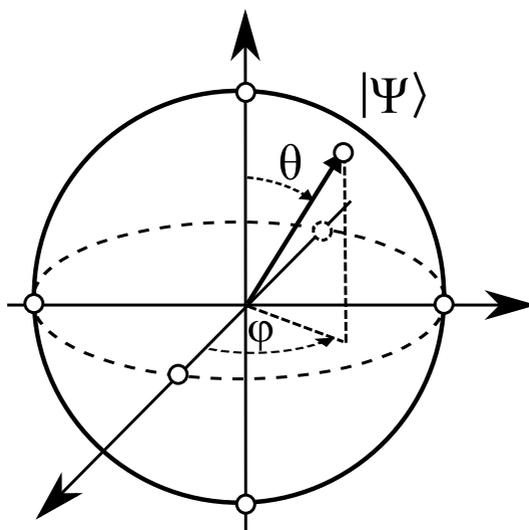


П. С. Парфенов

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА



Санкт-Петербург

2018

Министерство образования и науки Российской Федерации
Университет ИТМО

П. С. Парфенов

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

МЕТОДИЧЕСКОЕ ПОСОБИЕ К ПРАКТИКУМУ ПО СПЕЦИАЛЬНЫМ
РАЗДЕЛАМ ФИЗИКИ

РЕКОМЕНДОВАНО К ИСПОЛЬЗОВАНИЮ В УНИВЕРСИТЕТЕ ИТМО
по направлению подготовки 12.03.03 «Фотоника и оптоинформатика» в
качестве учебно-методического пособия для реализации основных
профессиональных программ высшего образования бакалавриата



УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

Санкт-Петербург

2018

П. С. Парфенов. Квантовая механика. Методическое пособие к практикуму по специальным разделам физики. — СПб: Университет ИТМО, 2018. — 117 с.

Рецензенты:

1. В.Л. Комолов, д.ф.-м.н., Университет ИТМО
2. М.Ю. Леонов, к.ф.-м.н., Университет ИТМО

Учебное пособие предназначено для бакалавров факультета фотоники и оптоинформатики, обучающихся по программе подготовки «Физика наноструктур» по направлению подготовки 12.03.03 «Фотоника и оптоинформатика», обучающихся по дисциплине «Специальные разделы физики». Практикум также может быть рекомендован студентам старших курсов физико-технических специальностей, а также магистрантам, специализирующимся в области применения оптических методов в оптоинформатики и изучении наноструктур.



Университет ИТМО — ведущий вуз России в области информационных и фотонных технологий, один из немногих российских вузов, получивших в 2009 году статус национального исследовательского университета. С 2013 года Университет ИТМО — участник программы повышения конкурентоспособности российских университетов среди ведущих мировых научно-образовательных центров, известной как проект «5 в 100». Цель Университета ИТМО — становление исследовательского университета мирового уровня, предпринимательского по типу, ориентированного на интернационализацию всех направлений деятельности.

© Университет ИТМО, 2018

© П. С. Парфенов, 2018

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение	5
Глава 1. Основные понятия.	8
1.1. Квантовые состояния и волновые функции.	8
1.1.1. Квантовые состояния	8
1.1.2. Волновые функции	9
1.1.3. Суперпозиция	10
1.1.4. Нормирование волновых функций	11
1.2. Операторы	11
1.2.1. Основные физические операторы	12
1.2.2. Эрмитовость операторов	13
1.3. Наблюдаемые	14
1.3.1. Собственные значения и функции	14
1.3.2. Спектр собственных значений	15
1.3.3. Непрерывный спектр	17
1.4. Среднее значение	18
1.5. Коммутаторы.	25
1.6. Принцип неопределенности	26
Глава 2. Уравнение Шрёдингера	28
2.1. Зависящее от времени уравнение Шрёдингера	28
2.1.1. Изменение средних значений во времени	29
2.2. Стационарное уравнение Шрёдингера.	31
2.2.1. Стационарное состояние свободной частицы	32
2.2.2. Плотность потока вероятности	34
2.2.3. Суперпозиция стационарных состояний	35
2.3. Потенциальные ямы	37
2.3.1. Одномерная потенциальная яма бесконечной глубины	38
2.3.2. Ортогональность функций и суперпозиция состояний	44
2.4. Гармонический осциллятор	51
2.4.1. Формализм лестничных операторов	52
2.4.2. Когерентные состояния	57

Глава 3. Матричная форма квантовой механики	59
3.1. Гильбертово пространство	59
3.1.1. Сфера Блоха	61
3.1.2. Обозначения Дирака	62
3.2. Матрицы	66
3.2.1. Матрицы операторов	66
3.2.2. Унитарные преобразования и преобразование координат	68
3.2.3. Квантовые гейты	71
3.2.4. Собственные значения и собственные вектора	72
3.3. Матрицы гамильтониана	74
3.3.1. Гамильтонианы многоуровневых систем	77
3.4. Многочастичные системы	82
3.5. Матрица плотности	84
Глава 4. Приближенные методы решения	89
4.1. Стационарная теория возмущений	89
4.2. Теория возмущений при наличии вырождения	94
4.3. Возмущения, зависящие от времени	101
4.3.1. Периодические возмущения	104
4.3.2. Золотое правило Ферми	106
Приложения	109
А. Сферическая система координат	109
Б. Символ Кронекера	110
В. Дельта-функция Дирака	110
Г. Тригонометрическая запись комплексного числа	111
Д. Тензорное произведение	111
Е. Некоторые табличные интегралы	112
Ж. Основные физические константы	113
Список литературы	114

ВВЕДЕНИЕ

Классический спор корпускулярной и волновой теорий света, начавшийся несколько веков назад, с появлением классической электродинамики Максвелла настолько прочно утвердил победу волновой теории, что корпускулярная теория была почти совсем забыта. Но на рубеже XIX и XX веков было сделано ряд открытий, пошатнувших положение волновой теории. Первые шаги в эту сторону сделали Бальмер и Ридберг, которые обнаружили закономерности в положении спектральных линий атома водорода (1885 и 1888 гг.). Затем было показано, что применение законов классической электромагнитной теории к задаче об излучении «черного тела» приводит к ошибочным результатам. Планк показал, что закон спектрального распределения энергии излучения точно совпадает с экспериментом, если предположить, что излучение испускается и поглощается строго определенными порциями, и ввел понятие «кванта» энергии, т.е. частицы энергии (1900 г.). Вскоре Эйнштейн, изучая законы фотоэффекта, из аналогичных Планку соображений показал, что свет поглощается порциями, и от частоты света зависит энергия каждой из таких порций, или квантов (1905 г.).

Следующий шаг сделал Бор, применивший принцип квантования к проблеме строения атома. Пытаясь объяснить дискретность спектра водорода и закономерности, установленные Бальмером и Ридбергом, он постулировал дискретность орбит и, тем самым, поставил точку в признании дискретности величин на микроуровне (1913 г.). Стало ясно, что на уровне атомов, молекул и кристаллов система переходит из одного состояния в другое скачкообразно. Такие переходы назвали квантовыми. Изучая их, Эйнштейн ввел коэффициенты, характеризующие вероятности излучательных квантовых переходов (1916 г.). В 1924 г. Луи де Бройль высказал гипотезу, что присущий фотонам корпускулярно-волновой дуализм свойственен и другим элементарным частицам. Практическое подтверждение этой гипотезы было получено в опытах по дифракции электронов в 1927 г., уже после появления квантовой механики.

Современная квантовая механика родилась в 1925 году, когда Вернер Гейзенберг опубликовал работу «О квантотеоретическом истолковании кинематических и механических соотношений». Его подход был связан с идеей рассмотрения микрочастиц как корпускул и описания процессов взаимодействия между ними с использованием только

тех понятий, для которых можно указать процедуру их экспериментального измерения. При этом полагалось, что переход микросистемы из начального состояния в конечное происходит посредством некоего загадочного квантового скачка, а вопросы о состоянии системы в момент перехода объявлялись не имеющими физического смысла, поскольку такое состояние, без его существенного изменения, в момент перехода не может быть измерено ни одним физическим прибором. В своей работе он показал, что те математические величины, которые в новой теории должны соответствовать наблюдаемым на опыте физическим величинам, в общем случае не коммутируют друг с другом, получил коммутационное соотношение, которому должны удовлетворять величины координаты и импульса микросистемы (ныне известное как $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$), а также нашел квантовые уровни энергии линейного ангармонического осциллятора.

В том же году теоретический подход Гейзенберга был развит в статье «О квантовой механике» М. Борном и П. Йорданом, воспользовавшись алгеброй матриц. Введенные Гейзенбергом обозначения были отождествлены с эрмитовыми матрицами, а квантовые уровни энергии стали соответствовать собственным значениям эрмитовой матрицы гамильтониана системы. Линейная алгебра, адаптированная к решению задач новой механики Гейзенбергом, Борном и Йорданом, получила название «матричной».

В 1926 г. Э. Шрёдингер опубликовал ряд статей, первой из которых была «Квантование как задача о собственных значениях», в которых ввел понятие «волновой функции» Ψ , позже получившее от Борна ясное физическое толкование – как вероятность обнаружения частицы, пропорциональная $|\Psi|^2$. Волновая функция подчинялась уравнению, для получения которого Шрёдингер воспользовался аналогией Гамильтона между траекториями материальных частиц в потенциальных полях и траекториями световых лучей, обнаруженной еще в 1831 г. Также он использовал понятие длины волны частиц, предложенное де Бройлем.

Так оформились две системы описания атома – матричная механика Гейзенберга и волновая механика Шрёдингера. Первая описывала электрон как частицу, вторая – как волну. При этом обе, как показал Шрёдингер в статье «Об отношении квантовой механики Гейзенберга-Борна-Йордана к моей» были математически эквивалентными. Однако считается, что методы матричной механики менее удобны для обсуждения поведения свободных частиц, чем методы волновой механики. Позднее, для объяснения спиновых и релятивистских эффектов были созданы подходы Паули и Дирака. С помощью уравнений Шрёдингера, Паули, Дирака и матриц Гейзенберга решаются далеко не все задачи

(преимущественно находятся только стационарные состояния), поэтому были созданы и приближенные методы – теория возмущений, вариационные методы и т. д.

На квантовых свойствах света построена почти вся фотоника и оптоэлектроника – это лазеры, светодиоды, фотоприемники, квантовые вычислители и т.д. Знакомство с представлениями квантовой механики необходимо как для качественного понимания современной физики, так и с методической точки зрения, поскольку в квантовой механике оценка явлений сильно отличается от оценки, основанной на повседневном опыте, что часто приходится учитывать при постановке современных опытов и при интерпретации результатов экспериментов.

В рекомендации включены теоретические задачи по нерелятивистской квантовой физике, рассматривающие квантовые свойства излучения, волновые свойства частиц, волновое и матричное представление, формализм и свойства чистых и смешанных квантовых состояний, а также приближенные методы решения. В начале каждого раздела приведены основные формулы и краткие теоретические сведения. Приводятся примеры материальных объектов, для описания которых используются приводимые формулы. Помимо примеров в тексте, включено большое количество задач, предназначенных для самостоятельного решения.

Учебное пособие предназначено для бакалавров факультета фотоники и оптоинформатики, обучающихся по программе подготовки «Физика наноструктур» по направлению подготовки 12.03.03 «Фотоника и оптоинформатика», обучающихся по дисциплине «Специальные разделы физики». Направлено на формирование способностей представлять научную картину мира на основе знания основных законов и методов естественных наук и математики, а также привлекать физико-математический аппарат для решения задач, возникающих в ходе профессиональной деятельности.

Издание является дополненной и переработанной версией пособия «Квантовая механика. Методическое пособие к практикуму по квантовой физике»[1], выпущенной в 2012 г. Автор выражает признательность выпускнику Университета ИТМО – кандидату физ.-мат. наук С. Ю. Кручинину (Max Planck Institute of Quantum Optics, Германия), а также сотрудникам кафедры ОФиСЕ Университета ИТМО – доктору физ.-мат. наук И. Д. Рухленко и профессору, доктору физ.-мат наук Е.Ю. Перлину, за помощь в подготовке пособия.

Глава 1

ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ

1.1. Квантовые состояния и волновые функции

1.1.1. Квантовые состояния [2, 3]. Квантовая физика позволяет вычислять значения наблюдаемых физических величин, сопоставляемых с квантовой частицей или системой частиц.

