

# Лекции по квантовой механике

Набор и вёрстка:

Сарафанов Ф.Г., Понур К.А., Шиков А.П.,  
Платонова М.В.

**Disclaimer.** В данном документе нами набраны лекции по квантовой механике, прочитанные на 3 курсе радиофизического факультета ННГУ **Куриным Владиславом Викторовичем**. Документ призван облегчить подготовку к зачётам и экзаменам и восполнить пробелы в знаниях читателя по квантовой механике. Разрешено копирование и распространение данного документа с обязательным указанием первоисточника.

При обнаружении ошибок, опечаток и прочих вещей, требующих исправления, можно либо создать issues в [репозитории на github.com](#), либо написать на электронную почту [sfg180@yandex.ru](mailto:sfg180@yandex.ru).

2 февраля – 7 октября 2022 г.

Нижний Новгород

# Оглавление

<b>1. Кусочно-постоянные потенциалы . . . . .</b>	<b>4</b>
1.1 Произвольный кусочно-постоянный потенциал . . . . .	4
1.2 Движение в потенциальной яме . . . . .	5
1.2.1 Четные решения . . . . .	7
1.2.2 Нечётные решения . . . . .	10
<b>2. Гармонический осциллятор . . . . .</b>	<b>13</b>
2.1 Классический гармонический осциллятор . . . . .	13
2.1.1 Переход от классического уравнения к квантовому . . . . .	13
2.1.2 Введение безразмерных переменных . . . . .	14
2.1.3 Безразмерный импульс и уравнение Эрмита . . . . .	15
2.1.4 Коммутатор $[\hat{p}_x, \hat{x}]$ в безразмерных переменных . . . . .	15
2.2 Метод ВКБ . . . . .	16
2.2.1 Решение осциллятора при больших $\xi$ . . . . .	16
2.2.2 Условие квантования энергии . . . . .	17
2.3 Полиномы и функции Эрмита . . . . .	19
2.3.1 Моды уравнения Эрмита . . . . .	19
2.3.2 Нормировка $H_0$ . . . . .	21
2.4 Операторное решение уравнения Эрмита . . . . .	22
2.4.1 Понижение порядка уравнения . . . . .	22
2.4.2 Операторы рождения $\hat{a}$ и уничтожения $\hat{a}^+$ . . . . .	23
2.4.3 Уравнение Эрмита в новых операторах . . . . .	25
2.4.4 Смысл операторов $a$ , $a^+$ и свойства $\alpha$ . . . . .	25
2.4.5 Нахождение собственных чисел. Оператор $\hat{n}$ . . . . .	29
2.4.6 Собственные функции уравнения Эрмита . . . . .	31
2.5 Вычисление средних . . . . .	33
2.5.1 Определение средней координаты . . . . .	33
2.5.2 Определение средней потенциальной энергии . . . . .	33
<b>3. Орбитальный момент . . . . .</b>	<b>35</b>
3.1 Законы сохранения в квантовой механике . . . . .	35
3.1.1 Трансляция времени . . . . .	35
3.1.2 Трансляция пространства . . . . .	36
3.1.3 Вращение пространства . . . . .	38
3.2 Коммутационные соотношения . . . . .	39

3.2.1	Коммутатор проекций момента импульса . . . . .	40
3.2.2	Коммутатор проекции волнового вектора и координаты .	41
3.2.3	Коммутатор квадрата момента импульса и его проекции	42
3.2.4	Понижающий и повышающий операторы орбитального момента . . . . .	43
3.3	Собственные функции и числа оператора орбитального момента	46
3.4	Матричное представление операторов момента . . . . .	49
3.4.1	Матричные элементы операторов $l_{\pm}$ . . . . .	49
3.4.2	Составление матриц из матричных элементов . . . . .	51
3.4.3	Матрицы операторов $l_{\pm}$ , $l_x$ , $l_y$ . . . . .	52
3.5	Собственные функции операторов момента в $\theta$ и $\varphi$ представлениях . . . . .	54
3.6	Сферические гармоники . . . . .	58
<b>4.</b>	<b>Движение в центрально-симметричном поле</b> . . . . .	<b>64</b>
4.1	Свободное движение . . . . .	67
4.2	Сферическая потенциальная яма . . . . .	71
4.3	Сферический гармонический осциллятор . . . . .	73
4.4	Кулоново поле . . . . .	75
4.5	Случайное вырождение . . . . .	81
<b>5.</b>	<b>Теория возмущений</b> . . . . .	<b>84</b>
5.1	Стационарная теория возмущений . . . . .	85
5.1.1	Ангармонический осциллятор . . . . .	90
5.1.2	Вырождение . . . . .	94
5.1.3	Двукратное вырождение . . . . .	96
5.2	Электрон в поле двух ядер . . . . .	98
5.3	Нестационарная теория возмущений . . . . .	103
5.3.1	Переходы в состояниях спектра при периодическом возмущении . . . . .	103
5.3.2	Представление Взаимодействия . . . . .	105
5.3.3	Монохроматическое возмущение . . . . .	106
5.3.4	Двухуровневая среда . . . . .	107
5.3.5	Золотое правило Ферми . . . . .	111
<b>6.</b>	<b>Квазиклассическое приближение</b> . . . . .	<b>116</b>
6.1	Квазиклассическая волновая функция вблизи точки поворота .	120

6.1.1	Метод Цвана . . . . .	120
6.2	Правило квантования Бора-Зоммерфельда . . . . .	123
<b>7.</b>	<b>Спин . . . . .</b>	<b>127</b>
7.1	Алгебра матриц Паули . . . . .	135
7.2	Оператор конечных вращений . . . . .	138
7.3	Матрицы вращения вокруг базисных осей . . . . .	141
<b>8.</b>	<b>Движение электрона в магнитном поле . . . . .</b>	<b>142</b>
8.1	Магнитный момент . . . . .	142
8.2	Орбитальное движение . . . . .	144
8.2.1	Калибровка . . . . .	144
8.3	Уравнение Паули . . . . .	146
8.3.1	Эксперимент Штерна-Герлаха . . . . .	146
8.4	Заряженная частица в однородном магнитном поле . . . . .	148

# 1. Кусочно-постоянные потенциалы

Рассмотрим решение стационарного уравнения Шрёдингера с кусочно-постоянным потенциалом, пользуясь разбиением решения на чётную и нечётную составляющие.

## 1.1. Произвольный кусочно-постоянный потенциал

Рассмотрим задачу на нахождение собственных значений энергии в уравнении Шрёдингера, составив  $U(x)$  как кусочно-постоянный потенциал:

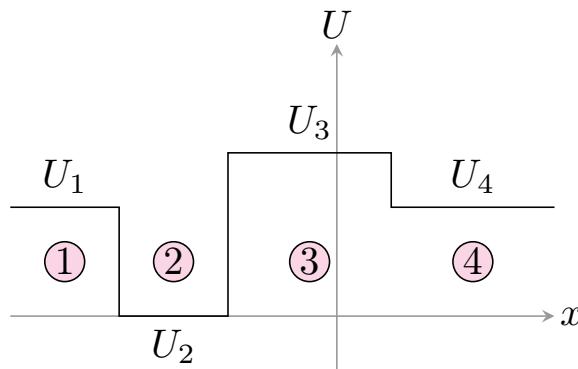


Рис. 1. Пример кусочно-постоянного потенциала  $U(x)$

На каждом участке такого потенциала работает уравнение Шрёдингера.

$$\hat{H}\Psi(x) = E\Psi(x)$$

Это стационарное уравнение Шрёдингера: его параметром является энергия  $E$ . Запишем гамильтониан:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\hat{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(\hat{x})$$

**Замечание.** Как нетрудно заметить, гамильтониан записан в  $x$ -представлении, то есть  $\hat{x} = x$ ,  $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ . Если потребуется, ничего не мешает перейти в  $p$ -представление:

$$\hat{p}_x = p_x, \quad \hat{x} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_x}, \quad \Psi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \Psi(x) \exp\left(-i\frac{p}{\hbar}x\right) dx$$

Вернёмся к уравнению Шрёдингера. Подставим расписанный гамильтониан в уравнение Шрёдингера:

ниан в уравнение:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \right] \Psi(x) = E \Psi(x)$$

Пронумеруем постоянные участки потенциала. На каждом таком  $j$ -том участке потенциала

$$\frac{\partial^2 \Psi_j}{\partial x^2} + \underbrace{\frac{2m}{\hbar^2} [E - U_j]}_{k_j^2} \Psi_j(x) = 0$$

Или это же уравнение в более простом виде:

$$\Psi_j'' + k_j^2 \Psi_j = 0$$

Решение этого уравнения нам знакомо:

$$\Psi_j = c_j \exp(ik_j x) + d_j \exp(-ik_j x)$$

где  $c_j, d_j$  – константы, определяемые из условий «сшивки» решений и зануляемости волновой функции на бесконечности. Полученное кусочно-гладкое решение «сшивается» на границах постоянности  $S_j$ :

$$\begin{aligned} \Psi_j|_{S_j} &= \Psi_{j+1}|_{S_j} \\ \Psi_j'|_{S_j} &= \Psi_{j+1}'|_{S_j} \end{aligned}$$

## 1.2. Движение в потенциальной яме

Рассмотрим задачу в потенциальной яме

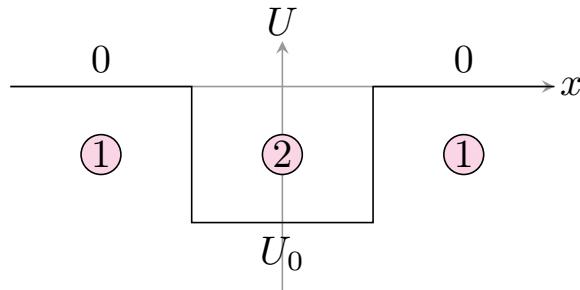


Рис. 2. Потенциальная яма

Разобьём пространство на две области: первая будет вне потенциальной

ямы, вторая – в яме. Решение уравнений Шрёдингера будем искать отдельно для двух областей.

$$\Psi''_{xx} + k_1^2 \Psi = 0, \quad k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E, \quad \text{при } \begin{cases} x > a \\ x < -a \end{cases} \quad (1)$$

$$\Psi''_{xx} + k_2^2 \Psi = 0, \quad k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E + |U_0|), \quad \text{при } -a \leq x \leq a$$

Стоит сказать, что при  $E > 0$  движение инфинитное, а спектр волновой функции непрерывен.

При  $E < 0$  движение финитное с дискретным спектром. Следовательно  $k_1^2 < 0$  и решением уравнения (1) будет являться:

$$\Psi = D e^{-\kappa x} + D_1 e^{+\kappa x},$$

где введено обозначение  $\kappa^2 = -k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2} |E|$

Значит, вне потенциальной ямы волновая функция или экспоненциально спадает или убывает. Из физических соображений, не может быть бесконечного роста, поэтому коэффициент  $D_1 = 0$  при  $x > 0$  и  $D = 0$  при  $x < 0$ .

Дальше будет решаться задача о дискретном спектре ( $E < 0$ ).

Из-за выбора начала координат  $U(x) = U(-x)$ , то есть функция будет четной. А значит уравнение

$$\Psi''_{xx}(x) + U(x)\Psi(x) = 0$$

инвариантно относительно замены  $x \rightarrow -x$ .

Решением этого уравнения будет суперпозиция чётных и нечётных волновых функций. Формализуется это введением оператора чётности  $\hat{P}$ :

$$\hat{P}\Psi(x) \underset{\text{def}}{=} \Psi(-x)$$

Этот оператор меняет  $x \rightarrow -x$ . Решим уравнение на собственные функции оператора  $\hat{P}$ :

$$\hat{P}\Psi = p\Psi \quad (2)$$

Подействуем на уравнение (2) оператором  $\hat{P}$  ещё раз

$$\hat{P}^2\Psi \underset{\text{def}}{=} \hat{1}\Psi = p^2\Psi$$

Отсюда  $p = \pm 1$ . Тогда у нас получаются уравнения:

$$\begin{aligned}\hat{P}\Psi(x) &= \Psi(x) \\ \hat{P}\Psi(-x) &= -\Psi(x)\end{aligned}$$

Также оператор перестановки коммутирует с оператором Гамильтона, а значит чётность и нечётность сохраняются во времени. То есть, если при  $t = 0$  была задана чётная функция, то она так и останется чётной. Значит, можно решать исходные уравнение на положительной полупрямой, а затем продолжать на отрицательную полупрямую.

### 1.2.1 Четные решения

$$\begin{cases} \Psi''_{xx} - \varkappa^2 \Psi = 0, & \text{при } x > a \\ \Psi''_{xx} + k^2 \Psi = 0, & \text{при } 0 < x < a \end{cases}$$

где

$$-k_1^2 = \varkappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2} |E|, \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (|U_0| - |E|)$$

Все дискретные уровни должны лежать выше минимума потенциала  $U_0$ . Запишем решения уравнения внутри и снаружи ямы при  $x > 0$ :

$$\begin{aligned}\Psi_{\text{внутри}} &= C \cos kx \\ \Psi_{\text{снаружи}} &= D e^{-\varkappa(x-a)}\end{aligned}$$

Теперь следует согласовать два этих решения на границе. Сделать это можно приравняв  $\Psi_{\text{внутри}}(a) = \Psi(a)_{\text{снаружи}}$  и  $\Psi(a)'_{\text{внутри}} = \Psi'_{\text{снаружи}}(a)$ . То есть

$$\begin{cases} C \cos ka = D \\ -kC \sin ka = -\varkappa D \end{cases}$$

Из этого уравнения следует, что

$$k \cdot \operatorname{tg} ka = \varkappa \quad (3)$$

Уравнение (3) является трансцендентным. Мы будем решать его графически.

Но прежде введём некоторые переобозначения.

$$z = \varkappa a = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} |E|} a$$

$$y = ka = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (|U_0| - |E|)} a$$

$$z^2 + y^2 = \frac{2m}{\hbar^2} |U_0| a^2 = w^2$$

Тогда уравнение (3) примет вид:

$$y \cdot \operatorname{tg} y = \sqrt{w^2 - y^2}$$

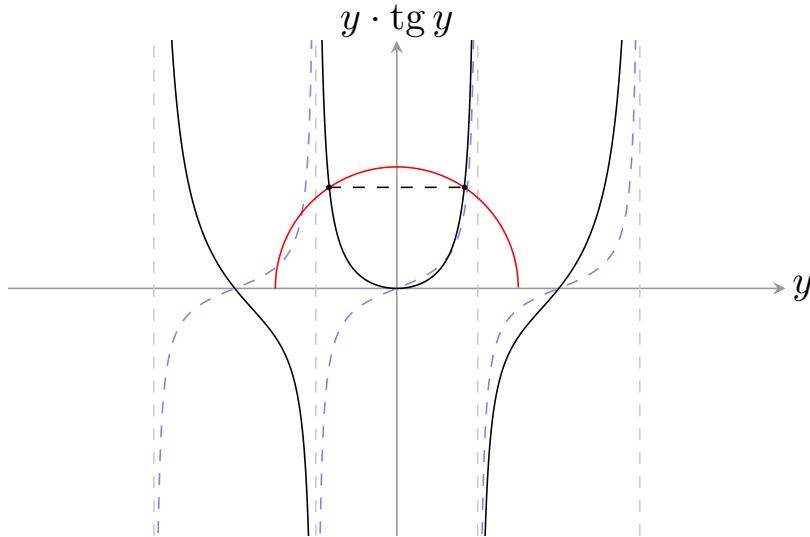


Рис. 3. График функции  $y \cdot \operatorname{tg} y = \sqrt{w^2 - y^2}$

Функция  $z = y \cdot \operatorname{tg}(y)$  - чётная, так как является произведением двух нечётных функций  $y$  и  $\operatorname{tg}(y)$ . Правая же часть исследуемого равенства  $z = \sqrt{w^2 - y^2}$  является верхней полуокружностью радиуса  $w$ .

Нас интересуют уровни энергии  $E$ , при которых имеются решения. В нашем случае они характеризуются координатой  $z$  точек пересечения полуокружности и  $y \cdot \operatorname{tg}(y)$ , так как  $z = \varkappa a \sim \sqrt{|E|}$ .

Как очевидно из рисунка 3, при любом сколь угодно малом значении  $w$  будет существовать хотя бы один уровень энергии. При дальнейшем увеличении значения  $w$  будут появляться новые уровни энергии, связанные с пересечением полуокружности со следующими ветвями  $y \cdot \operatorname{tg}(y)$  (см. рис. 5). Исходя

из уравнения, определяющего  $w$ ,

$$w^2 = z^2 + y^2 = \frac{2m}{\hbar^2} |U_0| \cdot a^2$$

увеличение  $w$  соответствует увеличению глубины потенциальной ямы  $U_0$ .

Таким образом, для чётной серии решений имеем распределение энергетических уровней в зависимости от глубины потенциальной ямы (см. рис. 4). При малых  $w$  тангенс можно разложить в ряд, показав, что  $|E| \sim w^2 \sim |U_0|^2$ . Следующие корни появляются при  $w \geq n\pi$ .

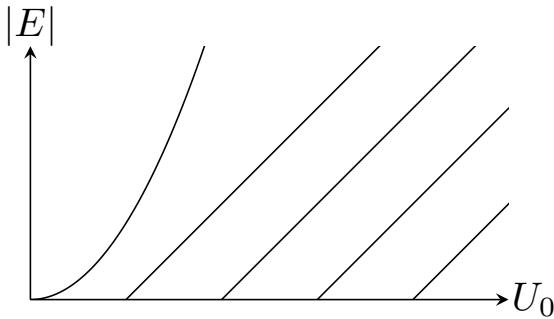


Рис. 4. График  $|E|(U_0)$  (четная серия)

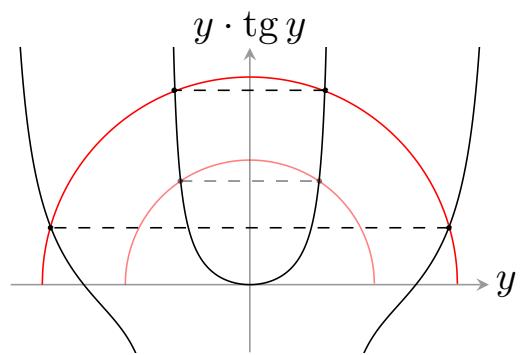
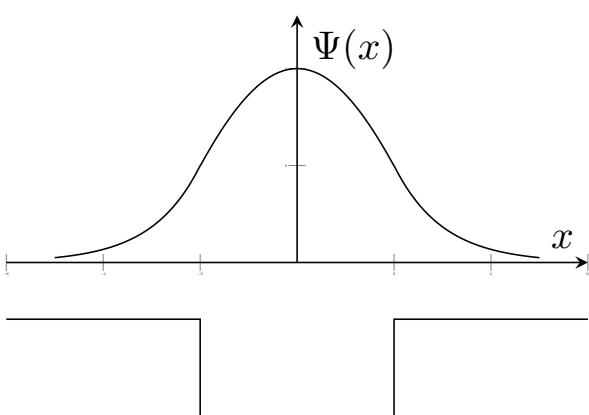
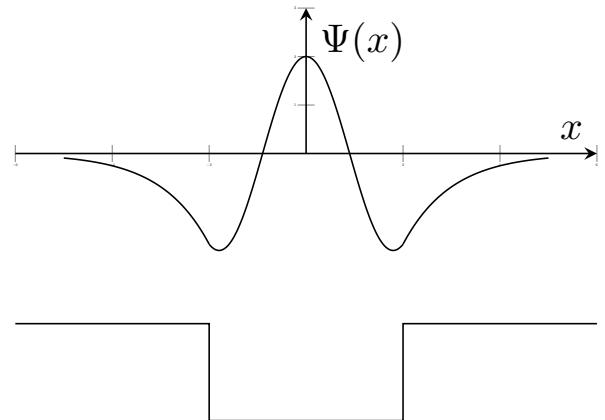


Рис. 5. Расщепление уровней

Изобразим график волновой функции  $\Psi(x)$ . Изначально имеем: косинус в отрезке  $[-a, a]$ , и спадающие экспоненты вне этого отрезка. В точках  $a, -a$  решения сшиты. Вид решения в отрезке  $[-a, a]$  будет зависеть от глубины потенциальной ямы  $U_0$ .

При  $w < \pi$  имеет место решение нулевой моды. При увеличении  $w > \pi$  от нулевого уровня энергии «отщепляется» новый уровень (см. рис. 5), появляются решения, соответствующие первой, второй и последующим модам (см. рис. 7).

Рис. 6. Нулевая мода  $\Psi(x)$ Рис. 7. Первая мода  $\Psi(x)$ 

Заметим, что число нулей возрастает не постепенно. Где состояние с одним нулём? Почему нули появляются парами? Дело в том, что мы рассмотрели только чётную серию, но при этом существует также нечётная серия.

### 1.2.2 Нечётные решения

Аналогичным образом подойдём к решению для нечётных функций. В этом случае

$$\begin{cases} \Psi_2 = c \cdot \sin kx, & x < a \\ \Psi_1 = d \cdot e^{-\varkappa(x-a)}, & x > a \end{cases}$$

Сшиваем на границе, учитывая граничные условия:

$$\begin{cases} c \cdot \sin ka = d \\ ck \cdot \cos ka = -\varkappa d \end{cases} \Rightarrow \operatorname{ctg} ka = -\varkappa$$

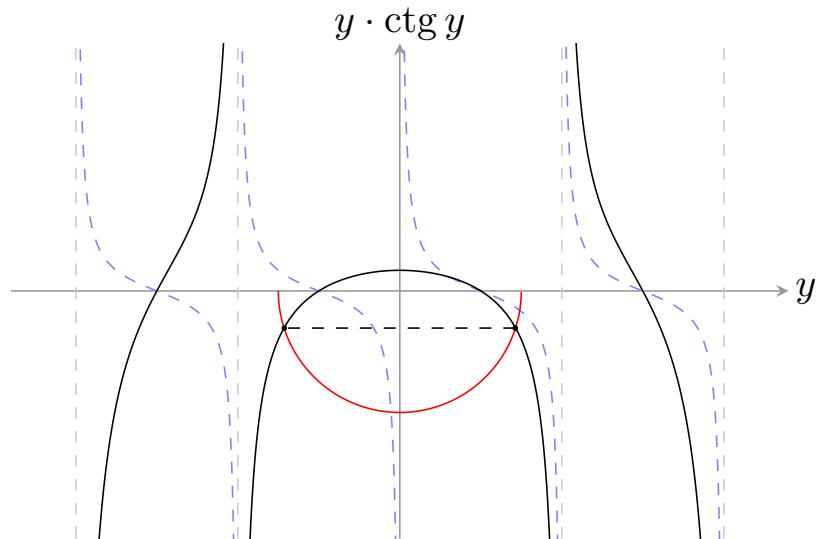
Вводя те же переменные, для нечётной серии получаем

$$y \cdot \operatorname{ctg}(y) = -\sqrt{w^2 - y^2}$$

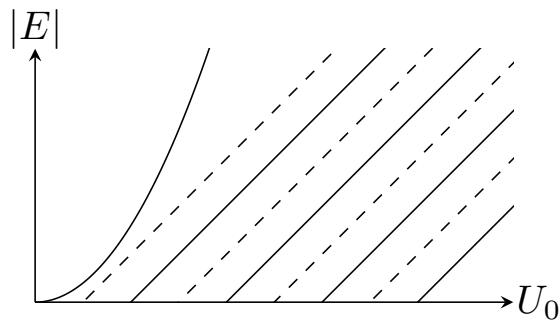
Решаем так же графически.

Разложим в ряд Тейлора в окрестности ноля:  $y \cdot \operatorname{ctg}(y)|_{y=0} \Rightarrow 1$ . Правая часть  $z = -\sqrt{w^2 - y^2}$  - это нижняя полуокружность радиуса  $w$ . Нас интересуют пересечения этой полуокружности с графиком  $y \cdot \operatorname{ctg}(y)$ .

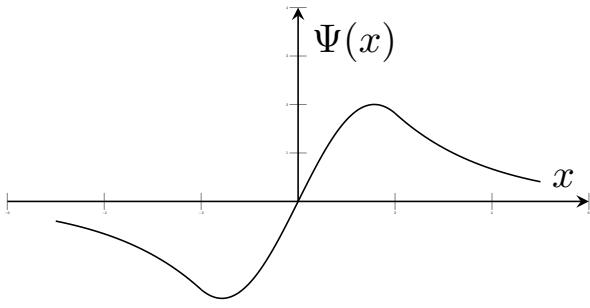
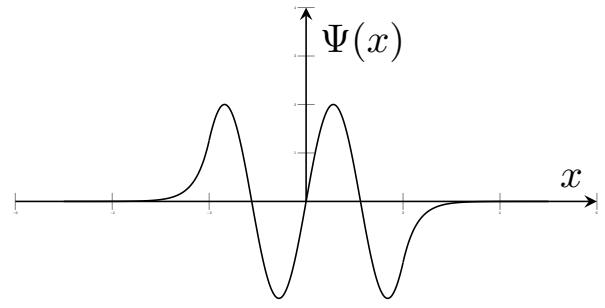
Теперь решения появляются только при  $w \geq \frac{\pi}{2}$ , а новые уровни появляются каждые  $w = \frac{\pi}{2} + \pi n$ .

Рис. 8. График  $y \cdot \operatorname{ctg} y = -\sqrt{w^2 - y^2}$ 

Создающаяся картина энергетических уровней показана на рисунке 9.

Рис. 9. График  $|E|(U_0)$  (чётная серия сплошным, нечётная пунктиром)

Волновая функция в нечётном случае будет иметь моды, так же как это было и в чётном случае. 1-я нечётная мода будет иметь 1 ноль, следующая, вторая, будет иметь 3 нуля, и так далее.

Рис. 10. Нулевая мода  $\Psi(x)$ Рис. 11. Первая мода  $\Psi(x)$ 

Таким образом устроены моды конечного спектра. Количество уровней определяется глубиной ямы. При постепенном её увеличении будут появляться, чередуясь, чётные и нечётные моды синуса и косинуса. В случае бесконечной потенциальной ямы спектр энергий будет бесконечным.

## 2. Гармонический осциллятор

### 2.1. Классический гармонический осциллятор

Вспомним, что было в классике. Запишем уравнение Ньютона для грузика на пружинке, перемещающегося без трения по горизонтальной оси  $x$ :

$$m\ddot{x} + kx = 0 \quad \Rightarrow \quad \ddot{x} + \omega^2 x = 0, \text{ где } \omega^2 = \frac{k}{m}.$$

Хорошо известны решения такого уравнения:

$$x = c_1 \cos \omega t + c_2 \sin \omega t = A \cos(\omega t + \varphi_0)$$

Запишем гамильтониан такой физической системы:

$$\hat{H} = \frac{m\dot{x}^2}{2} + \frac{kx^2}{2} = \frac{p^2}{2m} + \frac{kx^2}{2}$$

#### 2.1.1 Переход от классического уравнения к квантовому

А теперь сделаем переход к квантовой механике, заменив все физические величины – операторами:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2}, \quad (4)$$

где в  $x$ -представлении:

$$\hat{p} = -i\hbar\nabla, \quad \hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}. \quad (5)$$

Мы будем решать стационарное уравнение Шрёдингера, которое получается в случае, когда энергия имеет определённое значение, и говорят, что система имеет *стационарные состояния*. В этом случае нестационарное уравнение Шрёдингера имеет вид

$$i\hbar\dot{\Psi}(x, t) = \hat{H}\Psi(x, t) = E\Psi(x, t),$$

и оно может быть непосредственно проинтегрировано по времени, и тогда

$$\Psi(x, t) = \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right) \cdot \psi(x).$$

При этом для  $\psi(x)$  выполняется так называемое стационарное уравнение Шрёдингера:

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x). \quad (6)$$

### 2.1.2 Введение безразмерных переменных

Подставив выражения для гамильтониана осциллятора (4) и импульса (5) в стационарное уравнение Шрёдингера (6), получим уравнение гармонического осциллятора в следующем виде:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}\right)\psi(x) = E\psi(x)$$

Прежде чем решать его, приведём его к безразмерному виду, пользуясь следующими соображениями.

Слева произведение скобки на  $\psi(x)$ , справа произведение  $E \cdot 1 \cdot \psi(x)$ . Значит, если мы в левой части из скобок вынесем множитель размерности энергии, то оставшаяся скобка будет одной размерности с 1, значит, безразмерная. Простейшим вариантом, конечно, будет вынести  $\hbar\omega$ :

$$\hbar\omega\left(-\frac{\hbar}{2m\omega}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right)\psi(x) = E\psi(x)$$

Теперь можем ввести характерный масштаб:

$$l_q^2 = \frac{\hbar}{m\omega}$$

И тогда

$$\frac{\hbar\omega}{2}\left[-l_q^2\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{x^2}{l_q^2}\right]\psi(x) = E\psi(x)$$

Введем безразмерные переменные:

$$\varepsilon = \frac{E}{\hbar\omega}, \quad \xi = \frac{x}{l_q} \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial}{\partial \xi} = \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \xi} = \frac{\partial}{\partial x} \cdot l_q, \quad \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \cdot l_q^2$$

Тогда уравнение гармонического осциллятора в безразмерных координатах

$$\left[ -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{\xi^2}{2} \right] \psi = \varepsilon \psi \quad (7)$$

### 2.1.3 Безразмерный импульс и уравнение Эрмита

Попробуем сказать, как будет выглядеть безразмерный импульс  $\hat{p}_b \equiv \hat{p}_{x,b}$ :

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} = -\frac{i\hbar}{l_q} \frac{\partial}{\partial \xi}$$

Заметим, что размерный импульс должен представляться в виде безразмерного импульса, помноженного на размерную константу - единицу импульса. Из этого соображения очевидно, что

$$\hat{p}_b = -i \frac{\partial}{\partial \xi},$$

а единица импульса в наших безразмерных переменных  $1p = \frac{\hbar}{l_q} = \sqrt{m\hbar\omega}$ .

Итак, в нашем безразмерном уравнении следующая система единиц:

$$\begin{aligned} \text{Единица длины:} \quad 1\xi &= l_q = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \\ \text{Единица импульса:} \quad 1p &= \frac{\hbar}{l_q} = \sqrt{m\hbar\omega} \\ \text{Единица энергии:} \quad 1\varepsilon &= \hbar\omega \end{aligned}$$

Тогда уравнение осциллятора можно записать в виде, известном как **уравнение Эрмита**:

$$\left( \frac{\hat{p}_b^2}{2} + \frac{\xi^2}{2} \right) \psi = \varepsilon \psi \quad (8)$$

### 2.1.4 Коммутатор $[\hat{p}_x, \hat{x}]$ в безразмерных переменных

Найдем коммутатор проекции импульса и координаты в безразмерных переменных. Вспомним, что  $\sqrt{m\hbar\omega} \cdot \hat{p}_b = \hat{p}_x$ , а  $\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \cdot \xi = \hat{x} = x$ . Будем использовать известный результат:

$$\hat{p}_x \hat{x} - \hat{x} \hat{p}_x = -i\hbar$$

Подставим выражения для безразмерных переменных:

$$\sqrt{m\hbar\omega} \cdot \hat{p}_b \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \xi - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \xi \cdot \sqrt{m\hbar\omega} \cdot \hat{p}_b = -i\hbar$$

Вынесем общий множитель за скобку и сократим:

$$\sqrt{m\hbar\omega} \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} (\hat{p}_b \xi - \xi \hat{p}_b) = -i\hbar \quad \Rightarrow \quad \hat{p}_b \xi - \xi \hat{p}_b = -i$$

## 2.2. Метод ВКБ

### 2.2.1 Решение осциллятора при больших $\xi$

Будем искать решение уравнения (7) при больших значениях  $\xi$ . Тогда мы можем пренебречь  $\varepsilon$ :

$$\left( \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} - \xi^2 \right) \psi = 0 \quad (9)$$

Решением этого уравнения является функция  $\psi = \exp\left\{-\frac{\xi^2}{2}\right\}$ . Кроме подстановки, доказать, что эта функция действительно является решением этого уравнения можно воспользовавшись методом [Вентцеля-Крамерса-Бриллюэна](#).

Пусть у нас есть уравнение

$$\psi'' + k^2(x)\psi = 0 \quad (10)$$

Будем искать решение в виде  $\Psi = A(x) \exp\{i\theta(x)\}$ . После подстановки решения в (10) получим:

$$[A'' + 2i\theta'A' + iA\theta'' - A \cdot (\theta')^2 + k^2(x)A] \exp\{i\theta\} = 0$$

Разделим действительную и мнимую части (мнимую ещё умножили на  $A$ ). Тогда можно заметить, что второе уравнение системы представляет собой производную  $\frac{\partial A(x)^2 \theta'(x)}{\partial x}$ :

$$\begin{cases} A'' - A(\theta')^2 + k^2(x)A = 0 \\ 2\theta'A'A + A^2\theta'' = 0 = \frac{\partial\{A(x)^2\theta'(x)\}}{\partial x} \end{cases}$$

В нашем приближении больших  $\xi$  справедливо соотношение  $\left| \frac{A''}{A} \right| \ll \theta'^2$ . Тогда в первом уравнении системы пренебрежём  $A''$  и получим:

$$\theta' = \pm k(x)$$

Возвращаясь к уравнению (9), можем сказать, что  $\theta' = \pm i\xi$  и  $\theta = \pm i\frac{\xi^2}{2}$ . Данное решение является приближенным.

### 2.2.2 Условие квантования энергии

Как было показано выше,  $\theta = \pm i\frac{\xi^2}{2}$ , тогда решение имеет вид

$$\psi = e^{-\frac{\xi^2}{2}} \quad \Rightarrow \quad \psi' = -\xi e^{-\frac{\xi^2}{2}}, \quad \psi'' = -e^{-\frac{\xi^2}{2}} + \xi^2 e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

Подставим эти производные в уравнение (9). Тогда получим

$$\cancel{\xi^2 e^{-\frac{\xi^2}{2}}} - e^{-\frac{\xi^2}{2}} - \cancel{\xi^2 e^{-\frac{\xi^2}{2}}} = -e^{-\frac{\xi^2}{2}} = 0$$

Заметим, что оставшийся член  $-e^{-\frac{\xi^2}{2}}$ , вообще говоря, не равен нулю. Однако при выполнении условия  $\xi \gg 1$  этим членом можно пренебречь.

Будем искать решение в виде  $\psi = \chi(\xi)e^{-\frac{\xi^2}{2}}$ , где  $\chi(\xi)$  - новая функция. Чтобы волновая функция спадала на бесконечности в ноль,  $\chi(\xi)$  должна стремиться к бесконечности медленнее экспоненты:

$$\frac{\chi(\xi)}{e^{\frac{\xi^2}{2}}} \rightarrow 0, \quad \text{когда} \quad \xi \rightarrow \infty$$

Аналогично предыдущим расчётам, найдём первую и вторую производные

$$\psi' = \chi'e^{-\frac{\xi^2}{2}} - \xi\chi e^{-\frac{\xi^2}{2}}, \quad \psi'' = \chi''e^{-\frac{\xi^2}{2}} - 2\xi\chi'e^{-\frac{\xi^2}{2}} - \chi e^{-\frac{\xi^2}{2}} + \xi^2\chi e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

и подставим в уравнение (9), но при этом уже не будем считать  $\varepsilon = 0$ :

$$\chi'' - 2\xi\chi' - \chi + 2\varepsilon\chi = 0 \tag{11}$$

Это уравнение содержит  $\chi$  только в первой степени. Будем искать его решение в виде ряда  $\chi(\xi) = \sum C_n \xi^n$ . Заметим, что при  $\xi \rightarrow 0$  решение в виде ряда

регулярно. Найдём производные

$$\chi' = \sum nC_n \xi^{n-1}, \quad \chi'' = \sum n(n-1)C_n \xi^{n-2}$$

и подставим их в уравнение (11)

$$\sum n(n-1)C_n \xi^{n-2} - 2 \sum nC_n \xi^{n-1} \xi - \sum C_n \xi^n + 2\varepsilon \sum C_n \xi^n = 0$$

Чтобы свернуть это выражение в одну сумму, сделаем замену индексов для разных слагаемых. Так можно делать, потому что индексы у суммы – немые.

$$\overbrace{\sum n(n-1)C_n \xi^{n-2}}^{n-2=k} - 2 \overbrace{\sum nC_n \xi^n}^{n=k} - \overbrace{\sum C_n \xi^n}^{n=k} + 2\varepsilon \sum C_n \xi^n = 0$$

И тогда выражение преобразуется к более простому виду:

$$\sum_{k=0}^{\infty} [(k+2)(k+1)C_{k+2} - (2k-2\varepsilon+1)C_k] \xi^k = 0$$

Заметим, что  $\xi^k$  представляет собой полный базис пространства, и для того, чтобы  $\forall \xi, \sum_{k=0}^{\infty} [...] = 0$ , нужно чтобы все коэффициенты под суммой  $[...] = 0$ , т.е.

$$(k+2)(k+1)C_{k+2} - (2k-2\varepsilon+1)C_k = 0$$

откуда можно получить рекуррентное соотношение

$$C_{k+2} = \frac{2k-2\varepsilon+1}{(k+2)(k+1)} C_k. \quad (12)$$

Из соотношения видно, что существуют отдельные чётная и нечётная последовательности, соответствующие начальным коэффициентам  $C_0$  (для чётных) и  $C_1$  (для нечётных).

$$C_0 \rightarrow C_2, C_4, C_6, \dots$$

$$C_1 \rightarrow C_3, C_5, C_7, \dots$$

Это соответствует тому, что общее решения уравнения второго порядка зависит от двух констант, являющихся первыми членами ряда.

Чтобы решение было правильным, ряд должен кончиться (оборваться),

то есть, начиная с некоторого  $k = k_{max} = N$ , числитель в выражении (12) должен обратиться в ноль:

$$2N - 2\varepsilon + 1 = 0 \quad \Rightarrow \quad \varepsilon = N + \frac{1}{2}, \quad N = 0, 1, 2, 3, \dots$$

По сути, мы нашли собственные числа (спектр энергии), представляющие собой эквидистантный ряд (13). Теперь мы можем искать волновые функции, соответствующие разным собственным числам.

$$E_n = \hbar\omega \left( N + \frac{1}{2} \right) \quad (13)$$

## 2.3. Полиномы и функции Эрмита

Вспомним ключевые результаты, полученные в разделе 2.2. Мы записали уравнение Шрёдингера для гармонического осциллятора (движение частицы в потенциале  $x^2$ ), вывели соответствующее ему безразмерное уравнение – уравнение Эрмита и рассмотрели его решение в виде  $\chi(\xi) \cdot \exp(-\xi^2/2)$ , где  $\chi$  разложили в ряд. В силу уравнения Эрмита получили рекуррентное соотношение коэффициентов ряда (12). Из необходимости равенства нулю на бесконечности волновой функции мы потребовали обращение в ноль ряда начиная с некоторого члена, из чего получили квантование энергии осциллятора  $\varepsilon$  (13).

