z = 28$ ).

Вычислим интервалы тонкой структуры:

$$\widehat{V}_{SO} = A(\widehat{\mathbf{L}}, \widehat{\mathbf{S}})$$

Кратность вырождения  $(2s + 1)(2l + 1)$ .

Рассмотрим вырождение по  $J$ . Если  $L > S$ , то уровней  $2S + 1$ , а если  $S > L$ , то уровней  $2L + 1$ .

Из (18.3.1):

$$\widehat{\mathbf{J}}^2 = \widehat{\mathbf{L}}^2 + \widehat{\mathbf{S}}^2 + 2\widehat{\mathbf{L}}\widehat{\mathbf{S}}$$

Подставим это выражение в  $\widehat{V}_{SO}$ .

$$\widehat{V}_{SO} = A \frac{\widehat{\mathbf{J}}^2 - \widehat{\mathbf{L}}^2 - \widehat{\mathbf{S}}^2}{2} \quad (18.4.2)$$

Найдем поправку к энергии, обусловленную спин-орбитальным взаимодействием:

$$\Delta E_J = \langle JM_J LS | \widehat{V}_{SO} | JM_J LS \rangle = A \frac{J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)}{2}$$

Это выражение не зависит от  $M_J$ , т.е. вырождение снимается не полностью. Каждый такой уровень является  $(2J + 1)$  - кратно-вырожденным.

Найдем расстояние между соседними по  $J$  уровнями:

$$\Delta E_{J,L,S} - \Delta E_{J-1,L,S} = \frac{A}{2} \{J(J+1) - J(J-1)\} = AJ \quad (18.4.3)$$

- правило интервалов Ланде (1923).

Компонентами тонкой структуры называются термы расщепленного состояния.

## §5. Гамильтониан сложного атома в магнитном поле

Запишем выражение для векторного потенциала в виде:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}[\vec{\mathcal{H}} \times \mathbf{r}],$$

где  $\operatorname{div} \mathbf{A} = 0$ .

Из (14.3.2)

$$\hat{H}(i) = \frac{1}{2m} \left( \hat{\mathbf{p}}_i - \frac{e}{c} \mathbf{A}_i \right)^2 - \frac{e\hbar}{mc} \left( \hat{\mathbf{s}}_i \cdot \vec{\mathcal{H}} \right) + U(\mathbf{r}_i), \quad (18.5.1)$$

где  $\mathbf{A}_i = \mathbf{A}(\mathbf{r}_i)$ ,  $\mu_B = -\frac{e\hbar}{2mc}$  - магнетон Бора. Напомним, что мы считаем  $e < 0$ .

Электроны находятся в поле ядра, а также отталкиваются друг от друга. Этим эффектам соответствует  $U(\mathbf{r}_i) = \Phi(\mathbf{r}_i)$ .

Раскроем скобки в (18.5.1):

$$\left( \hat{\mathbf{p}}_i - \frac{e}{c} \mathbf{A}_i \right)^2 = \hat{\mathbf{p}}_i^2 - \frac{e}{c} (\hat{\mathbf{p}}_i \mathbf{A}_i + \mathbf{A}_i \hat{\mathbf{p}}_i) + \frac{e^2}{c^2} \mathbf{A}_i^2$$

С учетом выражения:

$$\hat{\mathbf{p}}_i \mathbf{A}_i(\cdot) = -i\hbar \nabla_i \mathbf{A}_i(\mathbf{r}_i)(\cdot) + \mathbf{A}_i \hat{\mathbf{p}}_i(\cdot)$$

Получаем:

$$\left( \hat{\mathbf{p}}_i - \frac{e}{c} \mathbf{A}_i \right)^2 = \hat{\mathbf{p}}_i^2 - \frac{e}{c} (\hat{\mathbf{p}}_i \mathbf{A}_i + \mathbf{A}_i \hat{\mathbf{p}}_i) + \frac{e^2}{c^2} \mathbf{A}_i^2 = \hat{\mathbf{p}}_i^2 - 2\frac{e}{c} \mathbf{A}_i \hat{\mathbf{p}}_i + \frac{e^2}{c^2} \mathbf{A}_i^2$$