Состояние, в котором находится квантовая система, описывается набором численных переменных. Если нам известна совокупность переменных, максимально полно описывающая систему, то состояние такой системы называется «чистым». Для «чистых» состояний всегда существует полная система измерительных процессов, приводящих к определенным результатам, обычно статистическим. Поэтому знание состояния такой системы в момент времени, например, $t = 0$, и ее динамических свойств, позволяет предсказать состояния системы в последующее время.

Если некоторые параметры системы неизвестны, то состояние можно представить как статистическую смесь множества чистых состояний. Такие состояния называются «смешанным». Применительно к системе частиц дополнительно выделяют «запутанное» состояние, при котором система находится в чистом состоянии, но для отдельных частей системы чистые состояния выделить не удастся. Поэтому система описывается как единое чистое состояние [1].

Пример 1.1. Состояние электрона в атоме водорода описывается четырьмя квантовыми числами $\{n, \ell, m_\ell, m_s\}$.

Пример 1.2. Примером «чистого состояния» является пучок фотонов, образующих монохроматическую плоскую электромагнитную волну, свойства поляризации которой можно описать всего одним вектором \mathbf{e} (жирный цвет обозначает вектора).

Примером смешанного состояния является частично поляризованный свет, который можно рассмотреть как смесь состояний, не имеющих определенных фазовых соотношений.

Примером запутанного состояния является пара фотонов, образовавшихся при распаде другого фотона либо частицы, разлетающихся в противоположные стороны и обладающих ортогональными векторами поляризации. «Запутанность» выражается в том, что состояние вектора поляризации каждой частицы связано с поляризацией другой частицы.

1.1.2. Волновые функции [3, 4]. Чистые состояния физических частиц или систем, а также их динамические свойства, могут полностью описываться комплексными волновыми функциями $\Psi(\xi, t)$, где ξ – обобщенные координаты (набор независимых переменных, необходимых для определения положения в некотором пространстве), а t – время. В соответствии с вероятностной интерпретацией, предложенной Борном, квадрат модуля волновой функции $|\Psi|^2$ пропорционален вероятности обнаружения частицы в выбранной точке пространства и является плотностью вероятности ρ .

Сумма вероятностей значений всех возможных координат системы должна быть равна единице, поэтому результат интегрирования $|\Psi|^2$ по всему пространству тоже должен быть равен единице

$$\int_D |\Psi|^2 d\xi = 1. \quad (1.1)$$

где D – область изменения переменных, от которых зависит Ψ .

Для одиночной частицы в декартовых координатах можно перейти непосредственно к объему V :

$$\int_D |\Psi|^2 d\xi = \int_V |\Psi|^2 dx dy dz = \int_V |\Psi|^2 dV = 1.$$

Равенство (1.1) называют условием нормировки волновых функций. Если интеграл от $|\Psi|^2$ сходится, то равенство (1.1) выполнимо подбором соответствующих постоянных коэффициентов.

В ряде случаев интеграл от $|\Psi|^2$ может расходиться, тогда Ψ не может быть нормирована по условию (1.1). В таком случае отношение квадратов $|\Psi|^2$ в двух различных точках пространства определяет относительную вероятность соответствующих значений координат.

Также постулируется, что реальные физические системы могут находиться только в состояниях, удовлетворяющих уравнению Шрёдингера, поэтому волновые функции также должны быть конечными, непрерывными и дифференцируемыми во всей области пространства (последние два требования не распространяются на начальное состояние системы). Из условия непрерывности следует,

что на границах существования системы и за ними волновая функция обращается в нуль.

Смешанные состояния волновыми функциями описаны быть не могут, поэтому они описываются статистическими матрицами плотности.

Пример 1.3. Рассмотрим налагаемые на волновые функции требования непрерывности, дифференцируемости и интегрируемости на примере нескольких функций, определенных на интервале $x \in (0, l)$, и равных нулю вне интервала. Функция $f = \sin \pi x/l$ непрерывна, дифференцируема, интегрируема. Функция $f = \operatorname{tg} \pi x/l$ претерпевает разрыв в точке $l/2$, а также для функции расходится интеграл. Функция $f = a$, где константа $a \neq 0$, претерпевает разрыв на границах определения, но интеграл от неё сходится.

Задание 1.1. Какая из следующих функций удовлетворяет условиям, налагаемым на волновые функции, и каким именно?

- а) e^{-kx^2} , $-\infty < x < +\infty$, $k > 0$, б) e^{kx^2} , $-\infty < x < +\infty$, $k > 0$,
 в) e^{imx} , $-\infty < x < +\infty$, m – вещественно.

Ответ. а) удовлетворяет, б) и в) не удовлетворяет.

1.1.3. Суперпозиция. Квантовая суперпозиция является одним из фундаментальных принципов квантовой механики. Она означает, что если система может находиться в одном состоянии, и может находиться в другом, то, пока над ней не производится измерение, она может находиться в обоих возможных состояниях одновременно, но обнаружена будет только в одном. Так, если в состоянии с волновой функцией Ψ_1 измерение приводит к определенному результату 1, а в состоянии Ψ_2 – к результату 2, то всякая линейная комбинация Ψ_1 и Ψ_2 , т.е. всякая функция вида $c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$ (где c_1, c_2 – комплексные постоянные), описывает такое состояние системы, что при эксперименте одно и то же измерение дает либо результат 1, либо результат 2. Вероятность получения конкретного результата задается значениями $|c_n|^2$, которые обычно нормируют на единичную вероятность $\sum |c_n|^2 = 1$ [1].

Пример 1.4. Возвращаясь к нашему примеру с монохроматической волной. Если волна распространяется вдоль оси z , то вектор поляризации можно разложить по направлениям поляризации по базовым векторам \mathbf{e}_x и \mathbf{e}_y . Тогда любое чистое состояние \mathbf{e} может быть представлено в виде линейной суперпозиции $\mathbf{e} = a_x\mathbf{e}_x + a_y\mathbf{e}_y$. Коэффициенты a_x^2 и a_y^2 являются вероятностями того, что отдельный фотон пройдет через

фильтр, пропускающий фотоны со строго определенной поляризацией (как в опыте Штерна-Герлаха).

Суперпозиция двух волн \mathbf{e}_1 и \mathbf{e}_2 , между которыми сохраняется определенное фазовое соотношение, также является чистым состоянием.

1.1.4. Нормирование волновых функций. Подбор таких постоянных множителей, чтобы соотношение (1.1) выполнялось, называется нормированием волновой функции. Так, если интеграл $\int |\Psi|^2 d\xi$ равен N , то можно нормировать волновую функцию, поделив её на \sqrt{N} . Нормированная функция будет иметь вид Ψ/\sqrt{N} .

Пример 1.5. В начальном состоянии, в момент времени $t = 0$, система описывается функцией $\Psi(x, 0) = a$, где a – вещественно, $x \in (0, L)$. Нужно отнормировать эту функцию.

Решение: Заметим, что функция претерпевает разрыв на границах определения, что допустимо для начальных условий. Также напомним, что квадрат модуля комплексного числа равен произведению этого числа на его комплексно сопряженное, т.е. $|\Psi|^2 = \Psi\Psi^* = \Psi^*\Psi$, где $*$ – знак комплексного сопряжения. Теперь нормируем функцию.

$$\int_V \Psi^*\Psi dV = \int_0^L a^2 dx = a^2 x|_0^L = La^2, \Rightarrow N = \sqrt{La^2}.$$

Нормированная функция $f(x) = a/\sqrt{La^2} = 1/\sqrt{L}$.

Задание 1.2.

а) Отнормируйте функцию $\Psi(x) = \sin(\pi x/L)$ на интервале $x \in (0, L)$ и функцию $\Psi(r) = e^{-r/a_0}$ на интервале $(0, +\infty)$.

б) Отнормируйте функцию $\Psi(\varphi) = e^{im\varphi}$ в двумерном пространстве, ограниченном окружностью радиусом r_0 , и функцию $\Psi(r) = e^{-r/a_0}$ во всем трехмерном пространстве.

Ответ. Нормированные функции: а) $\sqrt{\frac{2}{L}} \sin(\pi x/L)$, $\sqrt{\frac{2}{a_0}} e^{-r/a_0}$, б) $\frac{1}{r_0 \sqrt{\pi}} e^{im\varphi}$, $\frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}$.

1.2. Операторы

В математике оператор – это правило, по которому одна функция преобразуется к другой. В квантовой физике всякой физической

величине A , характеризующей частицу или систему, сопоставляется линейный самосопряженный, или эрмитов (Шарль Эрмит – французский математик XIX века), оператор \hat{A} . Операторы сопоставляются как процессам измерения, так и процессам воздействия на квантовую систему.

Оператор \hat{A} (обозначается символом со шляпкой), действуя на функцию Ψ_1 (или состояние), создает новую функцию Ψ_2 (или новое состояние). По правилам записи оператор действует на функцию, стоящую справа от него, т.е. $\hat{A}\Psi_1 = \Psi_2$.

Линейность оператора означает, что он может применяться почленно к сумме аргументов, т.е. $\hat{A}(\Psi_1 + \Psi_2) = \hat{A}\Psi_1 + \hat{A}\Psi_2$, и что постоянную величину можно выносить за знак оператора, т.е. $\hat{A}(c\Psi) = c\hat{A}\Psi$.

Пример 1.6. Мультипликативные линейные операторы – x и x^2 , дифференциальные линейные операторы – d/dx и d^2/dx^2 . Нелинейные операторы – \cos и $\sqrt{[\]^2}$.

Пример 1.7. Применим сумму операторов $\hat{A} = d/dx$ и $\hat{3}$ к разности функций $x^3 - 5$:

$$\begin{aligned} (\hat{A} + \hat{3})(x^3 - 5) &= \hat{A}(x^3 - 5) + \hat{3}(x^3 - 5) = \\ &= d/dx(x^3 - 5) + 3(x^3 - 5) = 3x^2 + 3x^3 - 15. \end{aligned}$$

1.2.1. Основные физические операторы. Явный вид основных физических операторов постулируется, остальные выводятся. Мы рассмотрим т.н. представление Шрёдингера, в котором операторы физических величин постоянны, и время явным образом и них не фигурирует (в отличие от представления Гейзенберга, в котором эволюция системы определяется только развитием операторов во времени).

Оператор координаты $\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}$, частный случай $\hat{x} = x$ состоит в умножении волновой функции на координату x .

Оператор импульса $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$. В декартовых координатах $\nabla = \mathbf{e}_x \frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{e}_y \frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{e}_z \frac{\partial}{\partial z}$, поэтому частный случай – $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$.

Оператор кинетической энергии частицы $\hat{E}_k = -\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$, где m – масса частицы.

Оператор полной энергии (гамильтониан) $\hat{H} = \hat{E}_k + U(r, t)$, где $U(r, t)$ – потенциальная энергия.

Оператор момента импульса запишем через векторное умножение и определитель:

$$\hat{\mathbf{L}} = [\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}] = \begin{vmatrix} \mathbf{e}_x & \mathbf{e}_y & \mathbf{e}_z \\ \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ \hat{p}_x & \hat{p}_y & \hat{p}_z \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \mathbf{e}_x & \mathbf{e}_y & \mathbf{e}_z \\ x & y & z \\ -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} & -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} & -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \end{vmatrix},$$

частные случаи проекции оператора на оси в декартовых координатах $-\hat{L}_x = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right)$, $\hat{L}_y = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right)$, $\hat{L}_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$.

В сферических координатах $\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$.

1.2.2. Эрмитовость операторов. Оператор \hat{A} называется самосопряженным или эрмитовым, если для любых двух волновых функций ψ и φ выполняется соотношение

$$\int \psi^* \hat{A} \varphi d\xi = \int (\hat{A} \psi)^* \varphi d\xi, \quad (1.2)$$

где $*$ – знак комплексного сопряжения. Все физические операторы являются эрмитовыми.

Пример 1.8. Очевидно, что эрмитовым является оператор $\hat{A} = const$, где $const$ – вещественное число, а также операторы \hat{x} или \hat{x}^2 .