### 2.3.1 Моды уравнения Эрмита

Волновую функцию, отвечающую собственному числу  $\varepsilon = N + \frac{1}{2}$ , принято называть модой  $N$ -го порядка. Попробуем вывести выражение для моды нулевого порядка (так называемое вакуумное состояние), а также 1–3 порядков.

**Нулевая мода  $N = 0$ .** Нулевой моде отвечает энергия  $\varepsilon = \frac{1}{2} + N = \frac{1}{2}$ . Для чётной моды разрешена только чётная серия коэффициентов (нечётная серия разойдётся, для неё нет условия обрыва). Коэффициент  $C_0$  произвольный, а  $C_2$  в силу условия обрыва уже отсутствует:

$$C_2 = \frac{2k - 2\varepsilon + 1}{(k+2)(k+1)} C_0 = \frac{2 \cdot 0 - 2 \cdot \frac{1}{2} + 1}{(0+2)(0+1)} C_0 = 0$$

Отсюда находится и решение нулевой моды:

$$\Psi_0 = \sum_{k=0}^0 C_k \xi^k \cdot e^{-\frac{\xi^2}{2}} = C_0 \cdot \exp\left\{-\frac{\xi^2}{2}\right\}$$

**Первая мода**  $N = 1$ . Первой моде отвечает энергия  $\varepsilon = \frac{1}{2} + 1 = \frac{3}{2}$ . Для нечетной моды разрешена только нечетная серия коэффициентов, значит  $C_0 = C_2 = \dots = 0$ , коэффициент  $C_1$  произвольный, а  $C_3$  в силу условия обрыва уже отсутствует. Тогда

$$\Psi_1 = C_1 \xi \cdot \exp\left\{-\frac{\xi^2}{2}\right\}$$

**Вторая мода**  $N = 2$ . Второй моде отвечает энергия  $\varepsilon = \frac{1}{2} + 2 = \frac{5}{2}$ . Нечётные коэффициенты не рассматриваем (аналогично предыдущим модам).

Коэффициент  $C_0$  произвольный,  $C_4$  зануляется в силу обрыва на  $N = 2$ , а  $C_2$  выразим через  $C_0$ :

$$C_2 = \frac{2k - 2\varepsilon + 1}{(k+2)(k+1)} C_0 = \frac{2 \cdot 0 - 2 \cdot \frac{5}{2} + 1}{(0+2)(0+1)} C_0 = -2C_0$$

Отсюда

$$\Psi_2 = \sum_{k=0}^2 C_k \xi^k \cdot e^{-\frac{\xi^2}{2}} = C_0 (1 - 2\xi^2) \cdot \exp\left\{-\frac{\xi^2}{2}\right\}$$

**Третья мода**  $N = 3$ . Третей моде отвечает энергия  $\varepsilon = \frac{1}{2} + 3 = \frac{7}{2}$ . Чётные коэффициенты не рассматриваем, коэффициент  $C_1$  произвольный,  $C_5$  зануляется в силу обрыва на  $N = 3$ , а  $C_3$  выразим через  $C_1$ :

$$C_3 = \frac{2k - 2\varepsilon + 1}{(k+2)(k+1)} C_1 = \frac{2 \cdot 1 - 2 \cdot \frac{7}{2} + 1}{(1+2)(1+1)} C_1 = -\frac{2}{3} C_1$$

Отсюда

$$\Psi_3 = \sum_{k=1}^3 C_k \xi^k \cdot e^{-\frac{\xi^2}{2}} = C_1 \left( \xi - \frac{2}{3} \xi^2 \right) \cdot \exp\left\{-\frac{\xi^2}{2}\right\}$$

Перед экспонентой в любом случае будет стоять какие-то полиномы. Эти

полиномы называют полиномами Эрмита и обозначают буквой  $H_k$ .

$$\Psi_k(\xi) \sim H_k(\xi) \exp\{-\xi^2/2\}$$

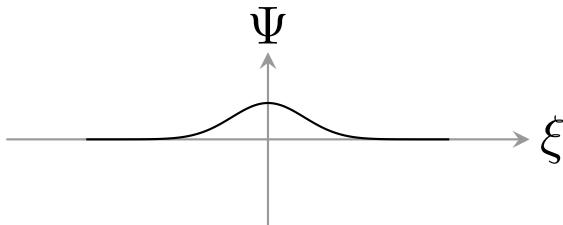


Рис. 12. Нулевая мода ( $N=0$ )

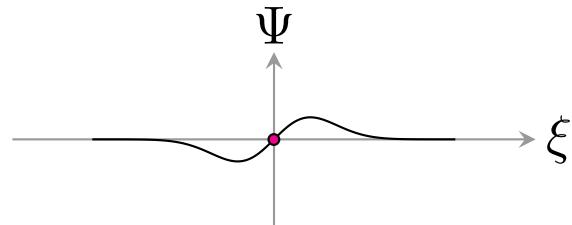


Рис. 13. Первая мода ( $N=1$ )

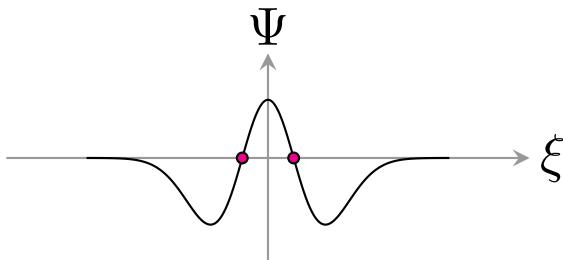


Рис. 14. Вторая мода ( $N=2$ )

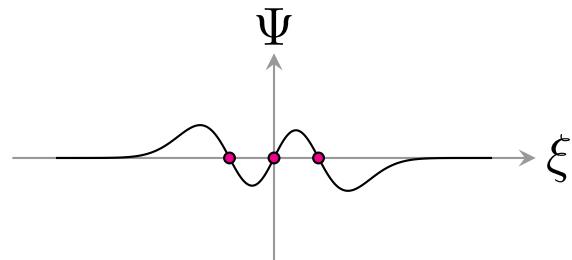


Рис. 15. Третья мода ( $N=3$ )

На рис. 12-15 изображены графики зависимости  $\Psi_0(\xi)$ ,  $\Psi_1(\xi)$ ,  $\Psi_2(\xi)$  и  $\Psi_3(\xi)$ . Из них можно сделать вывод, что количество нулей волновой функции совпадает с номером моды (на графиках нули отмечены маркерами).

Единственное, что мы не сделали — не нашли общую формулу (для  $H_k$ ). Это можно сделать, получив общее решение уравнения 11, например, с помощью метода Лапласа, который применим к дифференциальным уравнениям, содержащим аргумент в степени не выше первой. Мы в этом разделе этого делать не будем, а сделаем в следующем с помощью операторного метода.

### 2.3.2 Нормировка $H_0$

Когда мы искали моды, перед волновой функцией оставался коэффициент  $C_0$  или  $C_1$ . Мы можем найти его из условия нормировки волновой функции. Сделаем это на примере нормировки  $\Psi_0$ , для  $\Psi_1$  аналогично и рассматривать не будем.

Предположим, что  $X$  – нормировочный множитель и  $X^2 \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi_0^2| d\xi = 1$ .

Тогда в силу известного определённого интеграла Пуассона

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp\{-\xi^2\} d\xi = \sqrt{\pi}$$

Нетрудно получить ответ:

$$\Psi_0 = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} \exp\{-\xi^2/2\}$$

## 2.4. Операторное решение уравнения Эрмита

Вернёмся к уравнению (8). Для простоты теперь будем обозначать безразмерный оператор  $\hat{p}_b \equiv p$ , а безразмерный оператор координаты  $\hat{\xi} \equiv \xi$ .

Для решения уравнения также наложим условие, что волновая функция ограничена сверху некоторым конечным числом  $M$  при любых  $\xi$ :

$$\frac{p^2 + \xi^2}{2} \Psi(\xi) = \varepsilon \Psi(\xi), \quad \left\{ |\Psi(\xi)| < M \mid \forall \xi \right\} \quad (14)$$

Займёмся операторной алгеброй и будем рассматривать  $p$  и  $\xi$  просто как операторы. Их алгебра задаётся соотношением:

$$\hat{p}\hat{\xi} - \hat{\xi}\hat{p} = -i \quad (15)$$

### 2.4.1 Понижение порядка уравнения

Рассмотрим переход от уравнения второго порядка к комплексному уравнению первого порядка на примере классического осциллятора.

Это действительное уравнение второго порядка, но его можно свести к

двум комплексным уравнениям первого порядка:

$$\begin{aligned} x'' + \omega^2 x &= 0 \\ \underbrace{x'' + i\omega x'}_{u'} - i\omega x' + \omega^2 x &= 0 \\ u' - i\omega(x' + i\omega x) & \\ u' - i\omega u &= 0 \end{aligned}$$

Мы можем решить уравнение первого порядка, найти  $u$ , а затем подставить его в уравнение

$$x' + i\omega x = u$$

и решить это неоднородное уравнение первого порядка тривиальным интегрированием. Так решается уравнение классического осциллятора в [книге Ландау и Лившица «Теоретическая механика»](#).

#### 2.4.2 Операторы рождения $\hat{a}$ и уничтожения $\hat{a}^+$

Оказывается, в квантовой механике возможна точно такая же процедура понижения порядка уравнения, только её нужно проводить на операторах. Для этого вводят новые операторы:

$$\hat{\xi} = \frac{a + a^+}{\sqrt{2}}, \quad \hat{p} = \frac{a - a^+}{i\sqrt{2}} \quad (16)$$

Операторы  $\xi$ ,  $p$  эрмитовы (то есть самосопряжены), а операторы  $a$ ,  $a^+$  взаимно сопряжены друг с другом, где  $a^+$  обозначает эрмитово сопряжение  $a$ .

Операторы  $a$ ,  $a^+$ , очевидно, не эрмитовы, так как  $a \neq a^+$ . Если бы было равенство, то получилось бы  $p = 0$ , что означает неверность замены операторов.

Проверим эрмитовость  $\xi$ :

$$\xi^+ = \left( \frac{a + a^+}{\sqrt{2}} \right)^+ = \frac{a^+ + (a^+)^+}{\sqrt{2}} = \frac{a^+ + a}{\sqrt{2}} = \xi$$

Аналогично доказывается эрмитовость  $p$ . В нём числитель поменяет знак, но это уравновешивается сменой знака  $i$  в знаменателе:  $i^+ = -i$ . Значит, такое представление  $\xi$  и  $p$  возможно: оно не нарушает их эрмитовости, а как мы

помним, все физические операторы эрмитовы.

Отметим, что оператор  $a^+$  называют оператором рождения (или повышения), а  $a$  оператором уничтожения (или понижения). Смысл этих названий мы поймём позже, рассмотрев их свойства.

**Коммутатор**  $[a, a^+]$ . Займёмся вычислением такого коммутатора. Он понадобится дальше в выкладках. Подставим замену (16) в выведенный коммутатор  $p$  и  $\xi$  (15):

$$\begin{aligned} \frac{a - a^+}{\sqrt{2}i} \cdot \frac{a + a^+}{\sqrt{2}} - \frac{a + a^+}{\sqrt{2}} \cdot \frac{a - a^+}{\sqrt{2}i} &= -i \\ (a - a^+)(a + a^+) - (a + a^+)(a - a^+) &= 2 \\ aa - a^+a + aa^+ - a^+a^+ - (aa + a^+a - aa^+ - a^+a^+) &= 2 \\ aa^+ - a^+a &= 1 \end{aligned} \tag{17}$$

Получили, что операторы  $a$  и  $a^+$  коммутируют на 1. Заменим все операторы в уравнении Эрмита (14):

$$\begin{aligned} \frac{p^2 + \xi^2}{2} &= \frac{(a - a^+)(a - a^+)}{2\sqrt{2}\sqrt{2}i^2} + \frac{(a + a^+)(a + a^+)}{2\sqrt{2}\sqrt{2}} = \\ &= \frac{1}{4}[(a + a^+)(a + a^+) - (a - a^+)(a - a^+)] = \\ &= \frac{1}{4}[aa + a^+a + aa + a^+a^+ - (aa - a^+a - a^+ + a^+a^+)] = \frac{1}{2}(a^+a + aa^+) \end{aligned}$$

Напомним, что в отличии от обыкновенной алгебры, порядок операторов нельзя менять, для них не выполняется свойство коммутативности  $ab = ba$ . Поэтому, раскрывая скобки и приводя подобные, нужно следить за порядком членов.

Применяем коммутационное соотношение:

$$\frac{1}{2}(a^+a + aa^+) = \frac{1}{2}(2a^+a + 1) = a^+a + \frac{1}{2} = \frac{p^2 + \xi^2}{2} \tag{18}$$

Заметим, что тут у нас стоит сумма оператора и числа. Вообще говоря, математики бы поставили перед  $\frac{1}{2}$  единичный оператор, чтобы вся сумма была оператором: но в квантовой механике принято его не писать и подразумевать из контекста.

### 2.4.3 Уравнение Эрмита в новых операторах

Итак, мы решили уравнение Эрмита с помощью производных, разложения в ряд, иначе говоря - с помощью аппарата матанализа. Теперь попробуем решить его с помощью операторной алгебры, не решая нигде дифференциальных уравнений, кроме последнего этапа. При этом алгебра операторов нам задана коммутационными соотношениями.

Итак, используя полученное нами соотношение (18), запишем уравнение Эрмита через операторы  $a$ ,  $a^+$ :

$$\left( a^+ a + \frac{1}{2} \right) \Psi(\xi) = \varepsilon \Psi(\xi)$$

Или перепишем его в более компактном виде, попутно введя новую переменную  $\alpha$ :

$$a^+ a \Psi = \underbrace{\left( \varepsilon - \frac{1}{2} \right)}_{\alpha} \Psi \quad \Rightarrow \quad a^+ a \Psi = \alpha \Psi \quad (19)$$

### 2.4.4 Смысл операторов $a$ , $a^+$ и свойства $\alpha$

Перепишем в дираковских обозначениях уравнение (19):

$$a^+ a |\Psi_\alpha\rangle = \alpha |\Psi_\alpha\rangle$$

Это по сути задача на собственные функции  $\Psi_\alpha$  и собственные значения  $\alpha$  оператора  $a^+ a$ .

Так как функция  $\Psi$  обозначает у нас волновую функцию, а дираковская скобка тоже обозначает волновую функцию, то обозначение  $|\Psi_\alpha\rangle$  избыточно, и в дальнейшем мы будем обозначать его просто как  $|\alpha\rangle$ . То есть, примем соглашение, по которому мы просто нумеруем (параметризуем) собственные функции соответствующими собственными числами. Такое обозначение, например, принято в лекциях Фейнмана. Итак, мы имеем, по определению

$$|\Psi_\alpha\rangle \equiv |\alpha\rangle .$$

Итак, теперь все, что мы рассматривали раньше, свелось к задаче

$$a^+ a |\alpha\rangle = \alpha |\alpha\rangle . \quad (20)$$

Исследуем свойства этого уравнения.

**Неотрицательность собственных чисел  $\alpha$ .** Чтобы доказать этот факт, домножим уравнение (20) слева на левый вектор (бра-скобку)  $\langle \alpha |$ :

$$\langle \alpha | a^+ a | \alpha \rangle = \alpha \langle \alpha | \alpha \rangle$$

Если волновая функция нормируемая, то можно отнормировать её на единицу:  $\langle \alpha | \alpha \rangle = 1$ . В этом предположении сразу получаем, что в правой части уравнения стоит  $\alpha$ , умноженное на положительное число. Осталось доказать, что в левой оно тоже положительно.

Посмотрим внимательно на левую часть уравнения. Можем ли мы предположить, что  $a$  действует только на правую скобку, а  $a^+$  только на левую?

Можем, это позволяет нам сделать ассоциативный закон<sup>1</sup>. Умножение операторов не коммутативно, но ассоциативно! Этот факт нетрудно доказать, если записать операторы в матричной форме.

Теперь мы можем записать уравнение так:

$$\langle \alpha | a^+ \cdot a | \alpha \rangle = \alpha \langle \alpha | \alpha \rangle$$

Слева стоит произведение двух абстрактных векторов. Заметим, что в силу определения эрмитова сопряжения

$$\langle \alpha | a^+ = (a | \alpha \rangle)^+$$

Если мы обозначим вектор  $|\chi\rangle = a |\alpha\rangle$ , то слева у нас, оказывается, стоит скалярное произведение, естественно неотрицательное:

$$\langle \chi | \chi \rangle \geq 0$$

Таким образом,  $\alpha$  как коэффициент пропорциональности между двумя неотрицательными числами тоже число неотрицательное.  $\square$

---

<sup>1</sup>Напомним на примере арифметики, что это за свойство:  $3 \cdot (5 \cdot 8) = (3 \cdot 5) \cdot 8$

**Смысл  $a$  как оператора уничтожения.** Подействуем на уравнение (20) оператором  $a$  слева. В правой части  $a \cdot \alpha |\alpha\rangle = \alpha a |\alpha\rangle$ , т.к.  $\alpha$  – число:

$$aa^+a |\alpha\rangle = \alpha a |\alpha\rangle$$

Сделаем замену в силу коммутационного соотношения (17):

$$(a^+a + 1)a |\alpha\rangle = \alpha a |\alpha\rangle \Rightarrow a^+a \underbrace{a |\alpha\rangle}_{|\beta\rangle} = (\alpha - 1)a |\alpha\rangle$$

Здесь мы можем считать  $|\beta\rangle$  собственными функциями оператора  $a^+a$ , и сравним с уравнением (20)

$$a^+a |\beta\rangle = (\alpha - 1) |\beta\rangle \Leftrightarrow a^+a |\alpha\rangle = \alpha |\alpha\rangle$$

Из этого сопоставления очевидно, что должно быть верно  $|\beta\rangle \sim |\alpha - 1\rangle$  (равенство не пишем, так как ничего не знаем о нормировке), а значит

$$a |\alpha\rangle \sim |\alpha - 1\rangle$$

То есть, действуя оператором  $a$ , мы понизили номер волновой функции – это и есть смысл названия «оператор уничтожения» (или понижения).

**Целостность собственных чисел  $\alpha$ .** Выше мы доказали, что номера волновой функции у нас могут быть только неотрицательными. Рассмотрим последовательное применение оператора  $a$   $n$  раз к  $|\alpha\rangle$ :

$$a^n |\alpha\rangle \sim |\alpha - n\rangle$$

Но мы помним, что  $|\alpha - n\rangle \equiv |\Psi_{\alpha-n}\rangle$ , а значит

$$\alpha - n > 0$$

Так как мы можем применять оператор уничтожения сколь угодно раз, нужно, чтобы при некотором номере  $n$  номер волновой функции  $\alpha - n$  занулился, и тогда все последующие номера будут разрешены: они будут просто нулями. Иначе они станут отрицательными, а мы уже доказали, что это не так.

Значит,  $\alpha = n$ , а отсюда вывод –  $\alpha$  целое.  $\square$

Вспомним, что такое у нас  $\alpha$ :

$$\varepsilon - \frac{1}{2} = \alpha = n$$

А это же и есть квантование осциллятора, которое мы получали в предыдущей лекции! Теперь мы получили его, не производя никаких дифференцирований, разложений в ряд и тому подобного:

$$\varepsilon = n + \frac{1}{2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots,$$

Дальше везде вместо  $\alpha$  мы будем писать  $n$ , подразумевая что теперь мы знаем, что собственные числа целые.

**Смысл  $a^+$  как оператора рождения.** Подействуем на уравнение (20) оператором  $a^+$  слева. В правой части  $a^+(n|n\rangle) = na^+|n\rangle$ , так как  $n$  - число:

$$a^+a^+a|n\rangle = na^+|n\rangle$$

Сделаем замену в силу коммутационного соотношения (17):

$$a^+(aa^+ - 1)|n\rangle = na^+|n\rangle$$

Откуда перегруппировкой слагаемых получается уравнение

$$a^+aa^+|n\rangle = (n+1)a^+|n\rangle$$

Аналогично, как мы это проделывали с понижающим оператором, назовём новую собственную функцию  $|\beta\rangle = a^+|n\rangle$  и сравним с уравнением (20):

$$a^+a|\beta\rangle = (n+1)|\beta\rangle \quad \Leftrightarrow \quad a^+a|n\rangle = n|n\rangle$$

Отсюда  $|\beta\rangle \sim |n+1\rangle$ , и

$$a^+|n\rangle \sim |n+1\rangle$$

То есть, действуя оператором  $a^+$ , мы повысили номер волновой функции. Поэтому этот оператор называют повышающим, или оператором рождения.

### 2.4.5 Нахождение собственных чисел. Оператор $\hat{n}$

Вернёмся опять к уравнению (20) и домножим его на левую скобку  $\langle n|$ :

$$\langle n| a^+ a |n\rangle = n \langle n|n\rangle$$

Разделим действие операторов:  $a^+$  действует на левую скобку,  $a$  на правую (возможность так делать мы обосновали при доказательстве неотрицательности  $\alpha$ ) и вставим между такими векторами единичный оператор:

$$\begin{aligned} & \sum_k |k\rangle \langle k| \\ & \quad \downarrow \\ & \langle n| a^+ \hat{1} a |n\rangle = n \langle n|n\rangle \end{aligned}$$

При этом сумму мы можем вынести за скобки:

$$\sum_k \langle n|a^+|k\rangle \langle k|a|n\rangle = n \langle n|n\rangle$$

Покажем, что в этой сумме только одно слагаемое не ноль. Действительно, используя понижающее свойство  $a$  и повышающее  $a^+$  мы можем записать, что

$$\sum_k \langle n|k+1\rangle \langle k|n-1\rangle \sim n \langle n|n\rangle$$

Так как  $\langle k|m\rangle = 0$  при  $k \neq m$ , сумма упрощается до одного слагаемого  $k = n - 1$ . Теперь вернёмся обратно к формуле с операторами:

$$\langle n|a^+|n-1\rangle \langle n-1|a|n\rangle = n \langle n|n\rangle \quad (21)$$

Покажем, что если предположить, что волновая функция нормирована,  $\langle m|n\rangle = \delta_{mn}$ , то отсюда следует

$$|\langle n|a^+|n-1\rangle|^2 = |\langle n-1|a|n\rangle|^2 = n$$

Действительно, заметим, что и первый и второй множители – матричные элементы операторов  $a, a^+$ . Пусть  $A$  – матрица оператора  $a$ : тогда формула (21) перепишется в виде

$$A_{n,n-1}^+ \cdot A_{n-1,n} = n$$

Но на языке матриц  $A^+ = (A^*)^T = (A^T)^*$ . Преобразуем сначала первый множитель:

$$A_{n,n-1}^+ \cdot A_{n-1,n} = A_{n-1,n}^* \cdot A_{n-1,n} = |A_{n-1,n}|^2 = n$$

Теперь преобразуем второй множитель:

$$A_{n,n-1}^+ \cdot A_{n-1,n} = A_{n,n-1}^+ \cdot A_{n-1,n}^{+T*} = A_{n,n-1}^+ \cdot A_{n,n-1}^{+*} = |A_{n,n-1}^+|^2 = n$$

Действительно, если теперь вернуться к нотации Дирака, получим нужное выражение:

$$|\langle n | a^+ | n-1 \rangle|^2 = |\langle n-1 | a | n \rangle|^2 = n$$

□

Извлекаем корень из этих выражений:

$$\langle n | a^+ | n-1 \rangle = \sqrt{n}, \quad \langle n-1 | a | n \rangle = \sqrt{n} \quad (22)$$

Сравнивая полученные выражения с ранее выведенными формулами, описывающими действие операторов повышения и понижения, получим собственные числа обоих операторов:

$$a^+ |n-1\rangle = \sqrt{n} |n\rangle, \quad a |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle$$

**Оператор числа частиц  $\hat{n}$ .** Подействуем на второе выражение оператором  $a^+$ :

$$a^+ a |n\rangle = \sqrt{n} a^+ |n-1\rangle = n |n\rangle \quad (23)$$

Оператор  $\hat{n} \equiv a^+ a$  часто называют оператором числа частиц. Если уравнение (23) помножить слева на вектор  $\langle n |$ , то можно будет понять, что собой представляет этот оператор в матричном виде:

$$\langle n | \hat{n} | n \rangle = n$$

Напомним, что если мы сопоставляем матрицу оператору  $\hat{n}$ , то в левой скобке стоит номер строки, в правой номер столбца, а все скалярное произведение задаёт значение матричного элемента на пересечении этих столбца и строки.

Таким образом, мы можем записать матрицу оператора. Заметим, что она

диагональная:

$$\hat{n} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots \end{pmatrix}$$

Построим также матрицы операторов уничтожения и рождения, исходя из выведенных выше формул (22)  $\langle n | a^+ | n - 1 \rangle = \sqrt{n}$ ,  $\langle n - 1 | a | n \rangle = \sqrt{n}$ :

$$\hat{a} = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{a}^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & \dots \end{pmatrix}$$

#### 2.4.6 Собственные функции уравнения Эрмита

Вернёмся к установленному нами ранее уравнению (20), задающему уравнение Эрмита в бракет-нотации:

$$a^+ a |n\rangle = n |n\rangle$$

Мы установили, что собственные числа оператора  $\hat{n} = a^+ a$  целые. Для того, чтобы ряд собственных функций обрывался и не было отрицательного индекса (мы доказали, что это запрещено), необходимо существование наименьшего состояния с нулевым индексом. Оно называется вакуумным состоянием:

$$a |0\rangle = 0 \tag{24}$$

Чтобы найти следующее состояние, нужно подействовать оператором рождения на предыдущее состояние, не забыв про нормировку:

$$|1\rangle = a^+ |0\rangle \cdot \frac{1}{\sqrt{1}}, \quad |2\rangle = a^+ |1\rangle \cdot \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \dots \quad |n\rangle = a^+ |n-1\rangle \cdot \frac{1}{\sqrt{n}}$$

Ну и вообще говоря, отсюда очевидным образом следует и общая формула:

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^+)^n |0\rangle \tag{25}$$

Мы нашли и собственные числа, и собственные функции – все, ни разу ничего не продифференцировав и не проинтегрировав. Это называется алгебраическим методом.

Теперь установим соответствие между старым подходом и новым подходом. Вспомним, как мы ранее вводили операторы рождения и уничтожения, и проведем операцию обратного перехода от оператора  $a$  к  $p$  и  $\xi$ :

$$\xi = \frac{a + a^+}{\sqrt{2}}, \quad p = \frac{a - a^+}{\sqrt{2}i} \quad \Rightarrow \quad a = \frac{\xi + ip}{\sqrt{2}}$$

Учтя, что  $p = -i\frac{\partial}{\partial\xi}$ , получим оператор  $a$  в координатном представлении. Аналогично получается оператор  $a^+$ .

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{\partial}{\partial\xi}\right), \quad a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi - \frac{\partial}{\partial\xi}\right)$$

Теперь можем перейти от braket-записи уравнения вакуумного состояния (24) к уравнению в координатном представлении

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{\partial}{\partial\xi}\right)\Psi_0(\xi) = 0$$

Тут уже придётся дифференцировать, никуда не деться. Но заметим, что нам нужно решать уже не уравнение Эрмита 2-го порядка, а гораздо более простое уравнение первого порядка, которое решается всегда:

$$\xi\Psi + \frac{\partial\Psi}{\partial\xi} = 0 \quad \Rightarrow \quad \xi d\xi = -\frac{d\Psi}{\Psi} \quad \Rightarrow \quad \Psi_0 = C_1 \cdot \exp\left\{-\frac{\xi^2}{2}\right\},$$

где константа из нормировки получается  $C_1 = \pi^{-1/4}$ .

Чтобы получить следующую функцию, нужно подействовать на предыдущую оператором  $a^+$ , и вообще говоря, как мы уже вывели в (25), если подействовать оператором рождения  $n$  раз, получим  $\Psi_n$ :

$$\langle\xi|n\rangle = \Psi_n(\xi) = \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{n! \cdot 2^n}} \left\{ \xi - \frac{\partial}{\partial\xi} \right\}^n \exp\left\{-\frac{\xi^2}{2}\right\}$$

Мы получили все собственные функции путём рекуррентного вычисления, и вообще говоря, вычислили все полиномы Эрмита.

Таким способом решал задачу Гейзенберг, на год раньше Шрёдингера.

## 2.5. Вычисление средних

Рассмотрим практический пример вычисления средних значений, пользуясь матричным представлением операторов.

### 2.5.1 Определение средней координаты

Найдём  $\bar{\xi}$ . По определению среднего:

$$\bar{\xi} = \langle n | \xi | n \rangle = \int \Psi_n^*(\xi) \xi \Psi_n(\xi) d\xi = 0$$

Можно значительно упростить задачу, если смотреть **среднее значение оператора в матричном виде**. Существенно, что такое среднее составляется как сумма, каждое из слагаемых которой содержит множитель - соответствующий элемент главной диагонали матрицы оператора. Значит, если на главной диагонали нули, то среднее ноль. В нашем случае:

$$\xi = \frac{a + a^+}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & \dots \end{pmatrix} \right\}$$

Очевидно, здесь после суммирования матриц на главной диагонали остаются нули, а значит, среднее  $\bar{\xi} = 0$ .  $\square$

### 2.5.2 Определение средней потенциальной энергии

Будем вычислять среднее  $\frac{\xi^2}{2}$ , пользуясь матричными соображениями. Для начала, раскроем квадрат  $\frac{\xi^2}{2}$ , помня о том, что операторы не коммутативны:

$$\frac{\xi^2}{2} = \frac{(a + a^+)^2}{4} = \frac{1}{4} (aa + aa^+ + a^+a + a^+a^+)$$

Заметим, что некоторые слагаемые в среднем дадут ноль, так как у них нули на главной диагонали матрицы. Это  $aa$  и  $a^+a^+$ . Рассмотрим на примере  $aa$ :

$$aa |n\rangle \sim |n-2\rangle \Rightarrow \langle n-2 | aa |n\rangle \sim 1$$

Другие матричные элементы, кроме на строке  $n - 2$  и столбце  $n$ , занулятся в силу  $\langle m|n \rangle = \delta_{mn}$ . Значит, на диагонали действительно нули. Аналогично с  $a^+a^+$ . Тогда среднее упрощается:

$$\frac{\overline{\xi^2}}{2} = \frac{1}{4} \langle n| aa^+ + a^+a |n\rangle$$

Воспользуемся коммутационным соотношением (17):

$$\frac{1}{2}(aa^+ + a^+a) = a^+a + \frac{1}{2} \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{2} \langle n| aa^+ + a^+a |n\rangle = \langle n| a^+a |n\rangle + \frac{1}{2}$$

А так как в силу (23) можем подставить  $a^+a |n\rangle = n |n\rangle$ , то

$$\frac{\overline{\xi^2}}{2} = \frac{1}{2} \left( \langle n| a^+a |n\rangle + \frac{1}{2} \right) = \frac{1}{2} \left( n + \frac{1}{2} \right) = \frac{\varepsilon}{2}.$$

### 3. Орбитальный момент

Эмми Нёттер установила связь между законами сохранения и соответствующими им свойствами какой-либо симметрии. В квантовой механике эта связь приобретает особенно прозрачный смысл.

#### 3.1. Законы сохранения в квантовой механике

Рассмотрим, как появляется связь закона сохранения и свойства симметрии на примере нестационарного уравнения Шрёдингера:

$$i\hbar\dot{\Psi} = \hat{H}\Psi \quad (26)$$

##### 3.1.1 Трансляция времени

Запишем производную волновой функции по определению производной:

$$\dot{\Psi} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Psi(t + \Delta t) - \Psi(t)}{\Delta t} = \frac{\Psi(t + \delta t) - \Psi(t)}{\delta t},$$

где введено обозначение  $\delta t$  – бесконечно малый сдвиг во времени (операция сдвига во времени называется трансляцией времени).

Так как  $\delta t$  мало, можем разложить  $\Psi(t + \delta t)$  в ряд Тейлора. А так как  $\delta t$  ещё и бесконечно мало, то разложить можем только до первого члена, учитя в силу (26), что  $\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{\hat{H}}{i\hbar}\Psi(t)$ :

$$\Psi(t + \delta t) = \Psi(t) + \delta t \frac{\partial\Psi}{\partial t} = \left\{ 1 + \frac{\delta t}{i\hbar} \hat{H} \right\} \Psi(t)$$

$\uparrow$   
 Оператор бесконечно малого  
 сдвига во времени  $\hat{G}_{\delta t}$

Если физическая система инвариантна относительно трансляции времени, то в ней сохраняется  $\hat{H}$ .

Для дальнейших рассуждений вспомним, как вводится оператор производной по времени в квантовой механике. Выведем его:

$$\langle \dot{A} \rangle = \langle \Psi | \dot{A} | \Psi \rangle + \left\langle \dot{\Psi} \left| A \right| \Psi \right\rangle + \left\langle \Psi \left| A \right| \dot{\Psi} \right\rangle = \langle \Psi | \left( \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} (HA - AH) \right) | \Psi \rangle$$

Отсюда, очевидно, следует

$$\dot{A} = \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [A, H]$$

В классической физике сохранение  $H$  означает, что  $\dot{H} = 0$ . Соотнесём это определение с выведенным равенством:

$$\dot{H} = \cancel{\frac{\partial H}{\partial t}} + \frac{i}{\hbar} [H, H]$$

$H$  не может явным образом зависеть от времени, иначе о сохранении просто говорить нельзя. Но коммутатор  $[H, H]$  очевидно равен нулю, значит, равна нулю и вся сумма, и мы получили сохранение  $\hat{H}$ .

### 3.1.2 Трансляция пространства

Мы рассмотрели, как вводится трансляция времени и соответствующий оператор бесконечно малого сдвига во времени. Согласно теореме Нёттер, если система инвариантна относительно трансляции в пространстве, то сохраняется импульс.

Оператор импульса - это оператор бесконечно малой трансляции координаты. Разложим волновую функцию в ряд Тейлора в окрестности  $x$ , для начала в одномерном случае:

$$\Psi(x + a) = \Psi(x) + a \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x} + \dots + \frac{a^n}{n!} \frac{\partial^n \Psi}{\partial x^n}$$

Или, в операторной форме:

$$\Psi(x + a) = \left( 1 + a \frac{\partial}{\partial x} + \dots + \frac{a^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial x^n} \right) \Psi(x)$$

Скобка представляет собой разложение экспоненты в **ряд Тейлора**. С учетом этого, получаем

$$\Psi(x + a) = \exp \left( a \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi(x) = \exp \left( \frac{i}{\hbar} \hat{p} a \right) \Psi(x)$$

↑  
Оператор конечного сдвига  
в пространстве  $\hat{T}_a$

Перейдём к рассмотрению бесконечно малого приращения координаты  $\delta a$ . Тогда можем ограничиться двумя членами разложения и получить оператор бесконечно малого сдвига в пространстве, учтя, что  $p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ :

$$\Psi(x + \delta a) = \left(1 + \delta a \frac{\partial}{\partial x}\right) \Psi(x) = \left(1 + \frac{i}{\hbar} \delta a \hat{p}\right) \Psi(x)$$

$\uparrow$   
Оператор бесконечно малого  
сдвига в пространстве  $\hat{T}_{\delta a}$

Для нашего трёхмерного пространства несложно догадаться, какой вид будет иметь оператор сдвига, по аналогии с одномерным случаем:

$$\Psi(\vec{r} + \delta \vec{a}) = (1 + \delta \vec{a} \nabla) \Psi(x) = \left(1 + \frac{i}{\hbar} (\delta \vec{a}, \hat{\vec{p}})\right) \Psi(x)$$

$\uparrow$   
Оператор бесконечно малого  
сдвига в пространстве  $\hat{T}_{\delta \vec{a}}$

### 3.1.3 Вращение пространства

Рассмотрим преобразование поворота в пространстве. Как можно в общем случае описать поворот вектора в трёхмерном пространстве? Прибавить к нему некоторый бесконечно малый перпендикулярный вектор:

$$\vec{r}' = \vec{r} + \delta\vec{r}$$

Если он будет не перпендикулярен, то появится сдвиг в пространстве, а если не мал, то это не будет поворотом: при повороте длина (модуль) вектора должна сохраняться.