Теперь преобразуем второе слагаемое:

$$2\frac{e}{c} \mathbf{A}_i \hat{\mathbf{p}}_i = 2\frac{e}{c} \frac{1}{2} ([\vec{\mathcal{H}} \times \mathbf{r}_i], \hat{\mathbf{p}}_i) = \frac{e}{c} ([\hat{\mathbf{r}}_i \times \hat{\mathbf{p}}_i], \vec{\mathcal{H}}) = \frac{e}{c} (\hbar \hat{\mathbf{l}}_i, \vec{\mathcal{H}})$$

Окончательно получаем:

$$\hat{\mathbf{p}}_i^2 - 2\frac{e}{c} \mathbf{A}_i \hat{\mathbf{p}}_i + \frac{e^2}{c^2} \mathbf{A}_i^2 = \hat{\mathbf{p}}_i^2 - \frac{e\hbar}{c} (\hat{\mathbf{l}}_i, \vec{\mathcal{H}}) + \frac{e^2}{c^2} \mathbf{A}_i^2$$

Подставим это выражение в гамильтониан сложного атома:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_{i=1}^N \hat{H}(i) + \hat{V}_{SO} = \\ &= \sum_{i=1}^N \left( \frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m} - \underbrace{\frac{e\hbar}{2mc}}_{\mu_B} (\hat{\mathbf{l}}_i, \vec{\mathcal{H}}) + \frac{e^2}{2mc^2} \mathbf{A}_i^2 - \underbrace{\frac{e\hbar}{mc}}_{2\mu_B} (\hat{\mathbf{s}}_i \cdot \vec{\mathcal{H}}) + U(\mathbf{r}_i) \right) + \hat{V}_{SO} = \\ &= \hat{H}_0 + \hat{V}_Z + \hat{V}_D \end{aligned} \quad (18.5.2)$$

Рассмотрим каждое слагаемое в последней формуле.

$\widehat{H}_0$  - гамильтониан свободного атома.

$$\widehat{H}_0 = \sum_{i=1}^N \left( \frac{\widehat{\mathbf{p}}_i^2}{2m} + U(\mathbf{r}_i) \right) + \widehat{V}_{SO}$$

$\widehat{V}_Z = \mu_B(\widehat{\mathbf{L}} + 2\widehat{\mathbf{S}})\vec{\mathcal{H}}$  - оператор зеемановского взаимодействия.

Можно также записать, что  $\widehat{V}_Z = -\widehat{\boldsymbol{\mu}}_{\text{ат}}\vec{\mathcal{H}}$ , где  $\widehat{\boldsymbol{\mu}}_{\text{ат}} = -\mu_B(\widehat{\mathbf{L}} + 2\widehat{\mathbf{S}})$ .

$$\widehat{V}_D = \frac{e^2}{2mc^2} \sum_{i=1}^N \mathbf{A}_i^2 = \frac{e^2}{8mc^2} \sum_{i=1}^N [\vec{\mathcal{H}} \times \mathbf{r}_i]^2$$

- оператор диамагнитного взаимодействия.

Пусть  $\vec{\mathcal{H}} = (0, 0, \mathcal{H})$ . Тогда

$$\widehat{V}_Z = \mu_B(\widehat{L}_z + 2\widehat{S}_z)\mathcal{H}$$

$$\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \mu_B(\widehat{L}_z + 2\widehat{S}_z)\mathcal{H} + \frac{e^2 \mathcal{H}^2}{8mc^2} \sum_{i=1}^N [\mathbf{n}_z \times \mathbf{r}_i]^2 \quad (18.5.3)$$

Когда последним слагаемым можно пренебречь?

$$\frac{e^2 \mathcal{H}^2}{mc^2} a^2 \ll \frac{e\hbar}{mc} \mathcal{H}$$

$$\mathcal{H} \ll \left( \frac{e}{a^2} \right) \left( \frac{\hbar c}{e^2} \right) = \mathcal{E} \alpha^{-1} = \mathcal{H} \sim 10^4 \text{Гс}$$

Таким образом, в небольшом магнитном поле можно пренебречь последней суммой. Тогда для гамильтониана получим:

$$\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \mu_B(\widehat{L}_z + 2\widehat{S}_z)\mathcal{H} = \widehat{H}_0 - \widehat{\boldsymbol{\mu}}_{\text{ат}}\vec{\mathcal{H}} \quad (18.5.4)$$

## §6. Эффекты Зеемана и Пашена-Бака

### 6.1 Слабое поле

Рассмотрим случай слабого поля:

$$\boxed{|V_{\mu_{\text{ат}}\mathcal{H}}| \ll |E_J - E_{J-1}|} \quad (18.6.1)$$

$$E_J = E(L, S) + \Delta E_J$$

Расщепление  $\Delta E_J$  обусловлено зеемановским взаимодействием  $\widehat{V}_Z$ .