Результат менее очевиден в случае операторов импульса и энергии. Рассмотрим одномерный случай с границами определения a и b , где волновые функции обращаются в нуль. Подставляя в (1.2) оператор \hat{p}_x и интегрируя по частям, получаем

$$\begin{aligned} & \int_a^b \psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \varphi dx = -i\hbar \int_a^b \psi^* \frac{\partial \varphi}{\partial x} dx = \\ & = -i\hbar \left[\psi^* \varphi \Big|_a^b - \int_a^b \varphi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} dx \right] = i\hbar \int_a^b \varphi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} dx = \int_a^b \varphi \left(-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x} \right)^* dx, \end{aligned}$$

так как, согласно граничным условиям, слагаемое $\psi^* \varphi \Big|_a^b$ равно нулю (это слагаемое будет обращаться в ноль и при задании бесконечных пределов интегрирования – но уже в силу требования квадратичной интегрируемости функций). Исходя из эрмитовых свойств оператора \hat{p} , можно доказать и эрмитовость \hat{E}_k .

Задание 1.3. Показать, что операторы \hat{x} и \hat{L}_z эрмитовы.

Задание 1.4. Показать, что операторы $\frac{d}{dx}$, $\hat{x}\frac{d}{dx}$ и $\hat{x}\hat{p}_x$ не эрмитовы.

1.3. Наблюдаемые

1.3.1. Собственные значения и функции. Некоторые операторы и функции таковы, что в результате операции преобразования функции получается та же функция, но умноженная на число. В таких случаях функция называется собственной функцией оператора, а числовой множитель называется собственным значением оператора. Т.е. если

$$\hat{A}\Psi = a\Psi, \quad (1.3)$$

то a – собственное значение оператора \hat{A} , а Ψ – собственная функция оператора \hat{A} , соответствующая данному значению a .

В математике наличие у оператора собственных функций является скорее исключением. В квантовой физике это одно из базовых понятий – собственные значения соответствуют наблюдаемым величинам, которые могут быть получены в результате эксперимента, проведенного над системой. Вследствие эрмитовости физических операторов их собственные значения всегда вещественны, а совокупность всех собственных функций образует полный набор ортогональных функций.

Пример 1.9. Оператор $\hat{A} = d^2/dx^2$, функция $\Psi(x) = \cos 3x$, найти собственное значение.

Решение:

$$\hat{A}\Psi(x) = \frac{d^2}{dx^2} \cos 3x = 3 \cdot \frac{d}{dx} \sin 3x = -9 \cdot \cos 3x = -9 \cdot \Psi(x).$$

Следовательно собственное значение оператора равно -9 .

Задание 1.5. Даны функции ax , ax^2 , e^{ax} , e^{ax^2} , $\ln ax$ и $\sin ax$. Покажите, какие из них являются собственной функцией оператора

а) d/dx , б) d^2/dx^2 .

Ответ. а) e^{ax} , б) e^{ax} и $\sin ax$.

Задание 1.6. Покажите, какие из следующих функций являются собственными функциями оператора $\frac{d^2}{dx^2}$:

$$e^{-kx^2}, x^2, \cos kx + \sin kx.$$

Найдите собственные значения.

Ответ. Третья, собственное значение равно $-k^2$.

Задание 1.7. Найти собственное значение оператора \hat{A} , которое соответствует собственной функции Ψ , если:

$$\text{а) } \hat{A} = -\frac{d^2}{dx^2}, \Psi(x) = \sin 2x, \quad \text{б) } \hat{A} = -\frac{d^2}{dx^2} + x^2, \Psi(x) = e^{-\frac{x^2}{2}},$$

$$\text{в) } \hat{A} = \hat{p}_x, \Psi(x, y, z, t) = e^{ik\frac{x}{\hbar}}\Phi(y, z, t).$$

Ответ. а) 4, б) 1, в) k .

1.3.2. Спектр собственных значений. Квантовомеханические операторы, как правило, имеют не одну, а множество собственных функций $\Psi_1 \dots \Psi_n$ и соответствующих им собственных значений $a_1 \dots a_n$, которые образуют спектр, дискретный или сплошной. Рассмотрим случай дискретного спектра. Поскольку совокупность собственных функций эрмитовых операторов образуют полный набор ортогональных функций, то любая функция Ψ может быть выражена в виде линейной суперпозиции собственных функций оператора, где коэффициенты разложения c_n известны из теории рядов Фурье:

$$\Psi = \sum_n c_n \Psi_n, \quad \text{где } c_n = \int \Psi_n^* \Psi d\xi. \quad (1.4)$$

Вероятность того, что при измерении физической величины, соответствующей оператору \hat{A} , будет получено определенное собственное значение a_n из дискретного спектра, равна квадрату модуля коэффициента при соответствующей функции Ψ_n в разложении функции Ψ по собственным функциям оператора, т.е. $|c_n|^2$.

Напомним, что функции являются ортогональными, если интегралы их перекрытия $\int \Psi_m^* \Psi_n d\xi$ равны нулю. Если же функция принадлежит к набору нормированных ортогональных функций, то её называют ортонормированной. Определение таких функций записывают как

$$\int \Psi_m^* \Psi_n d\xi = \delta_{mn}, \quad (1.5)$$

где δ_{mn} – символ Кронекера (см. приложение Б).

В ряде случаев одному собственному значению оператора принадлежит несколько собственных функций, тогда они называются вырожденными. Тут следует иметь в виду, что собственные функции одного и того же вырожденного значения необязательно ортогональны [1].

Пример 1.10. На промежутке $(-\pi, \pi)$ полной ортонормированной системой функций является система

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}; \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin x; \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos x; \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin 2x; \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos x; \dots$$

Пример 1.11. Найдем собственные значения и волновые функции оператора импульса \hat{p}_x в случае функции, зависящей только от x (тогда можно перейти к полному дифференциалу по x), для чего рассмотрим уравнение

$$-i\hbar \frac{d}{dx} \psi(x) = p_x \psi(x) \Rightarrow \int \frac{d\Psi}{\Psi} = \int \frac{i}{\hbar} p_x dx \Rightarrow \ln \Psi = \frac{i}{\hbar} p_x x + const.$$

Видно, что решением уравнения является функция $\psi(x) = Ae^{ip_x x/\hbar}$, которая при всех вещественных значениях p_x удовлетворяет условиям, налагаемым на волновую функцию. Следовательно собственные значения оператора импульса образуют непрерывный спектр.

Пример 1.12. Оператор полной энергии, или гамильтониан, чаще всего имеет дискретный спектр. Если он не зависит от времени, то измерение энергии может дать нам лишь одно из значений энергии E_n . Т.е. если $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, то вероятность получить E_n равна $|c_n|^2$.

Задание 1.8. Найти собственные значения и нормированные волновые функции оператора \hat{L}_z в сферических координатах.

Решение. Выпишем выражение для собственного значения (1.3), подставив туда оператор \hat{L}_z в сферических координатах, и решим получившееся уравнение:

$$-i\hbar \frac{d\Psi}{d\varphi} = a\Psi \rightarrow \frac{d\Psi}{\Psi} = i\frac{a}{\hbar} d\varphi \rightarrow \Psi(\varphi) = Ae^{i\frac{a}{\hbar}\varphi}.$$

Поскольку $\Psi(\varphi) = \Psi(\varphi + 2\pi)$, то $e^{i2\pi n} = 1$. Равенство выполняется при $a/\hbar = 0; \pm 1; \pm 2; \dots$ Обозначим $\frac{a_n}{\hbar}$ через n . То есть собственные значения \hat{L}_z могут принимать только значения $a_n = n\hbar$, где n – целое число.

Волновая функция теперь может быть записана как $\Psi(\varphi)_n = Ae^{in\varphi}$. Найдем из условия нормировки (1.1) константу A :

$$\int_0^{2\pi} |\Psi|^2 d\varphi = A^2 \cdot 2\pi \rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}.$$

Следовательно, собственные функции оператора импульса

$$\Psi_n(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{in\varphi} \quad (1.6)$$

1.3.3. Непрерывный спектр. Приведенные соотношения могут быть обобщены на случай непрерывного спектра, тогда волновая функция Ψ будет разложена в интеграл по полной системе собственных функций Ψ_a величины a с непрерывным спектром

$$\Psi(\xi) = \int c_a \Psi_a(\xi) da, \quad \text{где } c_a = \int \Psi_a^*(\xi) \Psi(\xi) da.$$

Интегрирование производится по всей области значений, которые может принимать величина a .

Условие ортонормированности собственных функций непрерывного спектра запишется с использованием дельта-функции Дирака (см. Приложение В)

$$\int \Psi_a^* \Psi_{a'} da = \delta(a - a') \quad (1.7)$$

Собственные функции сплошного спектра не обращаются в нуль на бесконечности и поэтому квадратично не интегрируемы. Поэтому условие нормировки уже не может быть записано в виде (1.1).

Вместо этого функции нормируют таким образом, чтобы $|c_a|^2 da$ представляла собой вероятность рассматриваемой физической величине иметь в состоянии, описываемом волновой функцией Ψ , значение в заданном интервале a и $a + da$ [5]. Для этого удобно нормировать на δ -функцию Дирака, в таком случае условие нормировки будет выражено аналогично условию ортогональности (1.7) [1].

Пример 1.13. Предположим, что проводится измерение позиции свободной частицы и результатом измерения оказывается величина $x = x'$. Измерение значения координаты x , которое дало значение x' , приводит частицу в состояние, описываемое собственной функцией \hat{x} , соответствующее собственному значению x' . Уравнение (1.3) запишется в этом случае как

$$\hat{x}\delta(x - x') = x'\delta(x - x'),$$

где собственной функцией оператора координаты \hat{x} является дельта-функция Дирака.

Видно, во-первых, что собственные значения оператора координаты образуют непрерывный спектр от $-\infty$ до ∞ , и при измерении координаты волновая функция частицы будет «схлопываться» в дельта-функ-

цию, сосредотачиваясь в окрестностях точки измерения (подробнее вопрос «схлопывания» рассмотрен в главе ??). Во-вторых, видно что действие \hat{x} на функцию $f(x)$ представляет собой умножение на x , т.е. $\hat{x}f(x) = xf(x)$.

Пример 1.14. Вероятность при измерении координаты x получить значение, лежащее в интервале $(a, a + \Delta a)$, если Ψ нормирована, равна

$$P_{a, a+\Delta a} = \Delta a \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, y, z, t)|^2 dy dz$$

Или же, вероятность обнаружения частицы в момент времени t в элементе объема $d\tau$, содержащем точку с координатами (x, y, z) , равна $|\Psi(x, y, z, t)|^2 d\tau$.

1.4. Среднее значение

Для любой физической величины A возможен ряд результатов измерений этой величины, имеющих определенную вероятность. Рассмотрим «среднее значение» $\langle A \rangle$ величины A (т.е. математическое ожидание), которое мы получили бы путем проведения ряда опытов по измерению рассматриваемой величины, для каждого из которых поведение системы описывается волновой функцией Ψ .

Если собственные значения образуют дискретный спектр a_n , то среднее значение

$$\langle A \rangle = \sum_n a_n |c_n|^2, \text{ где } c_n = \int \Psi_n^* \Psi d\xi.$$

Напоминаем, что $|c_n|^2$ – вероятность получения n -го значения.

В обобщении на случай непрерывного спектра для нормированной волновой функции Ψ среднее значение

$$\langle A \rangle = \int \Psi^* \hat{A} \Psi d\xi, \quad (1.8)$$

т.е. надо выбрать оператор, соответствующий интересующей нас величине, применить его к волновой функции Ψ , полученное выражение умножить на комплексно-сопряженную Ψ^* и проинтегрировать по области определения функции.

В случае нахождения среднего значения для ненормированной функции, что часто имеет место при бесконечных пределах интегриро-

вания, интеграл (1.8) нужно дополнительно поделить на нормировочный интеграл:

$$\langle A \rangle = \frac{\int \Psi^* \hat{A} \Psi d\xi}{\int \Psi^* \Psi d\xi}. \quad (1.9)$$

Помимо среднего значения характеристикой физической величины является дисперсия

$$\sigma_A^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2, \quad (1.10)$$

где $\langle A^2 \rangle = \sum_n a_n^2 |c_n|^2$ для дискретного спектра и $\langle A^2 \rangle = \int_V \Psi^* \hat{A}^2 \Psi d\xi$ – для непрерывного. Квадратный корень из дисперсии называется среднеквадратичным отклонением σ .