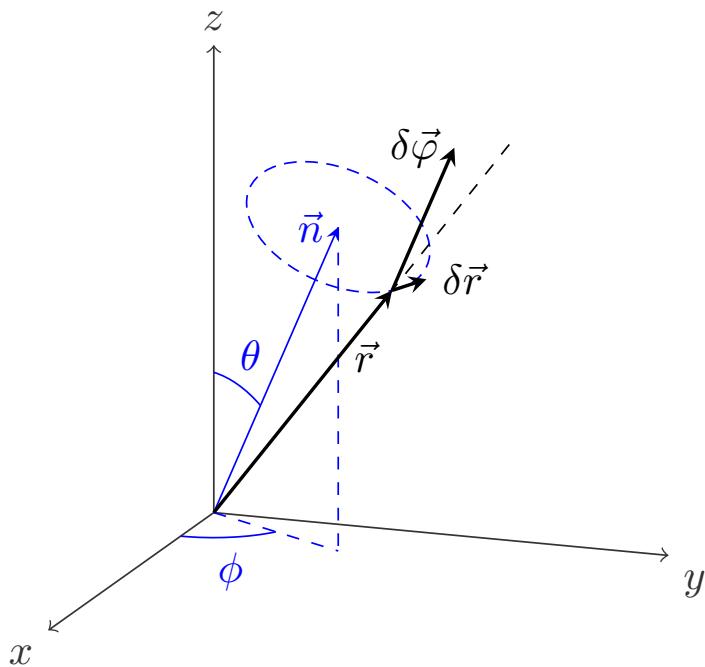


Рис. 16. Преобразование поворота

Если мы введём ось  $\vec{n}$  (см. рис. 16), вокруг которой будем осуществлять вращение вектора  $\vec{r}$ , то поворот можно описать с помощью нового вектора  $\delta\vec{\varphi} = \vec{n}\delta\varphi$ :

$$\delta\vec{r} = [\delta\vec{\varphi} \times \vec{r}]$$

Займёмся выражением оператора бесконечно малого поворота, разложив

в ряд волновую функцию повёрнутого аргумента:

$$\begin{aligned}\Psi(\vec{r} + \delta\vec{r}) &= \Psi(\vec{r}) + \delta\vec{r} \nabla \Psi(\vec{r}) = (1 + \delta\vec{r} \nabla) \Psi(\vec{r}) = \\ &= \left\{ 1 + ([\delta\vec{\varphi} \times \vec{r}] \cdot \nabla) \right\} \Psi(\vec{r})\end{aligned}$$

Заметим, что в скобках стоит смешанное произведение, для которого выполняется свойство **циклической перестановки**:

$$(\vec{a}, [\vec{b} \times \vec{c}]) = (\vec{c}, [\vec{a} \times \vec{b}]) = (\vec{b}, [\vec{c} \times \vec{a}])$$

Тогда

$$\Psi(\vec{r} + \delta\vec{r}) = \left\{ 1 + \delta\vec{\varphi} \cdot [\vec{r} \times \vec{\nabla}] \right\} \Psi(\vec{r})$$

Введём по определению оператор момента импульса (орбитального момента):

$$\hat{\vec{L}} = [\vec{r} \times \vec{p}] = -i\hbar [\vec{r} \times \vec{\nabla}]$$

Тогда можем снова переписать выражение для поворота:

$$\Psi(\vec{r} + \delta\vec{r}) = \left\{ 1 + \frac{i}{\hbar} \delta\vec{\varphi} \cdot \hat{\vec{L}} \right\} \Psi(\vec{r}) \quad (27)$$

↑  
Оператор бесконечно малого  
поворота в пространстве  $\hat{R}_{\delta\vec{\varphi}}$

### 3.2. Коммутационные соотношения

Будем измерять момент импульса в единицах  $\hbar$  ( $p = \hbar k$ ) (вспомним,  $\hbar$  – это квант действия). Вводится безразмерный орбитальный момент  $\vec{l}$ :

$$\vec{L} = \hbar \vec{l}$$

Откуда, учитя что  $\vec{k} = -i\nabla$ , получаем

$$\vec{l} = [\vec{r} \times \vec{k}]$$

Раскроем векторное произведение:

$$\hat{l} = [\vec{r} \times \vec{k}] = -i \begin{vmatrix} \vec{x}_0 & \vec{y}_0 & \vec{z}_0 \\ x & y & z \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \vec{x}_0 & \vec{y}_0 & \vec{z}_0 \\ x & y & z \\ k_x & k_y & k_z \end{vmatrix}$$

Раскроем по координатно проекции импульса, расписав определитель:

$$\begin{aligned} l_x &= yk_z - zk_y \\ l_y &= zk_x - xk_z \\ l_z &= xk_y - yk_x \end{aligned}$$

### 3.2.1 Коммутатор проекций момента импульса

Найдём коммутатор  $[l_x, l_y]$ , учтя, что  $y, x, k_z$  коммутируют:

$$\begin{aligned} l_x l_y - l_y l_x &= (yk_z - zk_y)(zk_x - xk_z) - (zk_x - xk_z)(yk_z - zk_y) = \quad (28) \\ &= yk_z zk_x - \cancel{yk_z xk_z} - \cancel{zk_y zk_x} + zk_y xk_z - \\ &\quad - (zk_x yk_z - \cancel{zk_x zk_y} - \cancel{xk_z yk_z} + xk_z zk_y) = \\ &= yk_z zk_x - xk_z zk_y + zk_y xk_z - zk_x yk_z \end{aligned}$$

Посмотрим, как действует первое слагаемое на  $\Psi$ , учтя что оператор произведения раскрывается как производная произведения ( $k_z \sim \frac{\partial}{\partial z}$ ), а  $k_z z = -i$ :

$$\begin{aligned} yk_z zk_x \Psi &= y \cdot k_z (zk_x \Psi) = y \cdot k_z \overset{\downarrow}{z} k_x \Psi + y \cdot k_z z \overset{\downarrow}{(k_x \Psi)} = \\ &= -iyk_x + zy \cdot k_z k_x \Psi \end{aligned}$$

Для второго слагаемого можно получить аналогичную формулу заменой в последней формуле  $y \rightarrow x, x \rightarrow y$ :

$$xk_z zk_y \Psi = -ixk_y + zx \cdot k_z k_y \Psi$$

Подставим получившийся результат в (28), учтя коммутируемость некоторых операторов:

$$\begin{aligned}
 (l_x l_y - l_y l_x) \Psi &= (y k_z z k_x - x k_z z k_y + z k_y x k_z - z k_x y k_z) \Psi = \\
 &= -i(y k_x - x k_y) \Psi + \cancel{z y \cdot k_z k_x} \Psi - \cancel{z x \cdot k_z k_y} \Psi + \cancel{z x \cdot k_y k_z} \Psi - \cancel{z y \cdot k_x k_z} \Psi = \\
 &= -i(y k_x - x k_y) \Psi
 \end{aligned}$$

Или, вспомнив что последнее выражение можно переписать через  $l_z$ :

$$l_x l_y - l_y l_x = i l_z$$

Отсюда циклической перестановкой  $x \rightarrow y \rightarrow z \rightarrow x$  получим ещё два коммутационных соотношения, и в итоге получаем важный результат - операторы проекций момента импульса между собой не коммутируют:

$$\begin{cases} l_x l_y - l_y l_x = i l_z \\ l_y l_z - l_z l_y = i l_x \\ l_z l_x - l_x l_z = i l_y \end{cases} \quad (29)$$

Вспомним, если операторы коммутируют, у них общая система собственных функций, и операторы в этом базисе диагональны  $\Rightarrow$  величины имеют определённое значение (одновременно измеримы).

### 3.2.2 Коммутатор проекции волнового вектора и координаты

Вспомним коммутационное соотношение для проекции импульса и координаты:

$$p_x x - x p_x = -i \hbar$$

Заметим, что так как  $k = -i \nabla = \frac{p}{\hbar}$ , то

$$k_x x - x k_x = -i$$

В силу того, что оператор нельзя переставлять только с тем объектом, на который он действует, будут выполняться соотношения вида

$$k_y x - x k_y = 0$$

В данном случае  $k_y \sim \frac{\partial}{\partial y}$ , а производная по  $y$  на  $x$  не действует. Аналогичные равенства выполняются и для других сочетаний коммутатора какой-либо проекции и координаты. Можно записать коммутатор в общем виде через символ Кронекера:

$$k_i x_k - x_j k_i = -i\delta_{ij}, \quad i, j = x, y, z$$

### 3.2.3 Коммутатор квадрата момента импульса и его проекции

Введём оператор квадрата момента импульса:

$$l^2 = l_x^2 + l_y^2 + l_z^2$$

Займёмся поиском коммутатора  $[l^2, l_z]$ . Заметим, что  $[l_z^2, l_z]$ , очевидно, равен нулю, и тогда:

$$[l^2, l_z] = (l_x^2 + l_y^2 + l_z^2)l_z - l_z(l_x^2 + l_y^2 + l_z^2) = l_x^2 l_z - l_z l_x^2 + l_y^2 l_z - l_z l_y^2 \quad (30)$$

Для вычисления  $[l_x^2, l_z]$  нужно пользоваться алгеброй, которая задаётся коммутационными соотношениями (29).

Для этого проделаем некоторые арифметические действия для приведения к виду, содержащем в явном виде уже известные коммутационные соотношения:

$$\begin{aligned} l_x^2 l_z - l_z l_x^2 &= l_x l_x l_z \underbrace{- l_x l_z l_x + l_x l_z l_x}_{\text{Добавили и вычли}} - l_z l_x^2 = \\ &= l_x (l_x l_z - l_z l_x) + l_x l_z l_x - l_z l_x^2 = \\ &= l_x \underbrace{(l_x l_z - l_z l_x)}_{-i l_y} + \underbrace{(l_x l_z - l_z l_x)}_{-i l_y} l_x = -i(l_x l_y + l_y l_x) \end{aligned} \quad (31)$$

Аналогично можно получить коммутатор  $[l_y^2, l_z]$ :

$$l_y^2 l_z - l_z l_y^2 = l_y \underbrace{(l_y l_z - l_z l_y)}_{i l_x} + \underbrace{l_y l_z l_y - l_z l_y^2}_{(l_y l_z - l_z l_y) l_y = i l_x l_y} = i(l_y l_x + l_x l_y) \quad (32)$$

Сложив уравнения (31) и (32), получим правую часть уравнения для комму-

татора  $[l^2, l_z]$  (30):

$$[l^2, l_z] = l_x^2 l_z - l_z l_x^2 + l_y^2 l_z - l_z l_y^2 = -i(l_x l_y + l_y l_x) + i(l_y l_x + l_x l_y) = 0$$

Получили важный результат<sup>2</sup>: любая проекция момента импульса и оператор квадрата момента коммутируют, а значит, имеют общую систему функций.

### 3.2.4 Понижающий и повышающий операторы орбитального момента

Когда мы решали задачу о гармоническом осцилляторе, нам было удобно ввести операторы рождения и уничтожения<sup>3</sup>. Аналогично можно ввести повышающие и понижающие операторы. Тогда, вместо операторов  $l_x$  и  $l_y$  мы получим новые операторы  $l_{\pm}$ . Часто вводят понижающий и повышающий операторы момента импульса:

$$l_{\pm} = l_x \pm i l_y$$

Повышающий и понижающий операторы не эрмитовы (так как в них входит мнимая единица):

$$l_+^+ = l_-, \quad l_-^+ = l_+ \quad (33)$$

Напомним, что оператор называется эрмитовым, когда выполняется следующее соотношение:  $l_x^+ = l_x^{*T} = l_x$ .

**Замечание.** Это напоминает нам поляризацию в общей физике (рис. 17): Линейная поляризация записывается через вектора в одной фазе:

<sup>2</sup>Тот же результат можно получить другим, более простым способом. Чтобы не повторяться, попробуем вычислить коммутатор  $[l_x, l^2]$ :

$$l_x l^2 - l^2 l_x = l_x l_y^2 + l_x l_z^2 + \cancel{l_x l_x^2} - l_y^2 l_x - l_z^2 l_x - \cancel{l_x l_x^2}$$

Подействовав на уравнение (28) оператором  $l_y$  справа и слева, получим систему уравнений и сложим её:

$$\begin{cases} l_x l_y^2 - l_y l_x l_y = i l_z l_y \\ l_y l_x l_y - l_y^2 l_x = i l_y l_z \end{cases} \Rightarrow l_x l_y^2 - l_y^2 l_x = i(l_z l_y + l_y l_z)$$

Аналогичным способом, действуя на нужное уравнение слева и справа (но не циклической перестановкой!), получается уравнение:

$$l_x l_z^2 - l_z^2 l_x = -i(l_y l_z + l_z l_y)$$

Но подставив два последних полученных выражения в выражение для коммутатора, получим, что коммутатор равен нулю.

<sup>3</sup>Заметим, что они были не эрмитовы

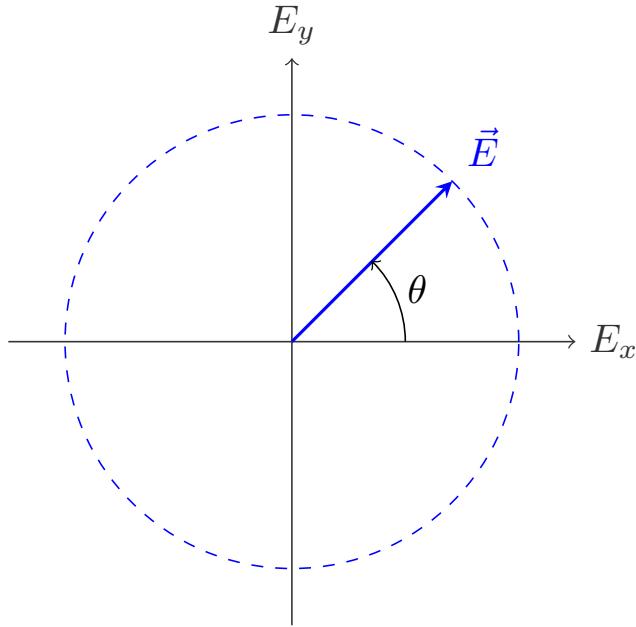


Рис. 17. Круговая поляризация: вектор вращается

$$\vec{x}_0 \cos \omega t + \vec{y}_0 \cos \omega t$$

Рассмотрим теперь круговую поляризацию. Круговой называют поляризацию, в которой вектор напряженности с течением времени поворачивается на плоскости  $(x, y)$ , не изменяя своей длины. Параметрически окружность задается так:

$$\begin{cases} x = \cos \theta \\ y = \sin \theta \end{cases}$$

В случае комплексных переменных, мы можем записать окружность как:

$$z = x + iy = \cos \theta + i \sin \theta = e^{i\theta}$$

Тогда мы можем круговую поляризацию записать так:

$$\vec{E} = \operatorname{Re}\{(\vec{x}_0 \pm i\vec{y}_0)e^{i\omega t}\}$$

Комплексное сопряжение поменяет направление вращения вектора  $\vec{E}$  и даст левую круговую поляризацию. Собственно, это и есть аналогия с (33).

Теперь рассмотрим следующие коммутационные соотношения:

$$[l_z, l_{\pm}], \quad [l_+, l_-].$$

Вычислим первый коммутатор (при вычислении использовались соотношения (29)).

$$\begin{aligned}
 [l_z, l_+] &= l_z(l_x + il_y) - (l_x + il_y)l_z = \underbrace{l_z l_x - l_x l_z}_{il_y} + i \underbrace{(l_z l_y - l_y l_z)}_{-il_x} = \\
 &= il_y + i(-il_x) = l_x + il_y = l_+
 \end{aligned}$$

Аналогично получается формула для  $l_-$ , и тогда

$$[l_z, l_\pm] = \pm l_\pm \quad (34)$$

Вычислим второй коммутатор:

$$\begin{aligned}
 [l_+, l_-] &= (l_x + il_y)(l_x - il_y) - (l_x - il_y)(l_x + il_y) = \quad (35) \\
 &\quad \{ \text{можно сразу заметить, что все слагаемые с } l_x^2, l_y^2 \text{ сокращаются} \} \\
 &= il_y l_x - il_x l_y - (il_x l_y - il_y l_x) = \\
 &= i(l_y l_x - l_x l_y) - i(l_x l_y - l_y l_x) = i(-il_z) - i(il_z) = 2l_z
 \end{aligned}$$

Теперь нам нужно через новые операторы выразить  $l^2 = l_x^2 + l_y^2 + l_z^2$ .

$$l^2 = l_x^2 + l_y^2 + l_z^2 = \frac{(l_+ + l_-)(l_+ + l_-)}{4} - \frac{(l_+ - l_-)(l_+ - l_-)}{4} + l_z^2$$

Все квадраты сократятся, поскольку операторы сами с собой коммутируют, а смешанные слагаемые удваиваются:

$$l^2 = \frac{l_- l_+ + l_+ l_-}{4} + \frac{l_+ l_- + l_- l_+}{4} + l_z^2 = \frac{l_+ l_- + l_- l_+}{2} + l_z^2$$

Воспользуемся коммутационным соотношением (35):

$$l_+ l_- - l_- l_+ = 2l_z \quad \Rightarrow$$

$$l^2 = \frac{2l_- l_+ + 2l_z}{2} + l_z^2 = l_- l_+ + l_z^2 + l_z = l_+ l_- + l_z^2 - l_z \quad (36)$$

### 3.3. Собственные функции и числа оператора орбитального момента

Будем искать решения аналогично тому, как мы это делали для гармонического осциллятора. Будем искать собственные векторы оператора  $l_z$ <sup>4</sup>.

В обозначениях Дирака это запишется так:

$$\hat{l}_z |\alpha_{l_z}, \alpha_{l^2}\rangle = \alpha_{l_z} |\alpha_{l_z}, \alpha_{l^2}\rangle$$

$$\hat{l}^2 |\alpha_{l_z}, \alpha_{l^2}\rangle = \alpha_{l^2} |\alpha_{l_z}, \alpha_{l^2}\rangle$$

Оператор  $l_z$  и  $l^2$  коммутируют, значит, у них общая система собственных функций. Два собственных числа обозначают, что собственный вектор нумеруется двумя числами. Поясним это на примере двух произвольных операторов с общей системой функций:

$$A\Psi_n = a_n \Psi_n, \quad B\Psi_n = b_n \Psi_n$$

$\Psi_n$  собственная функция для операторов  $A$  и  $B$ , поэтому её можно нумеровать одним индексом  $n$ , но иногда нумеруют двумя индексами  $\Psi_{a_n, b_n}$ , поскольку она удовлетворяет обоим уравнениям.

Физический смысл оператора  $l_z$  - поворот вокруг оси  $z$ , то есть изменение угла  $\varphi$ . Поставим перед собой задачу записать  $l_z$  в сферической системе координат. Для этого найдём вид оператора бесконечно малого поворота:

$$f(\theta, \varphi + \delta\varphi) = f(\varphi) + \delta\varphi \frac{\partial f}{\partial \varphi} = \left(1 + \delta\varphi \frac{\partial}{\partial \varphi}\right) f(\varphi) = \underbrace{\left(1 + i \delta\varphi \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}\right)}_{\hat{R}_{\delta\varphi} = l_z} f(\varphi)$$

Тогда в сферической системе координат (сравним с (27))

$$l_z = -i \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

---

<sup>4</sup>Оператор, действуя на свой собственный вектор, умножает его на число

Найдём собственные функции  $\Psi(\varphi)$  оператора  $l_z$  в  $\varphi$ -представлении:

$$-i \frac{\partial}{\partial \varphi} \Psi(\varphi) = \alpha_{l_z} \Psi(\varphi) \quad (37)$$

Решая дифференциальное уравнение (37), получим решение с точностью до константы  $f(r, \theta)$ , не зависящей от  $\varphi$ :

$$\Psi(\varphi) = f(r, \theta) \exp\{i\alpha_{l_z}\varphi\}, \quad \Psi(\varphi) = \Psi(\varphi + 2\pi)$$

**Целость собственных чисел оператора  $l_z$ .** Из решения следует, что собственные числа оператора  $l_z$  должны быть целым числом, иначе поворот на полный угол ( $2\pi$ ) не переведёт функцию обратно.

$$\alpha_{l_z} = m, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

$m$  – собственное число оператора  $l_z$ . Его также называют *магнитным квантовым числом*. Далее мы всюду будем писать, вместо  $\alpha_{l_z}$ , число  $m$ :

$$l^2 |m, \alpha_{l^2}\rangle = \alpha_{l^2} |m, \alpha_{l^2}\rangle$$

**Нормировка собственных функций  $l_z$ .** Тривиальное интегрирование даёт предэкспоненциальный множитель:

$$\Psi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\{im\varphi\}$$

**Смысл операторов повышения и понижения.** Для поиска смысла подействуем оператором повышения на уравнение для собственных функций и чисел  $l_z$ :

$$l_+ \cdot \left| \begin{array}{l} l_z |m, \alpha_{l^2}\rangle = m |m, \alpha_{l^2}\rangle \end{array} \right. \Rightarrow l_+ l_z |m, \alpha_{l^2}\rangle = m l_+ |m, \alpha_{l^2}\rangle$$

Заменим в левой части оператор, воспользовавшись коммутационными соотношениями (34):

$$l_z l_+ - l_+ l_z = l_+ \quad \Rightarrow \quad l_+ l_z = l_z l_+ - l_+$$

$$l_z l_+ |m, \alpha_{l^2}\rangle - l_+ |m, \alpha_{l^2}\rangle = m l_+ |m, \alpha_{l^2}\rangle$$

$$l_z l_+ |m, \alpha_{l^2}\rangle = (m + 1) l_+ |m, \alpha_{l^2}\rangle$$

Это означает, что  $l_+ |m, \alpha_{l^2}\rangle$  является собственной функцией оператора  $l_z$ , соответствующей собственному числу  $m + 1$ :

$$l_+ |m, \alpha_{l^2}\rangle \sim |m + 1, \alpha_{l^2}\rangle$$

Легко догадаться, что

$$l_- |m, \alpha_{l^2}\rangle \sim |m - 1, \alpha_{l^2}\rangle$$

**Ограничность собственных чисел оператора  $l_z$ .** Рассмотрим оператор  $l^2$ . Собственные числа оператора  $l_z$ , как мы выяснили, целые. Оказывается, они также будут ограниченными вследствие того, что проекция не может быть больше, чем полный вектор. Докажем этот факт. Очевидно, что

$$l^2 - l_z^2 = l_x^2 + l_y^2$$

Оператор справа положительно определённый. Вообще говоря, будучи составленным из эрмитовых операторов, он имеет действительные собственные числа, а их сумма квадратов – положительно определённая. Для не эрмитовых было бы не так. Но в нашем случае все хорошо, и любое скалярное произведение будет положительно:

$$\langle \Psi | l_x^2 + l_y^2 | \Psi \rangle \geq 0$$

Так как операторы слева и справа равны, значит, слева тоже положительно определённый оператор, и тогда собственные числа  $l_z$  будут ограничены.  $\square$

Обозначим максимальное возможное  $m_{\max}$  как  $l$ . Тогда минимальное  $m_{\min} = -l$ . Всего получается  $2l + 1$  значений. Тогда чему равно  $l_+ |l, \alpha_{l^2}\rangle$ ? Должно быть равно нулю:

$$l_+ |l, \alpha_{l^2}\rangle = 0, \quad l_- |-l, \alpha_{l^2}\rangle = 0$$

Если бы это было не так, то нарушилось бы условие ограниченности  $m$ .

**Собственные числа оператора  $l^2$ .** Подействуем оператором  $l^2$  на собственный вектор и воспользуемся коммутационным соотношением (36):

$$l^2 |l, \alpha_{l^2}\rangle = (l_- l_+ + l_z^2 + l_z) |l, \alpha_{l^2}\rangle = l_z(l_z + 1) |l, \alpha_{l^2}\rangle$$

Так как ранее мы выяснили, что собственные значения  $l_z$  – числа  $m$ :

$$\begin{cases} l_z^2 |l, \alpha_{l^2}\rangle = l^2 |l, \alpha_{l^2}\rangle \\ l_z |l, \alpha_{l^2}\rangle = l |l, \alpha_{l^2}\rangle \end{cases} \text{ то } \Rightarrow \alpha_{l^2} = l(l+1)$$

Итак, мы нашли собственные числа оператора  $l^2$ :  $\alpha_{l^2} = l(l+1)$ . Собственная функция нумеруется теперь двумя числами,  $m$  и  $l$ :

$$l_z |l, m\rangle = m |l, m\rangle \quad (38)$$

$$l^2 |l, m\rangle = l(l+1) |l, m\rangle \quad (39)$$

### 3.4. Матричное представление операторов момента

#### 3.4.1 Матричные элементы операторов $l_{\pm}$

Займёмся поиском матричных элементов операторов  $l_{\pm}$ . Для этого нужно выразить оператор  $l^2$  через  $l_z$  и  $l_{\pm}$  (36) и подставить в формулу с собственными числами оператора  $l^2$  (39):

$$(l_+ l_- + l_z^2 - l_z) |l, m\rangle = l(l+1) |l, m\rangle$$

Теперь можно домножить уравнение на скобку  $\langle l, m|$ :

$$\langle l, m| l_+ l_- + l_z^2 - l_z |l, m\rangle = \langle l, m| l^2 |l, m\rangle = \langle l, m| l(l+1) |l, m\rangle$$

Предполагая, что волновая функция нормирована  $\langle l, m|l, m\rangle = 1$ , можно упростить правую часть уравнения. В левой части уравнения можно раскрыть сумму, и тогда уравнение перепишется в следующем виде:

$$\langle l, m| l_+ l_- |l, m\rangle + \langle l, m| l_z^2 |l, m\rangle - \langle l, m| l_z |l, m\rangle = l(l+1)$$

Окончательно уравнение станет содержать только операторы  $l_{\pm}$ , если подставить собственные числа операторов  $l_z$  и  $l_z^2$  (38):

$$\langle l, m | l_+ l_- | l, m \rangle = l(l+1) - m^2 + m = l^2 - m^2 + (l+m) = (l+m)(l-m+1)$$

В разделе 2.4.4 мы показывали, что можно разделить скалярное произведение на два сомножителя, а значит, можно и вставить между ними единичный оператор:

$$\begin{aligned} \langle l, m | l_+ l_- | l, m \rangle &= (\langle l, m | l_+ ) \cdot (l_- | l, m \rangle) = (\langle l, m | l_+ ) \cdot \hat{1} \cdot (l_- | l, m \rangle) = \\ &= \langle l, m | l_+ \cdot \sum_k |l, k \rangle \langle l, k | \cdot l_- | l, m \rangle = \sum_k \langle l, m | l_+ | l, k \rangle \langle l, k | l_- | l, m \rangle \end{aligned}$$

Воспользуемся повышающим и понижающим свойством операторов  $l_{\pm}$ :

$$\begin{aligned} \sum_k \langle l, m | l_+ | l, k \rangle \langle l, k | l_- | l, m \rangle &\sim \sum_k \langle l, m | l, k+1 \rangle \langle l, k | l, m-1 \rangle \sim \\ &\sim \sum_k \delta_{m, k+1} \cdot \delta_{k, m-1} \end{aligned}$$

Отсюда мы получаем, что ненулевой вклад в сумму даст только слагаемое с  $k = m - 1$ , и тогда сумма вырождается в произведение двух скобок

$$\sum_k \langle l, m | l_+ | l, k \rangle \langle l, k | l_- | l, m \rangle = \langle l, m | l_+ | l, m-1 \rangle \langle l, m-1 | l_- | l, m \rangle$$

Операторы повышения и понижения образуют эрмитово сопряжённую пару

$$l_-^+ = l_+, \quad l_+^+ = l_-,$$

и вследствие этого матричные элементы  $\langle l, m | l_+ | l, m-1 \rangle$  и  $\langle l, m-1 | l_- | l, m \rangle$  — тоже эрмитово сопряжённые, а так как это числа, то они просто сопряжённые, и тогда их произведение есть модуль:

$$\begin{aligned} \langle l, m | l_+ l_- | l, m \rangle &= \\ &= |\langle l, m | l_+ | l, m-1 \rangle|^2 = |\langle l, m-1 | l_- | l, m \rangle|^2 = (l+m)(l-m+1) \end{aligned}$$

Чтобы найти матричный элемент, нужно извлечь корень из обоих частей уравнения. При этом, вообще говоря, число под корнем в общем случае ком-

плексное: но обычно фазу матричного элемента выбирают равной нулю, поэтому извлечение корня упрощается:

$$\langle l, m | l_+ | l, m - 1 \rangle = \sqrt{(l + m)(l - m + 1)} = \langle l, m - 1 | l_- | l, m \rangle$$

Итак, мы получили матричные элементы операторов повышения и понижения. Теперь можно задаться вопросом, как будут выглядеть и сами матрицы операторов  $l_{\pm}$ .

### 3.4.2 Составление матриц из матричных элементов

Этот раздел возник из-за впадения аудитории в ступор перед матричными элементами. Мы хотим получить матрицы всех операторов, которые мы использовали, при  $l = 1$ .

$l$  это максимальное значение  $m$ , а  $m$  пробегает значения  $-l < m < +l$  — всего  $2l + 1$  значений. В случае  $l = 0$  матрицей оператора является матрица  $1 \times 1$ , то есть число.

Матрица оператора  $l^2$  в случае  $l = 1$ :

$$\left. \begin{array}{l} l^2 |l, m\rangle = l(l+1) |l, m\rangle \\ \langle l, m | l^2 |l, m\rangle = l(l+1) \end{array} \right\} \Leftrightarrow \hat{l}^2 = 2 \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Как выглядит вектор  $|l, m\rangle$  в своём собственном представлении? Нужно разложить его по базису, определяемому формулой

$$l_z |l, m\rangle = m |l, m\rangle$$

Домножим на скобку  $\langle l', m'|$ :

$$\langle l', m' | l_z | l, m \rangle = m \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

Это означает, что на диагонали стоит  $m$ . **Матрица оператора в своём собственном представлении диагональна.**

$$\hat{l}_z = \begin{matrix} & m=1 & m=0 & m=-1 \\ m'=1 & 1 & 0 & 0 \\ m'=-0 & 0 & 0 & 0 \\ m'=-1 & 0 & 0 & -1 \end{matrix}$$

Теперь, коль скоро мы нашли матрицу оператора, можем найти и её собственные вектора  $|1, m\rangle$ . Это задача на собственные векторы и собственные значения из линейной алгебры:

$$\begin{pmatrix} 1 - \lambda & 0 & 0 \\ 0 & -\lambda & 0 \\ 0 & 0 & -1 - \lambda \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} = 0$$

Чтобы это произведение было равно нулю, нужно чтобы детерминант левой матрицы был равен нулю. А он равен нулю при трех значениях  $\lambda$ :  $\lambda_1 = 1, \lambda_2 = 0, \lambda_3 = -1$ . Подставляя по очереди эти три значения, получим собственные вектора:

$$|1, 1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1, 0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1, -1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Или в общем виде

$$|1, m\rangle = \begin{pmatrix} \delta_{m,1} \\ \delta_{m,0} \\ \delta_{m,-1} \end{pmatrix}$$

### 3.4.3 Матрицы операторов $l_{\pm}, l_x, l_y$

Освежив знания по составлению матриц, мы можем составить матрицу для оператора  $l_-$ :

$$\langle l, m-1 | l_- | l, m \rangle = \sqrt{(l+m)(l-m+1)}$$

Здесь  $m' = m-1$ , значит, числа стоят на нижней побочной диагонали (чтобы получить нужные матричные элементы, нужно положить  $m = 1, 0, -1$  и подставить их в левую и правую скобку. Тогда число слева будет номером строки,

а число справа - номером столбца):

$$l_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}$$

Для  $l_+$  аналогично:

$$l_+ = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Можно проверить, что эти операторы действительно повышают или понижают число  $m$ . Подействуем на собственный вектор  $|1, -1\rangle$  оператором  $l_+$ :

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

Т.е. вектор  $|1, -1\rangle$  превратился в  $|1, 0\rangle$ . Действуем этим же оператором теперь на  $|1, 0\rangle$ :

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

А если еще раз подействовать, получится ноль, как нас и учили.

Теперь можем получить и матрицы операторов  $l_{x,y}$ , выразив их через операторы повышения и понижения, для которых матрицы уже найдены:

$$l_x = \frac{1}{2}(l_- + l_+) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}$$

$$l_y = \frac{1}{2i}(l_+ - l_-) = \frac{1}{2i} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ -\sqrt{2} & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & -\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}$$

### 3.5. Собственные функции операторов момента в $\theta$ и $\varphi$ представлениях

Займёмся поиском выражений операторов бесконечно малых поворотов через углы. Ранее мы получили формулу для оператора бесконечно малого поворота вокруг оси  $z$ :

$$l_z = -i \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

Напомним, что выражение для бесконечно малого поворота вокруг оси  $z$  было получено через разложение в ряд Тейлора:

$$f(\theta, \varphi + \delta\varphi) = f(\varphi) + \delta\varphi \frac{\partial f}{\partial \varphi} = \left(1 + \delta\varphi \frac{\partial}{\partial \varphi}\right) f(\varphi) = \underbrace{\left(1 + i\delta\varphi \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}\right)}_{\hat{R}_{\delta\varphi} = l_z} f(\varphi)$$

Воспользуемся полученным выражением для поиска остальных.

**Аналитический способ.** По определению  $\vec{l}$ :

$$\vec{l} = [\vec{r} \times \vec{k}] = -i [\vec{r} \times \vec{\nabla}] \Rightarrow l_x = -i \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right)$$

Затем нужно выразить все через сферические координаты:

$$x = r \sin \theta \cos \varphi, \quad y = r \sin \theta \sin \varphi, \quad z = r \cos \theta$$

Оператор дифференцирования расписать как дифференцирование сложной функции:

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial r} \cdot \frac{\partial r}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial \theta} \cdot \frac{\partial \theta}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial \varphi} \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial x}$$

Все производные, которые придется считать, содержатся в якобиане:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial r}{\partial x} & \frac{\partial \theta}{\partial x} & \frac{\partial \varphi}{\partial x} \\ \frac{\partial r}{\partial y} & \cdots & \cdots \\ \frac{\partial r}{\partial z} & \cdots & \cdots \end{pmatrix}$$

Чтобы посчитать компоненты якобиана, нужно разрешить систему отно-

сительно  $r, \varphi, \theta$ :

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}, \quad r_{\perp} = \sqrt{x^2 + y^2}, \quad \cos \theta = \frac{z}{r}, \quad \cos \varphi = \frac{x}{r_{\perp}}$$

Этот способ включает в себя много громоздких вычислений (нужно будет сосчитать девять частных производных), в которых сложно не ошибиться, поэтому будет рассмотрен второй способ, который с математической точки зрения проще.

**Геометрический способ.** Введём тройку векторов – орты  $(\vec{r}_0, \vec{\theta}_0, \vec{\varphi}_0)$ :

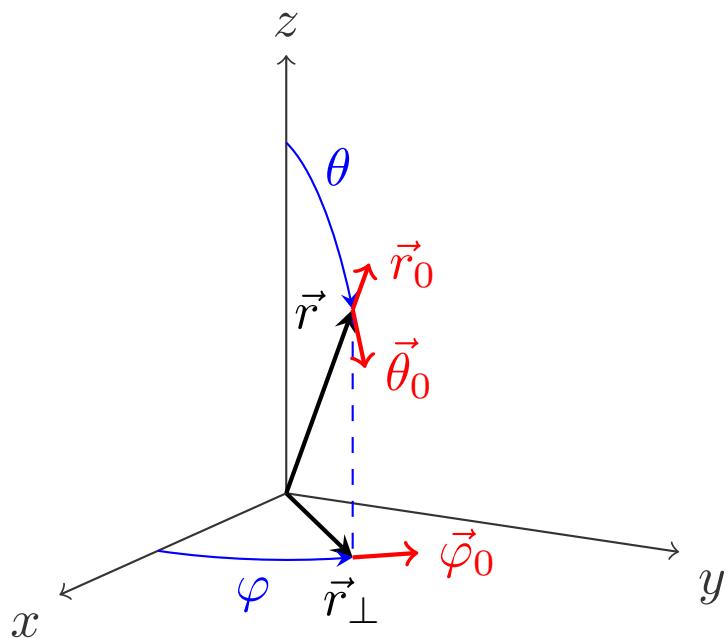


Рис. 18. Сферическая система координат

Введём новую систему координат (рис. 19), повернутую относительно лабораторной (рис. 18) таким образом, чтобы ось  $z$  осталась на месте, а ось  $y'$  была сонаправлена перпендикулярной составляющей вектора  $\vec{r}$ :  $\{y'\} \parallel \vec{r}_{\perp}$ .

Чем хороша новая ось  $x'$ ? При вращении вокруг неё изменяется только угол  $\theta$ . В старых осях у нас такое уже было: при вращении вокруг  $z$  менялся только угол  $\varphi$ . Значит, выражение для  $l_{x'}$  должно быть таким же по виду, как и  $l_z$ , но есть разница в знаке.

Для оси  $z$  угол  $\varphi$  растёт по правилу правого винта: если правый винт крутить так же, как и  $\varphi$ , то он будет двигаться в направлении  $+z$ . Для оси же  $x'$  вращение угла  $\theta$  левое, значит, по сравнению с  $l_z$  у  $l_{x'}$  поменяется знак.

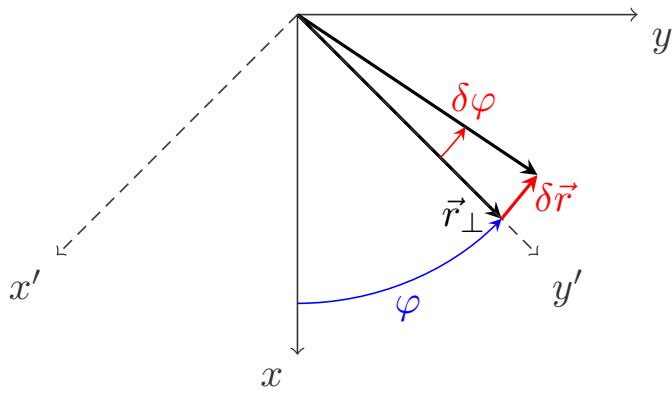
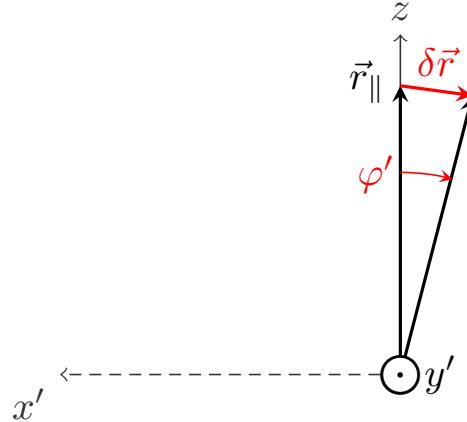


Рис. 19. Новая система координат

Так, не привлекая никакого дифференцирования, мы нашли в новых осях оператор  $l_{x'}$ :

$$l_{x'} = i \frac{\partial}{\partial \theta}$$

Рис. 20. Новый угол вращения вокруг оси  $y'$ 

**Оператор  $l_{y'}$ .** Поворот вектора  $\vec{r}$  осуществляется добавлением бесконечно малого перпендикулярного вектора  $\delta\vec{r}$ . Из рисунка 19 видно, что модуль этого вектора можно выразить через  $\delta\varphi$  и  $r_{\perp} = r \sin \theta$ :

$$\sin \delta\varphi = \delta\varphi = \frac{\delta r}{r_{\perp}} \Rightarrow \delta r = r \sin \theta \delta\varphi \quad (40)$$

С другой стороны, если мы теперь будем смотреть на этот же поворот со стороны оси  $y'$  (рис. 20), можно ввести бесконечно малый угол поворота  $\delta\varphi'$

вокруг оси  $y'$ , и для него аналогично записывается связь через  $\delta r$  и  $r_{\parallel}$ :

$$\sin \delta\varphi' = \delta\varphi' = \frac{\delta r}{r_{\parallel}} \Rightarrow \delta r = r \cos \theta \delta\varphi' \quad (41)$$

Объединяя уравнения (40) и (41), получим

$$\delta\varphi' = \operatorname{tg} \theta \cdot \delta\varphi$$

Аналогично тому, как мы это делали для  $l_{x'}$ , можем записать оператор поворота (на угол  $\varphi'$ ) для  $l_{y'}$ . Точно так же учтём знак  $-$ , который исчезнет из-за того, что вращение  $\varphi'$  опять левое:

$$l_{y'} = i \frac{\partial}{\partial \varphi'} = i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

Переход от  $l_{x'}$ ,  $l_{y'}$  к  $l_x$ ,  $l_y$  получим, воспользовавшись векторностью оператора момента, а именно тем, что компоненты вектора преобразуются также, как компоненты радиус-вектора. А как преобразуются координаты, видно из рисунка (рис. 19):

$$l_x = l_{x'} \sin \varphi + l_{y'} \cos \varphi, \quad l_y = -l_{x'} \cos \varphi + l_{y'} \sin \varphi$$

Резюмируя полученные результаты, окончательно запишем операторы в сферических координатах:

$$\begin{aligned} l_z &= -i \frac{\partial}{\partial \varphi}, \\ l_x &= i \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cos \varphi \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi}, \\ l_y &= -i \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + i \sin \varphi \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{aligned}$$

Отсюда можно получить и операторы повышения и понижения:

$$l_{\pm} = e^{\pm i\varphi} \left( \pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad (42)$$

Для получения оператора  $l^2$  воспользуемся его выражением через операторы

$l_{\pm}, l_z$ , например вторым из соотношений 36

$$l^2 = l_- l_+ + l_z^2 + l_z.$$

Подставляя в это выражение явные формулы (42) получим

$$l^2 = e^{-i\varphi} \left( -\frac{\partial}{\partial\theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) e^{i\varphi} \left( \frac{\partial}{\partial\theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) - \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} - i \frac{\partial}{\partial\varphi}.$$

Откуда, выполнив несложные вычисления, получим простое выражение:

$$l^2 = -\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} - \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial\theta}$$

Интересный факт — квадрат момента является угловой частью лапласиана:

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l^2(\theta, \varphi)}{r^2}$$

### 3.6. Сферические гармоники

Сферические гармоники  $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$  — это собственные функции операторов  $l_z$  и  $l^2$ , и поэтому они удовлетворяют уравнениям на собственные значения и функции:

$$\begin{cases} l^2 Y_{l,m}(\theta, \varphi) = l(l+1) Y_{l,m}(\theta, \varphi) \\ l_z Y_{l,m}(\theta, \varphi) = m Y_{l,m}(\theta, \varphi) \end{cases}$$

Ранее мы получали  $l_x, l_y, l_z, l^2, l_{\pm}$ . Выпишем операторы в сферических координатах:

$$l_z = -i \frac{\partial}{\partial\varphi}, \quad l^2 = -\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} - \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial\theta}, \quad \Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l^2(\theta, \varphi)}{r^2}$$

**Физический смысл сферических гармоник.** Волновая функция в декартовых координатах имеет смысл амплитуды вероятности, или, другими словами, величина

$$|\Psi(\vec{r})|^2 dx dy dz$$

есть вероятность нахождения частицы в элементарном объемчике  $dx dy dz$ . Волновая функция  $\Psi(r, \theta, \varphi)$  есть амплитуда вероятности в сферических ко-

ординатах, так что

$$|\Psi(r, \theta, \varphi)|^2 r^2 \sin \theta dr d\varphi d\theta$$

есть вероятность нахождения частицы в элементарном объеме сферической системы координат. Поскольку, как мы видели, в сферической системе координат в операторе Лапласа угловые переменные отделяются от радиальной

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = \sum_{n_r, l, m} R_{n_r, l}(r) Y_{l, m}(\theta, \varphi),$$

то сама сферическая гармоника  $Y_{lm}$  будет иметь смысл амплитуды вероятности пребывания частицы в элементарном телесном угле, так что

$$|Y_{l, m}(\theta, \varphi)|^2 d\Omega = |Y_{l, m}(\theta, \varphi)|^2 \sin \theta d\varphi d\theta.$$

Отсюда следует условие нормировки сферических гармоник.

$$\int |Y_{l, m}|^2 \sin \theta d\varphi d\theta = 1.$$

**Нахождение сферических гармоник.**  $Y_{l, m}(\theta, \varphi)$  мы можем найти, стандартным образом разделив переменные:

$$Y_{l, m}(\theta, \varphi) = \Theta_{l, m}(\theta) \cdot \Phi_m(\varphi)$$

Подставим гармонику в таком виде в уравнение на собственные значения  $l_z$  и проинтегрируем:

$$-i \frac{\partial}{\partial \varphi} \Theta_{l, m}(\theta) \cdot \Phi_m(\varphi) = m \Theta_{l, m}(\theta) \cdot \Phi_m(\varphi)$$

$$-i \frac{\partial}{\partial \varphi} \Phi_m(\varphi) = m \Phi_m(\varphi), \quad \Theta_{l, m}(\theta) \neq 0 \quad \Rightarrow \quad \Phi_m(\varphi) = C \cdot \exp\{im\varphi\}$$

Чтобы найти константу, отнормируем функцию  $\Phi$ . Заметим, что её квадрат можно трактовать как вероятность найти частицу в данном угле  $\varphi$ <sup>5</sup>:

$$\int_0^{2\pi} |\Phi_m(\varphi)|^2 d\varphi = 2\pi C^2 = 1 \quad \Rightarrow \quad \Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot \exp\{im\varphi\}$$

Причём  $m$ , из условия однозначности функции  $\Phi_m(\varphi) = \Phi_m(\varphi + 2\pi)$ , должно быть целым.