При  $\vec{\mathcal{H}} = 0$  кратность вырождения  $2J + 1$ .

Выберем базис  $\{|JM_JLS\rangle\}$ .

$$\widehat{\mathbf{J}} = \widehat{\mathbf{L}} + \widehat{\mathbf{S}}$$

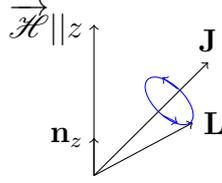


Рис. 18.2: К выводу эффекта Зеемана в слабом поле.

Из (18.6.1):

$$\Omega \ll \omega_{LS}, \quad (18.6.2)$$

где  $\Omega = \frac{\mu_B \mathcal{H}}{\hbar}$ .

Для энергий термов получим:

$$E_{\mathcal{H}} = E^{(0)} + \Delta E_{\mathcal{H}}^{(1)},$$

где

$$\Delta E_{\mathcal{H}}^{(1)} = |_{(18.5.4)} \mu_B \langle JM_J LS | \underbrace{\widehat{L}_z + 2\widehat{S}_z}_{\widehat{J}_z + \widehat{S}_z} | JM_J LS \rangle \mathcal{H} = \mu_B \langle \widehat{J}_z + \widehat{S}_z \rangle \mathcal{H}$$

Попробуем найти такое число  $g$  (фактор Ланде), чтобы выполнялось равенство:

$$\langle \widehat{J}_z + \widehat{S}_z \rangle = g \langle \widehat{J}_z \rangle \rightarrow \widehat{J}_z + \widehat{S}_z = g \widehat{J}_z$$

$$\widehat{J}_z = \widehat{\mathbf{J}} \mathbf{n}_z$$

$$\widehat{S}_z = \widehat{\mathbf{S}} \mathbf{n}_z$$

$$\widehat{\mathbf{J}} \mathbf{n}_z \widehat{\mathbf{S}} \mathbf{n}_z = (\widehat{\mathbf{J}} + \widehat{\mathbf{S}}) \mathbf{n}_z = \widehat{J}_z + \widehat{S}_z = g \widehat{J}_z = g \widehat{J}_z = g \widehat{\mathbf{J}} \mathbf{n}_z$$

Домножим последнее уравнение на  $\widehat{\mathbf{J}}$  слева:

$$\widehat{\mathbf{J}} \left| \widehat{\mathbf{J}} + \widehat{\mathbf{S}} = g \widehat{\mathbf{J}} \right.$$

$$g = ?$$

$$\langle \widehat{\mathbf{J}}^2 + \widehat{\mathbf{J}} \widehat{\mathbf{S}} \rangle = g \langle \widehat{\mathbf{J}}^2 \rangle$$

Из упр.1 II задания:

$$\langle \widehat{\mathbf{J}} \widehat{\mathbf{S}} \rangle = \frac{1}{2} [J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)]$$

$$\boxed{g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}} \quad (18.6.3)$$

- фактор Ланде.

$$\Delta E_{\mathcal{H}}^{(1)} = \mu_B g \langle JM_J LS | \widehat{J}_z | JM_J LS \rangle \mathcal{H} = \boxed{\mu_B g M_J \mathcal{H} = \Delta E_{\mathcal{H}}^{(1)}} \quad (18.6.4)$$

$M_J = -J, -J+1, \dots, J-2J+1$  значение.

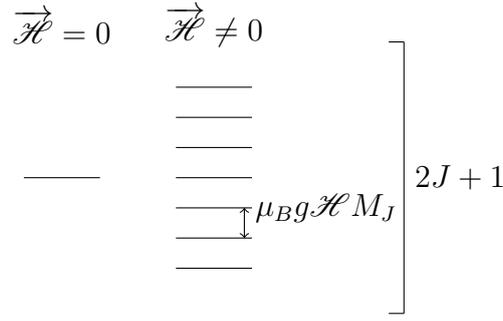


Рис. 18.3: Аномальный эффект Зеемана.

В слабом магнитном поле наблюдается аномальный эффект Зеемана (рис. 18.3) - снимается вырождение по  $M_J$ . Вырождение энергетического спектра атома снимается полностью.