Среднее значение эрмитова оператора всегда вещественно, а дисперсия всегда больше либо равна нулю. Среднее значение измеряемой величины в выбранном состоянии, если разложение проведено по его собственным функциям, будет равно её собственному значению в этом состоянии:

$$\langle A_m \rangle = \int \Psi_m^* \hat{A} \Psi_m d\xi = A_m.$$

Дисперсия для такого значения всегда равна нулю [1].

Пример 1.15. Средние значения операторов координаты и импульса в одномерном случае определяются выражениями

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* x \Psi dx \quad \text{и} \quad \langle p_x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \hat{p}_x \Psi dx = (-i\hbar) \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx.$$

Средние значения, соответствующие потенциальной и кинетической энергии:

$$\langle U \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* U \Psi dx \quad \text{и} \quad \langle E_k \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \hat{E} \Psi dx = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \right) \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} dx.$$

Пример 1.16. Поведение частицы, находящейся на интервале $x \in (0, b)$, задано функцией $\Psi(x) = ax(b - x)$. Найдем ожидаемое значение координаты частицы и её кинетической энергии.

$$\langle x \rangle = \int_0^b ax(b-x) \cdot x \cdot ax(b-x) dx = a^2 \int_0^b (b^2 x^3 - 2bx^4 + x^5) dx = a^2 \frac{b^6}{60}$$

Это ненормированное значение. Найдем нормировочный коэффициент:

$$\int_0^b (ax(b-x))^2 dx = a^2 \int_0^b (b^2x^2 - 2bx^3 + x^4) dx = a^2 \frac{b^5}{30},$$

Нормированное значение $\langle x \rangle = b/2$, или середина интервала, что и следовало ожидать. Средняя энергия

$$\langle E_k \rangle = \int_0^b ax(b-x) \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} ax(b-x) dx = 2a^2 \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^b (xb - x^2) dx = \frac{a^2 \hbar^2 b^3}{6m}$$

С учетом нормировки $\langle E_k \rangle = a^2 \hbar^2 / 5mb^2$.

Пример 1.17. Частица находится в состоянии

$$\Psi(x) = \frac{3\Psi_1 + 4\Psi_2}{\sqrt{25}},$$

состоянию Ψ_1 соответствует энергия E_1 , состоянию Ψ_2 – E_2 . При измерении энергии системы Ψ с вероятностью $9/25$ будет получено значение E_1 и с вероятностью $16/25$ – E_2 . Среднее значение энергии $\langle E \rangle = (9/25)E_1 + (16/25)E_2$.

Задание 1.9. Частица находится в состоянии, описываемом волновой функцией

$$\Psi(x) = (\cos \chi)e^{ikx} + (\sin \chi)e^{-ikx}, \text{ где } \chi - \text{ константа.}$$

а) Какова вероятность того, что частица будет обнаружена с импульсом, равным $\hbar k$? А с импульса $-\hbar k$?

б) Как будет записана волновая функция, если известно, что с вероятностью 90% регистрируется величина $\hbar k$? Напоминание – e^{ikx} является собственной функцией оператора \hat{p}_x с собственным значением $\hbar k$.

в) Оцените кинетическую энергию частицы. Указание – функцию непосредственно не нормировать, воспользоваться (1.9).

Ответ. б) $\Psi(x) = 0.95e^{ikx} + 0.32e^{-ikx}$, в) $\langle T_x \rangle = \hbar^2 k^2 / 2m$.

Задание 1.10. Вычислите среднее значение импульса $\langle \hat{p}_x \rangle$ частицы, описываемой следующими волновыми функциями:

а) e^{ikx} , б) $\cos kx$, в) e^{-ax^2} , во всех случаях $x \in (-\infty, +\infty)$.

Указание – функцию непосредственно не нормировать, воспользоваться (1.9).

Ответ. а) $k\hbar$ (что естественно, поскольку e^{ikx} является собственной функцией оператора \hat{p}_x с собственным значением $\hbar k$), б) 0, это не должно удивлять, поскольку $\cos kx = (e^{ikx} + e^{-ikx})/2$, что представляет собой сумму двух одинаковых встречных волн с одинаковой амплитудой, в) 0, тот же случай – система с симметричной волновой функцией обладает нулевым средним импульсом.

Задание 1.11. Имеется гауссово распределение

$$\psi(x) = Ae^{-\lambda(x-a)^2},$$

где A, a и λ – положительные действительные константы. Из условия нормировки найти A . Также найти $\langle x \rangle$, $\langle x^2 \rangle$, σ_x [3].

Указание – в этой и нескольких последующих задачах воспользоваться табличными интегралами (см., например, Приложение Е или [6]).

Ответ. $A^2 = \sqrt{2\lambda/\pi}$, $\langle x \rangle = a$ (что логично, т.к. функция симметрична относительно a), $\langle x^2 \rangle = a^2 + 1/4\lambda$, $\sigma_x^2 = 1/4\lambda$.

Задание 1.12. Волновая функция основного состояния атома водорода имеет вид $\Psi(r) = Ae^{-r/a_0}$, где a_0 – первый боровский радиус ($a_0 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/me^2$), m – масса электрона, e – заряд электрона, A – нормировочная константа. Потенциальная энергия взаимодействия электрона с ядром $U(r) = -e^2/r$. Определить A и среднее значение потенциальной энергии $\langle U \rangle$.

Решение.

$$\int |\Psi|^2 dV = \int_0^{+\infty} |\Psi(r)|^2 4\pi r^2 dr = 4\pi A^2 \int_0^{+\infty} e^{-2r/a_0} r^2 dr = 4\pi A^2 \frac{2a_0^3}{8} = \pi A^2 a_0^3,$$

следовательно $A = 1/\sqrt{\pi a^3}$. Среднее значение потенциальной энергии

$$\begin{aligned} \langle U \rangle &= \int_0^{+\infty} Ae^{-r/a_0} \left(\frac{-e^2}{r} \right) Ae^{-r/a_0} \cdot 4\pi r^2 dr = (-e^2) 4\pi A^2 \int_0^{+\infty} e^{-2r/a_0} r dr = \\ &= (-e^2) A^2 4\pi \frac{a_0^2}{4} = -A^2 \pi e^2 a_0^2 = \frac{-1}{\pi a_0^3} A^2 \pi e^2 a_0^2 = \frac{-e^2}{a_0} \end{aligned}$$

Задание 1.13. Дана волновая функция $\Psi(x, t) = Ae^{-\lambda|x|}e^{-i\omega t}$, где A , λ и ω – положительные действительные константы. Определить A , $\langle x \rangle$ и $\langle x^2 \rangle$, найти среднее квадратичное отклонение σ координаты x , определить вероятность найти частицу вне интервала $(\langle x \rangle - \sigma, \langle x \rangle + \sigma)$. При решении обратить внимание на четность подинтегральных функций [3].

Решение. Найдем нормировочный коэффициент

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} Ae^{-\lambda|x|}e^{+i\omega t} \cdot Ae^{-\lambda|x|}e^{-i\omega t} dx &= A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\lambda|x|} dx = 2A^2 \int_0^{\infty} e^{-2\lambda x} dx = \\ &= 2A^2 \cdot \frac{1}{2\lambda} = \frac{A^2}{\lambda} \Rightarrow A = \sqrt{\lambda}. \end{aligned}$$

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} Ae^{-\lambda|x|}e^{+i\omega t} \cdot x \cdot Ae^{-\lambda|x|}e^{-i\omega t} dx = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\lambda|x|} x dx = 0,$$

поскольку под знаком интеграла стоит произведение четной и нечетной функции, дающее нечетную функцию.

$$\langle x^2 \rangle = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\lambda|x|} x^2 dx = 2A^2 \int_0^{\infty} e^{-2\lambda x} x^2 dx = 2A^2 \cdot \frac{2}{(2\lambda)^3} = \frac{4\lambda}{8\lambda^3} = \frac{1}{2\lambda^2}.$$

$$\text{Дисперсия } \sigma_x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \sqrt{\langle x^2 \rangle} = 1/\sqrt{2}\lambda.$$

Вероятность $\omega_{x \in (-\sigma_x, +\sigma_x)} =$

$$= A^2 \int_{-\sigma_x}^{+\sigma_x} e^{-2\lambda|x|} dx = 2\lambda \int_0^{+\sigma_x} e^{-2\lambda x} dx = \frac{2\lambda}{-2\lambda} e^{-2\lambda x} \Big|_0^{\sigma_x} = -e^{-2\lambda \cdot \frac{1}{\sqrt{2}\lambda}} + 1 \approx 75,7\%.$$

Задание 1.14. Частица с массой m совершает одномерное движение на интервале $(0; l)$, её волновая функция $\Psi(x) = A \sin(\pi x/l)$. Найти A , $\langle x \rangle$, $\langle p_x \rangle$ и $\langle E \rangle$.

Решение.

$$\int_0^l A^2 \sin^2\left(\frac{\pi x}{l}\right) dx = \frac{A^2 l}{2}, \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{l}}.$$

$$\langle x \rangle = \int_0^l \Psi^* \hat{x} \Psi dx = A^2 \int_0^l x \sin^2 \frac{\pi x}{l} dx = \frac{l}{2}.$$

$$\langle p_x \rangle = \int_0^l \Psi^* \hat{p}_x \Psi dx = A^2 \int_0^l \sin \frac{\pi x}{l} (-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x} \sin \frac{\pi x}{l} dx = 0.$$

$$\langle E \rangle = \int_0^l \Psi^* \hat{E} \Psi dx = A^2 \int_0^l \sin \frac{\pi x}{l} \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \sin \frac{\pi x}{l} dx = \frac{2\hbar^2 \pi^2}{4ml^2}.$$

Задание 1.15. Частица с массой m совершает одномерное движение, в момент времени $t = 0$ находится в состоянии $\Psi(x) = Ae^{-\frac{x^2}{a^2} + ikx}$, где A , k и a – постоянные. Найти A , $\langle x \rangle$, $\langle p_x \rangle$ и $\langle E \rangle$. Обратить внимание на четность подинтегральных функций.

Решение.

$$A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\left(-\frac{x^2}{a^2} - ikx\right)} \cdot e^{\left(-\frac{x^2}{a^2} + ikx\right)} dx = A^2 a \sqrt{\frac{\pi}{2}}, \Rightarrow A^2 = \sqrt{\frac{2}{a^2 \pi}}.$$

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \hat{x} \Psi dx = A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} x \cdot e^{-\frac{2x^2}{a^2}} dx = 0,$$

поскольку под интегралом – нечетная функция, образованная произведением четной и нечетной функций.

$$\langle p_x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \hat{p}_x \Psi dx = -i\hbar A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\left(-\frac{x^2}{a^2} - ikx\right)} \frac{\partial}{\partial x} e^{\left(-\frac{x^2}{a^2} + ikx\right)} dx = k\hbar.$$

$$\langle E \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \hat{E} \Psi dx = \frac{-\hbar^2 A^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\left(-\frac{x^2}{a^2} - ikx\right)} \frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{\left(-\frac{x^2}{a^2} + ikx\right)} dx = \frac{\hbar^2}{4m} \left(\frac{1}{a^2} - k^2 \right).$$

Задание 1.16. Плоский ротор (система из материальной точки или физического тела, вращающегося относительно неподвижного центра) находится в состоянии, описываемом волновой функцией $\Psi(\varphi) = A \cos^2 \varphi$. Найти распределение проекции момента количества движения на ось Z , а также среднее значение и среднеквадратичное отклонение этой величины.