Теперь воспользуемся уравнением на собственные значения  $l^2$ :

$$\left[ -\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right] \Theta_{l,m}(\theta) \cdot \Phi_m(\varphi) = l(l+1) \Theta_{l,m}(\theta) \cdot \Phi_m(\varphi)$$

Функцию  $\Phi$  мы уже нашли, и можем подставить:

$$\left[ \frac{m^2}{\sin^2 \theta} - \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right] \Theta_{l,m}(\theta) = l(l+1) \Theta_{l,m}(\theta)$$

Это дифференциальное уравнение – с переменными коэффициентами, называется уравнением Лежандра<sup>6</sup>.

Один из способов его решить – сделать замену  $\xi = \cos \theta$ :

$$\sin^2 \theta = 1 - \xi^2, \quad \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} = \dots$$

Такая замена, как говорят, рационализирует уравнение: оно становится уравнением, решение которого можно искать в виде ряда по  $\xi$ . Но мы будем решать другим способом.

**Операторное решение уравнения Лежандра.** Идея операторного решения заключается в том, что вместо общего решения мы можем рекуррентно получить все функции<sup>7</sup>, начиная с  $Y_{l,l}$ .

Когда мы с помощью коммутационных соотношений выводили все формулы, мы получили условие ограниченности  $m \leq l$ , и тогда максимально

<sup>5</sup>Для  $R(r)$  и  $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$  это не так из-за якобиан-преобразования при переходе из декартовых в сферические координаты

<sup>6</sup>Его решения называются присоединёнными полиномами Лежандра, и вообще – это уравнение с точки зрения математики – уравнение в обычных производных. Есть справочник Канке по обыкновенным дифференциальным уравнениям.

<sup>7</sup>Также, как мы делали это ранее с полиномами Эрмита

возможная сферическая гармоника с орбитальным числом  $l$  – это  $Y_{l,l}(\theta, \varphi)$ .

Значит, если подействовать на гармонику  $Y_{l,l}$  оператором повышения, то в силу ограниченности  $m = -l \dots l$  оператор должен дать ноль:

$$l_+ Y_{l,l}(\theta, \varphi) = 0$$

Сначала давайте рассмотрим случай  $l = 0$ . В этом случае  $m = 0$  и уравнение  $l_+ Y_{0,0} = 0$  принимает вид<sup>8</sup>. При этом, так как  $Y_{0,0}$  не зависит от  $\varphi$ , второе слагаемое обратится в ноль:

$$\cancel{e^{i\varphi}} \left( \frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) Y_{0,0} = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial Y_{0,0}}{\partial \theta} = 0 \quad \Rightarrow \quad Y_{0,0} = \text{const} = c$$

Остаётся отнормировать  $Y_{0,0}$ , чтобы найти значение константы  $c$ :

$$\int |Y_{0,0}|^2 \sin \theta \, d\varphi \, d\theta = 2\pi \int_0^\pi c^2 \sin \theta \, d\theta = 1 \quad \Rightarrow \quad 4\pi c^2 = 1 \quad \Rightarrow \quad Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

**Высшие гармоники.** Теперь рассмотрим случай  $m = -l, 0, l$ . Сначала найдём формулу гармоники  $Y_{l,l}$ :

$$l_+ Y_{l,l} = 0 \quad \Rightarrow \quad e^{i\varphi} \left( \frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) Y_{l,l}(\theta, \varphi) = 0$$

Это уже уравнение первого порядка, линейное с переменными коэффициентами, которое решается. Прежде всего,  $e^{i\varphi} \neq 0$ , на него можно сократить. Разделим переменные и получим уравнение для  $\Theta_{l,l}$ :

$$Y_{l,l} = \Theta_{l,l}(\theta) \cdot \Phi_l(\varphi) \sim \Theta_{l,l}(\theta) e^{il\varphi} \quad \Rightarrow \quad \left( \frac{\partial}{\partial \theta} - l \operatorname{ctg} \theta \right) \Theta_{l,l}(\theta) = 0$$

Проинтегрируем полученное уравнение и получим выражение для  $Y_{l,l}$ :

$$\frac{d\Theta}{\Theta} = l \frac{\cos \theta}{\sin \theta} d\theta \quad \Rightarrow \quad \Theta_{l,l}(\theta) = c \cdot \sin^l \theta \quad \Rightarrow \quad Y_{l,l} \sim \sin^l \theta \cdot e^{il\varphi} = c \sin^l \theta \cdot e^{il\varphi}$$

<sup>8</sup>Напомним, мы получили выражения для повышающих и понижающих операторов в сферической системе координат:

$$l_{\pm} = l_x \pm i l_y = e^{\pm i\varphi} \left( \pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$

Осталось гармонику отнормировать, как мы это делали раньше:

$$2\pi c^2 \int \sin^{2l} \theta \sin \theta d\theta = 1$$

Это сложный интеграл, его надо брать  $l$  раз по частям. Вычислим его в случае  $l = 1$ :

$$2\pi c^2 \int_0^\pi \sin^2 \theta \sin \theta d\theta = 1$$

Возьмём интеграл стандартным образом:

$$\begin{aligned} 2\pi c^2 \int_0^\pi \sin^2 \theta \sin \theta d\theta &= -2\pi c^2 \int_0^\pi (1 - \cos^2 \theta) d\cos \theta = \\ &= 2\pi c^2 \int_{-1}^1 (1 - \xi^2) d\xi = 2\pi c^2 \left( \xi - \frac{\xi^3}{3} \right) \Big|_{-1}^1 = 2\pi c^2 \cdot \frac{4}{3} = \frac{8\pi c^2}{3} \end{aligned}$$

Отсюда  $c^2 = \frac{3}{8\pi}$ . Тогда

$$Y_{1,1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\varphi}$$

**Рекуррентное выражение гармоник для  $l = 1$ .** Найдя  $Y_{1,1}$ , мы можем найти также и гармоники  $Y_{1,0}$  и  $Y_{1,-1}$ . Воспользуемся оператором понижения:

$$l_- Y_{l,l}(\theta, \varphi) = \sqrt{(l+l)(l-l+1)} Y_{l,l-1}(\theta, \varphi) \Rightarrow l_- Y_{1,1}(\theta, \varphi) = \sqrt{2} Y_{1,0}(\theta, \varphi)$$

И отсюда

$$\begin{aligned} Y_{1,0} &= \frac{l_-}{\sqrt{2}} Y_{1,1} = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\varphi} \left( -\frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\varphi} = \\ &= \sqrt{\frac{3}{16\pi}} \left( -\frac{\partial}{\partial \theta} - \operatorname{ctg} \theta \right) \sin \theta = -\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \end{aligned}$$

А если мы знаем  $Y_{1,0}$ , то можем также рекуррентно найти  $Y_{1,-1}$ :

$$l_- Y_{1,0}(\theta, \varphi) = \sqrt{2} Y_{1,-1}(\theta, \varphi) \Rightarrow Y_{1,-1} = \frac{l_-}{\sqrt{2}} Y_{1,0}$$

Тогда

$$Y_{1,-1} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{-i\varphi} \left( -\frac{\partial}{\partial\theta} \right) \cos\theta = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{-i\varphi}$$

Вообще, любая функция на сфере может быть разложена по сферическим гармоникам:

$$f(\theta, \varphi) = \sum_{l,m} C_{l,m} Y_{l,m}(\theta, \varphi)$$

Это обобщённый ряд Фурье для функций не на отрезке, а на сфере. Сферические гармоники образуют полную систему функций для разложения. Такие функции встречались в электродинамике: разложение по мультипольям. Первый член  $l = 0$  – это монополь,  $l = 1$  – диполь,  $l = 2$  – квадруполь и вообще далее  $2^l$ -поль.

Почему эти функции – диполи? Давайте их нарисуем. Рисовать комплексные функции мы не можем, но можем образовать функции пригодные для построения:

$$Y_{1,0} \sim \cos\theta, \quad (Y_{1,1} + Y_{1,-1})\frac{1}{2} \sim \sin\theta \sin\varphi, \quad (Y_{1,1} - Y_{1,-1})\frac{1}{2i} \sim \sin\theta \cos\varphi$$

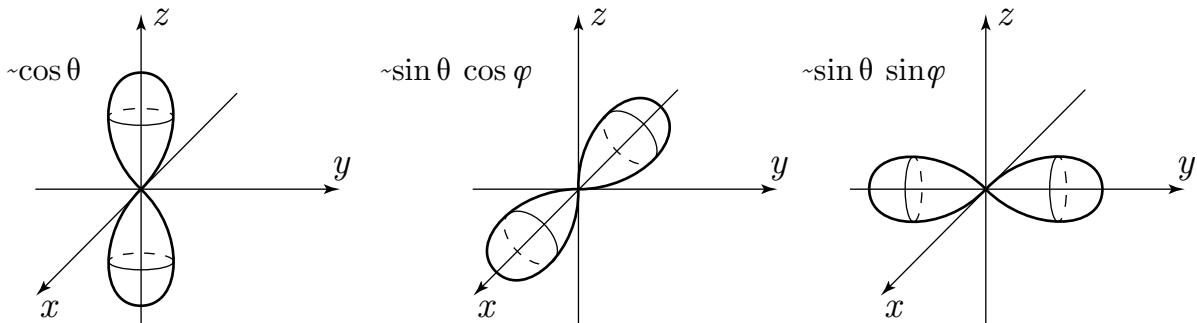


Рис. 21. Дипольные функции

Исторически так сложилось, что состояние с  $l = 0$  называется  $s$ -состояние (монопольное состояние), и так далее состояния  $p, d, f, g, h, \dots$ . Начиная с  $f$ , обозначение идёт согласно английскому алфавиту.

## 4. Движение в центрально-симметричном поле

Запишем в общем виде оператор поворота:

$$\hat{R} = 1 + i(\delta\vec{\varphi}, \vec{l})$$

Мы нашли собственные функции операторов  $l_z$ ,  $l^2$ . Эти операторы коммутируют и имеют общую систему собственных функций – сферических гармоник  $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ , где  $l$  – орбитальное квантовое число,  $m$  – магнитное квантовое число. Сферические гармоники возникают при разделении переменных в уравнении Шрёдингера, в котором есть сферическая симметрия.

**Постановка задачи.** Запишем гамильтониан сферически симметричной задачи

$$H = \frac{p^2}{2m} + U(|\vec{r}|) \quad (43)$$

где  $U(|\vec{r}|)$  – потенциал центрального поля, зависящий только от модуля  $|\vec{r}|$ . Поскольку потенциал сферически симметричен, удобно пользоваться сферической системой координат.

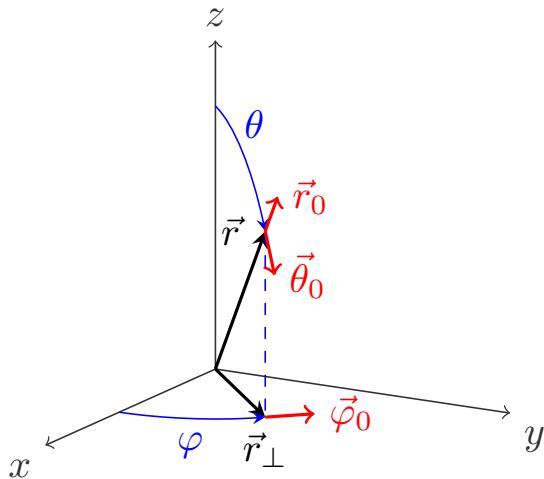


Рис. 22. Сферическая система координат

В  $\vec{r}$  – представлении оператор импульса можно выразить через лапласиан:

$$\frac{p^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \quad \Rightarrow \quad p^2 = -\hbar^2 \Delta, \quad \Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat{l}^2(\theta, \varphi)}{r^2}$$

Тогда уравнение Шрёдингера запишется в виде

$$\left[ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat{l}^2}{r^2} - \frac{2m}{\hbar^2} U(r) + \frac{2mE}{\hbar^2} \right] \Psi(\vec{r}) = 0$$

Будем искать решение в виде сферических гармоник:

$$\Psi(\vec{r}) = R(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi)$$

$$\left[ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2m}{\hbar^2} U(r) + \frac{2mE}{\hbar^2} \right] R(r) = 0$$

В центральном поле переменные разделились. Можно ввести

$$\underbrace{U_{\text{eff}}}_{\text{Эффективная энергия}} = \underbrace{U(r)}_{\text{Потенциальная энергия}} + \underbrace{\frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2}}_{\text{Центробежная энергия}}$$

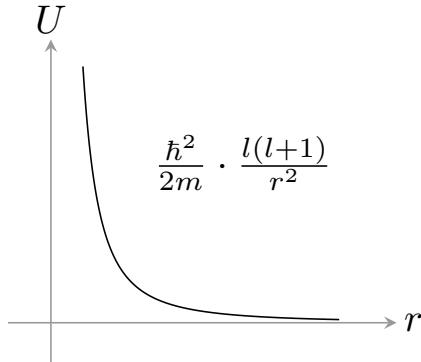


Рис. 23. Отталкивающий от центра потенциал, если  $l \neq 0$

При свободном движении частица летит по прямой. Если есть момент, то частица в центр не попадает, она от него отталкивается. Если момент равен нулю, то частица летит через центр (или покоятся), и центробежного потенциала нет.

Наше уравнение можно рассматривать как уравнение с параметром  $E$ , и тогда приписать индекс  $E$ :

$$\left[ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2m}{\hbar^2} U(r) + \frac{2mE}{\hbar^2} \right] R_{E,l}(r) = 0$$

Квантовых чисел всего три: энергия  $E$ , орбитальное квантовое число  $l$ ,

магнитное квантовое число  $m$ . Заметим, что в уравнение совсем не входит квантовое число  $m$ <sup>9</sup>. Это означает, что энергия не зависит от числа  $m$ : появляется вырожденность энергии по  $m$ , и каждый уровень энергии вырождается  $2l + 1$  раз.

Такое вырождение возникает из-за того, что в сферически симметричной системе можно произвольно выбрать ось  $z$ .

**Замечание о вырождении.** Выведенные выше мы представления операторов в сферической системе:

$$\begin{aligned} l_z &= -i \frac{\partial}{\partial \varphi}, & l_x &= i \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cos \varphi \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi}, \\ l_y &= -i \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + i \sin \varphi \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi}, & l^2 &= -\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \end{aligned}$$

В силу сферической симметрии гамильтониана (43), каждый из операторов  $l_x, l_y, l_z, l^2$  коммутирует с гамильтонианом. При этом проекции момента импульса не коммутируют между собой.

Покажем в общем случае, что это приводит к вырождению. Пусть у нас есть два не коммутирующих между собой оператора  $f, g$ , но коммутирующих с гамильтонианом:

$$[f, g] \neq 0, \quad [H, g] = 0, \quad [H, f] = 0$$

Из коммутации следует наличие общей системы собственных функций:

$$H\Psi_n = E_n \Psi_n, \quad f\Psi_n = f_n \Psi_n$$

Подействуем на первое уравнение оператором  $g$ , при этом в силу коммутации  $g$  и  $H$  можем их менять местами:

$$gH\Psi_n = E_n g\Psi_n \quad \Rightarrow \quad Hg\Psi_n = E_n g\Psi_n$$

Возникает  $\varphi_n = g\Psi_n$ . В силу коммутации

$$\hat{H}\hat{g}\Psi_n = E_n \hat{g}\Psi_n \quad \Rightarrow \quad \hat{H}\varphi_n = E_n \varphi_n$$

<sup>9</sup>Вообще говоря, буква  $m$  есть – но это масса частицы, а не квантовое число

Возникает вопрос, совпадают ли  $\Psi_n$  и  $\varphi_n$ , хотя бы с точностью до множителя? Оказывается, не совпадают, что следует из  $[f, g] \neq 0$ . Значит, возникает вырождение, и одному значению  $E_n$  соответствует несколько волновых функций.  $\square$

Можно сформулировать общее утверждение: *если есть какая-либо симметрия, то обязательно появится вырождение. Чем выше симметрия задачи, тем кратность вырождения будет больше.*

## 4.1. Свободное движение

Как хорошо известно, в этом случае потенциала нет,  $U \equiv 0$ . Обозначим  $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$ , тогда уравнение Шрёдингера можно записать в виде

$$\Delta \Psi + k^2 \Psi = 0$$

Запишем это уравнение в сферических координатах:

$$\left[ \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 \right] R_{k,l}(r) = 0$$

Из-за разделения переменных уравнение стало уравнением в обыкновенных производных. Исследуем асимптотику решения при  $r \rightarrow 0$  и  $r \rightarrow \infty$ .

**Асимптотика в нуле.** Если  $l \neq 0$ , то можно пренебречь  $k^2$ :

$$\left[ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_{k,l}(r) = 0$$

Заметим, что можно сделать масштабное преобразование  $r \rightarrow \alpha r$ , и при нем уравнение будет однородным и инвариантным. Значит, решение тоже должно быть инвариантно:  $f(\alpha r) = \beta f(r)$ . Такие уравнения называются **дифференциальными уравнениями Коши-Эйлера**, и любая степенная функция годится в качестве решения<sup>10</sup>. Будем искать решение в виде  $R(r) \sim r^\sigma$ :

$$\frac{\partial R}{\partial r} \sim \sigma r^{\sigma-1}, \quad r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \sim \sigma r^{\sigma+1}, \quad \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \sim \sigma(\sigma+1)r^{\sigma-2},$$

<sup>10</sup>При этом, конечно, выполняется  $(\alpha r)^\gamma = \alpha^\gamma r^\gamma$

Получается квадратное уравнение относительно  $\sigma$ . Его решения очевидны, можно увидеть, а можно посчитать дискриминант:

$$\sigma(\sigma + 1) = l(l + 1) \Rightarrow \sigma_1 = l, \quad \sigma_2 = -l - 1.$$

$$R(r \rightarrow 0) = c_1 r^l + \frac{c_2}{r^{l+1}}$$

**Асимптотика на бесконечности.** Теперь можно пренебречь  $\frac{l(l+1)}{r^2}$ . Заметим, что такое уравнение будет точным при  $l = 0$  для любых  $r$ .

$$\left[ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + k^2 \right] R_{k,l}(r) = 0$$

Это уравнение *сферической волны*. Оно решается заменой  $R(r) = \frac{\xi(r)}{r}$ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{\xi}{r} \right) &= \frac{\xi' r - \xi}{r^2}, \quad r^2 \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{\xi}{r} \right) = \xi' r - \xi, \\ \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{\xi}{r} \right) &= \xi'' r + \xi' - \xi = \xi'' r, \quad \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{\xi}{r} \right) = \frac{\xi''}{r} \end{aligned}$$

После проведения всех расчётов и подстановок исходное уравнение примет вид

$$\frac{1}{r} (\xi'' + k^2 \xi) = 0,$$

и его решение (так как решали при  $r \neq 0$ )

$$\xi = c_1 e^{ikr} + c_2 e^{-ikr} \Rightarrow R = c_1 \frac{e^{ikr}}{r} + c_2 \frac{e^{-ikr}}{r}$$

Получили решение вида сферической волны. Первое слагаемое отвечает расходящейся волне, а второе - сходящейся<sup>11</sup>.

Наше решение должно быть регулярно везде в случае  $l = 0$ . Для этого нужно выбрать другую фундаментальную систему решений:

$$R_{k,l=0} = \frac{a_1 \sin kr + a_2 \cos kr}{r}$$

Второй член расходится в нуле, значит,  $a_2 = 0$ .

<sup>11</sup> В квантовой механике зависимость стационарных решений от времени  $e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ , нужно с учётом этого посмотреть куда будет бежать волновой фронт

Займёмся случаем  $l \neq 0$ :

$$\left[ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 \right] R_{k,l}(r) = 0$$

Такое уравнение называется уравнением сферических функций Бесселя. Сферические функции Бесселя выражаются через обычные. Приведём ответ без доказательства (вывод можно посмотреть в Ландау(§33., стр.140)):

$$R_{k,l}(r) \sim r^l \left( \frac{1}{kr} \frac{\partial}{\partial r} \right)^l \cdot \frac{\sin kr}{r}, \quad R_{k,0} \sim \frac{\sin kr}{r}$$

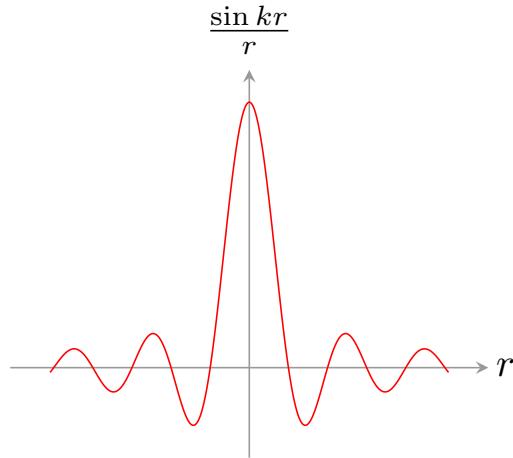


Рис. 24. График  $\sin kr/r$

$$R_{k,1}(r) \sim \frac{1}{k} \frac{\partial}{\partial r} \frac{\sin kr}{r} = \frac{1}{k} \left( \frac{k \cos kr}{r} - \frac{\sin kr}{r^2} \right)$$

Для анализа асимптотики в нуле полученные выражения надо разложить в ряд, то есть раскрыть неопределённость дальше:

$$R_{k,1} = [r \rightarrow 0] = \frac{1}{k} \left( \frac{k \left( 1 - \frac{(kr)^2}{2} \right)}{r} - \frac{kr - \frac{(kr)^3}{6}}{r^2} \right) = \frac{1}{k} \left( -\frac{k^3 r}{2} + \frac{k^3 r}{6} \right) = -\frac{k^2}{3} r$$

**К вопросу о нормировке.** Займёмся нормировкой функции  $R_{k,l}$ :

$$\int_0^\infty |R_{k,l}(r)|^2 r^2 dr$$

Если считать в лоб, возникнет проблема: интеграл расходится на бесконечности, то есть не существует. Физически это говорит о свободном движении: частица может уходить на бесконечность. Так как движение инфинитное, то спектр  $k$  непрерывен.

Правильно считать нормировочный интеграл надо так:

$$\int_0^\infty R_{k,l}^* R_{k',l'} r^2 dr = \delta(k - k') \delta_{l,l'}$$

Попробуем посчитать нормировку  $R_{k,0}$ :

$$a_1^2 \int_0^\infty \frac{\sin kr \sin k'r}{r^2} r^2 dr = \delta(k - k')$$

Такой ответ можно получить, взяв интеграл с помощью известного интеграла<sup>12</sup>:

$$\int_{-\infty}^\infty e^{i(k-k')x} dx = 2\pi \delta(k - k')$$

Итак, мы рассмотрели свободное движение в сферической системе координат. Оно сложнее, чем в декартовой.

---

<sup>12</sup>Это Фурье-преобразование дельта-функции

## 4.2. Сферическая потенциальная яма

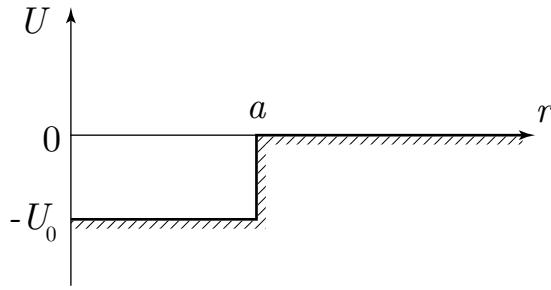


Рис. 25. Сферическая яма,  $a$  - радиус

Рассмотрим задачу о движении в сферически симметричной яме<sup>13</sup> (см. рис. 25). Для простоты рассмотрим случай, когда  $l = 0$  (так называемый  $s$ -канал):

$$\left[ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2m}{\hbar^2} U(r) + k^2 \right] R_{k,l}(r) = 0, \quad U = \begin{cases} -U_0, & r < a \\ 0, & r > a \end{cases}$$

В самом первом разделе мы уже решали задачу об одномерной яме:

$$\Psi'' + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0) \Psi = 0, \quad U = \begin{cases} -U_0, & -a < x < a \\ 0, & |x| > a \end{cases}$$

Оказывается, сферическая задача сводится к одномерной заменой  $R = \frac{\chi}{r}$ :

$$\begin{cases} \chi'' + \frac{2m}{\hbar^2} U_0 \chi + \frac{2m}{\hbar^2} E \chi = 0, & r \leq a, \\ \chi'' + \frac{2m}{\hbar^2} E \chi = 0, & r > a \end{cases}$$

Задача, казалось бы, та же. Но надо учесть особенность в нуле. Для одномерной задачи мы получали в яме

$$\Psi = C_1 \cos kx, \quad \Psi = C_2 \sin kx, \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - |E|)$$

<sup>13</sup>Казалось бы, есть сходство наших задач с электродинамическими. Главное отличие в том, что мы ищем скалярную функцию, и она может представлять собой сферически-симметричную волну, в силу скалярности, а в ЭД поля векторные. В ЭД не бывает монопольного излучения. Не может быть в точке переменного заряда: он должен откуда-то притечь (или куда-то утечь). Квантовая механика в этом плане больше похожа на акустику.

## И вне ямы

$$\Psi = d_1 \exp[-\varkappa(x - a)], \quad \Psi = d_2 \exp[\varkappa(x - a)], \quad \varkappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2} |E|$$

Ключевая разница в граничных условиях в нуле: задача на  $\chi$  формально совпала с одномерной для  $\Psi$ , но нам нужна регулярность в нуле не  $\chi$ , а  $R = \frac{\chi}{r}$ . Все чётные серии одномерной задачи дают  $R$  особенность в нуле и не подходят сферической задаче: не удовлетворяют ограниченностям в нуле. Поэтому работает только нечётная серия.

Что отсюда следует? Давайте вспомним одномерную задачу. В силу граничных условий – непрерывности функции и её производной получается

$$c_2 \sin ka = d_2, \quad c_2 k \cos ka = -\varkappa d_2 \quad \Rightarrow \quad k \operatorname{ctg} ka = -\varkappa$$

Обозначим

$$\gamma^2 = \frac{2m}{\hbar^2} |E| \quad \Rightarrow \quad k^2 = \gamma^2 - \varkappa^2$$

Введём переменные  $y = ka$ ,  $z = \gamma a$ ,  $p = \varkappa a$ , и тогда

$$y \operatorname{ctg} y = -p = -\sqrt{z^2 - y^2},$$

В разделе 1.2.2 мы подробно уже рассмотрели решение этой задачи. Напомним, что условие появление корня в нечётной серии

$$\sqrt{\frac{2mU_0}{\hbar^2}} a \geq \frac{\pi}{2}$$

Это важный результат: в квантовой механике в трёхмерной задаче нужно, чтобы яма была достаточно глубокой. **Дискретные уровни появляются из нуля при достижении критической глубины.** Это ключевое отличие сферической симметричной ямы от одномерной. В одномерной задаче один уровень энергии есть всегда, при любой глубине ямы.

### 4.3. Сферический гармонический осциллятор

Рассмотрим задачу о трёхмерном (сферическом) гармоническом осцилляторе. Гамильтониан такой задачи

$$H = H_x + H_y + H_z = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} + \frac{m\omega^2(x^2 + y^2 + z^2)}{2} = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 r^2}{2}$$

Это тоже задача о центральном поле: гамильтониан зависит только от модуля  $|\vec{r}|$ . Задача решается разделением переменных в декартовой системе координат  $\Psi(x, y, z) = X(x)Y(y)Z(z)$ , затем решаются задачи на собственные значения

$$H_x X = E_x X, \quad H_y Y = E_y Y, \quad H_z Z = E_z Z, \quad \text{где } E = E_x + E_y + E_z$$

По сути, задача разбивается на три одномерных осциллятора. Далее для каждого решение проводится стандартным образом: вводятся безразмерные координаты  $\xi = \frac{x}{l_{\text{кв}}} = x/\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ , получается уравнение, которое можно свести к уравнению Эрмита

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right] X = \hbar\omega \left[ -\frac{\hbar}{2m\omega} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m\omega x^2}{2\hbar} \right] X = E_x X$$

Решение такой задачи мы знаем:

$$E_x = \hbar\omega \left( n_x + \frac{1}{2} \right), \quad X_{n_x}(\xi) = \exp \left[ -\frac{\xi^2}{2} \right] H_{n_x}(\xi)$$

Без доказательства отметим тот факт, что решение трёхмерного осциллятора можно сконструировать из решений трех одномерных осцилляторов:

$$E = \hbar\omega \left( n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2} \right),$$

$$\Psi = \exp \left[ -\frac{x^2 + y^2 + z^2}{2l_{\text{кв}}^2} \right] H_{n_x}(x) H_{n_y}(y) H_{n_z}(z)$$

**Случайное вырождение.** Рассмотрим основное состояние ( $n_x = n_y = n_z = 0$ ). Какова его степень вырождения? Такое состояние одно: степень вырождения 1, или, как говорят, не вырожденное состояние.

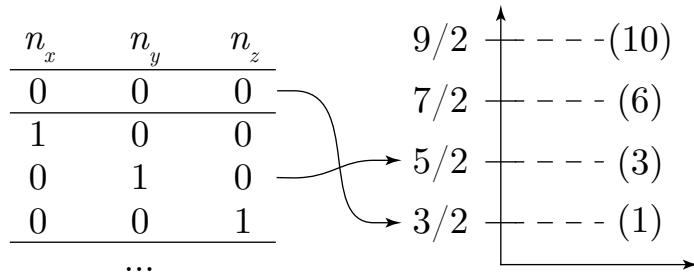


Рис. 26. Уровни и степени вырождения

Количество вырождений определяется количеством способов  $N$  набрать один и тот же уровень энергии разными  $n_x, n_y, n_z$ . Так, для уровня энергии  $E = \frac{5}{2}$  степень вырождения будет 3, для  $E = \frac{7}{2}$  степень 6 и так далее.

Чтобы было яснее, построим табличку, куда будем записывать все возможные способы набрать определённую энергию:

Таблица 1. Таблица вырождений

$N$	1	3			6					10										
$n_x$	0	1	0	0	2	0	0	1	1	0	3	0	0	1	0	1	2	2	1	0
$n_y$	0	0	1	0	0	2	0	1	0	1	0	3	0	1	1	2	1	0	0	2
$n_z$	0	0	0	1	0	0	2	0	1	1	0	0	3	1	2	0	0	1	2	1

Степени вырождения образуют арифметическую прогрессию. Степень вырождения на  $n$ -ом уровне будет

$$N = \frac{(n+1)(n+2)}{2}$$

Эту задачу можно решать и в сферической системе координат, записав соответствующий гамильтониан и разделив переменные:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l^2}{r^2} \right) + \frac{m\omega^2 r^2}{2}, \quad \Psi = R_{n_r, l}(r) Y_{l, m}(\theta, \varphi),$$

где  $n_r$  – число узлов радиальной волновой функции. При таком решении квантование энергии получится в следующем виде:

$$E = \hbar\omega \left( 2n_r + l + \frac{3}{2} \right)$$

Такое квантование даёт тот же самый ряд степеней вырождения. Например, попробуем набрать степень  $\frac{7}{2}$ :

$$n_r = 1, l = 0, \quad n_r = 0, l = 2, \quad \dots \quad 6 \text{ способов}$$

Если бы мы использовали формулу вырождения по магнитному квантовому числу  $2l+1$ , то получили бы степень вырождения меньше. Это пример так называемого **случайного вырождения**: вырождение выше, чем ожидается просто из сферической симметрии.

Если степень вырождения выше, значит есть ещё преобразование, отличное от сферического вращения. Это более высокая группа симметрии. Более низкая группа – подгруппа высокой. Пример: одномерное вращение – подгруппа трёхмерного вращения.

#### 4.4. Кулоново поле

Прежде чем рассматривать движение в поле Кулона, нужно учесть, что на самом деле поле создаётся частицами, а значит, рассматривать нужно движение нескольких частиц. Простейший пример такой системы – атом водорода: задача двух тел – движение протона и электрона.

Потенциал Кулона зависит только от расстояния между частицами. Сила же, которая зависит только от разности расстояний, есть внутренняя сила. Поэтому полный импульс сохраняется, и можно ввести новую систему координат относительно центра масс системы  $\vec{R}_{\text{цм}}$ , и тогда задачу двух тел можно разделить на задачу о вращении одного из тел вокруг центра масс и задачу о движении центра масс.

Введём обозначения:

$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2,$$

где  $\vec{r}_1, \vec{r}_2$  – радиус-векторы соответственно первой и второй частицы. Взаимодействие между частицами будем описывать притягивающим потенциалом Кулона

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

Запишем стационарное уравнение Шрёдингера:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m_1} \Delta_{r_1} - \frac{\hbar^2}{2m_2} \Delta_{r_2} + U(r) \right] \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (44)$$

Волновая функция здесь зависит от  $\vec{r}_1$  и  $\vec{r}_2$ , а значит, является функцией шести скалярных переменных.