Найдем, на каких частотах возможно излучение:

$$\begin{aligned}
 E_1 &= E_1^{(0)} + \mu_B g_1 M_{J1} \mathcal{H} \\
 E_2 &= E_2^{(0)} + \mu_B g_2 M_{J2} \mathcal{H} \\
 \hbar\omega = E_1 - E_2 &= E_1 - E_2 = (E_1^{(0)} - E_2^{(0)}) + \mu_B \mathcal{H} (g_1 M_{J1} - g_2 M_{J2})
 \end{aligned} \tag{18.6.5}$$

Однако частоты дополнительно ограничиваются правилами отбора:

$$\boxed{\Delta L = 0, \pm 1, \quad \Delta S = 0, \quad \Delta J = 0, \pm 1, \quad \Delta M_J = 0, \pm 1}$$

## 6.2 Сильное поле

$$|E_J - E_{J-1}| \ll |V_{\mu_{\text{ат}} \mathcal{H}}| \ll \Delta E_T,$$

где  $\Delta E_T$  - расстояние между соседними термами.

Ограничение сверху связано с тем, что наши выкладки верны, пока в атоме сохраняется  $LS$ -связь.

В сильном магнитном поле наблюдается простой эффект Зеемана или эффект Пашена-Бака.

$\hat{L}$ ,  $\hat{S}$  - сохраняются, поэтому необходимо пользоваться базисом  $\{|LM_L SM_S\rangle\}$ .

$$\begin{aligned}
 \Delta E_{\mathcal{H}}^{(1)} &= \left|_{(18.5.4)} \mu_B g \langle LM_L SM_S | \hat{L}_z + 2\hat{S}_z | LM_L SM_S \rangle \mathcal{H} \right. \\
 \Delta E_{\mathcal{H}}^{(1)} &= \mu_B \mathcal{H} (M_L + 2M_S)
 \end{aligned} \tag{18.6.6}$$

$$M_L = -L, -L + 1, \dots, L$$

$$M_S = -S, -S + 1, \dots, S$$

В отсутствие поля, энергетический уровень  $(2L + 1)(2S + 1)$ -кратно вырожден. В магнитном поле вырождение снимается частично.

$$\hbar\omega = E_1 - E_2 = E_1 - E_2 = (E_1^{(0)} - E_2^{(0)}) + \mu_B \mathcal{H} (\Delta M_L - 2\Delta M_S) \tag{18.6.7}$$

Возможные переходы определяются правилами отбора:

$$\boxed{\Delta L = 0, \pm 1, \quad \Delta S = 0, \quad \Delta M_L = 0, \pm 1, \quad \Delta M_S = 0}$$



# Глава 19

## Теория рассеяния

### §1. Постановка задачи рассеяния. Упругое рассеяние

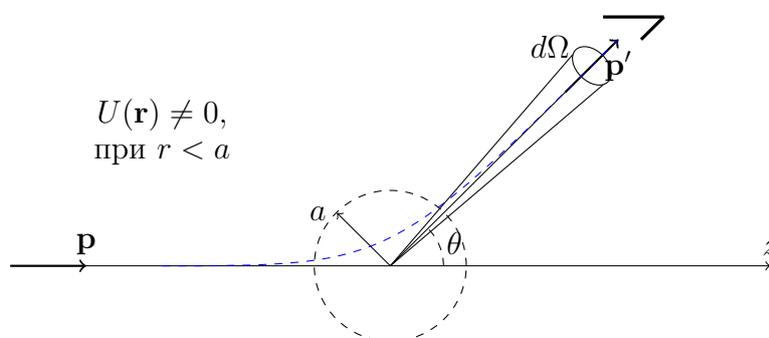


Рис. 19.1: Постановка задачи рассеяния.

$$U(\mathbf{r}) \equiv 0, \quad r > a$$

На детектор приходит рассеянная волна.

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \quad (19.1.1)$$

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

При  $E < 0$  задача превращается в задачу на собственные значения, решение которой мы знаем.

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} > 0$$

Запишем определение упругого рассеяния:

$$\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} = \frac{\hat{\mathbf{p}}'^2}{2m} \rightarrow |\mathbf{p}| = |\mathbf{p}'|$$
$$\mathbf{p} \neq \mathbf{p}'$$

Рассмотрим асимптотику волновой функции вдали от рассеивающего центра:

$$\psi(\mathbf{r}) \Big|_{r \rightarrow \infty} \approx e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + f(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r}$$

---

Функция  $f(\theta, \varphi)$  - амплитуда рассеяния.