Решение. Сперва найдем константу A :

$$\int_0^{2\pi} |\Psi|^2 d\varphi = A^2 \int_0^{2\pi} \cos^4 \varphi d\varphi = A^2 \left(\frac{3}{8}\varphi + \frac{\sin 2\varphi}{4} + \frac{\sin 4\varphi}{32} \right) \Big|_0^{2\pi} = A^2 \frac{3\pi}{4}$$

Отсюда $A = \frac{2}{\sqrt{3\pi}}$. Ортонормированный набор функций по оператору \hat{L}_z известен из уравнения (1.6) – $\Psi_n = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{in\varphi}$, найдем коэффициенты разложения функции по ним, разложив $\cos \varphi$ по формуле Эйлера:

$$c_n = \int_0^{2\pi} \Psi^* \Psi_n d\varphi = \frac{2}{\sqrt{3\pi}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{2\pi} \cos^2 \varphi e^{in\varphi} d\varphi = \frac{2}{\sqrt{3\pi}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot \frac{1}{4} \int_0^{2\pi} e^{i2\varphi} \cdot (e^{i2\varphi} + 2 + e^{-i2\varphi}) d\varphi = \frac{1}{2\pi\sqrt{6}} \int_0^{2\pi} (e^{i(n+2)\varphi} + 2e^{i(n+0)\varphi} + e^{i(n-2)\varphi}) d\varphi.$$

Рассмотрим подынтегральные слагаемые по-отдельности. Каждое из них обращает свою часть интеграла в 2π , если разность в степенной скобке обращается в ноль, и обращает свою часть интеграла в ноль при любой степени, отличной от нуля. Т.е.

$$\int_0^{2\pi} e^{i\varphi(n-k)} d\varphi = \begin{cases} 2\pi, & \text{если } n = k \\ 0, & \text{если } n \neq k \end{cases}$$

Такую запись можно заменить на символы Кронекера $\delta_{n,k}$ (см. (Б.1)), тогда коэффициенты разложения запишутся как

$$c_n = \frac{2\pi(\delta_{n,-2} + 2\delta_{n,0} + \delta_{n,2})}{2\pi\sqrt{6}} = \frac{\delta_{n,-2} + 2\delta_{n,0} + \delta_{n,2}}{\sqrt{6}}$$

Таким образом, от нуля отличны коэффициенты $c_{-2} = 1/\sqrt{6}$, $c_0 = 2/\sqrt{6}$ и $c_2 = 1/\sqrt{6}$. Сумма их квадратов, как и полагается, равна 1. Найдем среднее значение n :

$$\langle n \rangle = \sum_{-\infty}^{+\infty} n |c_n|^2 = \frac{1}{6}(-2 \cdot 1 + 0 \cdot 4 + 2 \cdot 1) = 0$$

Дисперсия величины n , поскольку $\langle n \rangle = 0$, равна

$$\sigma_n = \sqrt{\langle n^2 \rangle} = \sqrt{\sum_{-\infty}^{+\infty} n^2 |c_n|^2} = \sqrt{\frac{1}{6}(4 \cdot 1 + 0 \cdot 4 + 4 \cdot 1)} = \sqrt{\frac{4}{3}} = \frac{2}{\sqrt{3}}.$$

1.5. Коммутаторы

Коммутатором двух операторов \hat{A} и \hat{B} называют разность $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, которую обозначают $[\hat{A}, \hat{B}]$. Запись $\hat{A}\hat{B}$ означает, что сперва выполняется преобразование \hat{B} , а затем – преобразование \hat{A} . Два оператора коммутируют, если их коммутатор равен нулю. Неравенство нулю коммутатора двух операторов указывает на то, что результат преобразований зависит от порядка, в котором они выполняются. Например, умножение функции на координату и последующее дифференцирование не равносильно умножению после дифференцирования, коммутатор этих операторов равен единице:

$$\left[\frac{d}{dx}, x \right] f(x) = \frac{d(xf(x))}{dx} - x \frac{df(x)}{dx} = f(x) \frac{dx}{dx} + x \frac{df(x)}{dx} - x \frac{df(x)}{dx} = 1 \cdot f(x).$$

Обратим внимание на то, что коммутатор, также являясь оператором, не действует абстрактно, поэтому необходимо действовать им на какую-нибудь «тестовую» функцию, например $f(x)$.

Практическое значение коммутаторов связано, во-первых, с тем, что собственные функции одного оператора являются также собственными функциями другого оператора, с которым он коммутирует. Во-вторых, для физических величин, соответствующих некоммутируемым операторам, существует теоретический предел точности одновременно измерения (или принцип неопределенности, см. главу 1.6).

Пример 1.18. Коммутатор координаты и импульса, вычисленный еще Гейзенбергом в 1925 году:

$$\begin{aligned} [\hat{x}, \hat{p}_x] \psi &= \hat{x} \hat{p}_x \psi - \hat{p}_x \hat{x} \psi = x(-i\hbar) \frac{\partial \psi}{\partial x} + i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (x\psi) = \\ &= -i\hbar x \frac{\partial \psi}{\partial x} + i\hbar x \frac{\partial \psi}{\partial x} + i\hbar \psi \frac{\partial x}{\partial x} = i\hbar \psi. \end{aligned} \quad (1.11)$$

Опуская в конце вычислений «тестовую» функцию, получим канонический коммутатор

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar.$$

Пример 1.19. Покажем, что $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]$:

$$\begin{aligned} [\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] &= \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} = \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} + \hat{B}\hat{A}\hat{C} - \hat{B}\hat{A}\hat{C} = \\ &= (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\hat{C} + \hat{B}(\hat{A}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}) = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] \end{aligned}$$

Задание 1.17. Докажите следующие соотношения:

- а) $[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}]$,
 б) $[\hat{A} + \hat{B}, \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{B}, \hat{C}]$.

- Задание 1.18.** Вычислите коммутаторы а) $[\hat{x}^2, \hat{p}_x]$, б) $[\hat{x}, \hat{p}_x^2]$,
 в) $\left[\frac{d}{dx}, \frac{d}{dy}\right]$, г) $\left[\frac{d^2}{dx^2}, x^2\right]$, д) $\left[\frac{d^2}{dx^2}, x^3\right]$.

Ответ. а) $2i\hbar\hat{x}$, б) $2i\hbar\hat{p}_x$, в) 0, г) $2 + 4x d/dx$, д) $6x + x^2 d/dx$.

Задание 1.19. Вычислите коммутаторы

- а) $[\hat{L}_x, \hat{L}_y]$, б) $[\hat{L}_x, \hat{y}]$, в) $[\hat{L}_x, \hat{p}_y]$, г) $[\hat{p}_x, \hat{L}_z]$, д) $[\hat{L}_x, \hat{L}_z]$.

Ответ. а) $i\hbar\hat{L}_z$, б) $i\hbar z$, в) $\hbar\hat{p}_z$, г) $-i\hbar\hat{p}_y$, д) $i\hbar\hat{L}_y$.

Задание 1.20. Вычислите коммутаторы а) $[\hat{x}, \hat{H}]$ и б) $[\hat{p}_x, \hat{H}]$, где гамильтониан $\hat{H} = \hat{E}_k(x) + U(x)$.

Ответ. а) $2i\hbar\hat{p}_x$, б) $\frac{\hbar}{i} \frac{dU(x)}{dx}$.

Задание 1.21. Покажите, что коммутаторы произвольной функции координат $f(x)$ и оператора импульса имеют вид $[f, p_x] = i\hbar \frac{\partial f}{\partial x}$.

Решение:

$$\begin{aligned} [f(x), p_x] g(x) &= -i\hbar \left(f \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} f \right) g = -i\hbar \left(f \frac{\partial g}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} (f \cdot g) \right) = \\ &= -i\hbar \left(f \frac{\partial g}{\partial x} - \left(f \frac{\partial g}{\partial x} - g \frac{\partial f}{\partial x} \right) \right) = -i\hbar \left(-g \frac{\partial f}{\partial x} \right) = i\hbar \frac{\partial f(x)}{\partial x} \cdot g(x). \end{aligned}$$

1.6. Принцип неопределенности

В труде 1927 г. Гейзенберг показал, что измерение положения частицы неизбежно приводит к погрешностям в определении импульса частицы, что эта погрешность связана с некоммутуируемостью операторов \hat{x} и \hat{p} , и дал качественную формулировку:

$$\Delta x \Delta p \gtrsim h$$

Более строгая формулировка дана в том же году Кеннардом, показавшим, что если под неточностями понимать дисперсии, полученные при многократном проведении измерений координаты и импульса частицы в наборе одинаковых систем, то будет иметь место соотношение

$$\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}.$$

В общем виде принцип неопределенности для двух физических величин A и B , значение которых регистрируется в серии измерений, поставленных в одинаковых условиях, записывается как

$$\sigma_A \sigma_B \geq \left| \frac{1}{2i} \langle [A, B] \rangle \right|$$

или в виде альтернативных неравенств [1].

Принцип неопределенности устанавливает теоретический предел точности одновременного измерения некоммутирующих величин и является одним из фундаментальных принципов квантовой механики.

Задание 1.22. Частица с массой m находится в состоянии

$$\Psi(x, t) = A e^{-a[(mx^2/\hbar) + it]},$$

где A и a – положительные действительные константы. Найти A , $\langle x \rangle$, $\langle x^2 \rangle$, $\langle p \rangle$ и $\langle p^2 \rangle$. Найти σ_x и σ_p . Удовлетворяет ли их произведение принципу неопределенности?

Ответ. $A = \sqrt[4]{2am/\pi\hbar}$, $\langle x \rangle = 0$, $\langle x^2 \rangle = \hbar/4am$, $\langle p \rangle = 0$ и $\langle p^2 \rangle = am\hbar$, $\sigma_x \sigma_p = \hbar/2$.

Глава 2

УРАВНЕНИЕ ШРЁДИНГЕРА

2.1. Зависящее от времени уравнение Шрёдингера

Изменение чистого состояния во времени (или эволюция), когда над ним не производится измерение, задается уравнением Шрёдингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\xi, t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi(\xi, t). \quad (2.1)$$

В частном случае частицы с массой m , находящейся в потенциальном поле U , уравнение (2.1) будет записано как

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\xi, t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\xi, t) \right] \Psi(\xi, t). \quad (2.2)$$

Такая частица может находиться только в тех состояниях, которые описываются волновыми функциями $\Psi(\xi, t)$, удовлетворяющими уравнению Шрёдингера (2.2).

Из уравнения Шрёдингера следует важное свойство волновых функций – их непрерывность. Так, если потенциал U непрерывен, даже если представляет собой ступенчатую функцию, то непрерывны собственные функции гамильтониана и их производные. В случае, когда потенциал U обращается в бесконечность, свойством непрерывности обладают только сами функции.

Еще одна особенность следует из математических свойств дифференциального уравнения, а именно – если уравнение Шрёдингера имеет несколько решений в виде волновых функций, то сумма этих волновых функций также будет являться решением уравнения Шрёдингера. Это свойство лежит в основе квантовой суперпозиции [1].

Задание 2.1[3]. Частица с массой m находится в состоянии

$$\Psi(x, t) = A e^{-a[(m x^2 / \hbar) + i t]},$$

где A и a – положительные действительные константы. При каких значениях потенциальной энергии $U(x)$ функция Ψ удовлетворяет уравнению Шрёдингера?

Ответ: $U = 2a^2 x^2 m$.

2.1.1. Изменение средних значений во времени. Непосредственное дифференцирование квантово-механических величин по времени не имеет смысла, поскольку невозможно провести два последовательных измерения квантовой системы, не оказав влияние при этом на ее состояние. Однако, если состояния системы $\Psi(\xi, t)$ меняются во времени, то будет меняться и среднее значение измеряемой физической величины A . Используя уравнение Шрёдингера найдем оператор скорости изменения физической величины (теорема Эренфеста).

Пусть $\langle A(t) \rangle$ – среднее значение некоторой физической величины A в состоянии $\Psi(\xi, t)$. Найдем скорость изменения этого среднего значения:

$$\frac{d\langle A(t) \rangle}{dt} = \frac{d}{dt} \left[\int \Psi^* \hat{A} \Psi d\xi \right] = \int \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \hat{A} \Psi d\xi + \int \Psi^* \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \Psi d\xi + \int \Psi^* \hat{A} \frac{\partial \Psi}{\partial t} d\xi.$$

Из уравнения (2.1) $\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar} \hat{H} \Psi^*$ и $\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \Psi$, поэтому

$$\begin{aligned} \frac{d\langle A(t) \rangle}{dt} &= -\frac{1}{i\hbar} \int (\hat{H} \Psi^*) \hat{A} \Psi d\xi + \int \Psi^* \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \Psi d\xi + \frac{1}{i\hbar} \int \Psi^* \hat{A} \hat{H} \Psi d\xi = \\ &= \int \Psi^* \left(\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}, \hat{H}] \right) \Psi d\xi \end{aligned}$$

Отсюда видно, что изменение среднего значения во времени будут задаваться

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle. \quad (2.3)$$

Следствием уравнения (2.3) является то, что если \hat{A} не зависит явно от времени ($\partial \hat{A} / \partial t = 0$) и коммутирует с гамильтонианом системы \hat{H} , то среднее значение величины A сохраняется во времени в любом состоянии Ψ . Такая физическая величина, неизменная во времени в любом состоянии системы Ψ , называется интегралом движения для данной системы. Для операторов, не зависящих от времени, в т.ч. таких как \hat{x} , \hat{r} , \hat{p} , \hat{L} и \hat{H} , условием сохранения физической величины A является $[\hat{A}, \hat{H}] = 0$. Одна и та же величина в одних условиях может быть интегралом движения, а в других – нет. При свободном движении частицы, когда $U(\hat{r}) = const$, величины p_x , p_y и p_z , – интегралы движения, в то время как координата частицы никогда не сохраняется. Практический смысл интегралов движения в том, что они позволяют узнать свойства движения без интегрирования уравнений движения [1].