**Преобразование к задаче о движении центра масс.** Разобьём эту систему на движение центра масс и вращение частицы вокруг общего центра масс. Введём обозначения радиус-вектора центра масс  $\vec{R}$ , массы системы  $M$  и приведённой массы  $m$ :

$$\vec{R} = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2}, \quad M = m_1 + m_2, \quad \frac{1}{m} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \quad (45)$$

Запишем  $\vec{r}$  и  $\vec{R}$  в индексной форме записи  $x_i$  и  $X_i$ :

$$x_i = x_{1i} - x_{2i}, \quad X_i = \frac{m_1 x_{1i} + m_2 x_{2i}}{m_1 + m_2}, \quad i = 1, 2, 3$$

Нужно перейти от старых переменных  $\vec{r}_1$ ,  $\vec{r}_2$  к новым  $r$ ,  $R$ . Для этого нужно выразить производные:

$$\frac{\partial}{\partial x_{1j}} = \frac{\partial}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial x_i}{\partial x_{1j}} + \frac{\partial}{\partial X_i} \cdot \frac{\partial X_i}{\partial x_{1j}}, \quad \frac{\partial}{\partial x_{2j}} = \frac{\partial}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial x_i}{\partial x_{2j}} + \frac{\partial}{\partial X_i} \cdot \frac{\partial X_i}{\partial x_{2j}}$$

Дифференцированием уравнений по соответствующим переменным получаем:

$$\frac{\partial x_i}{\partial x_{1j}} = \delta_{ij}, \quad \frac{\partial x_i}{\partial x_{2j}} = -\delta_{ij}, \quad \frac{\partial X_i}{\partial x_{1j}} = \frac{m_1}{m_1 + m_2} \delta_{ij}, \quad \frac{\partial X_i}{\partial x_{2j}} = \frac{m_2}{m_1 + m_2} \delta_{ij},$$

где  $\delta_{ij}$  – символ Кронекера. Лапласиан и другие производные в индексной форме записи примут вид:

$$\Delta_{x_1} = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial x_{1i}^2}, \quad \Delta_{x_2} = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial x_{2i}^2}$$

$$\frac{\partial}{\partial x_{1j}} = \delta_{ij} \left[ \frac{\partial}{\partial x_i} + \frac{m_1}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial X_i} \right], \quad \frac{\partial}{\partial x_{2j}} = -\delta_{ij} \left[ \frac{\partial}{\partial x_i} - \frac{m_2}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial X_i} \right]$$

В последних уравнениях, так как справа идёт неявное суммирование по  $i$ , можно упростить формулы:

$$\frac{\partial}{\partial x_{1j}} = \frac{\partial}{\partial x_j} + \frac{m_1}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial X_j}, \quad \frac{\partial}{\partial x_{2j}} = -\frac{\partial}{\partial x_j} + \frac{m_2}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial X_j}$$

$$\Delta_{x_1} = \sum_i \frac{\partial^2}{\partial x_{1i}^2} = \sum_i \left( \frac{\partial}{\partial x_i} + \frac{m_1}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial X_i} \right)^2 =$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{2m_1}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial X_i} + \frac{m_1^2}{m_1 + m_2} \frac{\partial^2}{\partial X_i^2}$$

В дальнейшем знак суммы опускается и по повторяющемуся индексу подразумевается суммирование.

$$\Delta_{x_2} = \frac{\partial^2}{\partial x_{2i}^2} = \left( -\frac{\partial}{\partial x_i} + \frac{m_2}{m_1 + m_2} \cdot \frac{\partial}{\partial X_i} \right)^2 =$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} - \frac{2m_2}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial X_i} + \frac{m_2^2}{m_1 + m_2} \frac{\partial^2}{\partial X_i^2}$$

Подставим теперь выраженные через новые переменные лапласианы в (44):

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \Delta_{x_{1i}} - \frac{\hbar^2}{2m_2} \Delta_{x_{2i}} =$$

$$-\frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{1}{m_1} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{m_1}{(m_1 + m_2)^2} \frac{\partial^2}{\partial X_i^2} + \frac{1}{m_2} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{m_2}{(m_1 + m_2)^2} \frac{\partial^2}{\partial X_i^2} \right) =$$

$$-\frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{1}{m_1} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{1}{m_1 + m_2} \frac{\partial^2}{\partial X_i^2} + \frac{1}{m_2} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \right)$$

С учётом введённых в (45) обозначений:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \Delta_{x_{1i}} - \frac{\hbar^2}{2m_2} \Delta_{x_{2i}} = -\frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{1}{m} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{1}{M} \frac{\partial^2}{\partial X_i^2} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta_R$$

Подставим найденные выражения в (44):

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_R - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r + U(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{R}, \vec{r}) = E \Psi(\vec{R}, \vec{r})$$

Переменные разделяются, и мы можем искать решение в виде

$$\Psi(\vec{R}, \vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{R}} \psi(\vec{r})$$

Тогда уравнение можно переписать в виде

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r + U(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = E_{\text{нов}} \psi(\vec{r}), \quad \text{где} \quad E_{\text{нов}} = E - \frac{\hbar^2 k^2}{2M},$$

а  $k$  – волновой вектор центра масс:  $\vec{P}_{\text{цм}} = \hbar \vec{k}$ . Энергия теперь разделилась на энергию разностного движения и энергию центра масс. Задача двух тел свелась к свободному движению центра масс  $\vec{v}_{\text{цм}} = \frac{\hbar \vec{k}}{M}$ .

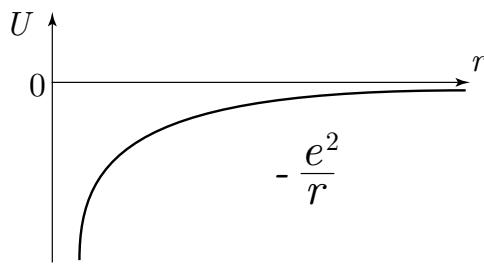


Рис. 27. Потенциал притяжения

**Задача о вращении вокруг центра масс.** Итак, уравнение для движения частицы вокруг центра масс задаётся уравнением Шрёдингера

$$\begin{aligned} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r + U(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) &= E_{\text{нов}} \psi(\vec{r}) \quad \Rightarrow \\ \Rightarrow \quad \left[ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat{l}^2}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E_{\text{нов}} + \frac{e^2}{r} \right) \right] \psi(r) &= 0 \end{aligned}$$

Будем искать решение в сферических гармониках методом разделения переменных:

$$\psi(\vec{r}) = R(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi)$$

Подстановка в уравнение Шрёдингера даст уравнение для радиальной части:

$$\left[ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E + \frac{e^2}{r} \right) \right] R(r) = 0$$

Удобно привести это уравнение к безразмерному виду. Для этого надо сделать масштабное преобразование, выбрать единицу длины и единицу энергии:

$$1L : \quad r = (1L)r_d = \alpha r_d, \quad 1E : E = (1E)\varepsilon_d = \gamma \varepsilon_d$$

Для безразмерности нужно:

$$\frac{m\alpha^2}{\hbar^2}\gamma = 1, \quad \frac{m\alpha^2}{\hbar^2}\frac{e^2}{\alpha} = 1$$

Тогда в безразмерных переменных

$$\left[ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{(l+1)l}{r^2} + 2\left(\varepsilon + \frac{1}{2}\right) \right] R(r) = 0$$

где  $\alpha = \frac{\hbar^2}{me^2}$  – кулоновская единица длины,  $\gamma = \frac{me^4}{\hbar^2}$  – кулоновская единица энергии. Если в  $\alpha$  подставить массу электрона, это будет боровский радиус.

**Приведение к стандартному виду.** Хотим найти дискретный спектр. Введём новые переменные  $n = \frac{1}{\sqrt{-2\varepsilon}}$  и  $\rho = \frac{2r}{n}$ . В них уравнение запишется как

$$R'' + \frac{2}{\rho} R' + \left[ -\frac{1}{4} + \frac{n}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] R(\rho) = 0$$

Как ведёт себя волновая функция при  $\rho \rightarrow \infty$ ? Пренебрежём убывающими на бесконечности членами:

$$R'' + \cancel{\frac{2}{\rho} R'} + \left[ -\frac{1}{4} + \cancel{\frac{n}{\rho}} - \cancel{\frac{l(l+1)}{\rho^2}} \right] R(\rho) = 0, \quad \rho \rightarrow \infty$$

$$R'' - \frac{1}{4} R = 0 \quad \sim \exp\left[-\frac{\rho}{2}\right]$$

А при  $\rho \rightarrow 0$

$$R'' + \frac{2}{\rho} R' - \frac{l(l+1)}{\rho^2} R = 0$$

Это уравнение Эйлера<sup>14</sup> и решение ищется в виде  $R \sim \rho^l$ . Член  $+\frac{c_2}{\rho^{l+1}}$  не учитываем, он противоречит ограниченности волновой функции.

Предлагается искать решение в виде  $R = \rho^l \exp\left[-\frac{\rho}{2}\right] W(\rho)$ . Подстановка

<sup>14</sup>Оно однородно степени 0: если домножить решение на  $\lambda$ , то  $\lambda$  будет можно вынести за скобки

в исходное уравнение даст

$$\rho W'' + (\underbrace{2l+2-\rho}_{\beta})W' + (\underbrace{n-l-1}_{-\delta})W = 0$$

$$\rho W'' + (\beta - \rho)W - \delta W = 0$$

Получившееся уравнение известно в математике как уравнение Куммера. При этом всю левую часть называют функцией Куммера или вырожденной гипергеометрической функцией:

$$F(\delta, \beta, \rho)$$

Будем искать решение в виде ряда.

$$W = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \rho^n \quad \Rightarrow \quad \rho W'' = \sum_{n=0}^{\infty} c_n n(n-1) \rho^{n-1}$$

$$W' = \sum_{n=0}^{\infty} c_n n \rho^{n-1} \quad \Rightarrow \quad \rho W' = \sum_{n=0}^{\infty} c_n n \rho^n$$

Тогда

$$\sum_{n=0}^{\infty} c_n n(n-1) \rho^{n-1} - \sum_{n=0}^{\infty} c_n n \rho^n + \beta \sum_{n=0}^{\infty} c_n n \rho^{n-1} - \delta \sum_{n=0}^{\infty} c_n \rho^n = 0$$

В первой сумме первые два члена нули, и ещё сделаем замену  $n = k + 1$ . Во второй сумме заменяем немой индекс  $n = k$ , в третей  $k = n - 1$ , последняя как вторая:

$$\sum_{k=0}^{\infty} c_{k+1} k(k+1) \rho^k - \sum_{k=0}^{\infty} c_k k \rho^k + \beta \sum_{k=-1}^{\infty} c_k (k+1) \rho^k - \delta \sum_{k=0}^{\infty} c_k \rho^k = 0$$

Группируем члены:

$$(k+1)(\beta+k)c_{k+1} = (k+\delta)c_k \quad \Rightarrow \quad c_{k+1} = \frac{(k+\delta)}{(k+1)(k+\beta)} c_k$$

Чтобы записать общее решение этого уравнения,  $c_{k=0}$  мы можем положить

произвольной, например 1:

$$c_0 = 1, \quad c_1 = \frac{\delta}{\beta 1}, \quad \dots \quad c_2 = \frac{\delta(\delta+1)}{\beta(\beta+1)2!}, \quad c_3 = \frac{\delta(\delta+1)(\delta+2)}{\beta(\beta+1)(\beta+2)3!},$$

Тогда

$$c_n = \frac{\delta(\delta+1) \cdot \dots \cdot (\delta+n-1)}{\beta(\beta+1) \cdot \dots \cdot (\beta+n-1)} n!$$

Нам нужна регулярность в нуле и на бесконечности функции

$$R = \rho^l \exp\left[-\frac{\rho}{2}\right] W(\rho).$$

Для этого нужен обрыв ряда, чтобы он превратился в полином. Для этого с некоторого  $k$  нужно обрывать. Если  $\delta$  – целое отрицательное число, то нужно  $\delta = -n_r$ , где  $n_r$  – целое положительное число или ноль.

Вспомним, что у нас была введена замена  $\delta = 1 - n + l = -n_r$ , тогда условие обрыва можно записать в виде

$$n = n_r + l + 1$$

Также мы делали замену  $n = \frac{1}{\sqrt{-2\varepsilon}}$ . Отсюда можно найти безразмерную энергию:

$$\varepsilon = -\frac{1}{2n^2}$$

Полиномы, образующиеся при обрыве ряда, называются **полиномами Лагера**  $L_{\beta,\delta}$ , и решение через них записывается как

$$R = \rho^l \exp\left[-\frac{\rho}{2}\right] L_{\beta,\delta}(\rho)$$

## 4.5. Случайное вырождение

Итак, мы получили выражение на собственные значения (энергию) и на собственные функции при больших  $\frac{r}{n}$ :

$$\varepsilon = -\frac{1}{2n^2}, \quad \text{где} \quad n = n_r + l + 1, \quad \Psi = \left(\frac{2r}{n}\right)^l \exp\left[-\frac{r}{n}\right] L_{n_r}\left(\frac{2r}{n}\right) Y_{l,m}(\theta, \varphi)$$

Сосчитаем степень вырождения. В правой колонке набрано вырождение по  $m$ , которое составляет  $2l + 1$ :

$$n = 0 : \begin{cases} n_r = 0, l = 0 & 1 \\ n_r = 1, l = 1 & 1 \end{cases} \Rightarrow 1 \quad n = 1 : \begin{cases} n_r = 1, l = 0 & 1 \\ n_r = 0, l = 1 & 3 \end{cases} \Rightarrow 4$$

$$n = 2 : \begin{cases} n_r = 2, l = 0 & 1 \\ n_r = 1, l = 1 & 3 \\ n_r = 0, l = 2 & 5 \end{cases} \Rightarrow 9 \quad n = 3 : \begin{cases} n_r = 3, l = 0 & 1 \\ n_r = 2, l = 1 & 3 \\ n_r = 1, l = 2 & 5 \\ n_r = 0, l = 3 & 7 \end{cases} \Rightarrow 16$$

Легко сообразить, что степень вырождения за счёт только  $2l + 1$  будет

$$\sum_{l=0}^{l=n-1} (2l + 1) = n^2$$

Степень вырождения же оказалась выше, чем можно было бы ожидать. Такое вырождение называется случайным и является следствием некоторой дополнительной симметрии.

### Дополнительные замечания.

$$\hat{A}, \hat{B} \quad [A, B] \neq 0,$$

Напишем некий оператор (интеграл движения, закон сохранения) специфический для кулонова поля.

$$\vec{A} = \frac{\vec{r}}{r} - \frac{1}{2} \left\{ \left[ \vec{p}, \vec{l} \right] - \left[ \vec{l}, \vec{p} \right] \right\}$$

Убедимся в этом:

$$m\ddot{\vec{r}} = -\frac{\vec{r}e^2}{r^3}$$

Если бы был классический интеграл движения, то было бы

$$\vec{A} = \frac{\vec{r}}{r} - \left[ \vec{p}, \vec{l} \right]$$

В квантовой механике дополнительному вырождению соответствует некото-

рый оператор, коммутирующий с гамильтонианом.

Импульс и момент импульса в квантах эрмитовы, а их симметризованное произведение (pl-lp) тоже эрмитово.

$$(AB)^+ = B^+ A^+, \quad \hat{C} = AB + BA \quad \text{эрмитов всегда (симметризован)}$$

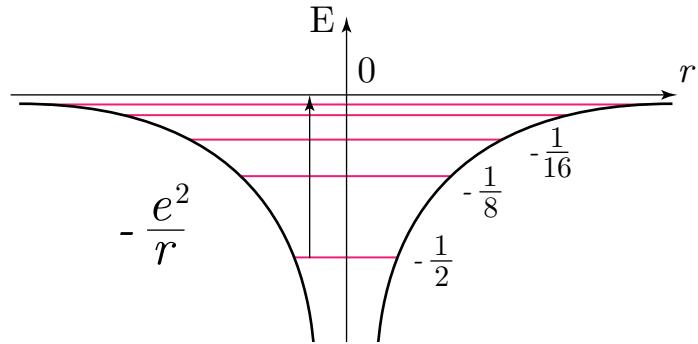


Рис. 28. Спектр в кулоновом поле

Всего под нулём находится бесконечное число уровней. В задаче про яму получалось конечное число уровней, а в кулоновом поле оно бесконечно: из-за слабого спадания функции  $\frac{1}{r}$ .

Для высоких  $n$  движение будет классическим. Например, сильно возбуждённые атомы водорода (так называемые ридверговские).

В размерных переменных

$$E = -\frac{Ry}{2n^2}, \quad \text{где} \quad Ry = 27.2 \text{ эВ}$$

## 5. Теория возмущений

Количество точно решаемых задач ограничено. Это такие задачи, как прямоугольные потенциалы, гармонический осциллятор, кулоново поле и подобные. Таких задач очень мало. Практически любая реальная физическая квантовая задача точно не решается. Поэтому важно уметь применять приближенные методы: один из них – теория возмущений. Она основана на существовании малого параметра задачи.

Покажем простейшее применение теории возмущений на примере решения алгебраических уравнений. Оказывается, можно решить точно квадратное уравнение, кубическое (с помощью формулы Кардано) и четвёртой степени, а уравнение пятой степени в радикалах уже не решается. Это строго доказанный математический факт (см. книгу Феликса Клейна «Элементарная математика глазами высшей»).

$$x^5 + \alpha x^4 + \beta x^3 + \gamma x^2 + \delta x + \varepsilon = 0$$

Довольно сложно доказать, что чего-то решить нельзя. Аналитически решить уже не получится. Тем не менее, может оказаться, (по теореме о представлении любого уравнения в виде  $\prod_{n=1}^5 (x - x_n) = 0$ ) что решение мы найдём. Например:

$$x^5 - 1 = 0 \quad \text{его решение} \quad x = \exp\left\{\frac{2\pi i n}{5}\right\}$$

Если уравнение решается в радикалах, то решения на комплексной плоскости можно построить циркулем и линейкой, иначе нельзя.

Пусть у нас есть точно решённая задача, и задача, слабо отличающаяся от точной:

$$x^2 + x = \varepsilon$$

Квадратное уравнение, в принципе, решается точно.

Если  $\varepsilon = 0$ , то

$$x^2 + x = x(x + 1) = 0 \quad x_1 = 0, \quad x_2 = -1.$$

Будем искать решение в виде  $x_2 = x_2^0 + \delta$ . Тогда

$$(-1 + \delta)^2 + (-1 + \delta) = \varepsilon \Rightarrow 1 - 2\delta + \delta^2 - 1 + \delta = \varepsilon$$

Так как  $\delta \ll 1$ , то  $\delta^2 \rightarrow 0$ , и тогда  $\delta = -\varepsilon$ .

Суть теории возмущений заключается именно в разложении по малому параметру в области точного решения.

## 5.1. Стационарная теория возмущений

Пусть у нас есть уравнение Шрёдингера:

$$i\hbar\dot{\Psi} = \hat{H}\Psi$$

Пусть  $\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{V}$ , где  $V$  - это возмущение. Предположим отсутствие явной зависимости от времени:  $\frac{\partial H^0}{\partial t} = 0$ ,  $\frac{\partial V}{\partial t} = 0$ . Тогда можем искать решение стационарной задачи:

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

Пусть мы знаем точное решение невозмущенной задачи:

$$H^{(0)}\psi_m^{(0)}(q) = E_m^{(0)}\psi_m^{(0)}(q) \quad (46)$$

Тогда решение этой задачи  $\psi$  можно искать в виде разложения по собственным функциям стационарных состояний невозмущённой задачи:

$$(\hat{H}^{(0)} + \hat{V})\psi = E\psi, \quad \psi = \sum_{m=0}^{\infty} c_m \psi_m^{(0)}(q) \quad (47)$$

Подставим это разложение в уравнение невозмущенной задачи (47), и учитывая, что оператор линейный, получим:

$$\sum_{m=0}^{\infty} c_m (\hat{H}^{(0)} + \hat{V}) \psi_m^{(0)} = E \sum_{m=0}^{\infty} c_m \psi_m^{(0)}.$$

В силу точного решения (46)

$$\sum_{m=0}^{\infty} c_m (E - E_m^{(0)}) \psi_m^{(0)} = \sum_{m=0}^{\infty} c_m \hat{V} \psi_m^{(0)}$$

Собственные функции гамильтониана невозмущённой задачи (причём он является эрмитовым оператором) ортогональны. Тогда сумму можно домно-

жить слева на  $\psi_k^{(0)*}$  и проинтегрировать по  $dq$ . В итоге получаем:

$$\left\langle \psi_k^{(0)} \left| \psi_m^{(0)} \right. \right\rangle \equiv \langle k | m \rangle = \delta_{km} \Rightarrow (E - E_k^{(0)}) c_k = \sum_m V_{km} c_m,$$

или

$$(E_k^{(0)} - E) c_k + \sum_m V_{km} c_m = 0, \quad (48)$$

где  $V_{km}$  – матричный элемент:

$$V_{km} = \left\langle \psi_k^{(0)} \left| V \right| \psi_m^{(0)} \right\rangle = \int \psi_k^{(0)*} \hat{V} \psi_m^{(0)}(q) dq.$$

Слагаемое  $E_k^{(0)}$ . Как выглядит  $H^{(0)}$  в своём представлении?

$$\int \psi_k^{(0)*} H^{(0)} \psi_m^{(0)} dq = E_m^{(0)} \delta_{km}$$

Он диагональный.

Предполагается, что спектр дискретный, так как ставились суммы, а не интегралы. Как записать систему уравнений (48) в матричном виде? (столбцы  $m$ , строчки  $k$ )

$$\begin{pmatrix} E_1^{(0)} - E + V_{11} & V_{12} & V_{13} & \dots \\ V_{21} & E_2^{(0)} - E + V_{22} & V_{23} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \dots \end{pmatrix} = 0$$

Индекс  $k$  – это номер уравнения.

$$\sum_j a_{ij} c_j = 0$$

Будем считать, что  $V_{km}$  в каком-то смысле малы. В каком, выясним. Будем искать значение коэффициентов  $c_m$  и энергии  $E$  в виде рядов

$$c_m = c_m^{(0)} + c_m^{(1)} + c_m^{(2)} + \dots, \quad E = E^{(0)} + E^{(1)} + E^{(2)} + \dots$$

Где  $E^{(1)}, c_m^{(1)}$  такого же порядка малости, как возмущение. Определим поправки к  $n$ -му собственному значению в нулевом, первом и втором приближении.

Для  $n$ -го состояния:

$$c_n^{(0)} = 1, c_m^{(0)} = 0 \quad (m \neq n)$$

$$E = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \dots$$

**Нулевой порядок малости.** Рассмотрим нулевое приближение. Пусть система без возмущения находилась в начальном состоянии  $E_n^{(0)}$ . В нулевом приближении все элементы  $V_{kn}$  зануляются:

$$\begin{pmatrix} E_1^{(0)} - E & 0 & 0 & \dots \\ 0 & E_2^{(0)} - E & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \dots \end{pmatrix} = 0$$

Для решения этой линейной однородной системы, нужно чтобы определитель был равен нулю. Матрица диагональная, ее детерминант – произведение диагональных элементов:

$$\Delta = \prod_{k=1}^{\infty} (E_k^{(0)} - E) = \prod_{k=1}^{\infty} (E_k^{(0)} - E^{(0)}) = 0 \quad \Rightarrow c_k^{(0)} = \delta_{nk} \Rightarrow E^{(0)} = E_n^{(0)}$$

В итоге, невозмущённое решение очевидно, совпадает с решением невозмущенной задачи  $\psi = \psi^{(0)}$ . Мы можем так решать эту систему уравнений, т.к. сделали предположение при решении, что все энергии  $E_1^{(0)}, E_2^{(0)}, \dots$  разные. Вырождение будет рассмотрено позднее.

**Первый порядок малости.** Уравнение (48) это уравнение Шрёдингера, записанное в представлении стационарных состояний невозмущённой системы. Геометрический образ – матрица ( $k$  – номер строки,  $m$  – столбца):

$$\begin{pmatrix} E_1^{(0)} - E + V_{11} & V_{12} & V_{13} & \dots \\ V_{21} & E_2^{(0)} - E + V_{22} & V_{23} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \dots \end{pmatrix} = 0$$

Это СЛАУ. Сколько собственных функций – столько и уравнений в системе, т.е. имеем бесконечную матрицу. Рассмотрим первое приближение. Для этого в уравнении (48) при подстановке выражений для  $E$  и  $c_k$  необходимо оставить только слагаемые **первого порядка малости**. Для первой поправки ищем

решение в виде:

$$E = E_n^{(0)} + E_n^{(1)}, \quad c_k = c_k^{(0)} + c_k^{(1)}$$

$$\sum_m V_{km} c_m^{(0)} = (E_n^{(0)} + E_n^{(1)} - E_k^{(0)}) \cdot (c_k^{(0)} + c_k^{(1)}) \simeq c_k^{(0)} E_n^{(1)} + c_k^{(1)} (E_n^{(0)} - E_k^{(0)})$$

Так как  $c_k^{(0)} = \delta_{nk}$ :

$$\sum_m V_{km} \delta_{nm} = V_{kn} = \delta_{nk} E_n^{(1)} + c_k^{(1)} (E_n^{(0)} - E_k^{(0)})$$

Для случая  $n = k$  получаем поправку к энергии:

$$E_n^{(1)} = V_{nn} = \int \psi_n^{(0)*} \hat{V} \psi_n^{(0)}(q) dq.$$

А для  $n \neq k$  находим поправку к коэффициенту разложения:

$$V_{kn} = c_k^{(1)} (E_n^{(0)} - E_k^{(0)}) \Rightarrow c_k^{(1)} = \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}, \quad n \neq k$$

Мы получили, что в первом приближении столбец коэффициентов  $C = \{c_k\}$  имеет вид (на  $n$ -ом месте  $1 + c_n^{(1)}$ )

$$C = \begin{pmatrix} c_1^{(0)} + c_1^{(1)} \\ c_2^{(0)} + c_2^{(1)} \\ \dots \\ c_n^{(0)} + c_n^{(1)} \\ \dots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{V_{1n}}{E_n^{(0)} - E_1^{(0)}} \\ \frac{V_{2n}}{E_n^{(0)} - E_2^{(0)}} \\ \dots \\ 1 + c_n^{(1)} \\ \dots \end{pmatrix}$$

Таким образом, мы нашли в первом порядке все коэффициенты  $c_k^{(1)}$ , кроме  $n$ -го – которое из уравнения не находится.

Поправку  $c_n^{(1)}$  легко определить из условия нормировку волновой функции  $\psi_n = \psi_n^{(0)} + \psi_n^{(1)}$  на единицу, с точностью **до первого порядка**. При этом необходимо учесть ортогональность собственных функций, их нормировку и отбросить все слагаемые, у которых порядок малости выше единицы.

$$\langle \psi | \psi \rangle = \left\langle \sum_m (\delta_{mn} + c_m^{(1)}) \psi_m^{(0)} \middle| \sum_m (\delta_{mn} + c_m^{(1)}) \psi_m^{(0)} \right\rangle =$$

$$\begin{aligned}
&= \left\langle (1 + c_n^{(1)})\psi_n^0 + \sum_{m \neq n} c_m^{(1)}\psi_m^{(0)} \middle| (1 + c_n^{(1)})\psi_n^0 + \sum_{m \neq n} c_m^{(1)}\psi_m^{(0)} \right\rangle = \\
&= |1 + c_n^{(1)}|^2 \left\langle \psi_n^{(0)} \middle| \psi_n^{(0)} \right\rangle + \left\langle \sum_{m \neq n} c_m^{(1)}\psi_m^{(0)} \middle| \sum_{m \neq n} c_m^{(1)}\psi_m^{(0)} \right\rangle = \\
&= |1 + c_n^{(1)}|^2 + \underbrace{\sum_{m \neq n} |c_m^{(1)}|^2}_{\text{второй порядок малости}} = 1 + c_n^{(1)} + c_n^{*(1)} = 1 + 2 \operatorname{Re} \{ c_n^{(1)} \} = 1
\end{aligned}$$

Логично предположить, что  $\operatorname{Re} \{ c_n^{(1)} \} = 0$ . Следовательно,  $c_n^{(1)} = 0$ . Таким образом, мы нашли первую поправку:

$$E_n^{(1)} = V_{nn}, \quad n = k$$

$$c_k^{(1)} = \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}, \quad n \neq k$$

**Второй порядок малости** Запишем уравнения во втором порядке малости. В (48) подставляем  $k = n$  и разложение  $E$  и  $c_k$  до вторых порядков малости. При этом большинство слагаемых сократится, и останется:

$$-E_n^{(2)}c_n^{(0)} + \sum_{m \neq n} V_{nm}c_m^{(1)} = 0$$

Откуда поправка второго порядка к  $n$ -му уровню энергии:

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{V_{nm}V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

Находя аналогичным способом поправку к коэффициентам (пренебрегая всем выше второго порядка малости, учитывая что у  $V \cdot c_m^{(2)}$  - 3й порядок малости), получаем выражение для поправки коэффициентов разложения ( **Выражение ниже – (49) получено студентом, а не записано с лекций, возможно, оно неправильное!** ):

$$c_k^{(2)} = \begin{cases} 0, & k = n \\ \sum_{m \neq n} \frac{|V_{mn}|^2}{(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})} - \frac{V_{kn}V_{nn}}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})^2}, & k \neq n \end{cases} \quad (49)$$

С точностью до второго порядка, получаем выражение для энергии:<sup>15</sup>

$$E_n = E_n^{(0)} + V_{nn} + \sum_{m \neq n} \frac{V_{mn}V_{nm}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

### 5.1.1 Ангармонический осциллятор

Такой осциллятор описывает движение в непарabolическом потенциале. Гамильтониан системы есть

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} + \underbrace{\alpha x^3 + \beta x^4}_{\hat{V}}$$

Будем считать, что невозмущенный гамильтониан  $\hat{H}^{(0)} = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$ . Эта задача может быть решена с помощью операторов рождения и уничтожения  $a^+, a$ :

$$\begin{aligned} p &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \equiv -i\hbar \partial_x \\ H &= -\frac{\hbar^2 \partial_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} + \alpha x^3 + \beta x^4 \\ H &= \hbar\omega \left( -\frac{\hbar\partial_x^2}{2m\omega} + \frac{m\omega}{2\hbar} x^2 + \alpha \frac{x^3}{\hbar\omega} + \beta \frac{x^4}{\hbar\omega} \right) \end{aligned}$$

Введём безразмерные величины  $l_{\text{кв}} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \equiv l_k$  и  $x = \xi l_k$ :

$$H = \hbar\omega \left( -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{\xi^2}{2} + \frac{\alpha l_k^3}{\hbar\omega} \xi^3 + \frac{\beta l_k^4}{\hbar\omega} \xi^4 \right)$$

<sup>15</sup> В Ландау (см. §38, стр 173) такую сумму часто обозначают штрихом, считая, что в такой сумме опускается бесконечное слагаемое.

Введём переменные

$$\varepsilon = \frac{E}{\hbar\omega}, \quad \tilde{\alpha} = \frac{\alpha l_k^3}{\hbar\omega}, \quad \tilde{\beta} = \frac{\beta l_k^4}{\hbar\omega}$$

Тогда

$$H = \frac{p^2 + \xi^2}{2} + \tilde{\alpha}\xi^3 + \tilde{\beta}\xi^4, \quad H\psi = \varepsilon\psi$$

Вспомним, как вводились операторы  $a$  и  $a^+$  в (16), а также их коммутационные соотношения:

$$\xi = \frac{a + a^+}{\sqrt{2}}, \quad p = \frac{a - a^+}{i\sqrt{2}}, \quad p\xi - \xi p = -i, \quad aa^+ - a^+a = 1$$

Гамильтониан при подстановке будет иметь вид:

$$H = \underbrace{a^+a + \frac{1}{2}}_{H^0} + \underbrace{\tilde{\alpha} \frac{(a + a^+)^3}{2\sqrt{2}} + \tilde{\beta} \frac{(a + a^+)^4}{4}}_V$$

Задача схожа с теорией колебаний, где мы ищем поправку к частоте методом Ван-дер-Поля. Мы же будем искать поправку к  $k$ -му уровню энергии.

$$\varepsilon^{(0)} = k + \frac{1}{2}$$

Чтобы найти первую поправку, надо найти матричный элемент  $V_{kk}$ :

$$\varepsilon = \varepsilon^{(0)} + \langle k | V | k \rangle$$

Займёмся этим. Сначала найдем матричный элемент от кубического слагаемого:

$$\langle k | \tilde{\alpha}(a + a^+)^3 | k \rangle = \quad (50)$$

Вспомним, как действуют операторы  $a, a^+$ , и как раскрывается куб суммы:

$$a^+ |k-1\rangle = \sqrt{k} |k\rangle, \quad a |k\rangle = \sqrt{k} |k-1\rangle$$

$$\begin{aligned} (a + a^+)^3 &= \\ &= a^3 + a^{+3} + a^2a^+ + aa^{+2} + aa^+a + a^+a^2 + a^+aa^+ + a^{+2}a \end{aligned}$$

Если расписывать действие каждого оператора на каждую собственную функцию, то в результате окажется, что под интегралом:

$$\langle k | \tilde{\alpha}(a + a^+)^3 | k \rangle = \int \psi_k^* \tilde{\alpha}(a + a^+)^3 \psi_k dq$$

в множителе  $\tilde{\alpha}(a + a^+)^3 \psi_k$  - отсутствуют собственные функции номера  $k$ , и в силу ортогональности  $\langle \psi_k | \psi_m \rangle = \delta_{mk}$ , выражение (50) равно 0, а значит, и первая поправка к энергии  $\varepsilon^{(1)} = 0$ .

Теперь займёмся слагаемым 4-й степени. (Ненулевыми здесь будет шесть слагаемых, из бинома Ньютона 1 4 6 4 1):

$$\begin{aligned} & \langle k | \tilde{\beta}(a + a^+)^4 | k \rangle = \\ & = \langle k | aaa^+a^+ + aa^+aa^+ + a^+aaa^+ + a^+aa^+a + a^+a^+aa | k \rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} a^+ | k \rangle &= \sqrt{k+1} | k+1 \rangle, \quad a^+a^+ | k \rangle = \sqrt{k+2}\sqrt{k+1} | k+2 \rangle, \\ aa^+a^+ | k \rangle &= (k+2)\sqrt{k+1} | k+1 \rangle, \quad aaa^+a^+ | k \rangle = (k+2)(k+1) | k \rangle \end{aligned}$$

Находя таким образом действие каждого слагаемого в итоге получаем:

$$\begin{aligned} \langle k | aa^+aa^+ | k \rangle &= (k+1)^2, \quad \langle k | aaa^+a^+ | k \rangle = (k+2)(k+1) \\ \langle k | a^+aaa^+ | k \rangle &= k(k+1), \quad \langle k | aa^+a^+a | k \rangle = k(k+1), \quad \langle k | a^+a^+aa | k \rangle = k(k-1) \end{aligned}$$

Проделав все таким нехитрым способом, напишем окончательный ответ:

$$\varepsilon^{(1)} = \langle k | \tilde{\beta}(a + a^+)^4 | k \rangle = 3\tilde{\beta}(2k^2 + 2k + 1)$$

У гармонического осциллятора (в нулевом приближении) спектр эквидистантный, см рис. 29. При  $\tilde{\beta} > 0$ , из-за положительной поправки  $\varepsilon^{(1)}$  уровни повышаются. Это есть проявление принципа неопределённости: мы пытаемся зажать квантовую частицу в более узком потенциале, а она реагирует путём повышения своей энергии. Чем больше  $k$ , тем выше уходят уровни энергии и сильнее нарушается эквидистантность.

Конечная разность  $E_k - E_{k-1}$  – аналог производной. Для производной  $\partial(x^2)/\partial x = 2x$ , здесь аналогично разность порядка  $k^2$ .

Если же  $\beta < 0$  (см рис. 30), то расстояние между уровнями будет сокра-

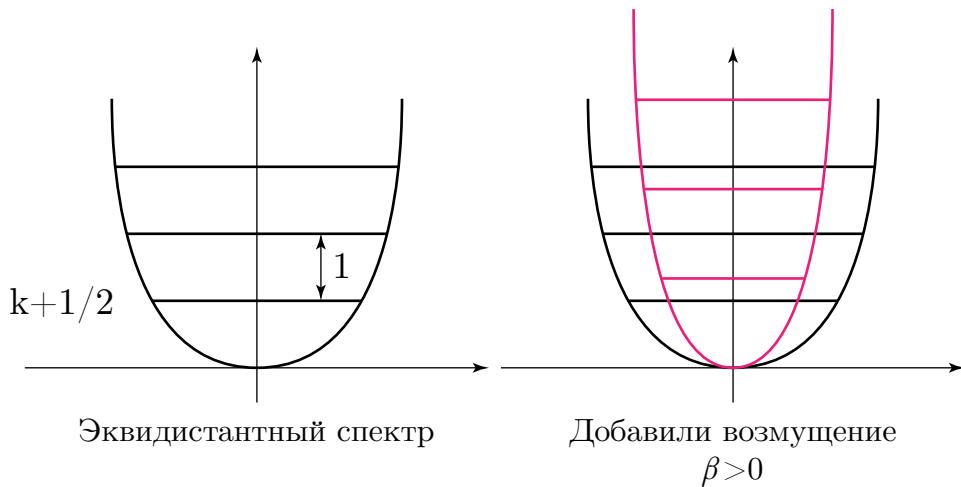


Рис. 29. Различие уровней гармонического и ангармонического осцилляторов

щаться. ... ??

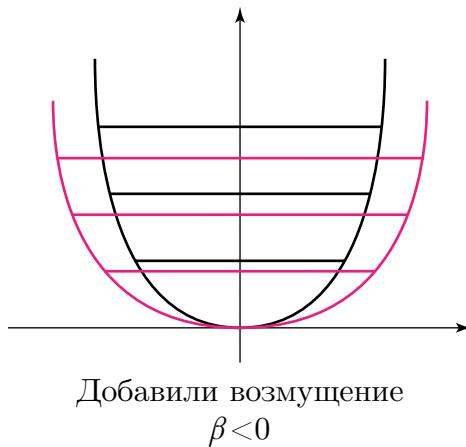


Рис. 30. Сокращение расстояния между уровнями

Как было показано ранее, в первом порядке теории возмущений добавка  $x^3$  не изменит ничего. Во втором порядке – изменит. Попробуем найти поправку к нулевому уровню из общей формулы для уровня  $k$ :

$$\varepsilon_k = \varepsilon_k^{(0)} + V_{kk} + \sum_{m \neq k} \frac{V_{km} V_{mk}}{E_k^{(0)} - E_m^{(0)}} \quad (51)$$

Для  $k = 0$   $E_0^{(0)} - E_m^{(0)} < 0$ , а в силу эрмитовости  $\hat{V}$ :  $V_{mk} = V_{km}^*$ . Тогда поправка второго порядка к основному приближению будет всегда отрицательна – из-за кубического члена.

Наметим путь решения этой задачи. Нужно выписывать матричные элементы  $V_{mk}$ :

$$V_{km} = \langle k | (a + a^\dagger)^3 | m \rangle$$

$$\begin{aligned} \langle k | a^3 | m \rangle &\Rightarrow m = k + 3, & \langle k | a^{+3} | m \rangle &\Rightarrow m = k - 3 \\ \langle k | a^{+2}a | m \rangle &\Rightarrow m = k - 1, & \langle k | a^2a^+ | m \rangle &\Rightarrow m = k + 1 \end{aligned}$$

В этой сумме будет четыре члена, в знаменателе формулы (51) будет

$$E_k^0 - E_m^0 = \pm 3\hbar\omega$$

Эта задача решена в Ландау<sup>16</sup>. **Она у нас на экзамене на пятёрку.**

### 5.1.2 Вырождение

Модификаций теорий возмущений много. Мы будем изучать теорию возмущений Шрёдингера-Ритца. В квантовой электродинамике её применение сложно, и Фейнман придумал другую теорию возмущений, позволяющую автоматизировать решение.

От времени у нас по-прежнему ничего не зависит. Уравнение в базисе функций невозмущённой задачи запишется как

$$(E_n^{(0)} - E)c_n + \sum_m V_{nm}c_m = 0.$$

В матричном виде ( $m$  – номер столбца,  $n$  – строки):

$$\begin{pmatrix} E_1^{(0)} - E + V_{11} & V_{12} & V_{13} & \dots \\ V_{21} & E_2^{(0)} - E + V_{22} & V_{23} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \dots \end{pmatrix} = 0$$

Мы рассматривали случай, когда все  $E_1^{(0)}, E_2^{(0)}, \dots$  разные – т.е. нет вырождения. Характеристическое уравнение здесь – определитель матрицы равен нулю:

$$\Delta = \prod_n (E_n^{(0)} - E) = 0$$

<sup>16</sup>см. §38, стр 175, решенная во втором порядке малости.

Если мы брали конкретную энергию  $E = E_k^{(0)}$ , то получали  $c_{nk}^{(0)} = \delta_{nk}$ . При вырождении одному собственному значению соответствует несколько собственных функций. У характеристического уравнения среди  $E_n^{(0)}$  есть одинаковые корни<sup>17</sup>.