Если рассеивающий потенциал сферически-симметричен, т.е.  $U(\mathbf{r}) = U(r)$ , то  $f(\theta, \varphi) = f(\theta)$ .

$$\psi(\mathbf{r}) \Big|_{r \rightarrow \infty} \approx e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (19.1.2)$$

Волновая функция, удовлетворяющая (19.1.2) называется функцией рассеяния.

## §2. Амплитуда и сечение рассеяния

Пусть  $\frac{dN}{dt}$  - скорость счета детектора. В детектор попадают частицы из телесного угла  $d\Omega$ .

**Определение 1.** Плотность потока падающих частиц  $\mathbf{j}_{пад}$  - число частиц, проходящих в единицу времени через единичную площадку, перпендикулярную пучку.

**Определение 2.** Эффективным сечением рассеяния (сечением рассеяния) называется отношение:

$$\frac{dN}{dt |\mathbf{j}_{пад}|} = d\sigma \quad (19.2.1)$$

Заметим, что размерность  $d\sigma = [\text{см}^2]$ .

С другой стороны:

$$\frac{dN}{dt} = j_{рас} r^2 d\Omega$$

Тогда

$$d\sigma = \frac{j_{рас}}{j_{пад}} r^2 d\Omega \quad (19.2.2)$$

Из §1 гл. 5:

$$j_{пад} \sim J: \quad \mathbf{J} = \frac{-i\hbar}{2m} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)$$

$$\rho_{рас} = \frac{|f(\theta)|^2}{r^2}$$

$$j_{рас} = \rho_{рас} v = v \frac{|f(\theta)|^2}{r^2}$$

Подставим это выражение в (19.2.2):

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 \quad (19.2.3)$$

- выражение для дифференциального сечения рассеяния в сферически-симметричном рассеивающем потенциале.

### §3. Функция Грина задачи рассеяния. Интегральное уравнение задачи рассеяния

Запишем уравнение Шредингера для задачи рассеяния:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\mathbf{r})\right)\psi(\mathbf{r}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\psi(\mathbf{r}) \quad | \cdot \frac{2m}{\hbar^2}$$

$$(\Delta + k^2)\psi(\mathbf{r}) = \frac{2m}{\hbar^2}U(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})$$

Решение этого неоднородного дифференциального уравнения можно представить, как сумму общего решения однородного ДУ и частного решения неоднородного ДУ:

$$\begin{cases} (\Delta + k^2)\psi_0(\mathbf{r}) = 0 \\ (\Delta + k^2)\psi_1(\mathbf{r}) = \frac{2m}{\hbar^2}U(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}), \end{cases}$$

Вспомним определение функции Грина  $G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ :

$$(\Delta_{\mathbf{r}} + k^2)G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \equiv \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (19.3.1)$$

Тогда с использованием функции Грина:

$$\psi_1(\mathbf{r}) = \int G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \frac{2mU(\mathbf{r}')}{\hbar^2} \psi(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'$$

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = -\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}$$

Теперь можно выписать функцию рассеяния:

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_0(\mathbf{r}) - \frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'$$

Всегда можно считать, что  $|\mathbf{r}'| < a \ll r$ , т.к.  $r \rightarrow \infty$ .

Введем малый параметр:

$$\frac{r'}{r} \ll 1$$

Тогда:

$$\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \approx \frac{e^{ikr-ik\mathbf{r}'\mathbf{n}}}{r},$$

где  $\mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}}{r}$ .

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_0(\mathbf{r}) - \frac{e^{ikr}}{r} \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-ik\mathbf{r}'\mathbf{n}} U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'$$

С учетом  $\psi_0(\mathbf{r}) = e^{ik\mathbf{r}}$ :

$$f(\theta, \varphi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-ik\mathbf{r}'\mathbf{n}} U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'$$

Окончательно получим интегральное уравнение задачи рассеяния:

$$\boxed{\psi(\mathbf{r}) = e^{ik\mathbf{r}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'} \quad (19.3.2)$$

Окончание лекции см. [тут](#). Текст ссылки:

[mipt.ru/education/chair/theoretical\\_physics/upload/1e2/Born\\_4-arpq3lk8s2a.pdf](http://mipt.ru/education/chair/theoretical_physics/upload/1e2/Born_4-arpq3lk8s2a.pdf)