Пример 2.1. Рассмотрим несколько случаев.

1. Система, в которой присутствует потенциальное поле, постоянное во времени.

$$\frac{d}{dt}\langle E \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{H}] \rangle = 0 \text{ и } \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0,$$

т.е. энергия системы постоянна и является интегралом движения.

2. Потенциальное поле зависит от времени, $\hat{H} = \hat{E} + U(r, t)$:

$$\frac{d}{dt}\langle E \rangle = \frac{d}{dt} [\Psi^* \hat{H} \Psi] = \frac{i}{\hbar} \int \Psi^* [\hat{H} \hat{H} - \hat{H} \hat{H}] \Psi + \int \Psi^* \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} \Psi d\xi = \left\langle \frac{\partial}{\partial t} (\hat{E}_k + \hat{U}) \right\rangle$$

При постоянной кинетической энергии полная энергия системы меняется со скоростью изменения внешнего поля $\left\langle \frac{\partial \hat{U}}{\partial t} \right\rangle$.

3. Движение частицы в пространстве, свободном от полей. Поскольку $[\hat{H}, \hat{p}] = 0$, то $\frac{d}{dt}\langle p \rangle = 0$. Но что насчет $\langle r \rangle$?

$$\frac{d}{dt}\langle x \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{x}] \rangle + \left\langle \frac{\partial x}{\partial t} \right\rangle = \left\langle \frac{i}{\hbar} \cdot \frac{-\hbar^2}{2m} \cdot 2 \frac{d}{dr} \right\rangle + 0 = \left\langle \frac{-i\hbar}{m} \cdot \frac{d}{dx} \right\rangle = \frac{\langle \hat{p} \rangle}{m}$$

что эквивалентно классическому определению импульса $p = mv$.

Пример 2.2. Является ли оператор импульса интегралом движения в сферически симметричном поле $U(|\mathbf{r}|)$?

Решение. В таком поле гамильтониан $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(|\mathbf{r}|)$. Т.к. $U(|\mathbf{r}|)$ м.б. разложена в ряд Тейлора по степеням r , то достаточно проанализировать коммутатор импульса с r и \hat{p}^2 .

$$[\hat{p}^2, \hat{p}] = (-i\hbar)^3 [\nabla^2, \nabla] = (-i\hbar)^3 (\nabla^3 - \nabla^3) = 0, \quad [\hat{r}, \hat{p}] = -i\hbar[\hat{r}, \nabla], \\ [\hat{r}, \nabla]\Psi = r\nabla\Psi - \nabla(r\Psi) = r\nabla\Psi - \Psi\nabla r - r\nabla\Psi = -\Psi\nabla r = -\mathbf{e}_r\Psi,$$

поскольку оператор Гамильтона ∇ в сферических координатах

$$\nabla f = \mathbf{e}_r \frac{\partial f}{\partial r} + \mathbf{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} + \mathbf{e}_\varphi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial f}{\partial \varphi}$$

Следовательно $[\hat{r}, \hat{p}] = i\hbar\mathbf{e}_r \neq 0$. Поскольку \hat{p} коммутирует только с одним из слагаемых гамильтониана, то p – не интеграл движения.

Задание 2.2. Являются ли операторы \hat{p}^2 , \hat{L}_x и \hat{L}_y интегралами движения в сферически симметричном поле $U(|\mathbf{r}|)$?

Задание 2.3. Покажите, что для одномерного случая справедливо равенство

$$m \frac{d\langle x^2 \rangle}{dt} = \langle xp \rangle + \langle px \rangle$$

2.2. Стационарное уравнение Шрёдингера

Полная энергия изолированной системы (а также системы, находящейся в постоянном внешнем поле) не зависит от времени. Поэтому если в данном состоянии энергия имеет определенное значение, то это значение остается постоянным во времени. Такие состояния, в которых энергия имеет определенные значения и не зависит от времени, называются стационарными. Они описываются собственными функциями гамильтониана Ψ_n , а энергия системы является собственным значением гамильтониана E_n :

$$\hat{H}\Psi_n(\xi, t) = E_n\Psi_n(\xi, t). \quad (2.4)$$

Для стационарного состояния можно провести разделение переменных $\Psi_n(\xi, t) = \psi_n(\xi)\varphi_n(t)$, где ψ_n – функция только координат. Если теперь, с учетом разделения переменных, проинтегрировать уравнение (2.1) и расписать в формуле гамильтониан, то получим выражение

$$i\hbar\psi \frac{d\varphi}{dt} = \frac{-\hbar^2}{2m}\varphi\nabla^2\psi + U\psi\varphi \quad \Big| \quad (\psi\varphi) \Rightarrow i\hbar\frac{1}{\varphi}\frac{d\varphi}{dt} = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi}\nabla^2\psi + U$$

Левая часть уравнения зависит от времени, первое слагаемое в правой части зависит только от координат и, по последнему слагаемому, имеет размерность энергии. Обозначим правую часть через энергию E и решим получившееся дифференциальное уравнение методом интегрирования.

$$i\hbar\frac{1}{\varphi}\frac{d\varphi}{dt} = E \rightarrow \int \frac{d\varphi}{\varphi} = \int \frac{E}{i\hbar} dt \rightarrow \ln \varphi = \frac{E}{i\hbar}t + const \rightarrow \varphi = c e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

Теперь видно, что временной частью решения уравнения Шрёдингера является периодическая функция $\varphi(t) = c \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$, а полная, зависящая от времени волновая функция $\Psi_n(\xi, t)$ для стационарного состояния состоит из произведения

$$\Psi_n(\xi, t) = \psi_n(\xi) \cdot e^{-iE_n t/\hbar} \quad (2.5)$$

Малой буквой ψ обозначают волновые функции стационарных состояний без временного множителя, они задаются уравнением

$$\hat{H}\psi_n(\xi) = E_n\psi_n(\xi). \quad (2.6)$$

Это стационарное уравнение Шрёдингера, которое можно интерпретировать как уравнение на собственные значения и функции гамильтониана. Покажем физический смысл собственных значений гамильтониана системы. Если система пребывает в состоянии Ψ_n , то средняя энергия

$$\langle E_n \rangle = \int \Psi_n^* \hat{H} \Psi_n d\xi = \int \psi_n^* E_n \psi_n d\xi = E_n \int \psi_n^* \psi_n d\xi = E_n. \quad (2.7)$$

Собственные значения, таким образом, представляют собой энергию системы. Теперь найдем дисперсию энергии стационарного состояния, описываемого уравнением (2.4), воспользовавшись формулой (1.10):

$$\begin{aligned} \langle E_n^2 \rangle &= \int \psi_n^* \hat{H}^2 \psi_n d\xi = \int \psi_n^* \hat{H} (E_n \psi_n) d\xi = E_n \int \psi_n^* \hat{H} \psi_n d\xi = E_n^2, \\ \sigma_{E_n}^2 &= \langle E_n^2 \rangle - \langle E_n \rangle^2 = E_n^2 - E_n^2 = 0. \end{aligned}$$

Таким образом, для системы, волновая функция которой есть собственная функция гамильтониана, энергия является строго определенной величиной и совпадает с собственным значением, соответствующей этой функции.

Из формулы для полной волновой функции (2.5) видно, что в стационарном состоянии, помимо E , не зависит от времени и пространственное распределение вероятности обнаружения частицы:

$$|\Psi|^2 = \Psi \Psi^* = \psi^2(\xi) e^{-iEt/\hbar} e^{+iEt/\hbar} = \psi^2(\xi).$$

Независящая от времени волновая функция вещественна всегда, кроме нескольких случаев, а именно, когда присутствует магнитное возмущение или материальная система находится в вырожденном состоянии [1].

Задание 2.4. Покажите, что для стационарных состояний постоянная E должна быть вещественной [3].

Указание – запишите E в уравнении (2.5) как сумму $E_0 + i\Gamma$ и покажите, что если условие нормировки должно выполняться для всех t , то $\Gamma = 0$.

2.2.1. Стационарное состояние свободной частицы. Для одиной частицы с массой m уравнение (2.6) запишется как

$$\nabla^2 \psi_n(\xi) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \psi_n(\xi) = 0, \quad (2.8)$$

где E – общая энергия, U – потенциальная энергия, а их разность $(E - U)$ – кинетическая. Уравнение (2.8) имеет конечные во всем пространстве решения при любом положительном значении энергии E . Одиночная частица обладает определенным импульсом \mathbf{p} и кинетической энергией $\mathbf{p}^2/2m$, и для нее решениями уравнения являются собственные функции оператора импульса. В одномерном случае они имеют вид

$$\psi(x) = c e^{i\frac{\mathbf{p}}{\hbar}x} = c e^{\pm i\frac{\sqrt{2m(E-U)}}{\hbar}x}, \quad (2.9)$$

знак зависит от направления движения частицы (импульс \mathbf{p} – векторная величина).

Полным, зависящим от времени решением уравнения (2.1) для свободной частицы является функция

$$\Psi = c e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \mathbf{p}x)}.$$

Каждая такая функция – плоская волна. Частота этой волны равна E/\hbar , ее волновой вектор $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$ (абсолютное значение вектора равно волновому числу k), а соответствующую длину волны $\lambda = 2\pi\hbar/p$ называют дебройлевской длиной волны частицы [1].

Пример 2.3. Найдём вероятность обнаружения частицы, движущейся в пространстве, свободном от полей, в конечной точке. Пусть у частицы масса m и энергия E , она движется вдоль оси абсцисс x в положительном направлении, а потенциальная энергия поля $U = 0$. С учетом волнового числа $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ стационарное уравнение Шрёдингера (2.8) запишется как

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0$$

Решение такого дифференциального уравнения в общем виде может быть записано разными способами, нам подходит вариант $\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$. Поскольку, по условиям задачи, направление движения – положительное, то $B = 0$ и волновая функция $\psi(x) = Ae^{ikx}$. Попробуем найти A из условия нормировки (1.1):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |A|^2 e^{ikx} e^{-ikx} dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx = |A|^2 \cdot 2\infty = 1$$

Отсюда $|A|^2 = \frac{1}{2\infty}$ и $A = 0$. Следовательно вероятность обнаружения частицы в отдельной точке равна нулю.

Тут следует учесть, что ситуация с бесконечными пределами интегрирования довольно искусственная, поэтому обычно либо выбирают конечные пределы, при которых $A \neq 0$, либо применяют нормировку на дельта-функцию.

Теперь найдем среднее значение импульса такой частицы. Поскольку ее волновую функцию нормировать не удалось, воспользуемся формулой нахождения среднего значения для ненормированных функций (1.9)

$$\langle p \rangle = \frac{\int A e^{-ikx} \hat{p}_x A e^{ikx} dx}{\int A e^{-ikx} A e^{ikx} dx} = (-i\hbar)ik \frac{\int A e^{-ikx} A e^{ikx} dx}{\int A e^{-ikx} A e^{ikx} dx} = k\hbar.$$

Задание 2.5. Найдите энергию частицы с массой m , движущейся в пространстве, свободном от полей, вдоль оси x .

Задание 2.6. Можно показать, что E должна превышать минимальное значение $U(x)$ для любой нормализованной функции, являющейся решением уравнения Шрёдингера, независящего от времени [3]. Перепишите уравнение (2.8), приравняв вторую производную остальным слагаемым и предположите, как будет выглядеть функция, имеющая определенную вторую производную? [7]

2.2.2. Плотность потока вероятности. Вектор

$$\mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi) \quad (2.10)$$

называется вектором плотности потока вероятности [5]. Интеграл от этого вектора по поверхности есть вероятность того, что в течение единицы времени частица пересечет эту поверхность.