Пусть у нас кратность вырождения корня  $E_k^{(0)}$  будет  $N$ :

$$\begin{pmatrix} E_1^{(0)} - E + V_{11} & V_{12} & V_{13} & \dots \\ V_{21} & E_2^{(0)} - E + V_{22} & V_{23} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \dots \\ c_{n_1} \\ c_{n_2} \\ \dots \end{pmatrix} = 0$$

Например, уровни энергии, и соответствующие им собств. функции:

$$E_n^{(0)} = E_{n1}^{(0)} = E_{n2}^{(0)}, \quad \psi_{n1}^{(0)}(x), \psi_{n2}^{(0)}(x)$$

Тогда любая их суперпозиция также будет решением:

$$\psi = d_1 \psi_{n1}^{(0)}(x) + d_2 \psi_{n2}^{(0)}(x)$$

Как же правильно найти эти коэффициенты? Всего в столбце коэффициентов  $n = k + N$  элементов<sup>??</sup>. В матрице теперь берём не все уравнения, а только блок кратных корней ( $n'$  обозначены коэффициенты, относящиеся к одному и тому же значению энергии  $E_n$ ):

$$\underbrace{(E_n^{(0)} - E)}_{-E_n^{(1)}} c_n^{(0)} + \sum_{n'} V_{nn'} c_{n'}^{(0)} = 0$$

Выше мы ограничились только первым приближением  $E = E_n^{(0)} + E_n^{(1)}$ . Поправка к  $n$ -му уровню

$$-E_n^{(1)} c_n^{(0)} + \sum_{n'} V_{nn'} c_{n'}^{(0)} = 0,$$

где  $n, n'$  - пробегают по всем значениям состояний, относящихся к одному собственному значению  $E_n^{(0)}$ , т.е. система получится  $N$ -го порядка. Условие

<sup>17</sup>Пример кратного корня – решение уравнения  $x^2 = 0$

разрешимости и нахождения коэффициентов  $c_n^{(0)}$  – равенство нулю детерминанта. Напишем, например, для порядка  $N = 3$  это уравнение в матричном виде:

$$\begin{pmatrix} -E^{(1)} + V_{11} & V_{12} & V_{13} \\ V_{21} & -E^{(1)} + V_{22} & V_{23} \\ V_{31} & V_{32} & -E^{(1)} + V_{33} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} = 0$$

Тогда в индексной записи определитель

$$\Delta = \|V_{ik} - E^{(1)}\delta_{ik}\| = 0$$

Или

$$\hat{V} = \begin{pmatrix} V_{11} & V_{12} & V_{13} & \dots \\ V_{21} & V_{22} & V_{23} & \dots \\ V_{31} & V_{32} & V_{33} & \dots \end{pmatrix}$$

и тогда

$$\det(\hat{V} - E^{(1)}\hat{I}) = 0.$$

Это уравнение называется **секулярным**. Такими уравнениями описываются медленные движения планет, например, в небесной механике, и дают малые поправки. Характерное время оборота Земли – ровно год, а возмущения (например, влияние Луны) имеют характерные времена – века.

### 5.1.3 Двукратное вырождение

Простейший пример вырождения – двукратное вырождение. Обозначим номером 1 строку и столбец выделенного блока в матрице. Тогда

$$\begin{aligned} -Ec_1 + V_{11}c_1 + V_{12}c_2 &= 0 \\ -Ec_2 + V_{22}c_2 + V_{21}c_1 &= 0 \end{aligned}$$

В матричном виде

$$\begin{pmatrix} -E + V_{11} & V_{12} \\ V_{21} & -E + V_{22} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = 0$$

Смысл равенства нулю детерминанта – совпадение прямых (плоскостей, и так далее) – что даст существование нетривиального решения. Это всё имеет простой геометрический смысл и говорит о линейной зависимости уравнений.

Найдем решение  $\det = 0$  – квадратное уравнение:

$$E^2 - (V_{11} + V_{22})E + V_{11}V_{22} - V_{12}V_{21} = 0$$

В общем виде для второго порядка получим:

$$E^2 - E \operatorname{diag} \hat{V} + \det \hat{V} = 0$$

Итак, для второго порядка (учтём, что  $V_{12}V_{21} = |V_{12}|^2$ )

$$E_{1,2} = \frac{V_{11} + V_{22}}{2} \pm \sqrt{\frac{(V_{11} + V_{22})^2}{4} - V_{11}V_{22} + |V_{12}|^2}$$

$$E_{1,2} = \frac{V_{11} + V_{22}}{2} \pm \sqrt{\frac{(V_{11} - V_{22})^2}{4} + |V_{12}|^2}$$

Мы нашли собственные значения энергии. Дальше нужно найти константы: для этого подставить одно из найденных значений в систему 5.1.3.

$$(-E_1 + V_{11})c_1 + V_{12}c_2 = 0, \quad \Rightarrow \quad c_2 = c_1 \frac{E_1 - V_{11}}{V_{12}}$$

$c_1$  можем положить чему хотим, т.е. константа произвольная. Введём нумерацию, соответствующую решениям  $E_{1,2}$ :

$$c_2^1 = \frac{c_1}{V_{12}} \left[ \frac{V_{22} - V_{11}}{2} + \sqrt{\frac{(V_{11} - V_{22})^2}{4} + |V_{12}|^2} \right]$$

$$c_2^2 = \frac{c_1}{V_{12}} \left[ \frac{V_{22} - V_{11}}{2} - \sqrt{\frac{(V_{11} - V_{22})^2}{4} + |V_{12}|^2} \right]$$

Или можно записать в виде

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}_{(1)} = \begin{pmatrix} V_{12} \\ \frac{V_{22} - V_{11}}{2} + \sqrt{\dots} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}_{(2)} = \begin{pmatrix} V_{12} \\ \frac{V_{22} - V_{11}}{2} - \sqrt{\dots} \end{pmatrix},$$

Тогда

$$\psi = c_1^{(0)} \psi_1^0 + c_2^{(0)} \psi_2^0$$

Это правильные функции нулевого приближения: они соответствуют невырожденному состоянию.

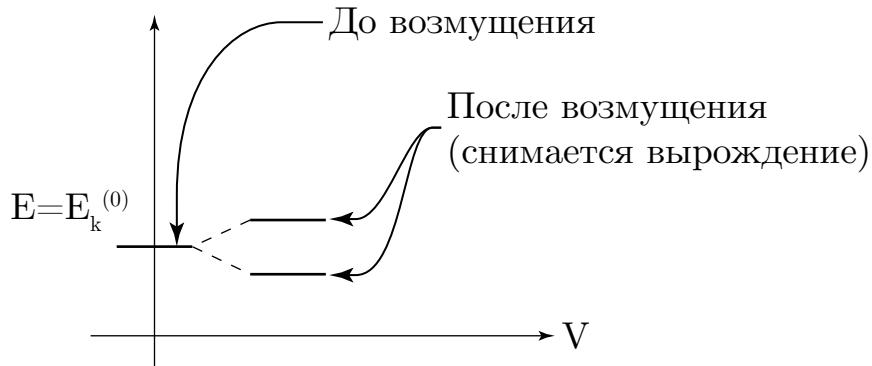


Рис. 31. Снятие вырождения при возмущении

При конечном возмущении, как говорят, снимается вырождение. Сейчас рассмотрим задачу о возникновении **зон**.

## 5.2. Электрон в поле двух ядер

Мы решали задачу об атоме водорода. Теперь вдруг сбоку подносим один

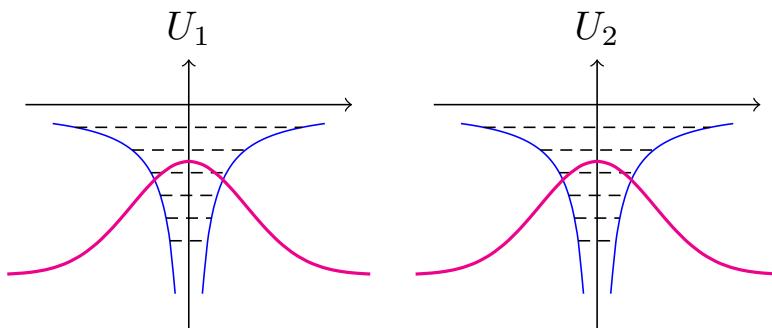


Рис. 32. Электрон может находиться как в  $\Psi$  одного протона, так и другого

протон: получается система из двух протонов и одного электрона. Это система образует молекулярный ион  $H_2^+$ .

Задачу можно решать так: поскольку протоны тяжёлые, то можно считать что они не двигаются, и сначала решить задачу о движении электрона в поле двух протонов:

$$H = \frac{p^2}{2m} + U(r - r_1) + U(r - r_2)$$

Нам нужно решить такую задачу:

$$\hat{H}\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}), \quad (52)$$

Уровни здесь дважды вырождены, так как система уровней неподвижных ядер одинакова. Будем искать волновую функцию в виде линейной комбинации:

$$\Psi(r) = c_1\Psi^{(0)}(\vec{r} - \vec{r}_1) + c_2\Psi^{(0)}(\vec{r} - \vec{r}_2) + \underbrace{\dots}_{\text{поправка}}$$

Зная гамильтониан (52) этой системы, можно записать СУШ:

$$\begin{aligned} \left[ \frac{p^2}{2m} + U(\vec{r} - \vec{r}_1) + U(\vec{r} - \vec{r}_2) \right] \left\{ c_1\Psi^{(0)}(\vec{r} - \vec{r}_1) + c_2\Psi^{(0)}(\vec{r} - \vec{r}_2) \right\} = \\ = E \left\{ c_1\Psi^{(0)}(\vec{r} - \vec{r}_1) + c_2\Psi^{(0)}(\vec{r} - \vec{r}_2) \right\} \end{aligned} \quad (53)$$

Будем считать, что решения для одного атома мы знаем, т.е.:

$$\left[ \frac{p^2}{2m} + U(\vec{r} - \vec{r}_1) \right] \Psi^{(0)}(\vec{r} - \vec{r}_1) = E^{(0)}\Psi^{(0)}(\vec{r} - \vec{r}_1)$$

Тогда (53) можно переписать в виде:

$$\begin{aligned} E^{(0)}c_1\Psi^{(0)}(\vec{r} - \vec{r}_1) + U(\vec{r} - \vec{r}_2)c_1\Psi^{(0)}(\vec{r} - \vec{r}_1) + \\ E^{(0)}c_2\Psi^{(0)}(\vec{r} - \vec{r}_2) + U(\vec{r} - \vec{r}_1)c_2\Psi^{(0)}(\vec{r} - \vec{r}_2) = \\ = E \left\{ c_1\Psi^{(0)}(\vec{r} - \vec{r}_1) + c_2\Psi^{(0)}(\vec{r} - \vec{r}_2) \right\} \end{aligned}$$

Домножим это уравнение сначала на  $\Psi^{(0)*}(\vec{r} - \vec{r}_1)$  и проинтегрируем по пространству, а затем домножим на  $\Psi^{(0)*}(\vec{r} - \vec{r}_2)$ , и так же проинтегрируем:

$$\int \Psi^{(0)*}\Psi^{(0)} d^3r = 1$$

Так же будут интегралы, которые мы не будем считать, а просто обозначим:

$$\begin{aligned} S &= \int U(\vec{r} - \vec{r}_2) \Psi^{*(0)}(\vec{r} - \vec{r}_1) \Psi^{(0)}(\vec{r} - \vec{r}_1) d^3r, \\ R &= \int \Psi^{*(0)}(\vec{r} - \vec{r}_1) \Psi^{(0)}(\vec{r} - \vec{r}_2) d^3r, \\ T &= \int U(\vec{r} - \vec{r}_1) \Psi^{*(0)}(\vec{r} - \vec{r}_1) \Psi^{(0)}(\vec{r} - \vec{r}_2) d^3r, \end{aligned}$$

Тогда

$$E^{(0)}c_1 + Sc_1 + E^{(0)}Rc_2 + Tc_2 = Ec_1 + ERc_2$$

Теперь надо написать второе уравнение. Можно не проделывать все то же самое, а просто сделать замену:

$$r_1 \rightarrow r_2, \quad r_2 \rightarrow r_1, \quad c_1 \rightarrow c_2, \quad c_2 \rightarrow c_1.$$

$$E^{(0)}c_2 + Sc_2 + E^{(0)}Rc_1 + Tc_1 = Ec_2 + ERc_1$$

Поскольку уравнения действительные, то в интегралах  $S, T, R$  можно было бы не писать сопряжение. (Почему-то волновая функция действительна).??  
Обозначим  $E^{(0)} - E = -\varepsilon$ , тогда оба уравнения запишутся в виде:

$$\begin{pmatrix} -\varepsilon + S & (E^{(0)}R + T - (E^{(0)} + \varepsilon)R) \\ E^{(0)}R + T - (E^{(0)} + \varepsilon)R & -\varepsilon + S \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$$

$S, R, T$  – так называемые интегралы перекрытия. Упрощая систему, получим:

$$\begin{pmatrix} -\varepsilon + S & T - \varepsilon R \\ T - \varepsilon R & -\varepsilon + S \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$$

Для существования решения, определитель должен равняться нулю. Определитель даст (учтём, что  $\varepsilon \sim T, S$ ):

$$(S - \varepsilon)^2 - (T - \varepsilon R)^2 = 0$$

его решение будет

$$\varepsilon = S \pm (T - \varepsilon R)$$

поскольку  $S, T, R \sim \mu$  – в первом порядке теории возмущений, то

$$\varepsilon(1 \mp R) = S \pm T \rightarrow \varepsilon = S \pm T$$

Итак, мы нашли поправку первого порядка малости. Теперь найдём коэффициенты:

$$\begin{pmatrix} -T & T \\ T & -T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = 0$$

Видно, что уравнения линейно зависимы, значит, при  $\varepsilon = S + T$ ,  $c_2 = c_1$ . Аналогично при  $\varepsilon = S - T$  получается  $c_2 = -c_1$ .

Можно заметить, что  $S$  и  $T$  – отрицательны. Потенциал – притяжения, значит  $U < 0$ . Отсюда следует, что  $S + T < S - T$ .

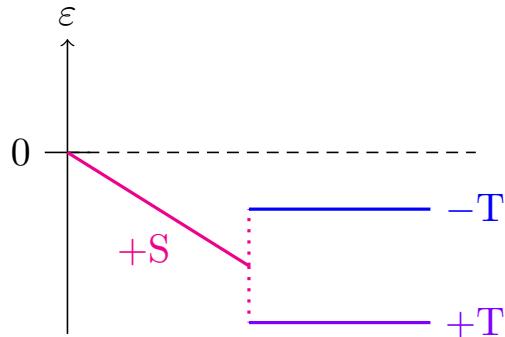


Рис. 33. Расщепление

Симметричная волновая функция:

$$\Psi_1 = c_1 \left( \Psi^{(0)}(\vec{r} - \vec{r}_1) + \Psi^{(0)}(\vec{r} - \vec{r}_2) \right), \Rightarrow \varepsilon = -|S| - |T|$$

Антисимметричная волновая функция:

$$\Psi_2 = c_1 \left( \Psi^{(0)}(\vec{r} - \vec{r}_1) - \Psi^{(0)}(\vec{r} - \vec{r}_2) \right), \Rightarrow \varepsilon = -|S| + |T|$$

Это **правильные** функции нулевого приближения.

Можно рассмотреть задачу не о двух атомах, а о большом количестве. Степень вырождения будет очень высокой. Например, кристалл. Характерная плотность атомов в металле  $10^{23} \text{ см}^{-3}$ . Уровней будет уже не 2, а  $10^{24}$ :

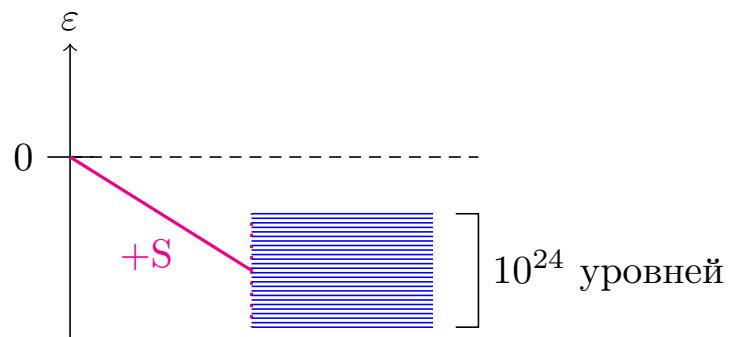


Рис. 34. Разрешённая зона

Резюмируем: снятие вырождения породило зону. Уровни в зоне расположены так близко, что можно считать их сплошным спектром.

### 5.3. Нестационарная теория возмущений

Необходимо решить уравнение с нестационарным возмущением:

$$i\hbar\dot{\Psi} = \left(\hat{H}^{(0)} + V(\vec{r}, t)\right)\Psi$$

#### 5.3.1 Переходы в состояниях спектра при периодическом возмущении

Пример нестационарных возмущений. Пусть есть атом водорода с потенциалом  $-e^2/|x|$ :

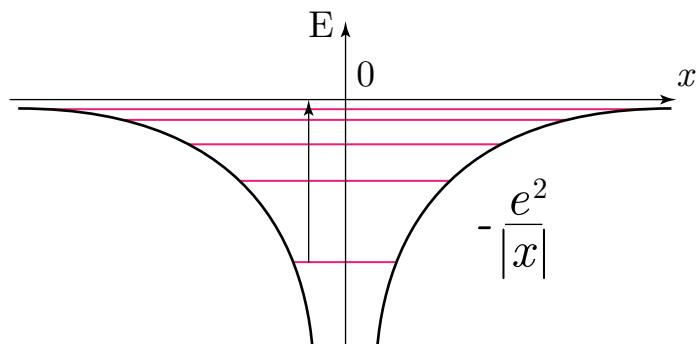


Рис. 35. Спектр атома водорода

Что такое возмущение? Пусть действует однородное электрическое поле  $\vec{E} = \vec{E}_0 \cos \omega t$ . Его потенциал

$$\varphi = -(\vec{E} \cdot \vec{r})$$

Тогда изначальное уравнение примет вид

$$i\hbar\dot{\Psi} = \left(\frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{2} - e(\vec{E}_0 \cdot \vec{r}) \cos \omega t\right)\Psi(\vec{r}, t)$$

Если бы поле было статическое, мы бы наблюдали снятие вырождения – т.е. эффект Штарка. А теперь могут возникать переходы между уровнями. Пусть мы знаем, что в нулевой момент времени электрон находится в основном состоянии. Потом мы включаем переменное поле, и электрон может возбудиться – перейти на следующий уровень, или вообще ионизироваться – перейти в область почти сплошного спектра: на простом языке, отрыв электрона от атома.

Нестационарная теория возмущений позволит нам сосчитать вероятности переходов и вероятность ионизации.

**Переходы в дискретном спектре.** Вообще говоря, поле неоднородное, но если размер атома много меньше длины волны, то это называется дипольным приближением. Как подойти к задаче? Пусть нам известны функции нулевого порядка (известна задача про атом водорода), а полное решение будем раскладывать по функциям невозмущённой задачи  $\Psi_n^{(0)}$ :

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_n c_n(t) \Psi_n^{(0)}(r), \quad \hat{H}^{(0)} \Psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \Psi_n^{(0)}$$

Запишем уравнение Шрёдингера, и скалярно домножим на  $\Psi_m^{*(0)}$ :

$$\Psi_m^{*(0)} | -i\hbar \sum_n \dot{c}_n(t) \Psi_n^{(0)}(r) = H^{(0)} \sum_n c_n(t) \Psi_n^{(0)}(r) + V \sum_n c_n(t) \Psi_n^{(0)}(r) \rangle$$

Воспользуемся ортогональностью:

$$\langle \Psi_m | \Psi_n \rangle = \int \Psi_m^*(r) \Psi_n(r) d^3r = \delta_{m,n}$$

Тогда уравнение Шрёдингера принимает вид

$$i\hbar \dot{c}_m = E_m^{(0)} c_m(t) + \sum_n V_{mn}(t) c_n(t) \quad (54)$$

Это энергетическое представление невозмущённой задачи. ??

Это система дифференциальных уравнений в обыкновенных производных, которых много, по всему дискретному спектру. Как её решать? Это уравнение Шрёдингера, где все операторы взяты в представлении Шрёдингера. Вспомним, что есть представления Гейзенберга и Шрёдингера. В чем состоит разница между этими представлениями? Среднее значение любой физической величины  $A$  может зависеть от времени:

$$\bar{A} = \int \Psi^*(t) \hat{A} \Psi(t, r) d^3r = \langle \Psi(t) | \hat{A} | \Psi(t) \rangle.$$

Это язык Шрёдингера, когда волновая функция зависит от времени. Сама функция  $\Psi$  удовлетворяет уравнению Шрёдингера:  $A$  можно записать через

оператор эволюции  $\hat{U}(t)$ :

$$i\hbar |\Psi\rangle = H |\Psi\rangle, \quad |\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t) |\Psi(0)\rangle, \quad \langle \Psi(t)| = \langle \Psi(0)| U^+(t)$$

Оператор эволюции должен быть унитарным, потому что

$$\langle \Psi(t)| \Psi(t)\rangle = \langle \Psi(0)| U^+ U |\Psi(0)\rangle = 1 \quad \Rightarrow \quad U^+ U = \hat{1}.$$

Тогда выражение для среднего значения принимает вид

$$\bar{A} = \langle \Psi(0)| U^+ A U |\Psi(0)\rangle$$

Это уже представление Гейзенберга:

$$\langle \Psi^G | A^G | \Psi^G \rangle$$

### 5.3.2 Представление Взаимодействия

$$A^I = \hat{U}^{0+} \hat{A}^S \hat{U}^0$$

$$H = H^{(0)} + V, \quad i\hbar \dot{U}^0 = H^{(0)} U^0$$

Итак, нам нужно решать уравнение (54):

$$i\hbar \dot{c}_m = E_m^{(0)} c_m(t) + \sum_n \underbrace{V_{mn}(t)}_{\simeq 0} c_n(t)$$

Сделаем преобразование к представлению взаимодействия. Сначала решим уравнения нулевого приближения

$$i\hbar \dot{c}_m = E_m^{(0)} c_m \quad \Rightarrow \quad c_m(t) = c_m(0) \exp\left(-i \frac{E_m^{(0)} t}{\hbar}\right),$$

а затем введём новую переменную  $d_m(t)$  соотношением:

$$c_m(t) = d_m(t) \exp\left(-i \frac{E_m^{(0)} t}{\hbar}\right)$$

Тогда

$$\dot{c}_m = \dot{d}_m \exp\left(-i\frac{E_m^{(0)}t}{\hbar}\right) - \frac{iE_m^{(0)}}{\hbar} d_m \exp\left(-i\frac{E_m^{(0)}t}{\hbar}\right)$$

Подставляя  $\dot{c}_m$  в изначальное уравнение (54):

$$i\hbar \dot{d}_m \exp\left(-i\frac{E_m^{(0)}t}{\hbar}\right) = \sum_n V_{mn}(t) d_n(t) \exp\left(-i\frac{E_n^{(0)}t}{\hbar}\right)$$

Тогда

$$i\hbar \dot{d}_m = \sum_n \tilde{V}_{mn}(t) d_n(t), \quad (55)$$

где оператор возмущения в представлении взаимодействия

$$\tilde{V}_{mn} = V_{mn} \exp\left(i\frac{(E_m^{(0)} - E_n^{(0)})t}{\hbar}\right) \quad (56)$$

Это уравнение Шрёдингера в представлении взаимодействия. Почему оно так называется? Если бы не было взаимодействия  $V_{m,n}$ , все  $d_m$  были бы константами.

### 5.3.3 Монокроматическое возмущение

Пусть имеется переменное электрическое поле, направление по оси  $x$ . Тогда имеем:

$$\begin{aligned} \hat{V} &= exE \cos \omega t, \quad V_{mn} = eEX_{mn} \cos \omega t = \frac{1}{2}eEX_{mn}(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}), \\ X_{mn} &= \int \Psi_m^*(r)x\Psi_n(r) dx dy dz = X_{nm}^*. \end{aligned}$$

Можем рассмотреть более общий случай произвольного гармонического возмущения:

$$V_{mn} = (F_{mn}e^{-i\omega t} + F_{nm}^*e^{+i\omega t})$$

Тогда, подставив  $V_{mn}$  в (56), учитывая, что  $\omega_{mn} = \frac{(E_m^{(0)} - E_n^{(0)})}{\hbar}$

$$\tilde{V}_{mn} = F_{mn}e^{i(\omega_{mn} - \omega)t} + F_{nm}^*e^{i(\omega + \omega_{mn})t}$$

Пусть нам дано, что в начальный момент времени система находится в каком-то  $k$ -ом состоянии. Значит,  $d_n^{(0)}(t = 0) = \delta_{nk}$ . Тогда, подставляя в (55) выражение для  $\tilde{V}_{mn}$ :

$$i\hbar \dot{d}_{mk}^{(1)} = \tilde{V}_{mk}(t) = F_{mk} e^{i(\omega_{mk} - \omega)t} + F_{km}^* e^{i(\omega_{mk} + \omega)t}$$

Настоящие уравнения – параметрические и в общем случае не решаются. А мы получили то, что можно решить. Интеграл берётся, и

$$d_{mk}^{(1)} = \frac{1}{i\hbar} \left[ \frac{F_{mk} e^{i(\omega_{mk} - \omega)t}}{i(\omega_{mk} - \omega)} + \frac{F_{km}^* e^{i(\omega_{mk} + \omega)t}}{i(\omega_{mk} + \omega)} \right] \quad (57)$$

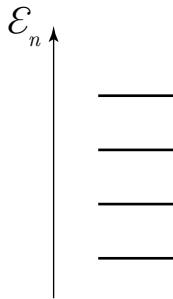


Рис. 36. Структура уровней

Условие применимости такого приближения –  $|d_{mk}| \ll 1$ . Здесь возможно неограниченное нарастание при совпадении частоты внешнего воздействия с расстоянием между уровнями, и на таком резонансном уровне теория возмущений неприменима.

Итак, формула верна при отсутствии резонанса. Случай резонанса

$$\Omega_{mk} = \omega \cdot (m - k)$$

### 5.3.4 Двухуровневая среда

Важно, что система (атом) имеет сильно неэквидистантный спектр (см. рис. 37) и только пара уровней находится в резонансе. Давайте для этой пары уровней напишем уравнение. Пусть нижний уровень  $d_1$ , верхний  $d_2$ . Между ними могут быть и другие, но не резонансные уровни.

Пусть на атом воздействует поле частотой, близкой к резонансной:  $\omega =$

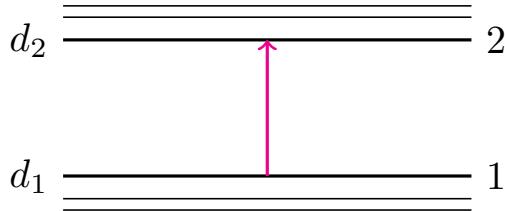


Рис. 37. Спектр атома с двухуровневым переходом

$\omega_{21} + \varepsilon$ . Тогда (54) примет вид:

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{c}_2 &= E_2 c_2 + c_1 \left( F_{21} e^{-i(\omega_{21} + \varepsilon)t} + F_{12}^* e^{i(\omega_{21} + \varepsilon)t} \right) \\ i\hbar\dot{c}_1 &= E_1 c_1 + c_2 \left( F_{12} e^{-i(\omega_{21} + \varepsilon)t} + F_{21}^* e^{i(\omega_{21} + \varepsilon)t} \right) \end{aligned}$$

В переменных  $d$ :

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{d}_2 &= d_1 \left[ F_{21} e^{i(\omega_{21} - \omega_{21} - \varepsilon)t} + \cancel{F_{12}^* e^{i(\omega_{21} + \omega_{21} + \varepsilon)t}} \right] \\ i\hbar\dot{d}_1 &= d_2 \left[ F_{12} e^{i(\omega_{21} - \omega_{21} + \varepsilon)t} + \cancel{F_{21}^* e^{i(\omega_{21} + \omega_{21} + \varepsilon)t}} \right] \end{aligned} \quad (58)$$

Из формулы (58) видим, что важны члены, которые близки к резонансу. Отбросив остальные члены получим ( $F_{12} = F_{21}^*$ ):

$$i\hbar\dot{d}_2 = d_1 F_{21} e^{-i\varepsilon t}, \quad i\hbar\dot{d}_1 = d_2 F_{21}^* e^{i\varepsilon t}$$

Введём новые переменные  $d_2 = b_2 e^{-i\varepsilon t/2}$ ,  $d_1 = b_1 e^{i\varepsilon t/2}$ . Тогда (58) запишется:

$$i\hbar \left( \dot{b}_2 - i\frac{\varepsilon}{2} b_2 \right) = F_{21} b_1 i\hbar \left( \dot{b}_1 + i\frac{\varepsilon}{2} b_1 \right) = F_{12}^* b_2$$

Это уже уравнения с постоянными коэффициентами. Система уравнений первого порядка лучше уравнения  $n$ -го порядка. Так что решать будем так: уравнение линейное с постоянными коэффициентами, значит нужно искать решения в виде экспонент:

$$\begin{pmatrix} b_2(t) \\ b_1(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_2 \\ b_1 \end{pmatrix} e^{-i\Omega t}$$

Подставляем в ():

$$\begin{aligned} i\hbar\left(-i\Omega - i\frac{\varepsilon}{2}\right)b_2 &= F_{21}b_1 \\ i\hbar\left(-i\Omega + i\frac{\varepsilon}{2}\right)b_1 &= F_{21}^*b_2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hbar\left(\Omega + \frac{\varepsilon}{2}\right)b_2 &= F_{21}b_1 \\ \hbar\left(\Omega - \frac{\varepsilon}{2}\right)b_1 &= F_{21}^*b_2 \end{aligned}$$

Получили СЛАУ, значит есть нетривиальное решение, когда определитель равен нулю:

$$\hbar^2\left(\Omega^2 - \frac{\varepsilon^2}{4}\right) = |F_{21}|^2$$

Отсюда

$$\Omega^2 = \frac{\varepsilon^2}{4} + \frac{|F_{21}|^2}{\hbar^2}$$

Впервые эту задачу рассмотрел Раби. Это базовая задача квантовой оптики. За это он получил Нобелевскую премию. Эта частота называется частотой Раби. Теперь найдём собственные вектора:

$$\Omega = \pm\sqrt{\frac{\varepsilon^2}{4} + \frac{|F_{21}|^2}{\hbar^2}}$$

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} b_2(t) \\ b_1(t) \end{pmatrix} &= c_1 \begin{pmatrix} b_2^1 \\ b_1^2 \end{pmatrix} e^{-i\Omega t} + c_2 \begin{pmatrix} b_2^2 \\ b_1^2 \end{pmatrix} e^{i\Omega t} \\ b_2^{1,2} &= F_{21}, \quad b_1^{1,2} = \hbar\left(\pm\Omega + \frac{\varepsilon}{2}\right) \end{aligned}$$

Имеем следующие выражения для собственных векторов

$$\begin{pmatrix} b_2^1 \\ b_1^1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F_{21} \\ \hbar\left(\Omega + \frac{\varepsilon}{2}\right) \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} b_2^2 \\ b_1^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F_{21} \\ \hbar\left(-\Omega + \frac{\varepsilon}{2}\right) \end{pmatrix}.$$

Общее решение уравнений

$$\begin{pmatrix} b_2(t) \\ b_1(t) \end{pmatrix} = c_1 \begin{pmatrix} F_{21} \\ \hbar\left(\Omega + \frac{\varepsilon}{2}\right) \end{pmatrix} e^{-i\Omega t} + c_2 \begin{pmatrix} F_{21} \\ \hbar\left(-\Omega + \frac{\varepsilon}{2}\right) \end{pmatrix} e^{i\Omega t}$$

Зададим начальные условия:  $b_2(t = 0) = 0$ ,  $b_1(t = 0) = 1$ : атом в начальный момент времени находится на первом уровне (нижнем). Удовлетворение начальным условиям даст  $c_1 = -c_2$ .

$$c_1 \left[ \hbar \left( \Omega + \frac{\varepsilon}{2} \right) - \hbar \left( \frac{\varepsilon}{2} - \Omega \right) \right] = 1 \quad \Rightarrow \quad c_1 = \frac{1}{2\hbar\Omega}$$

$$\begin{pmatrix} b_2(t) \\ b_1(t) \end{pmatrix} = \frac{1}{2\hbar\Omega} \left[ \begin{pmatrix} F_{21} \\ \hbar(\Omega_R + \frac{\varepsilon}{2}) \end{pmatrix} e^{-i\Omega t} - \begin{pmatrix} F_{21} \\ \hbar(-\Omega + \frac{\varepsilon}{2}) \end{pmatrix} e^{i\Omega t} \right]$$

Отсюда

$$\begin{aligned} b_2(t) &= -\frac{F_{21}}{2\hbar\Omega} 2i \sin \omega t = -i \frac{F_{21}}{\hbar\Omega} \sin \Omega t, \\ b_1(t) &= -\frac{1}{2\hbar\Omega} \left[ \hbar \frac{\varepsilon}{2} (e^{-\Omega t} - e^{i\Omega t}) + \hbar\Omega (e^{-\Omega t} + e^{i\Omega t}) \right] = \cos \Omega t - \frac{i\varepsilon}{2\Omega} \sin \Omega t \end{aligned}$$

где

$$\Omega = \pm \sqrt{\frac{\varepsilon^2}{4} + \frac{|F_{21}|^2}{\hbar^2}}$$

Можно показать, что  $|b_1|^2 + |b_2|^2 = 1$ .

Рассмотрим случай точного резонанса  $\varepsilon = 0$ :

$$b_1 = \cos \Omega t, \quad b_2 = -i \sin \Omega t \quad \Rightarrow \quad |b_1|^2 = \cos^2 \Omega t, \quad |b_2|^2 = \sin^2 \Omega t,$$

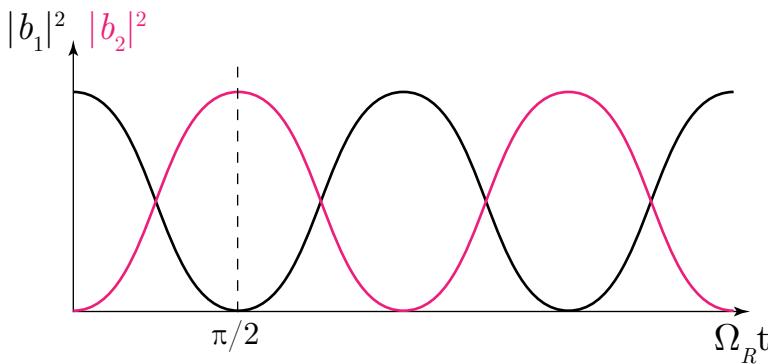


Рис. 38. Осцилляция Раби

Это называется осцилляцией Раби.  $b_1$  – населённость нижнего уровня. Легко видеть, что если резонанс неточный, то осцилляция станет неполной: система не будет полностью перекачиваться из одного состояния в другое.

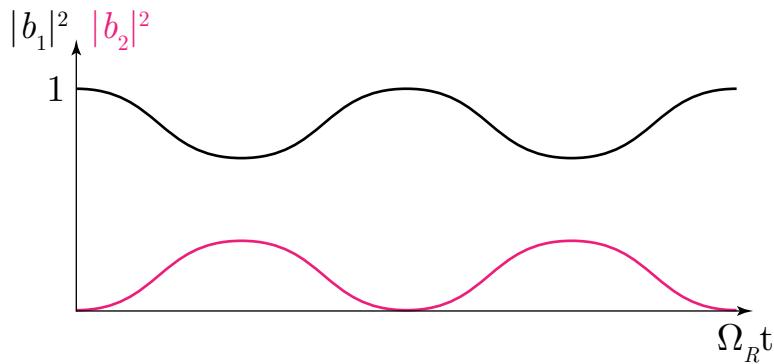


Рис. 39. Неточный резонанс

### 5.3.5 Золотое правило Ферми

Ферми применил теорию возмущений к задаче о переходе из дискретного спектра в сплошной.

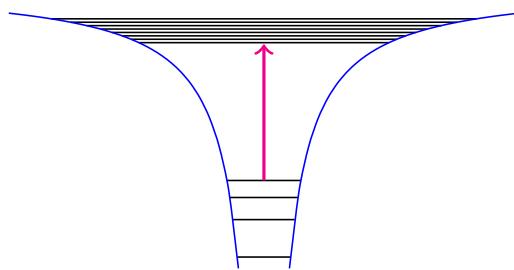


Рис. 40. Переход в спектре атома водорода

Если энергии фотона достаточно, чтобы перескочить из дискретного спектра в сплошной, работает правило Ферми. При гармоническом воздействии на систему справедливо (см. (57) ):

$$c_{nk} = -\frac{F_{nk} e^{i(\omega_{nk} - \omega)t}}{\hbar(\omega_{nk} - \omega)} - \frac{F_{kn}^* e^{i(\omega_{nk} + \omega)t}}{\hbar(\omega_{nk} + \omega)}$$

$c_m(t = 0) = \delta_{mk}$ .  $c_{nk}$  есть амплитуда вероятности перехода из начального состояния  $k$  в конечное  $n$ . Обозначим <sup>18</sup>

$$n \equiv f, \quad k \equiv i$$

<sup>18</sup>Таким обозначения используются в Ландау f=final, i=initial, см. §41 стр. 187

Нужно решить задачу

$$i\hbar\dot{c}_{fi} = F_{fi}e^{i(\omega_{fi}-\omega)t} + F_{if}^*e^{i(\omega_{fi}+\omega)t}$$

Проинтегрируем по времени от 0 до  $t$ :

$$i\hbar\dot{c}_{fi} = \tilde{V}_{fi}(t), \quad \tilde{V}_{fi}(t) = F_{fi}e^{i(\omega_{fi}-\omega)t} + F_{if}^*e^{i(\omega_{fi}+\omega)t}$$

$$i\hbar c_{fi} = \int_0^t \tilde{V}_{fi}(t)dt$$

В первом порядке теории возмущений, пренебрегая не резонансным членом:

$$c_{fi} = -\frac{F_{fi}}{\hbar} \cdot \frac{e^{i(\omega_{fi}-\omega)t} - 1}{\omega_{fi} - \omega} - \cancel{\left( \dots \right)} = -\frac{2iF_{fi}}{\hbar} \frac{e^{i\frac{\omega_{fi}-\omega}{2}t}}{\omega_{fi} - \omega} \sin\left(\frac{\omega_{fi}-\omega}{2}t\right)$$

Тогда

$$|c_{fi}|^2 = \frac{|F_{fi}|^2}{\hbar^2} \frac{\sin^2\left(\frac{\omega_{fi}-\omega}{2}t\right)}{\frac{(\omega_{fi}-\omega)^2}{4}} = \frac{|F_{fi}|^2}{\hbar^2} \frac{\sin^2(\alpha t)}{\alpha^2} \quad (59)$$

Какую размерность имеет амплитуда вероятности - безразмерную. Это легко проверить, если учесть, что матричный элемент имеет размерность энергии.

Рассмотрим функцию (60). Есть утверждение, что при  $t \rightarrow \infty$  справедливо:

$$\frac{\sin^2(\alpha t)}{\alpha^2} \sim \delta(\alpha)t \quad (60)$$

Вычислим интеграл:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2(\alpha t)}{\alpha^2} dt = t \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2(\alpha t)}{\alpha^2 t^2} dt \sim t$$

$t$  здесь будет параметром. График функции изображён на рисунке 41: Нули функции (60) расположены в  $\alpha t = n\pi$ . В нуле аргумента функция равна  $t$ .

Ширина этой функции до первых нулей по оси  $\alpha = \frac{2\pi}{t}$ . Чем-то похоже на дельта-функцию: чем больше время, тем выше и уже эта функция. Опреде-

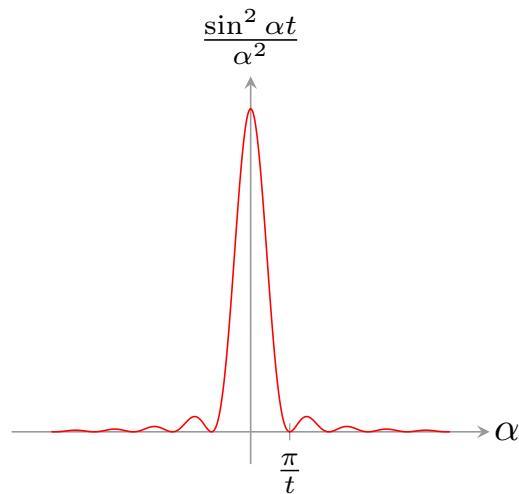


Рис. 41. График функции  $\frac{\sin^2 \alpha t}{\alpha^2}$

ление  $\delta$ -функции: в нуле бесконечность, в остальных точках 0, а площадь под кривой равна 1.

Рассмотрим интеграл

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2 y}{y^2} dy$$

Можно применить теорию вычетов. Чтобы свести интеграл к вычетам, нужно образовать контур на комплексной плоскости (см. рис. 42).

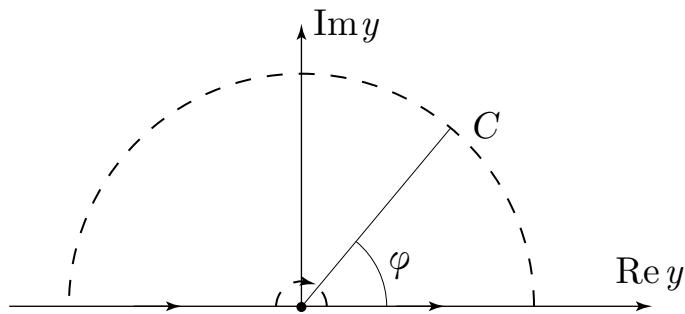


Рис. 42. Контур по комплексной плоскости

Особая точка  $y = 0$ . Это устранимая особая точка:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2 y}{y^2} dy = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1 - \cos 2y}{2y^2} dy = \int_C = \int_C \left[ \frac{1}{2y^2} - \frac{e^{2iy}}{4y^2} - \frac{e^{-2iy}}{4y^2} \right] dy =$$

Где контур обходит особую точку. Нам нужно где-то этот интеграл замкнуть. Замкнём на бесконечности в верхней полуплоскости, окружностью радиуса  $R \rightarrow \infty$ :

$$dy = R d\varphi, \quad \frac{1}{2y^2} = \frac{1}{R^2}$$

Так как внутри контура  $C'$  нет особых точек, вычетов нет, интеграл равен нулю. Второй член тоже можно замкнуть сверху аналогично, и он тоже равен нулю.

А последнее слагаемое, из-за минуса, надо замыкать по нижней полуплоскости. Правило замыкания носит название «лемма Жордана».

Тогда

$$\int = - \int_{C''} \frac{e^{-2iy}}{4y^2} dy = 2\pi i \operatorname{Res} f(0)$$

Обход по контуру идёт против часовой стрелки. А вычет – это коэффициент  $c_{-1}$  в ряде Лорана:

$$\operatorname{Res} f(z) = c_{-1}, \quad f(z) = \frac{c_{-2}}{z^2} + \frac{c_{-1}}{z} + c_0 + c_1 z + \dots$$

Тогда найдём вычет (разлагая в нуле):

$$\int = 2\pi i \operatorname{Res} \frac{e^{-2iy}}{4y^2} = 2\pi i \operatorname{Res} \frac{1 - 2iy}{4y^2} = \pi.$$

Итак, тогда

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin^2 \alpha t}{\alpha^2} = \pi \delta(\alpha) t$$

Тогда уравнение (59) при  $t \rightarrow \infty$  принимает вид:

$$|c_{fi}|^2 = \frac{|F_{fi}|^2}{\hbar^2} \pi \cdot \delta\left(\frac{\omega_{fi} - \omega}{2}\right) \cdot t$$

Воспользуемся тождеством

$$\delta(\alpha x) = \frac{1}{\alpha} \delta(x)$$

Коэффициент перед временем можно трактовать как частоту – вероят-

ность перехода в единицу времени:

$$w_{fi} = 2\pi \frac{|F_{fi}|^2}{\hbar^2} \delta(\omega_{fi} - \omega) = 2\pi \frac{|F_{fi}|^2}{\hbar^2} \delta\left(\frac{E_f - E_i}{\hbar} - \omega\right)$$

$$w_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |F_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega)$$

Это и есть золотая формула Ферми. Она применима для расчёта ядерных, химических реакций и очень много чего ещё. Дельта-функция говорит о сохранении энергии.

Замечание о плотности состояний. Обычно уровни  $E_f$  (конечные состояния) сильно вырождены. А в формуле  $w_{fi}$  стоит конкретное состояние. Вводят понятие плотности состояний. У дискретного спектра – это дельта-функции.

Плотность состояний – это число состояний в интервале:

$$N(E) = \nu(E) dE$$

Если хотим учесть переходы во все состояния (например, нужна скорость распада атомов, нам не важно куда именно улетело, важно сколько всего улетело), нужно ещё раз проинтегрировать правило Ферми:

$$W_{fi} = \int w_{fi}(E_f) \nu(E_f) dE_f = \frac{2\pi}{\hbar} |F_{fi}|^2 \nu(E_f)$$

## 6. Квазиклассическое приближение

Это приближение в некотором смысле – тоже вариант теории возмущений, но другой. В этом разделе мы будем говорить о методе ВКБ (Венцеля, Крамерса, Бриллюэна). Это вариация метода геометрической оптики, который был известен задолго до квантовой механики. ВКБ применим, когда параметр меняется медленно (может, сильно, но главное – медленно).

Пусть у нас есть уравнение Шрёдингера:

$$i\hbar\dot{\Psi} = [H^0 + V(t, x)]\Psi,$$

где  $V(t, x)$  – медленная функция.

Пусть мы знаем решение без возмущения. Например, для свободного движения, причём решением будет плоская волна:

$$i\hbar\dot{\Psi} = \frac{p^2}{2m}\Psi \Rightarrow \Psi = \exp\left\{-i\omega t + i(\vec{k}, \vec{r})\right\}$$

Характерными масштабами здесь являются временной период  $T = \frac{2\pi}{\omega}$  и длина волны<sup>19</sup>  $\lambda = \frac{2\pi}{k}$ .

Еще пример – слабонеоднородная среда: потенциал плавный, и производная потенциала в каком-то смысле мала.

Рассмотрим стационарную одномерную неоднородность  $V = V(x)$ . Запишем стационарное уравнение Шрёдингера

$$H\Psi = E\Psi \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(\vec{r}) + U(\vec{r})\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r})$$

Поскольку мы упростили задачу до одномерного случая, то:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi'' + [E - U(x)]\Psi(x) = 0 \Rightarrow \Psi''(x) + k^2(x)\Psi(x) = 0 \quad (61)$$

Это уравнение Гельмгольца. Оно точно решается только для некоторых известных специальных зависимостей  $k(x)$ . Однако, если  $k(x)$  плавная, то можно разработать метод ВКБ.

<sup>19</sup>Напомним структуру спектра. Смещение в красную сторону – это более длинные волны. Например, наша вселенная расширяется, и спектральные линии смещены в красную сторону.

Пусть летит частица выше потенциального барьера. В классике она не отражается: коэффициент прохождения равен единице. А в квазиклассике появляется малая экспоненциальная вероятность отражения  $R \sim e^{-(E-U)}$ . А если энергия ниже барьера, в классике строго 1 коэффициент отражения, а в квазиклассике аналогично экспоненциально малый коэффициент прохождения.

Если бы  $k$  было бы константой, то решение Гельмгольца было бы  $e^{ikx}$ . А теперь будем искать решение

$$kx = \int k \, dx = \Theta(x), \quad \Psi = A(x)e^{i\Theta(x)}$$

Эта идея лежит на поверхности, но очень продуктивная. Подставляем все в уравнение Гельмгольца:

$$\Psi' = (A' + i\Theta' A)e^{i\Theta}, \Psi'' = (A'' + i\Theta'' A + i\Theta' A')e^{i\Theta} + i\Theta'(A' + i\Theta' A)e^{i\Theta}$$

Тогда ( $e^{i\Theta} \neq 0 \ \forall \Theta$ )

$$A'' + 2i\Theta' A' + i\Theta'' A - (\Theta')^2 A + k^2(x)A = 0$$

Можем разделить действительную и мнимую части:

$$\begin{aligned} A'' + (k^2 - (\Theta')^2)A &= 0 \\ 2\Theta' A' = \Theta'' A = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial A^2 \Theta'}{\partial x} &= 0 \end{aligned}$$

До сих пор все было точное. А теперь пренебрежём  $A''$ , исходя из идеи плавности. Позже оценим, когда можно так пренебречать. Тогда

$$(\Theta')^2 = k^2(x) \quad \Rightarrow \quad \Theta = \pm \int k \, dx, \quad \Theta' = \pm k$$

А из второго уравнения  $A = \frac{c_1}{\sqrt{k}}$ . Тогда можно записать решение:

$$\Psi(x) = \frac{c_1}{\sqrt{k}} e^{i \int k \, dx} + \frac{c_2}{\sqrt{k}} e^{-i \int k \, dx}$$

Кстати, все наше решение верно для  $k^2 > 0$ . А так как мы ввели

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - U(x))$$

Это классически разрешённая область. А в классически запрещённой области

$$\Psi'' - \kappa^2(x)\Psi = 0, \quad \text{где} \quad \kappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(U(x) - E),$$

и решение будет иметь вид

$$\Psi(x) = \frac{d_1}{\sqrt{\kappa}} e^{\int \kappa dx} + \frac{d_2}{\sqrt{\kappa}} e^{-\int \kappa dx}.$$

Итак, мы получили уравнения для классически разрешённой области. Чтобы приближение работало, нам нужно:

$$\frac{A''}{A} \ll k^2(x)$$

У нас

$$A \sim k^{-\frac{1}{2}}, \quad A' \sim -\frac{1}{2}k^{-\frac{3}{2}}k', \quad A'' \sim -\frac{3}{4}k^{-\frac{5}{2}}(k')^2 - \frac{1}{2}k^{-\frac{3}{2}}k''$$

Тогда

$$\left| \frac{A''}{A} \right| = \left| \frac{3}{4}k^{-2}k'^2 - \frac{1}{2}k^{-1}k'' \right| \ll k^2$$

Итак,

$$k^{-2}k'^2 \ll k^2 \quad \text{или} \quad |k'| \ll k^2$$

Второе возможно, если производная мала, или велико  $k^2$ . Значит, приближение не работает, если  $k \rightarrow 0$ . Здесь

$$k' \ll k^2 \quad \Rightarrow \quad k'' \ll 2kk'$$

Первое неравенство в совмещении со следствием из второго даёт:

$$k'' \ll \frac{k'^2}{k} \ll kk'$$

Так как  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ , то  $k' = -\frac{2\pi}{\lambda^2}\lambda'$ . Условие локального приближения (ВКБ)

можно переписать в виде

$$\lambda' \ll 2\pi \sim 1.$$

Это означает: изменение длины волны на расстоянии порядка длины волны мало. Посмотрим на уравнение (61) как на уравнение осциллятора:

$$\ddot{x} + \omega^2(t)x = 0, \quad x = \frac{c}{\sqrt{\omega}} e^{i \int \omega t}$$

Тут можно вспомнить слово **адиабатический инвариант**. Амплитуда колебаний медленно меняется (ММА). Энергия колебаний

$$H \sim \frac{\dot{x}^2 + \omega^2 x^2}{2} = A^2 \omega^2 = \omega C^2, \quad C^2 = \frac{H}{\omega}$$

Это и есть адиабатический инвариант.

$$H = \omega J$$

Фактически, амплитуда ВКБ решения представляет собой адиабатический вариант.

**Точка поворота.** Мы получили условие  $k' \ll k^2$ . Посмотрим, где оно нарушается:

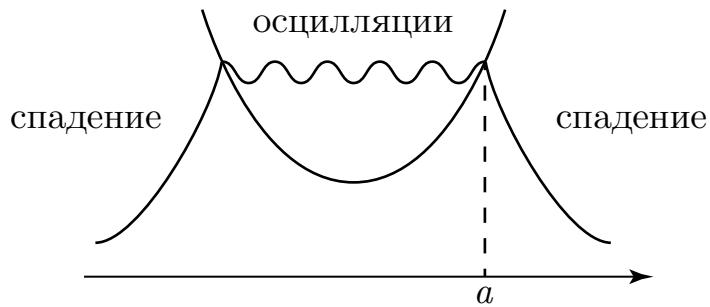


Рис. 43. В точке  $a$  и симметричной ей кинетическая энергия обращается в ноль

Место, где кинетическая энергия в классике обращается в ноль, называется точкой поворота. В этом месте условие ВКБ  $k' \ll k^2$  нарушается: производная  $k'$  конечна, а  $k^2$  обращается в ноль. Значит, вблизи точки поворота

приближение неверно.

$$\Psi = \dots + O\left(\frac{k'}{k^2}\right)$$

## 6.1. Квазиклассическая волновая функция вблизи точки поворота

Рассмотрим некоторые способы решения вблизи точки поворота. Один из способов – точно решить уравнение.  $k^2$  можно заменить линейной функцией:

$$U(x) = E\left(1 + \frac{x-a}{L}\right),$$

где  $L$  – характерный масштаб. Разлагая потенциальную энергию в ряд Тейлора:

$$U(x) = U(a) + U'(a) \cdot (x-a) \Rightarrow \frac{E}{L} = U'(a).$$

Тогда введём обозначения:

$$k^2 = -\frac{2m}{\hbar^2 L}(x-a) = -\chi(x-a)$$

И отсюда

$$\Psi''_{xx} - \chi(x-a)\Psi = 0.$$

Это уравнение Эйри – уравнение Шрёдингера в линейном потенциале. Вблизи точки поворота любой потенциал линеен, и мы пренебрегли членами высшего порядка. Можно решить его точно, а потом сшить при  $x < a$  и  $x > a$  с ранее полученными решениями.

### 6.1.1 Метод Цвана

Ещё один способ – метод Цвана<sup>20</sup>. Суть метода заключается в том, что мы рассматриваем уравнение на комплексной плоскости  $x$ .

<sup>20</sup>Это немецкая фамилия. Интересно, что перевод фамилии – Лебедев

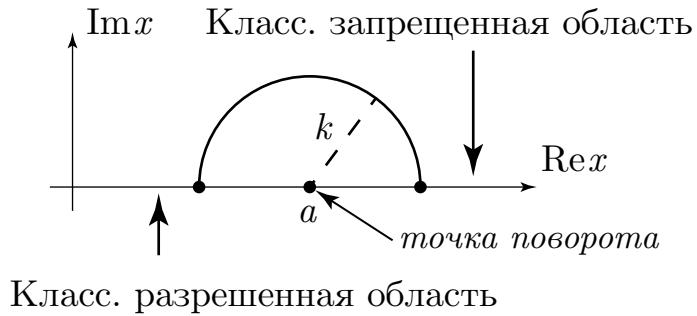


Рис. 44. Обход точки поворота в комплексной плоскости

Здесь стоит точка поворота  $a$ . Если рассматривать уравнение в комплексной плоскости, можно, формально ничего не нарушив, обойти точку поворота по окружности достаточно большого радиуса, так, чтобы формально всегда работала формула  $k' \ll k^2$ , то есть чтобы все время работал метод ВКБ.

**Сшивка решений ВКБ в точке поворота.** Запишем волновую функцию в классически запрещённой зоне, то есть справа от точки поворота:

$$x > a : \quad \frac{d}{\sqrt{\kappa}} \exp \left\{ - \int_a^x \kappa(x) dx \right\}, \quad \text{где } \kappa = \chi(x - a). \quad (62)$$

Преобразуем подэкспоненциальное выражение, проведя интегрирование:

$$\int_a^x \kappa(x) dx = \chi^{\frac{1}{2}} \int_a^x (x - a)^{\frac{1}{2}} dx = \frac{2}{3} \chi^{\frac{1}{2}} (x - a)^{\frac{3}{2}}, \quad \sqrt{\kappa} = \chi^{\frac{1}{4}} (x - a)^{\frac{1}{4}}$$

Тогда можем переписать формулу (62) – решение справа от точки поворота:

$$\Psi(x > a) = \frac{d}{\chi^{\frac{1}{4}} (x - a)^{\frac{1}{4}}} e^{-\frac{2}{3} \chi^{\frac{1}{2}} (x - a)^{\frac{3}{2}}}$$

Теперь проведём аналогичные преобразования для волновой функции слева от точки поворота:

$$\Psi = \frac{c_1}{\sqrt{k(x)}} e^{i \int k dx} + \frac{c_2}{\sqrt{k(x)}} e^{-i \int k dx}, \quad k^2 = \chi(a - x)$$

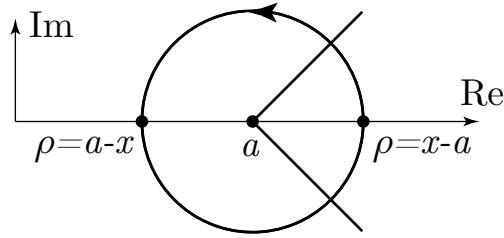


Рис. 45. Обход точки поворота против часовой стрелки

$$\int_a^x \chi^{\frac{1}{2}}(a-x)^{\frac{1}{2}} dx = -\frac{2}{3}\chi^{\frac{1}{2}}(a-x)^{\frac{3}{2}}$$

Тогда

$$\Psi(x < a) = \frac{c_1}{\chi^{\frac{1}{4}}(a-x)^{1/4}} e^{-i\frac{2}{3}\chi^{\frac{1}{2}}(a-x)^{\frac{3}{2}}} + \frac{c_2}{\chi^{\frac{1}{4}}(a-x)^{1/4}} e^{i\frac{2}{3}\chi^{\frac{1}{2}}(a-x)^{\frac{3}{2}}}$$

Теперь давайте путешествовать по комплексной плоскости (см. рис. 45). Нужно посмотреть, как преобразуется показатель экспоненты  $\sim (x-a)^{\frac{3}{2}}$  при обходе точки поворота по и против часовой стрелки. Выберем начало координат в точке поворота и перейдём к полярным координатам:

$$(x-a)^{\frac{3}{2}} = \rho^{\frac{3}{2}} e^{i0} \Rightarrow \rho^{\frac{3}{2}} e^{i\frac{3}{2}} = -i(a-x)^{\frac{3}{2}}$$

Получается, что при обходе контура сверху показатель экспоненты стал таким же, как у решения с другой стороны! Еще преобразования:

$$(x-a)^{\frac{1}{4}} \Rightarrow e^{i\frac{\pi}{4}}(a-x)^{\frac{1}{4}}$$

Получается, что

$$\frac{d}{\chi^{\frac{1}{4}}(x-a)^{\frac{1}{4}}} \rightarrow \frac{c_1}{\chi^{\frac{1}{4}} e^{i\frac{\pi}{4}}(a-x)^{\frac{1}{3}}} \Rightarrow c_1 = d e^{i\frac{\pi}{4}}$$

Итак, уже сшили две константы. Теперь обойдём контур по часовой стрелке, чтобы выразить ещё одну константу (из-за смены направления обхода у фазы будет другой знак):

$$(x-a)^{\frac{1}{4}} \rightarrow e^{-i\frac{\pi}{4}}(a-x)^{\frac{1}{4}}$$

Отсюда

$$c_2 = de^{-i\frac{\pi}{4}}$$

Подводя итог, запишем волновую функцию в классически разрешённой зоне:

$$\begin{aligned} \Psi(x < a) &= \frac{d}{\chi^{\frac{1}{4}}(a-x)^{\frac{1}{4}}} e^{-\frac{2}{3}i\chi^{\frac{1}{2}}(a-x)^{\frac{3}{2}} + i\frac{\pi}{4}} + \frac{d}{\chi^{\frac{1}{4}}(a-x)^{\frac{1}{4}}} e^{\frac{2}{3}i\chi^{\frac{1}{2}}(a-x)^{\frac{3}{2}} - i\frac{\pi}{4}} = \quad (63) \\ &= \frac{2d}{\sqrt{k}} \cos\left(\frac{2}{3}\chi^{\frac{1}{2}}(a-x)^{\frac{3}{2}} - \frac{\pi}{4}\right) = \frac{2d}{\sqrt{k}} \cos\left(\int_a^x k \, dx + \frac{\pi}{4}\right) = \\ &= \frac{2d}{\sqrt{k}} \cos\left(\left|\int k \, dx\right| - \frac{\pi}{4}\right) \end{aligned}$$

Эта формула говорит о том, что при отражении от линейного потенциала набегает разность фаз. При отражении происходит скачок фазы<sup>21</sup> на  $\frac{\pi}{2}$ , что очевидно следует из полученной нами волновой функции (63).

## 6.2. Правило квантования Бора-Зоммерфельда

Нильс Бор – известный датский физик. Еще до изобретения квантовой механики он придумал правила квантования, и с их помощью объяснил спектр атома водорода. Бор предположил, что адиабатический инвариант принимает не любые значения, как в классической механике, а дискретные, ничем не обосновывая.

$$J = \oint p \, dq = n\hbar$$

С помощью квазиклассического приближения мы можем решить задачу о уровнях в произвольной яме.

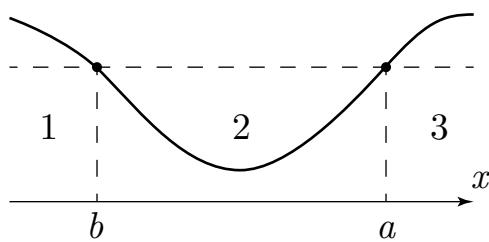


Рис. 46. Яма и точки поворота  $b, a$

<sup>21</sup>Это похоже на отражение волны в электродинамике: волна, падающая на металл, отражается и этим самым удовлетворяет граничному условию  $E_\tau = 0$ . Если падает  $e^{ikx}$ , то отражается  $-e^{-ikx}$ . Говорят, что при отражении происходит скачок фазы на полдлины волны (на  $\pi$ ).

Мы недавно получили

$$\frac{d}{\sqrt{\kappa}} e^{\left| \int \kappa dx \right|} = \frac{d}{\sqrt{k}} \cos(\dots)$$

Со стороны 1 получаем:

$$\frac{2d_1}{\sqrt{k}} \cos \left( \int_b^x k dx - \frac{\pi}{4} \right)$$

А если применить со стороны 3:

$$\frac{2d_3}{\sqrt{k}} \cos \left( \int_x^a k dx - \frac{\pi}{4} \right)$$

Где справедлива эта формула? Эти формулы должны быть одинаковыми. Отсюда следует, прежде всего, что

$$d_1 \cos \left( \int_b^x k dx - \frac{\pi}{4} \right) = d_3 \cos \left( \int_x^a k dx - \frac{\pi}{4} \right)$$

Добавим к этому уравнению

$$\int_b^x = \int_b^a + \int_a^x = \int_b^a - \int_x^a, \quad \int_x^a = \varphi$$

Тогда (разобраться с пределами)??

$$d_1 \cos \left( \int_a^b k dx - \varphi - \frac{\pi}{4} \right) = d_2 \cos \left( \varphi - \frac{\pi}{4} \right)$$

$$\int_b^a k dx - \frac{\pi}{2} = n\pi, \quad d_3 = d_1(-1)^n \quad \Rightarrow \quad \int_b^a k dx = \pi \left( n + \frac{1}{2} \right)$$

Часто это записывают так:

$$\oint k dx = 2 \int_b^a k dx = \pi(2n + 1)$$

Или, учтя  $p = \hbar k$ :

$$\oint p \, dx = \pi \hbar (2n + 1) \quad \text{или} \quad \oint p \, dq = \dots$$

**Частица в параболическом потенциале.** В этом случае  $U = \frac{\varkappa x^2}{2}$ , собственная частота  $\omega = \sqrt{\frac{\varkappa}{m}}$ , откуда  $\varkappa = m\omega^2$ . Уравнение имеет вид:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right] \Psi(x) = E \Psi(x)$$

Хотим записать в виде:

$$\left[ \frac{\partial^2}{\partial x^2} + k^2(x) \right] \Psi = E \Psi,$$

Откуда

$$k^2(x) = \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) \Rightarrow k(x) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left( E - \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right)}$$

Точки поворота будут при корне, равном нулю:

$$x_*^2 = \frac{2E}{m\omega^2}$$

У нас должно быть:

$$\int_{-x_*}^{x_*} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left( E - \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right)} \, dx = \pi \left( n + \frac{1}{2} \right)$$

Введём замену переменной и проинтегрируем:

$$\begin{aligned} m\omega^2 = \frac{2E}{x_*^2} \Rightarrow \int_{-x_*}^{x_*} \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2} \left( 1 - \frac{x^2}{x_*^2} \right)} \, dx &= \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \int_{-x_*}^{x_*} \sqrt{1 - \frac{x^2}{x_*^2}} \, dx = \\ &= \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x_* \int_{-1}^1 \sqrt{1 - y^2} \, dy = \frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x_* = \frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x_* \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} = \pi \left( n + \frac{1}{2} \right) \end{aligned}$$

Несложными арифметическими действиями отсюда получается

$$E = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right)$$

Правило Бора-Зоммерфельда, полученное из классики, даёт верное правило квантования (правда, волновую функцию даст уже неверную).

## 7. Спин

Спин – от английского «вращение». Что же это такое? Обычно говорят, что это типично квантовое явление, не имеющее аналогов в классической механике. Действительно, аналогов нет, а вот в классической теории поля (электродинамике) такое понятие есть, и это понятие поляризации волны.

Будем анализировать волновые функции при вращении пространства или системы координат. Спин тесно связан с вращением. Как его ввести? До сих пор мы представляли волновую функцию одной буквой  $\Psi(\vec{r})$ . При вращении она преобразовывалась только за счёт оператора вращения:

$$R = \left[ 1 + i(\delta\vec{\varphi}, \vec{l}) \right], \quad \text{где} \quad \vec{l} = [\vec{r} \times \vec{k}]$$

Здесь  $\vec{l}$  – орбитальный момент.

Рассмотрим поле  $\vec{E}(\vec{r})$ . Оно само вектор, и от вектора зависит. В каждой точке пространства задано направление. А теперь мы поворачаем систему координат. При повороте изменится как радиус-вектор, так и направление  $\vec{E} = (E_x, E_y, E_z)$ .

Вектор – это объект, компоненты которого при повороте координат преобразуются как координаты (так по определению).

Рассмотрим более сложный объект:

$$\Psi_\sigma(\vec{r}), \quad \sigma = 0, \dots, n$$

Волновая функция может быть более сложной, а её компоненты преобразуются друг через друга.

Мы рассматриваем нерелятивистскую квантовую механику, и наше рассмотрение верно при скоростях всех частиц, много меньших скорости света. Наша механика не может описать фотоны, например. Поэтому поляризация – не совсем хороший образ для нерелятивистской квантовой механике, потому что волны распространяются в вакууме со скоростью света.

Если же перейти в систему отсчёта, в которой частица покойится, и смотреть в ней за вращением, можно ввести оператор спина:

$$R = [1 + i(\delta\vec{\varphi}, \vec{s})], \quad \Psi_\sigma(\vec{r}) = \Psi(\vec{r}, \sigma)$$

А также можно ввести вектор полного момента:

$$\hat{\vec{j}} = \hat{\vec{l}} + \hat{\vec{s}}$$

Тогда

$$\hat{R} = \left[ 1 + i(\delta\vec{\varphi}, \vec{j}) \right]$$

Отделить спин от момента можно только тогда, когда можно перейти в систему отсчёта, в которой момент будет 0.

Переменные  $\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3, \dots$  называют спиновыми компонентами.

В каком пространстве действует оператор спина? Матричное умножение:

$$\begin{pmatrix} \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \end{pmatrix}$$

Какие коммутационные соотношения получатся для оператора  $\vec{s}$ ? Оператор  $\vec{l}$  тоже должен быть вектором.

Есть три оператора:

$$s_x, s_y, s_z.$$

Мы не знаем, как они устроены, лишь это матрицы, действующие в этом конфигурационном пространстве. Утверждается, что аналогично орбитальному моменту

$$l_x l_y - l_y l_x = i l_z, \quad \text{etc}$$

Будет

$$s_x s_y - s_y s_x = i s_z, \quad j_x j_y - j_y j_x = i j_z$$

Почему коммутационные соотношения одинаковы? Мы делали явное предположение, что  $\hbar \vec{l} = [\vec{r} \times \vec{p}]$ . Теперь этого сделать уже не можем, но почему получается то же самое? А вот почему: это все три оператора поворота и обозначают одно и тоже: два последовательных вращения эквивалентны вращению вокруг оси  $z$ . Это свойство трёхмерного пространства, и никак не связано с видом оператора.

Значит, для всех операторов момента (которые есть операторы вращения) коммутационные соотношения одинаковы, и ими можно воспользоваться для вычисления матричных элементов.

Займёмся оператором спина. Вводятся повышающий и понижающий опе-

раторы

$$s_{\pm} = s_x \pm is_y$$

Их коммутационные соотношения:

$$[s_+, s_-] = 2s_z, \quad [s_z, s_{\pm}] = \pm s_{\pm}$$

Также вводится оператор квадрата спина:

$$s^2 = s_x^2 + s_y^2 + s_z^2 = s_-s_+ + s_z^2 + s_z = s_+s_- + s_z^2 - s_z$$

Будем искать собственные функции. Собственные числа обозначаем  $\sigma$ , а максимальное значение её  $s$ :

$$s_z |s, \sigma\rangle = \sigma |s, \sigma\rangle, \quad s^2 |s, \sigma\rangle = s(s+1) |s, \sigma\rangle$$

Напомним, как строится теория. Подействуем на первое уравнение () оператором повышения:

$$s_+s_z |s, \sigma\rangle = (s_zs_+ - s_+) |s, \sigma\rangle = \sigma s_+ |s, \sigma\rangle$$

где в силу коммутационной алгебры

$$s_zs_+ - s_+s_z = s_+$$

Тогда

$$s_zs_+ |s, \sigma\rangle = s_+ |s, \sigma\rangle + \sigma s_+ |s, \sigma\rangle = (\sigma + 1)s_+ |s, \sigma\rangle$$

Отсюда следует:

$$s_+ |s, \sigma\rangle \sim |s, \sigma + 1\rangle$$

Точно также можно доказать, что

$$s_- |s, \sigma\rangle \sim |s, \sigma - 1\rangle$$

**Теорема.**  $\sigma$  ограничена сверху. Если запишем оператор

$$s_x^2 + s_y^2 = s^2 - s_z^2$$

Если непрерывно увеличивать  $s_z$ , то в конце концов правая часть станет отрицательной, что невозможно. Значит, есть максимальное значение, и обозначим его

$$s = \sigma_{\max}$$

Аналогично будет ограничение снизу на  $s$ . Расстояние между ними  $2s$ , и оно должно покрываться целым числом – отсюда следует  $2s$  – целое. Возможны:

$$\begin{aligned} s = 0 &\Rightarrow \sigma = 0 \\ s = \frac{1}{2} &\Rightarrow \sigma = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \\ s = 1 &\Rightarrow \sigma = -1, 0, 1 \end{aligned}$$

Собственное число  $\sigma$  называется проекцией спина на ось  $z$ , а его максимальное значение  $s$  – спином. Число компонент волновой функции есть  $2s + 1$ , и оно принимает целые значения начиная с 1.

Нетрудно найти, пользуясь формулой ( $s^2 = \dots$ ), матричные элементы: Подействуем на кет вектор  $|s, s\rangle$ , соответствующий максимальному  $\sigma = s$  оператором  $s^2$ , записав его в форме

$$s^2 = s_- s_+ + s_z^2 + s_z.$$

Тогда, поскольку для обрыва ряда нужно, чтобы  $s_+ |s, s\rangle = 0$ , мы получим

$$(s_- s_+ + s_z^2 + s_z) |s, s\rangle = s(s+1) |s, s\rangle$$

Теперь будем искать матричный элемент:

$$s(s+1) = \langle s, \sigma | s_+ s_- + s_z^2 - s_z | s, \sigma \rangle = \langle s, \sigma | s_+ s_- | s, \sigma \rangle + \langle s, \sigma | s_z^2 - s_z | s, \sigma \rangle$$

$$s(s+1) - [\sigma^2 - \sigma] = \langle s, \sigma | s_+ s_- | s, \sigma \rangle = \langle s, \sigma | s_+ | s, \sigma - 1 \rangle \langle s, \sigma - 1 | s_- | s, \sigma \rangle$$

И в силу эрмитовости операторов  $s_- = s_+^+$ :

$$\langle s, \sigma - 1 | s_- | s, \sigma \rangle = \langle s, \sigma | s_+ | s, \sigma - 1 \rangle = \sqrt{s(s+1) - \sigma^2 + \sigma}$$

Подкоренное выражение можно преобразовать

$$s^2 + s - \sigma^2 + \sigma = (s + \sigma)(s - \sigma) + s + \sigma = (s + \sigma)(s - \sigma + 1),$$

и, окончательно для матричных элементов операторов  $s_{\pm}$  будем иметь

$$\langle s, \sigma - 1 | s_- | s, \sigma \rangle = \langle s, \sigma | s_+ | s, \sigma - 1 \rangle = \sqrt{(s + \sigma)(s - \sigma + 1)}$$

Рассмотрим спин  $s = \frac{1}{2}$ . В этом случае проекция спина может принимать два значения  $\sigma = \pm \frac{1}{2}$  и волновая функция двухкомпонентна:

$$|\psi\rangle = (\psi_{\frac{1}{2}}, \psi_{-\frac{1}{2}})^T = (\psi_{\uparrow}, \psi_{\downarrow})^T$$

Тогда операторами, действующими в этом пространстве, будут матрицы  $2 \times 2$ .

$$s_z = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Оператор  $s_+$ :

$$s_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Как мы нумеруем элементы матрицы?

$$\begin{pmatrix} a_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} & a_{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} \\ a_{-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} & a_{-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} \end{pmatrix}$$

Аналогично получаем

$$s_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Двухкомпонентная функция называется спинором. Это что-то вроде вектора, только недоделанного. Вообще, всё, что полуцелый спин, называется спинорами, а с целым спином – вектора, тензора и так далее.

Спин – это многокомпонентная волновая функция. При вращении новые компоненты  $\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3$  выражаются через старые. Мы ввели  $s = \max \sigma$ .  $\sigma \in -s \dots s$ . Само  $s$  может принимать либо целые, либо полуцелые моменты.

В чем отличие орбитального момента от спинового? Раньше у нас был оператор вращения

$$\hat{R} = \left( q + i\delta\varphi \vec{l} \right)$$

А у спинового:

$$\hat{R} = \left( q + i\delta\varphi \vec{s} \right)$$

Оператор полного момента

$$\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}.$$

Если компоненты перемешиваются при преобразовании пространства, то эти переменные называют спиновыми. Бывают и другие дискретные переменные, не связанные с вращением, которые иногда называют псевдоспином, изоспином (но это не спин, просто так говорят). Пример изоспина: в ядерной физике протон и нейтрон часто считают изоспиновыми состояниями одной частицы, различающимися проекциями изоспина.

$$|nuc\rangle = \begin{pmatrix} p \\ n \end{pmatrix}, \quad |p\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |n\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Мы ввели операторы  $s_x, s_y, s_z \rightarrow s_{\pm}, s_z, s^2$  и с помощью алгебры операторов вывели матричные элементы. Ось  $z$  называют осью квантования, её можно выбрать как угодно. Операторы  $s^2, s_z$  коммутируют.

$$\begin{aligned} s_z |s, \sigma\rangle &= \sigma |s, \sigma\rangle \\ s^2 |s, \sigma\rangle &= s(s+1) |s, \sigma\rangle \end{aligned}$$

Дальше мы вывели матричные элементы  $s_{\pm}$ :

$$\begin{aligned} \langle s, \sigma - 1 | s_{-} | s, \sigma \rangle &= \sqrt{(s + \sigma)(s - \sigma + 1)}, \\ \langle s, \sigma | s_{+} | s, \sigma - 1 \rangle &= \sqrt{(s + \sigma)(s - \sigma + 1)} \end{aligned}$$

Что мы видим?  $\sigma$  принимает  $2s+1$  значений с шагом 1. Собственные функции оператора спина называются **спинорами**.

Все элементарные частицы имеют полуцелый спин: электроны, нейтроны, протоны и т.д. По современным представлениям, весь мир состоит из вещества и поля. Всё вещество имеет полуцелый спин: три кварка, три антикварка, лептоны (электроны, мюоны, тау-лептоны и соответствующие им нейтрино). Лептоны участвуют только в слабом взаимодействии.

У фотона уже спин 1. Есть поле клея (glue), которое связывает собой кварки. Объединение всех теорий (слабого, сильного взаимодействия и т.д.) называется Great Unification Theory. Квант гравитации – гравитон – имеет спин 2.

В релятивизме всё не так просто. Известно, что поляризаций только две.

Но для безмассовых частиц наша формула не работает: мы были должны двигаться вместе с частицей (чтобы отделить спин от орбитального момента) со скоростью света, что невозможно. Согласно принципам СТО, свет остановить нельзя: в любой системе отсчёта свет летит со скоростью света.