Пример 2.4. Волновая функция свободного движения может быть нормирована так, чтобы она описывала поток частиц с равной единице плотностью (т.е. в единицу времени через единичную площадку будет проходить в среднем по одной частице) [5]. Такая функция

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{v}} e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x})},$$

где v – скорость частицы. Действительно, подставив эту функцию в 2.10, получим $\mathbf{j} = \mathbf{p}/mv$, т.е. единичный вектор в направлении движения.

Задание 2.7. Выведите нормировочный коэффициент A частицы, летящей вдоль оси x , используя формулу вероятности и полагая, что плотность потока вероятности $j_x = 1$ [8].

Решение.

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

поскольку функция – собственная оператора импульса. Аналогично для Ψ^* .

$$j_x = A^2 \frac{p}{m} \Psi \Psi^*$$

Отсюда следует $A = \sqrt{m/p} = \sqrt{1/v}$.

2.2.3. Суперпозиция стационарных состояний. Рассмотрим стационарное уравнение (2.6). Любая функция ψ может быть выражена в виде линейной комбинации собственных функций гамильтониана, поэтому общим решением уравнения является суперпозиция стационарных состояний $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots$, каждое из которых связано с уровнями энергии E_1, E_2, E_3, \dots :

$$\hat{H}\psi(\xi) = \hat{H} \left(\sum_n c_n \psi_n(\xi) \right) = \sum_n c_n E_n \psi_n(\xi),$$

где каждому уровню энергии E_1, E_2, E_3, \dots соответствуют различающиеся волновые функции вида (2.5), поэтому можно записать, что полное уравнение Шрёдингера для стационарных состояний (2.4) имеет решение в виде линейной комбинации стационарных состояний

$$\Psi(\xi, t) = \sum_n c_n \psi_n(\xi) e^{-iE_n t/\hbar}, \quad (2.11)$$

где c_n – некоторые комплексные константы, которые можно найти, используя волновую функцию, взятую в произвольный момент времени t_0 , с помощью соотношения, аналогичного (1.4), а именно

$$c_n = \int \psi_n^* e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} \Psi_n(\xi, t_0) d\xi$$

Теперь рассмотрим волновую функцию системы, являющуюся суперпозицией двух собственных функций ψ_1 и ψ_2

$$\Psi(\xi, t) = c_1 \psi_1(\xi) e^{-iE_1 t/\hbar} + c_2 \psi_2(\xi) e^{-iE_2 t/\hbar}$$

и проанализируем, как ведет себя энергия такой двухуровневой системы [9]. Если воспользоваться выражением (1.8) для вычисления среднего значения энергии, то мы получим, что

$$\langle E \rangle = \int \psi^* \hat{H} \psi d\xi = \int (c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2)^* \hat{H} (c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2) d\xi = |c_1|^2 E_1 + |c_2|^2 E_2$$

вследствие ортогональности собственных функций (1.5). Т.е. средняя энергия системы не зависит от времени и определяется значениями энергии в собственных состояниях, взятых с соответствующими весами. Однако, если аналогичным (1.10) способом вычислить среднеквадратичное отклонение энергии, то найдем

$$\begin{aligned} \langle E^2 \rangle &= \int (c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2)^* \hat{H}^2 (c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2) d\xi = |c_1|^2 E_1^2 + |c_2|^2 E_2^2, \\ \sigma_E^2 &= \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = |c_1|^2 E_1^2 + |c_2|^2 E_2^2 - |c_1|^4 E_1^2 - |c_2|^4 E_2^2 - 2|c_1|^2 |c_2|^2 E_1 E_2 = \\ &= |c_1|^2 E_1^2 (1 - |c_1|^2) + |c_2|^2 E_2^2 (1 - |c_2|^2) - 2|c_1|^2 |c_2|^2 E_1 E_2 = |c_1|^2 |c_2|^2 (E_1 - E_2)^2 \end{aligned}$$

откуда видно, что энергия более не является строго определенной величиной (хотя и остается независимой от времени).

Полное значение энергии системы можно найти по формуле среднего значения для дискретного спектра

$$\langle H \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 E_n,$$

но можно найти и из формулы для непрерывного спектра, они эквивалентны [1]:

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= \int \Psi^* \hat{H} \Psi d\xi = \int \left(\sum c_m \psi_m \right)^* \hat{H} \left(\sum c_n \psi_n \right) d\xi = \\ &= \sum \sum c_m^* c_n E_n \int \psi_m^* \psi_n d\xi = \sum |c_n|^2 E_n. \end{aligned}$$

Пример 2.5. Предположим, что мы реализовали суперпозицию двух нижних уровней системы, и вклад каждого состояния одинаков. Волновая функция будет выглядеть как

$$\Psi = \Psi_1 + \Psi_2$$

Нормализуем эту функцию:

$$\begin{aligned} \int |\Psi|^2 d\xi &= \int (\Psi_1 + \Psi_2)^* (\Psi_1 + \Psi_2) d\xi = \\ &= \int (\Psi_1^* \Psi_1 + \Psi_1^* \Psi_2 + \Psi_2^* \Psi_1 + \Psi_2^* \Psi_2) d\xi = (1 + 0 + 0 + 1) = 2, \end{aligned}$$

поскольку собственные функции ортонормированы и интеграл их взаимного перекрытия обращается в ноль. Таким образом, нормализованная функция будет

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_1 + \Psi_2).$$

Теперь покажем, как зависят от времени ожидаемые значения такой системы:

$$\begin{aligned} \int \Psi^* \hat{A} \Psi d\xi &= \frac{1}{2} \int (\Psi_1 + \Psi_2)^* \hat{A} (\Psi_1 + \Psi_2) d\xi = \\ &= \frac{1}{2} \int (\psi_1^* \hat{A} \psi_1 + \psi_2^* \hat{A} \psi_2 + \psi_1^* \hat{A} \psi_2 e^{-i(E_2 - E_1)t/\hbar} + \psi_2^* \hat{A} \psi_1 e^{i(E_2 - E_1)t/\hbar}) d\xi = \\ &= \frac{\langle A_1 \rangle + \langle A_2 \rangle}{2} + \int \psi_1^* \hat{A} \psi_2 d\xi \cdot \cos\left(\frac{E_2 - E_1}{\hbar} t\right). \end{aligned}$$

Среднее значение такой величины будет средним значением двух состояний плюс слагаемое, осциллирующее во времени с частотой, пропорциональной разности энергий. Если измерение проводится за время, малое по сравнению с этим характерным временем $\tau \sim \hbar/(E_2 - E_1)$, то средние значения измеряемых величин будут очень близки между собой, в противном случае они могут значительно различаться. Временной интервалом τ , в течение которого свойства системы существенным образом изменяются, можно связать с неопределенностью измеренной в системе энергии σ_E^2 (соотношение неопределенности для времени и энергии).

Осцилляции в квантовых системах встречаются довольно широко. Чаще всего они возникают под действием внешнего (например, лазерного) поля, а не вследствие суперпозиции. Но, например, в газовом лазере перемешивание лазерным полем основного и возбужденного состояния приводит атом в состояние суперпозиции, сохраняющееся некоторое время вне резонатора. Суперпозиция приводит к асимметрии зарядового облака и создает атомный дипольный момент.

2.3. Потенциальные ямы

Классической задачей, иллюстрирующей свойства уравнения Шрёдингера, являются задача для одиночной частицы, находящейся в потенциальной яме, т.е. некоторой области пространства, в которой потенциальная энергия частицы меньше, чем вне ее. Довольно долгое время эта задача, демонстрирующая дискретность уровней энергии и зависимость их положения от геометрии ямы, носила довольно абстрактный характер – искусственных структур, в которых могли бы

проявиться такие свойства, создано не было, а энергетический спектр энергии в атоме, также носящий дискретный характер, подчинялся другому закону (из-за отличной формы ямы). Однако в настоящее время такие искусственные структуры, оптические и электронные свойства которых задаются размерами и формой, широко используются в микро-, оптоэлектронике и других областях науки и производства [1].

2.3.1. Одномерная потенциальная яма бесконечной глубины.

Найдем волновые функции и энергетические уровни стационарных состояний частицы в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками (рис. 2.1). Такая яма описывается функцией

$$\begin{cases} U(x) = \infty, & x < 0 \\ U(x) = 0, & 0 < x < a \\ U(x) = \infty, & x > a \end{cases}$$

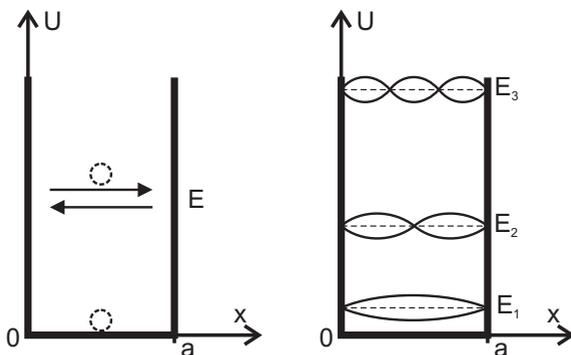


Рис. 2.1. Частица в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Слева – классическая модель, справа – квантовая (пучности отражают распределение волновой функции)

Волновая функция стационарного состояния $\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-t\frac{E}{\hbar}}$, ее пространственная часть $\psi(x)$ удовлетворяет стационарному уравнению Шрёдингера

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0,$$

где $k = \sqrt{2mE}/\hbar$. Решение такого уравнения в общем виде может быть записано как $\psi(x) = A \cos kx + B \sin kx$. Граничные условия дают $\psi(0) = 0$ и $\psi(a) = 0$, теперь можно составить систему уравнений:

$$\begin{cases} \psi(0) = A \cos k0 + B \sin ka = 0 \\ \psi(a) = A \cos ka + B \sin ka = 0 \end{cases}$$

Первое уравнение имеет решение только при $A = 0$, что позволяет упростить второе уравнение системы до

$$B \sin ka = 0.$$

Синус будет обращаться в нуль при $ka = \pi \cdot n$, где n – любое целое число кроме нуля, т.к. при $n = 0$ обратится в нуль $\int |\psi|^2 dx$, что противоречит условию о нахождении в яме частицы. Теперь поведение частицы в яме может быть описано синусоидальными волновыми функциями

$$\psi_n = B \sin\left(\frac{\pi n}{a} x\right). \quad (2.12)$$

Из условия нормировки можно найти коэффициент $B = \sqrt{2/a}$. Заметим, что в зависимости от четности n функция ψ_n становится симметричной (при нечетности уровня) или ассиметричной (при четности) относительно центра ямы. Это свойство присуще всем состояниям с симметричным потенциалом.

Поскольку $k = \sqrt{2mE}/\hbar$, то возможные уровни энергии частицы

$$E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2a^2 m} \quad (2.13)$$

Основные отличия от «классического» поведения – частица имеет строго определенные значения энергии, не может обладать нулевой энергией и, что для нас самое важное, оптические свойства ямы прямо зависят от геометрических, поскольку расстояние между уровнями энергии будет уменьшаться при увеличении ширины ямы. Также видно, что в случае больших n , плотность вероятности нахождения частицы в единице объема, пропорциональная $|\psi|^2$, все больше приближается к классическому постоянному распределению, одинаковому по всему объему.

Также следует указать на разницу между рассмотренной потенциальной ямой и атомом, рассматриваемым с точки зрения потенциальной ямы для электрона. Такая яма, образованная полем ядра атома, может считаться бесконечно глубокой, но ее стенки ямы не вертикальные. Так, в случае атома водорода, форма ямы описывается зависимостью $-e^2/r$.