Общая собственная функция операторов  $s^2, s_z$  нумеруется двумя квантовыми числами  $|s, \sigma\rangle$ , однако, очень часто полный спин фиксирован, как например у электрона  $s = 1/2$  и тогда первый индекс у вектора состояния просто опускают и пишут только второй индекс. Давайте займёмся спином  $\frac{1}{2}$ .

$$\sigma = \frac{1}{2}, \quad \sigma = -\frac{1}{2} \quad \Rightarrow \quad \begin{pmatrix} \Psi(\vec{r}, \frac{1}{2}) \\ \Psi(\vec{r}, -\frac{1}{2}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Psi_{\frac{1}{2}} \\ \Psi_{-\frac{1}{2}} \end{pmatrix}$$

Почему говорят, что спин – чисто квантовое явление? В классике, во-первых, нет никаких волновых функций. Размерный спин  $\vec{S} = \hbar \vec{s}$ . При  $\hbar \rightarrow 0$  полный спиновый момент обращается в 0. Но для орбитального момента при этом может быть  $l \rightarrow \infty$ , и полный момент останется конечным. Поэтому при постоянной Планка, стремящейся к нулю, спиновый момент исчезает.

Как понимать матрицу ()?

$$\begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_0 \\ \Psi_{-1} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \Psi_{\frac{3}{2}} \\ \dots \\ \Psi_{-\frac{3}{2}} \end{pmatrix}$$

Операторы в пространстве таких векторов – это матрицы. Например, оператор  $s_z$

$$\langle s', \sigma' | s_z | s, \sigma \rangle = \sigma \langle s', \sigma' | s, \sigma \rangle = \delta_{ss', \sigma\sigma'}$$

Он диагонален. Напомню, что мы нумеруем матрицу так:

$$\begin{pmatrix} a_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} & a_{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} \\ a_{-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} & a_{-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} \end{pmatrix}$$

$$s_z = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

Теперь для  $s_+$ :

$$\left\langle \frac{1}{2} \middle| s_+ \middle| -\frac{1}{2} \right\rangle = 1$$

$$s_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad s_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Как выглядят собственные векторы:

$$\left| \sigma = \frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \left| \sigma = -\frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Проверим, что  $s_+ \left| \frac{1}{2} \right\rangle = 0$ :

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Проверим  $s_- \left| \frac{1}{2} \right\rangle = \left| -\frac{1}{2} \right\rangle$ :

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Проверим  $s_- \left| -\frac{1}{2} \right\rangle = 0$ :

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Итак, можно убедиться, что на языке матриц мы реализовали алгебру операторов.

В случае спина 1:

$$\begin{pmatrix} a_{1,1} & a_{1,0} & a_{1,-1} \\ a_{0,1} & a_{0,0} & a_{0,-1} \\ a_{-1,1} & a_{-1,0} & a_{-1,-1} \end{pmatrix}$$

Давайте распишем случай спина 1. Теперь будет три вектора:

$$\left| 1 \right\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \left| 0 \right\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \left| -1 \right\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Теперь матрица  $s_z$ :

$$s_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$s_+ = \sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad s_- = \sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Если есть две частицы с разным спином, спин у них складывается. Из двух частиц со спином  $\frac{1}{2}$  можно получить спин 0 или 1. Более подробно займёмся спином  $\frac{1}{2}$ . Вводят такую матрицу:

$$s_z = \frac{1}{2} \sigma_z, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Тогда

$$s_x = \frac{s_+ + s_-}{2} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad s_y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

Эти матрицы  $\sigma_{x,y,z}$  называют матрицами Паули:

$$\vec{s} = \frac{1}{2} \vec{\sigma}$$

Здесь компоненты вектора – это матрицы. Хотя это настоящий вектор: при преобразовании координат он преобразуется как координаты.

## 7.1. Алгебра матриц Паули

Прежде всего, оператор спина подчиняется соотношениям:

$$s_x s_y - s_y s_x = i s_z$$

Тогда (пишем одно соотношение, все остальные отличаются циклической перестановкой)

$$\sigma_x \sigma_y - \sigma_y \sigma_x = 2i \sigma_z$$

Проверим, действительно ли это так:

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} = 2i \sigma_z$$

Отсюда также видно, что

$$\sigma_x \sigma_y = i \sigma_z, \quad \sigma_y \sigma_x = -i \sigma_z,$$

и

$$\sigma_x \sigma_y + \sigma_y \sigma_x = 0$$

Такую сумму называют антисимметрией, и говорят, что матрицы Паули с разными индексами антисимметричны. Интересно, что квадраты матриц Паули – единичные матрицы:

$$\sigma_x^2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = \hat{1}$$

$$s^2 = \frac{3}{4} \hat{1}.$$

В итоге, есть три матрицы, удовлетворяющие антисимметрическому соотношению

$$\sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i = 2 \delta_{ij} \hat{1}$$

Почему мы назвали наш параграф алгеброй матриц Паули? Потому, что мы нашли таблицу умножения для этих матриц, а алгебра – это математическая модель с двумя определяющими операциями, сложения и умножения. Матрицы Паули могут быть рассмотрены как некоторые гиперкомплексные единицы, из которых можно образовать гиперкомплексное число  $z$ :

$$z = a \sigma_0 + b_1 \sigma_1 + b_2 \sigma_2 + b_3 \sigma_3 = a + (\vec{b} \vec{\sigma}).$$

Здесь, для единства записи мы ввели обозначение  $\sigma_0 = \hat{1}$ . У алгебры обычных комплексных чисел есть две образующих единицы:  $1$  и  $i$ . А здесь четыре образующих числа, и Гамильтон, придумавший её, назвал её кватернионной алгеброй.

А мы вывели, по сути, таблицы умножения и сложения матриц. Мы можем матрицы Паули умножать и складывать, и их множество замкнуто относительно этих операций: результат – тоже матрица Паули.

Рассмотрим произвольную функцию от матрицы  $z$ :

$$f(z) = f(a + \vec{b} \vec{\sigma})$$

Одно из определений взятия функции от матрицы:

$$f(\hat{z}) = \sum \frac{z^n}{n!} \frac{\partial^n f}{\partial z^n} \Big|_{z=\hat{z}}$$

О чём свидетельствуют полученные нами соотношения? Квадратичная степень выражается через линейную. Это значит, что **любая функция при таком определении представляет собой линейную функцию**.

Как найти такую функцию? Надо воспользоваться вторым определением: функция от диагональной матрицы, по определению:

$$f(\text{diag } A) = f(\text{diag}(a_n)) = \text{diag}(f(a_n))$$

Если матрица приводится к диагональному виду, то эти два определения совпадают. А как мы знаем, что эрмитовы матрицы всегда можно привести к диагональному виду.

Как преобразуются матрицы при преобразовании координат? Пусть есть вектор столбец  $\vec{\Psi}$ :

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \end{pmatrix}, \quad \varphi = \hat{A}\Psi$$

Введём новый вектор

$$\Psi' = S\Psi$$

Тогда

$$\varphi' = S\varphi = S\hat{A}\Psi = S\hat{A}S^{-1}\Psi'$$

И

$$\varphi' = A'\Psi', \quad A' = SAS^{-1}$$

Пусть  $A'$  – диагональный:  $A' = \text{diag}(a)$ . Тогда

$$A = S^{-1}A'S$$

По определению,

$$f(A') = f(a)$$

Отсюда

$$f(A) = \text{def } f = S^{-1}f(SAS^{-1})S$$

Получили новое определение, но оно хуже: оно справедливо не всегда, а только когда матрица может быть приведена к диагональному виду.

Если мы будем пользоваться другим определением, у нас появится множитель

$$S^{-1}(SAS^{-1})^n S = S^{-1}(SAS^{-1}) \cdot \dots \cdot (SAS^{-1})S = A^n$$

Приведём () к диагональному виду: выберем ось  $z$  вдоль  $\vec{b}$ , тогда

$$f\left(a + \vec{b}\vec{\sigma}\right) = f(a + b\sigma_z) = f\begin{pmatrix} a+b & 0 \\ 0 & a-b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(a+b) & 0 \\ 0 & f(a-b) \end{pmatrix}$$

Утверждается, что  $f\left(a + \vec{b}\vec{\sigma}\right) = A + \vec{B}\vec{\sigma}$ : это есть свойство матриц Паули, любая функция должна быть линейна.

$$A + B\sigma_z = \begin{pmatrix} A+B & 0 \\ 0 & A-B \end{pmatrix}$$

Тогда получается, что

$$\begin{aligned} A + B &= f(a+b), \quad A - B = f(a-b) \Rightarrow \\ A &= \frac{f(a+b) + f(a-b)}{2}, \quad B = \frac{f(a+b) - f(a-b)}{2} \end{aligned}$$

У нас  $\vec{z}_0 = \vec{b}/b$ , и тогда  $\vec{B} = \frac{\vec{b}}{b}B$ . Задача решена.

Итак, мы продолжаем тему спина. Рассмотрим спин  $\frac{1}{2}$ .

## 7.2. Оператор конечных вращений

Мы вводили спин как оператор бесконечно малых вращений:

$$\hat{R} = [\hat{1} + i(\delta\vec{\varphi} \cdot \vec{s})]$$

где оператор поворота работает как  $\varphi' = \hat{R}\varphi$ . Хотим образовать оператор конечных вращений. Эта задача решается просто, стандартно в теории групп. Мы изучаем группу вращения в трёхмерном пространстве, а спиноры, вектора, тензоры реализуют различные представления ... .

По определению, мы вводили

$$\delta\vec{\varphi} = \vec{n}\delta\varphi$$

Можем выбрать ось  $z$  так, чтобы она торчала вдоль  $\vec{n}$ . Тогда оператор вращения вокруг новой оси  $z'$ :

$$R_{\vec{z}_0\delta\varphi} = [1 + i\delta\varphi \hat{s}_z]$$

А  $s_z$  диагонален: для  $\frac{1}{2}$

$$s_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Тогда в силу диагональности можем написать:

$$\psi' = \psi + i\frac{\delta\varphi}{2}\sigma_z\psi \quad \Rightarrow \quad \frac{\psi' - \psi}{\delta\varphi} = \frac{i\sigma_z\psi}{2} \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial\psi}{\partial\varphi} = \frac{i\sigma_z\psi}{2}$$

Это матричное уравнение, или система дифференциальных уравнений:

$$\frac{\partial\psi_1}{\partial\varphi} = \frac{i}{2}\psi_1, \quad \frac{\partial\psi_2}{\partial\varphi} = -\frac{i}{2}\psi_2$$

Спинор у нас двухкомпонентный. Если спин 1, то будет три уравнения, но все равно они будут диагональными. А их мы уже можем решить:

$$\psi_1 = \psi_1^0 e^{i\frac{\varphi}{2}}, \quad \psi_2 = \psi_2^0 e^{-i\frac{\varphi}{2}}$$

или опять в матричном виде:

$$\psi = e^{i\frac{\varphi}{2}\sigma_z}\psi^0.$$

Мы получили оператор вращения на конечный угол  $\varphi$  вокруг новой оси. Его можно представить в виде, справедливом для произвольного спина

$$\psi = e^{i\varphi s_z}\psi^0.$$

Здесь стоит экспоненциальная функция от диагональной матрицы, которая,

как обычно, понимается как

$$\exp \frac{i\varphi}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \stackrel{\text{def}}{=} \begin{pmatrix} e^{i\frac{\varphi}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\varphi}{2}} \end{pmatrix}$$

Теперь хотим вернуться обратно, к неповёрнутой системе координат. Операция возврата, это поворот, который сохраняет скалярное произведение, поэтому  $s_z$  нужно просто заменить на  $\vec{n}_0 \vec{s}$ . Мы получим формулу

$$\psi = e^{i\varphi(\vec{n}, \vec{s})} \psi^0,$$

верную для любого спина. Обсудим спин  $1/2$  поподробнее. Для спина  $\frac{1}{2}$  при повороте на угол  $2\pi$  (полный оборот) со спинором происходит следующее:

$$\vec{R}_{2\pi} = -\hat{1} \quad \Rightarrow \quad \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} -\psi_1 \\ -\psi_2 \end{pmatrix}$$

Говорят, что спиноры реализуют двузначное представление.

Попробуем упростить формулу для оператора конечного вращения. Ранее мы получили, что для произвольная функция от линейной комбинации матриц Паули есть линейная функция, а именно

$$f[a + (\vec{b}, \vec{\sigma})] = A + \vec{B}\vec{\sigma}$$

где

$$A = \frac{f(a+b) + f(a-b)}{2}, \quad \vec{B} = \frac{\vec{b}}{b} \frac{f(a+b) - f(a-b)}{2}$$

Применим решение этой задачи к выражению оператора поворота<sup>22</sup>. Хотим узнать  $f, a, b$

$$R = \exp \left[ i \frac{\varphi}{2} (\vec{n}, \vec{\sigma}) \right]$$

Нетрудно увидеть, что

$$f = e^{i\frac{\varphi}{2}}, \quad a = 0, \quad \vec{b} = \vec{n}, \quad |b| = 1.$$

Отсюда

$$A = \cos \frac{\varphi}{2}, \quad B = i \sin \frac{\varphi}{2}$$

Тогда окончательно для спина  $\frac{1}{2}$

$$\hat{R} = \cos \frac{\varphi}{2} + i(\vec{n}, \vec{\sigma}) \sin \frac{\varphi}{2}$$

Можно переписать в виде матрицы:

$$\begin{aligned}\hat{R} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \cos \frac{\varphi}{2} + \left\{ i \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} n_x + i \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} n_y + i \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} n_z \right\} \sin \frac{\varphi}{2} = \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \cos \frac{\varphi}{2} + i \begin{pmatrix} n_z & n_x - i n_y \\ n_x + i n_y & -n_z \end{pmatrix} \sin \frac{\varphi}{2}\end{aligned}$$

### 7.3. Матрицы вращения вокруг базисных осей

$$\begin{aligned}R_z &= \begin{pmatrix} e^{i\frac{\varphi}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\varphi}{2}} \end{pmatrix} \\ R_x &= \cos \frac{\varphi}{2} + \sigma_x \sin \frac{\varphi}{2} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\varphi}{2} & i \sin \frac{\varphi}{2} \\ i \sin \frac{\varphi}{2} & \cos \frac{\varphi}{2} \end{pmatrix}\end{aligned}$$

Нетрудно видеть, что эрмитово сопряжение оператора поворота

$$R^+ = R^{-1}$$

и оператор оказывается унитарным, как и должно быть, для того чтобы он сохранял норму. В общем случае

$$\langle \psi' | \psi' \rangle = \langle \psi | U^+ U | \psi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle.$$

Ну и наконец

$$R_y = \cos \frac{\varphi}{2} + i \sigma_y \sin \frac{\varphi}{2} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\varphi}{2} & \sin \frac{\varphi}{2} \\ -\sin \frac{\varphi}{2} & \cos \frac{\varphi}{2} \end{pmatrix}$$

---

<sup>22</sup>В Ландау-Лившице введены обозначения  $\hat{R}_\varphi = U$

## 8. Движение электрона в магнитном поле

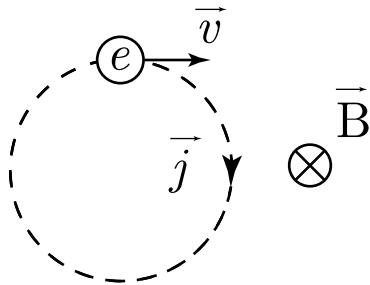


Рис. 47. Электрон в магнитном поле

Вращение электрона в магнитном поле можно трактовать как круговой ток или магнитный диполь:

$$\vec{j} = e n \vec{v}, \quad \text{где} \quad n(\vec{r}) = \delta(\vec{r} - \vec{r}_1)$$

### 8.1. Магнитный момент

Механический момент - момент импульса:

$$\vec{L} = \sum m[\vec{r} \times \vec{v}] = \int \rho[\vec{r} \times \vec{v}] d^3r$$

Определение магнитного момента

$$\vec{\mu} = \frac{1}{2c} \sum e[\vec{r} \times \vec{v}] = \frac{1}{2c} \int [\vec{r} \times \vec{j}] d^3r$$

Магнитный момент связан с механическим в классике *теоремой Лармора*:

$$\vec{\mu} = \frac{e}{2mc} \vec{L}$$

Простейший пример магнитного момента – Земля. Считается, что внутри есть некий «магнит» (течёт магма, есть ферромагнитное ядро, текут токи внутри):

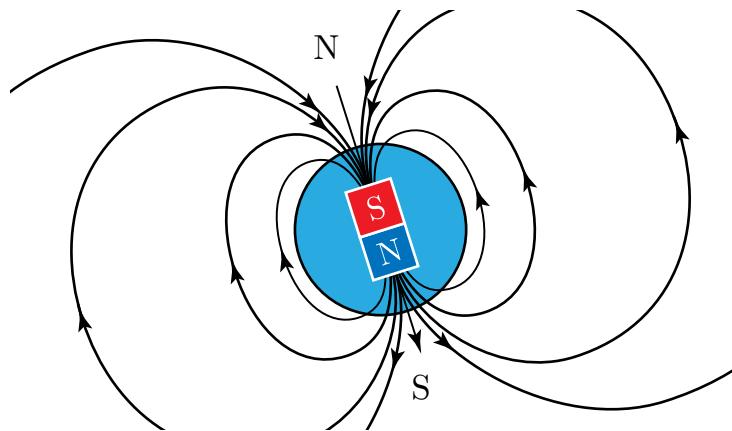


Рис. 48. Магнитное поле земли

Если поместить элементарный магнитик в поле диполя, то он будет ориентирован по полю. Энергия магнитика в поле

$$U = -(\vec{\mu}, \vec{B})$$

В классической механике момент чисто орбитальный, а в квантовой механике есть два вида момента, и полный момент  $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ . Все моменты измеряются в единицах действия  $\hbar$ , и тогда:

$$\vec{\mu} = \frac{e\hbar}{2mc} \vec{L}$$

Множитель перед полным безразмерным моментом  $\vec{j}$  называется *магнетоном Бора*.

Дирак доказал, что для спинового момента электрона коэффициент пропорциональности в два раза больше

$$\vec{\mu} = 2\mu_B \vec{s}$$

так что

$$\vec{\mu} = \mu_B (\vec{l} + 2\vec{s})$$

Вводится понятие  $g$ -фактора:

$$\mu = \frac{e\hbar}{2mc} g \vec{s}$$

Для электрона  $g = 2$ . Это впервые показал Дирак, когда написал своё релятивистское уравнение Дирака, а в нерелятивистском случае этот результат

называется аномальным соотношением. Для связи спина и момента стоит двойка, а для орбитального момента двойки нет.

Бор и Ван-Лёвен доказали, что в состоянии термодинамического равновесия система электрически заряженных частиц (электронов, атомных ядер и т. п.), помещённая в постоянное магнитное поле, не могла бы обладать магнитным моментом, если бы она строго подчинялась законам классической физики.

## 8.2. Орбитальное движение

Давайте запишем выражение для электрона, движущегося в магнитном поле. Будем рассматривать квантовое движение: есть орбитальная и спиновая части.

Для начала попробуем записать уравнение Шрёдингера для безспиновой частицы ( $s = 0$ ). Можно записать через векторный и скалярный потенциалы, которые автоматически удовлетворяют уравнениям без источников:

$$\vec{E} = -\nabla\varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}$$

### 8.2.1 Калибровка

Потенциалы определены с точностью до калибровки:

$$A \rightarrow A + \nabla f, \quad \varphi \rightarrow \varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial f}{\partial t}$$

Утверждается, что калибровочные преобразования – закон природы, а значит, уравнение Шрёдингера должно быть относительно них инвариантно:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{p^2}{2m} \Psi$$

Как ввести в нем магнитное поле? Нужно заменить

$$\vec{p} \rightarrow \vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A}, \quad U = q\varphi, \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q\varphi$$

Так как магнитное поле не совершает работы, то потенциальная энергия одинакова как при наличии магнитного поля, так и при отсутствии. Итак, урав-

нение Шрёдингера для бесспиновой частицы в магнитном поле:

$$\left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q\varphi \right) \Psi = \frac{(\vec{p} - \frac{1}{c}\vec{A})^2}{2m} \Psi$$

В классической механике

$$\vec{F} = q \left( \vec{E} + \frac{1}{c} [\vec{v} \times \vec{B}] \right)$$

В нашей квантовой механике

$$\vec{p} = -i\hbar \nabla$$

Во пространстве он входит в уравнения как

$$-i\hbar \nabla - \frac{1}{c} \vec{A},$$

А во времени как

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q\varphi$$

Это удлинённая (ковариантная) форма. В силу калибровочной инвариантности

$$\vec{A} \rightarrow \vec{A} + \nabla f, \quad \varphi \rightarrow \varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial f}{\partial t}$$

Можно исключить лишние члены фазовых преобразованием волновой функции:

$$\Psi \rightarrow \Psi \exp \left[ \frac{iqf}{\hbar c} \right]$$

В таком случае и уравнения Максвелла, и Шрёдингера останутся инвариантными.

$$\left[ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q\varphi + \frac{1}{c} \frac{\partial f}{\partial t} \right] \Psi \exp \left[ \frac{iqf}{\hbar c} \right]$$

$$e^{\frac{iqf}{\hbar c}} \left[ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + i\hbar \frac{iq}{\hbar c} \frac{\partial f}{\partial t} - q\varphi + \frac{1}{c} \frac{\partial f}{\partial t} \right] \Psi = 0$$

### 8.3. Уравнение Паули

Что изменится, если ввести спин? Должно добавиться к этому уравнению уравнение для потенциальной энергии:

$$\left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q\varphi \right) \Psi = \frac{(\vec{p} - \frac{q}{c}\vec{A})}{2m} \Psi - (\vec{\mu}, \vec{B}) \Psi$$

Для электрона  $s = \frac{1}{2}$ ,  $g = 2$ , а магнитный момент

$$\vec{\mu} = \frac{e\hbar}{2mc} g \vec{S} = \frac{e\hbar}{2mc} \vec{\sigma}$$

В итоге уравнение для электрона

$$\left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\varphi \right) \Psi = \left[ \frac{(-i\hbar \nabla - \frac{e}{c}\vec{A})^2}{2m} - \frac{e\hbar}{2mc} (\vec{\sigma}, \vec{B}) \right] \Psi, \quad \Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}$$

Кстати, здесь можно ввести гирочастоту, называемую также циклотронной

$$\vec{\omega}_H = \frac{e\vec{B}}{mc} \Rightarrow \frac{e\hbar}{2mc} (\vec{\sigma}, \vec{B}) = \frac{\hbar}{2} (\vec{\sigma}, \vec{\omega}_H)$$

Это уравнение и называется уравнением Паули.

#### 8.3.1 Эксперимент Штерна-Герлаха

В приборе Штерна-Герлаха, прежде всего, были незаряженные частицы.

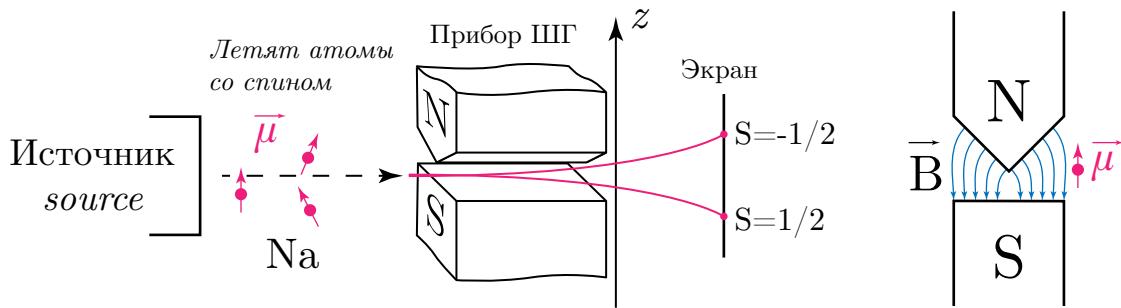


Рис. 49. Опыт Штерна-Герлаха

Летели нейтральные атомы натрия. В приборе магнитное поле неоднородно: оно создаётся квадрупольным магнитом. Один конец магнита острый, а

другой тупой. На нас по рисунку летит пучок: нейтральный, но с магнитным моментом.

Элементарный магнитик в таком неоднородном поле втягивается в область сильного поля. Сила, действующая на магнитик

$$\vec{F} = \nabla(\vec{\mu}, \vec{B}) = (\vec{\mu} \nabla) \vec{B}$$

Это производная по направлению  $\vec{\mu}$  от поля  $\vec{B}$ . Если поле приблизительно линейно неоднородно, то

$$U = -\vec{r} \cdot (\vec{\mu} \nabla) \cdot \vec{B}$$

Что будет происходить, если влетает атом с каким-то направлением спина, например спин вверх? Что с ним будет происходить? Если у него гиromагнитное соотношение положительно, то магнитный момент тоже смотрит вверх, и атом отклоняется вниз. Итак, этот прибор, фактически, измеряет проекцию спина на ось  $z$ .

В классике на экране была бы непрерывная картина. Но как мы знаем, проекция спина может принимать дискретные значения. Поэтому на экране прибора будут регистрироваться несколько полос: для спина  $\frac{1}{2}$  и спина  $-\frac{1}{2}$ . Это впервые позволило наблюдать дискретность спектра.

Прибор Штерна-Герлаха – аналог поляризатора в оптике.

Теперь пусть прибор разложил пучок на два пучка. Если поставить последовательно ещё один прибор, то второго пучка уже не будет:

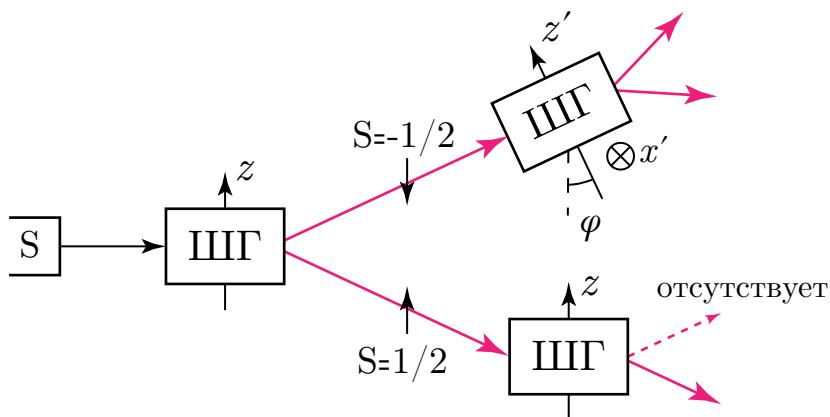


Рис. 50. Два прибора Штерна-Герлаха

Если же повернуть второй прибор и у него будет новая ось  $z'$ , то можно

через оператор поворота

$$U_\varphi = \cos \frac{\varphi}{2} + i(\vec{u}, \vec{\sigma}) \sin \frac{\varphi}{2}$$

$$U_\varphi = \cos \frac{\varphi}{2} + i\sigma_x \sin \frac{\varphi}{2} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\varphi}{2} & i \sin \frac{\varphi}{2} \\ i \sin \frac{\varphi}{2} & \cos \frac{\varphi}{2} \end{pmatrix}$$

Тогда если начальное состояние  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ , то

$$\begin{pmatrix} \Psi'_1 \\ \Psi'_2 \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \cos \frac{\varphi}{2} \\ i \sin \frac{\varphi}{2} \end{pmatrix}$$

Здесь интенсивности

$$I_1 = \cos^2 \frac{\varphi}{2}, \quad I_2 = \sin^2 \frac{\varphi}{2}$$

Если угол  $\frac{\pi}{2}$ , то интенсивности будут равны. В этом отличие от оптики (поляризацию света можно сравнить со спином 1): у света интенсивность при проходе через полароид  $\sin^2 \varphi$ .

Итак, прибор Штерна-Герлаха – это поляризатор для спина. Он всегда будет разбивать излучение на два пучка (хотя и интенсивность одного из них может быть равна нулю).

## 8.4. Заряженная частица в однородном магнитном поле

Эта задача носит имя Ландау. Для электрона  $q = e, g = 2, s = 1/2$ , а уравнение

$$\left[ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\varphi \right] \Psi = \left[ \frac{(-i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \vec{A})^2}{2m} - \frac{e\hbar}{2mc} (\vec{\sigma}, \vec{B}) \right] \Psi$$

Рассмотрим случай, когда электрического поля нет ( $E = 0, \varphi = 0$ ), а магнитное поле однородно ( $\vec{B} \parallel \vec{z}_0 = \text{const}$ ).

$$\vec{B} = \text{rot } \vec{A} = \begin{vmatrix} \vec{x}_0 & \vec{y}_0 & \vec{z}_0 \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ A_x & A_y & A_x \end{vmatrix}$$

Отсюда

$$B_z = \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y}$$

Чтобы поле было однородным, можно выбрать  $A_y = B_z x$ ,  $A_x = 0$  или наоборот:  $A_x = -B_z y$ ,  $A_y = 0$ . Такой выбор называют калибровкой Ландау.

Такая свобода возникает вследствие калибровочной инвариантности, с калибровочной функцией  $f = Bxy$ . Выберем второй вариант.

Будем искать стационарные решения, так как гамильтониан от времени не зависит:

$$\left[ \frac{(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\vec{A})^2}{2m} - \frac{e\hbar}{2mc}(\vec{\sigma}, \vec{B}) \right] \Psi = E\Psi$$

$$\frac{1}{2m} \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} + \frac{e}{c} \cdot B \cdot y \right)^2 \Psi - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \Psi = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \Psi - \frac{e\hbar B}{2mc} \sigma_z \Psi = E\Psi, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_{\uparrow} \\ \Psi_{\downarrow} \end{pmatrix}$$

$$\left[ \frac{1}{2m} \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} + \frac{e}{c} \cdot B \cdot y \right)^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{e\hbar B_z}{mc} \sigma \right] \Psi = E\Psi$$

$$\sigma_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma & 0 \\ 0 & -\sigma \end{pmatrix}$$

Так как нет явной зависимость от  $x$  и  $z$ , можно искать решение в виде преобразования Фурье:

$$\Psi = \Phi(y) \exp\{ik_x x + ik_z z\}$$

Тогда

$$\left[ \frac{1}{2m} \left( \hbar k_x + \frac{e}{c} B y \right)^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\hbar^2}{2m} k_z^2 - \frac{e\hbar B_z}{mc} \sigma \right] \Phi = E\Phi$$

Перенесём последние два слагаемых вправо и введём новую энергию

$$\varepsilon = E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \frac{\hbar e B}{mc} \sigma = E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \hbar \omega_H \sigma$$

Тогда

$$\left[ \frac{1}{2m} \left( \hbar k_x + \frac{e}{c} B y \right)^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right] \Phi = \varepsilon \Phi$$

Это ни что иное, как уравнение осциллятора. Вспомним его:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{m\omega^2 y^2}{2} \right] \Phi = \varepsilon \Phi$$

Попробуем привести уравнение () к такому виду:

$$\frac{1}{2m} \frac{e^2 B^2}{c^2} \frac{m}{m} \left( \frac{h k_x c}{e B} + y \right)^2 = \frac{m \omega_H^2}{2} (y - y_0)^2$$

Тогда приведённый вид

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + m \omega_H^2 (y - y_0)^2 \right] \Phi = \varepsilon \Phi$$

Приведём уравнение к безразмерному виду:

$$\hbar \omega_H \left[ -\frac{\hbar}{2m \omega_H} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{m \omega_H (y - y_0)^2}{2\hbar} \right] \Phi = \varepsilon \Phi$$

Можем ввести

$$Y - Y_0 = \frac{y - y_0}{l_H}, \quad l_H = \sqrt{\frac{\hbar}{m \omega_H}} = \sqrt{\frac{\hbar c}{e B}}$$

$$\hbar \omega_H \left[ \frac{(Y - Y_0)^2}{2} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial (Y - Y_0)^2} \right] \Phi = \varepsilon \Phi$$

Решение такого осциллятора нам известно:

$$\varepsilon = \hbar \omega_H \left( n + \frac{1}{2} \right) \Rightarrow E = \hbar \omega_H \left( n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} - \hbar \omega_H \sigma$$

Так как  $\sigma = \pm \frac{1}{2}$ , то

$$E = \hbar \omega_H n + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} - \hbar \omega_H \left( \sigma - \frac{1}{2} \right)$$

Рассмотрим случай без свободного движения ( $k_z = 0$ ):

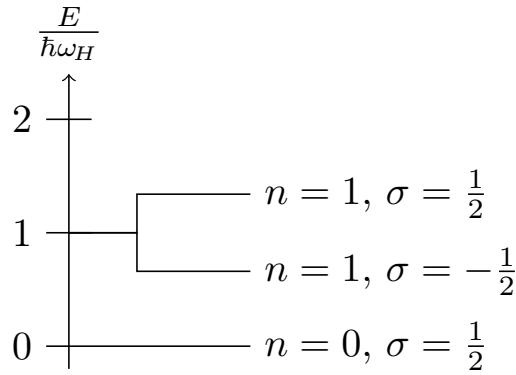


Рис. 51. Расщепление уровней

Уровень  $E = \hbar\omega_H$  дважды вырожден, и все высшие уровни дважды вырождены. А собственные функции

$$\Phi = \exp\left\{-\frac{(Y - Y_0)^2}{2}\right\} H_n(Y - Y_0)$$

Тогда

$$\Psi = \exp\{ik_x x + ik_z z\} \exp\left\{-\frac{(y - y_0)^2}{2l_H^2}\right\} H_n\left(\frac{y - y_0}{l_H}\right)$$

где  $y_0 = -\frac{\hbar k_x c}{eB} = -\frac{\hbar k_x}{m\omega_H}$ .

Заметим, что есть вырождение: волновые функции зависят от  $k_x$ , а энергия – нет. Обсудим аналогию с классической механикой.

### Классическая задача

$$m\dot{\vec{v}} = \frac{e}{c} [\vec{v} \times \vec{B}], \quad B \equiv B_z$$

$$\begin{cases} \dot{v}_x = \omega_H v_y \\ \dot{v}_y = -\omega_H v_x \\ \dot{v}_z = 0 \end{cases}$$

Ищем решение в виде

$$e^{-i\omega t} \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} -i\omega v_x = \omega_H v_y \\ -i\omega v_y = -\omega_H v_x \\ v_z = v_z^0 \end{cases}$$

Для первых двух уравнений считаем определитель, чтобы система имела решение:

$$\omega = \pm \omega_H$$

Тогда два собственных вектора найдём, и полное решение

$$\begin{pmatrix} v_x \\ v_y \end{pmatrix} = c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} e^{-i\omega_H t} + c_2 \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} e^{i\omega_H t}$$

Это хорошо известный результат: на плоскости  $(v_x, v_y)$  мы крутимся в одну сторону – это гировращение, а по  $z$  происходит движение с постоянной скоростью.

Проинтегрируем решение:

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \frac{c_1}{-i\omega_H} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} e^{-i\omega_H t} + \frac{c_2}{i\omega_H} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} e^{i\omega_H t} + \begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix}$$

Точка  $(x_0, y_0)$  называется *ведущим центром*. На плоскости  $(x, y)$  происходит вращение вокруг ведущего центра по радиусу

$$r_H = \frac{v}{\omega_H}$$

**Аналогия классики и квантового решения.** Волновая функция локализована по  $y$ . Что у неё определено?

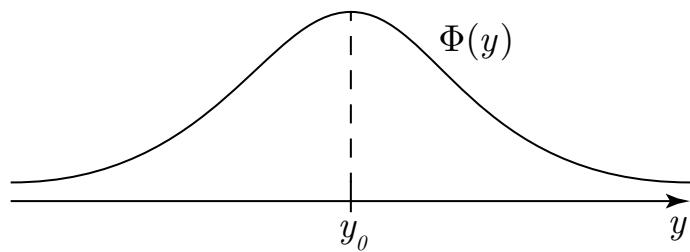


Рис. 52. Функция  $\Phi(y)$

Продольное движение что в классике, что в квантах одинаково. А по-перечное зависит от калибровки: в функции определён центр  $y_0$ , по оси  $x$  осцилляции.

Центр волновой функции может быть назван ведущим центром. В отличии от классической задачи, где определены обе координаты ведущего цен-

тра, то теперь при нашем выборе калибровки будет определена координата  $y_0$  ведущего центра, а по  $x$  функция не локализована.

Заметим, что если выбрать другую калибровку  $A_y = Bx$ , ситуация перевернётся: локализация по  $x$  и неопределенность по  $x$ .

В Ландау также решена задача о симметричной калибровке

$$A_x = \frac{1}{2}By, \quad A_y = -\frac{1}{2}Bx$$

При этом уровни энергии не изменяются. Уровни энергии движения электрона в магнитном поле называются уровнями Ландау.

## Неофициальный минимум и полезные формулы

**Волновая функция и её физический смысл.** Каждое состояние системы может быть описано в данный момент времени определенной функцией координат  $\psi(q)$ , эта функция называется волновой.  $q$  – обобщенные координаты системы, в простейшем случае  $x, y, z$ .

$|\psi|^2 dq$  определяет распределение вероятностей значений координат.

При этом вероятность того, что система находится в каком-то состоянии всегда равна 1

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(q)|^2 dq = 1$$

**Операторы физических величин, их свойства (эрмитовость, некоммутативность).** ??

Введем и определим понятие оператор  $\hat{f}$ . Пусть  $\hat{f}\psi$  обозначает результат действия оператора  $\hat{f}$  на функцию  $\psi$

kek

**Импульс. Волновая функция свободной частицы.** Импульс определяется оператором  $\hat{p} = -i\hbar\nabla$  Волновая функция свободной частицы:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp\{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)\} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - Et)\right\}$$

Энергия принимает любые значения. Энергетический спектр непрерывный.

**Стационарное и нестационарное уравнения Шрёдингера.**

$$\text{Нестационарное: } i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi(\vec{r}, t)$$

В развернутом виде:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}, t) + U(\vec{r})\Psi(\vec{r}, t)$$

$$\text{Стационарное: } \hat{H}\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r})$$

Или, расписывая оператор Гамильтона:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}) + [E - U(\vec{r})] \Psi(\vec{r}) = 0,$$

$E = \text{const}$  – энергия системы,  $U(\vec{r})$  – потенциальная энергия

## Значение постоянной Планка

$$\hbar = 1.054 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}$$

$$\hbar = 1.054 \cdot 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{с}$$

$$\hbar = 6.582 \cdot 10^{-16} \text{ эВ} \cdot \text{с}$$

## Формулы

### Коммутационные соотношения

$$[p_x, x] = -i\hbar$$

$$[a, a^+] = 1$$

$$\begin{cases} l_x l_y - l_y l_x = i l_z \\ l_y l_z - l_z l_y = i l_x \\ l_z l_x - l_x l_z = i l_y \end{cases}$$

$$[l^2, l_z] = 0$$

$$[l_z, l_{\pm}] = \pm l_{\pm}$$

$$[l_+, l_-] = 2l_z$$

### Собственные числа операторов

$$a^+ |n-1\rangle = \sqrt{n} |n\rangle, \quad a |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle$$

$$l_+ |m, l-1\rangle = \sqrt{(m+k)(l-m+1)} |m+1, l\rangle ,$$
$$l_- |m, l\rangle = \sqrt{(m+k)(l-m+1)} |m-1, l\rangle$$

$$l_z |l, m\rangle = m |l, m\rangle$$
$$l^2 |l, m\rangle = l(l+1) |l, m\rangle$$