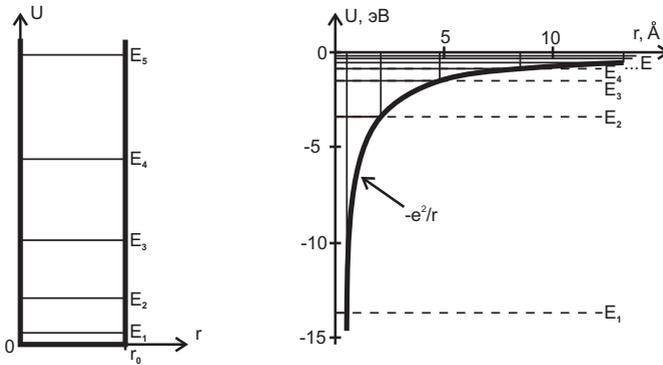


Рис. 2.2. Расположение уровней энергии электрона. Слева – в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками, справа – в атоме водорода

Вследствие этого с увеличением номера расстояние между соседними уровнями не увеличивается, а уменьшается, и с достижением нуля уровни сливаются в одну зону (рис. 2.2).

Задание 2.8[10]. Однократно ионизированную молекулу некоторого органического красителя (рис. 2.3), в которой электрон может двигаться от одного конца цепочки к другому, в некотором приближении можно считать одномерной бесконечно глубокой потенциальной ямой с шириной $8,4 \text{ \AA}$. Расстояние между стенками соответствует расстоянию между атомами азота. Цвет красителя, в нашем случае, определяется переходом $3 \rightarrow 3$. Какого цвета краситель?

Решение. Энергия кванта света, поглощаемого или излучаемого при переходе электрона между уровнями 4 и 3, равна

$$E_{4 \rightarrow 3} = E_4 - E_3 = \frac{\pi^2 \hbar^2 4^2}{2a^2 m} - \frac{\pi^2 \hbar^2 3^2}{2a^2 m} = \frac{\pi^2 \hbar^2 (4^2 - 3^2)}{2a^2 m} = 4,26 \cdot 10^{-19} \text{ (Дж)}.$$

Теперь можно найти длину волны излучения:

$$\lambda = \frac{hc}{E_{2 \rightarrow 3}} = 467 \text{ (нм)}.$$

Это синий цвет.

Задание 2.9. Какого цвета был бы краситель из предыдущей задачи, если бы цвет определялся переходом $2 \rightarrow 1$?

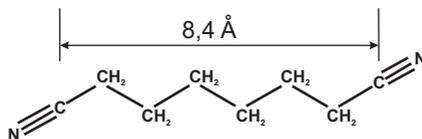


Рис. 2.3. Молекула некоторого органического красителя

Ответ. Он бы не поглощал в видимом диапазоне, поскольку переход находится в инфракрасной области.

Задание 2.10[2]. Некоторые красители являются линейными молекулами, вдоль которых свободно движутся электроны. Рассмотрение энергетических уровней таких систем помогает объяснить цвет подобных пигментов. Рассмотрим молекулы с химической формулой $(C_nH_{n+2})^-$, которые могут представлено как производные молекул полиэтилена, например таких как гексатрин $CH_2 = CH - CH = CH - CH_2$, но обладающих нечетным числом атомов углерода $-CH_2 = CH - CH - CH = CH_2$. Такая молекула будет активным радикалом из-за свободной связи в центре. Электроны, образующие связи между атомами углерода в молекуле, образуют общее электронное облако:



Каждое звено углерода добавляет расстояние $d = 1.4 \text{ \AA}$. В такой структуре $n + 1$ электрон находится в одномерной яме длиной nd . Более точно длина ямы представляется как $L_n = (n + 1)d + 2b$, где b описывает краевые эффекты, но считается, что $b = d/2$ достаточно хорошо описывает ситуацию.

1. В соответствии с принципом Паули, один уровень могут занимать не больше двух электронов. Какова общая энергия основного состояния E_0 и первого возбужденного состояния набора из $n + 1$ электронов?

Воспользоваться выражением $\sum_{k=1}^n k^2 = n(n + 1)(2n + 1)/6$.

2. Запишите выражение для длины волны λ_n поглощения света при переходе между основным и первым возбужденным состоянием. Воспользоваться значением Комптоновской длины волны электрона $\lambda_C = h/(m_e c) = 2.426 \cdot 10^{-12} \text{ нм}$.

3. Экспериментально наблюдается, что молекулы с величиной n , равной 9, 11 и 13 поглощают синий (470 нм), желтый (600 нм) и красный свет (730 нм) соответственно. Эти наблюдения согласуются с

полученной выше формулой? Будут ли ионы с $n < 7$ и $n > 15$ окрашены?

Ответ. 1. Общая энергия при попарном размещении $E_0 \sim (\sum^{k/2} 2k^2)$, или более точно

$$E_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL} 2 \sum_{k=1}^{(n+1)/2} k^2 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{24mL} (n+1)(n+2)(n+3)$$

Разница энергии между первым возбужденным состоянием и основным будет

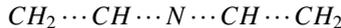
$$\Delta E = E_1 - E_0 = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{mL} \frac{1}{4} ((n+3)^2 - (n+1)^2) = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{mL} (n+2)$$

2. С учетом полученного выражения для ΔE , $h\nu = \Delta E$, $\lambda = c/\nu$ и $L_n = nd$ получим

$$\lambda_n = \frac{8d^2 n^2}{\lambda_c (n+2)} = \frac{646n^2}{n+2}$$

3. Из формулы выше получаем $\lambda_9 = 476$ нм, $\lambda_{11} = 602$ нм и $\lambda_{13} = 728$ нм, что согласуется с экспериментом. Для меньших n длины волн находятся в УФ области (352 и 231 нм для 7 и 5 соответственно), и не окрашены. Для больших n длины волн находятся в ИК диапазоне (855 и 983 нм для 15 и 17 соответственно). Эти ионы также не поглощают видимый свет при переходе между основным и первым состояниями, но тем не менее окрашены из-за переходов в высшие возбужденные состояния.

Задание 2.11[2]. В молекуле, рассмотренной выше, центральная группа CH может быть заменена атомом азота:



Присутствие атома азота не меняет расстояние между атомами, но изменяет общую форму потенциала – добавляется малое возмущение $V(x)$, локализованное вблизи атома азота:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{если } \left| x - \frac{L_n}{2} \right| > \alpha/2 \\ -V_0, & \text{если } \left| x - \frac{L_n}{2} \right| \leq \alpha/2 \end{cases}$$

где $\alpha/d \ll 1$ и $V_0 > 0$.

1. Найдите изменение энергии электронов. В соответствии со стационарной теорией возмущений, поправка к энергии равняется $E_n^{(1)} = \int \psi_n^* \hat{V} \psi_n d\xi$.

2. Экспериментально наблюдается, что для одних и тех же n , спектр азотистой молекулы схож со спектром первоначальной, но длины волн λ_n^N систематически короче (наблюдается синий сдвиг) если $n = 4p + 1$, и систематически длиннее (красный сдвиг) если $n = 4p + 3$ в сравнении с λ_n^0 соответствующего углеродного иона. Разъясните этот феномен.

Решение.

1. Поправка к энергии

$$E^{(1)} = \int V(x) |\psi_k(x)|^2 dx = -V_0 \int_{(L_n - \alpha)/2}^{(L_n + \alpha)/2} |\psi_k(x)|^2 dx$$

Нормализованная волновая функция в яме $\psi_k(x) = \sqrt{2/L_n} \sin(k\pi x/L_n)$. С заменой переменных $y = x - L_n/2$ получаем

$$E^{(1)} = \frac{-2V_0}{L_n} \int_{-\alpha/2}^{+\alpha/2} \sin^2\left(\frac{k\pi y}{nd} + \frac{k\pi}{2}\right) dy$$

Тут есть два случая:

Если k четное, то влиянием поправки можно пренебречь, т.к. значение \sin^2 в окрестностях нуля близко к нулю.

Если k нечетное, то

$$E^{(1)} = \frac{-2V_0}{L_n} \int_{-\alpha/2}^{+\alpha/2} \cos^2\left(\frac{k\pi y}{nd}\right) dy$$

Значение косинуса в окрестностях нуля близко к единице, поэтому $E^{(1)} = -2V_0\alpha < 0$.

Отсюда видно, что нечетные уровни систематически сдвинуты вниз, в то время как четные практически неизменны. Это легко объяснить, т.к. возмущение попадает в узел четной функции и максимум нечетной.

2. Возмущение относительно разности энергии уровней $E_1 - E_0$ будет

$$\delta E = E_{(n+3)/2}^{(1)} - E_{(n+1)/2}^{(1)}$$

Когда $(n + 1)/2$ четное, т.е. $n = 4p + 3$, $E_{(n+1)/2}^{(1)} = 0$,

$$\delta E = E_{(n+3)/2}^{(1)} = -\frac{2V_0\alpha}{nd} < 0$$

Когда $(n + 1)/2$ нечетное, т.е. $n = 4p + 1$, $E_{(n+3)/2}^{(1)} = 0$,

$$\delta E = -E_{(n+1)/2}^{(1)} = \frac{2V_0\alpha}{nd} > 0$$

Видно, что для $n = 4p + 1$, энергия возбуждения увеличивается, и уменьшается λ , а для $n = 4p + 3$ уменьшается возбуждение и увеличивается λ .

Задание 2.12. Рассчитайте разность энергии электрона в эВ между 1 и 2 уровнями одномерной потенциальной ямы шириной 1 нм.

Какой длине волны и какому электромагнитному диапазону соответствует квант с такой энергией?

Ответ. 1.1 эВ, 1.2 мкм – это ближнее инфракрасное излучение.

Задание 2.13. Найти средние значения координаты, импульса частицы, а также дисперсию координат и импульса частицы, находящейся в бесконечно глубокой потенциальной яме с непроницаемыми границами $(0, a)$. Выполняется ли принцип неопределенности? Для какого уровня результат ближе всего к теоретическому пределу [3]?

Ответ. $\langle x \rangle = a/2$, $\langle p \rangle = 0$, $\sigma_p^2 = \left(\frac{\hbar n\pi}{a}\right)^2$, $\sigma_x^2 = a^2\left(\frac{1}{12} - \frac{1}{2n^2\pi^2}\right)$,
 $\sigma_p\sigma_x = \pi\hbar n\sqrt{\frac{1}{12} - \frac{1}{2n^2\pi^2}}$. Минимального значения неопределенность достигает при $n = 1$, где $\sigma_p\sigma_x = 0.57\hbar$, что немного больше теоретического предела $\hbar/2$.

Задание 2.14. Рассчитайте вероятность того, что частица будет найдена в одномерной потенциальной яме шириной a в интервале $x \in (0.49a, 0.51a)$, если а) $n=1$, б) $n=2$.

Ответ. а) 0.04, б) 0.0004.

Задание 2.15. Рассчитайте ожидаемые значения операторов $\langle \hat{x}\hat{p}_x \rangle$ и $\langle \hat{p}_x\hat{x} \rangle$ для основного состояния частицы в одномерной потенциальной яме длиной a . Оба значения вещественны и равны? Объясните почему. Как вы думаете, ожидаемые значения останутся теми же для других уровней?

Ответ. $\langle \hat{x}\hat{p}_x \rangle = i\hbar/2$, $\langle \hat{p}_x\hat{x} \rangle = -i\hbar/2$, оба оператора не эрмитовы.

2.3.2. Ортогональность функций и суперпозиция состояний. Одномерная потенциальная яма является хорошим модельным объек-

том для иллюстрации ряда базисных принципов квантовой физики, а именно ортогональности собственных функций и суперпозиции состояний частицы, находящейся в ней [1].

Пример 2.6. Покажем, что у частицы, пребывающей в потенциальной яме $x \in (0, a)$, волновые функции ортонормированы, т.е. удовлетворяют требованию (1.5) [3]:

$$\begin{aligned} \int \psi_n^* \psi_m dx &= \frac{2}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{\pi m}{a} x\right) \sin\left(\frac{\pi n}{a} x\right) dx = \frac{1}{a} \int_0^a \left[\cos\left(\frac{m-n}{a} \pi x\right) - \right. \\ &- \left. \cos\left(\frac{m+n}{a} \pi x\right) \right] dx = \left\{ \frac{1}{(m-n)\pi} \sin\left(\frac{m-n}{a} \pi x\right) - \frac{1}{(m+n)\pi} \sin\left(\frac{m+n}{a} \pi x\right) \right\} \Big|_0^a = \\ &= \frac{1}{\pi} \left\{ \frac{\sin[(m-n)\pi]}{m-n} - \frac{\sin[(m+n)\pi]}{m+n} \right\} \end{aligned}$$

При $n \neq m$ оба слагаемых обращаются в нуль, а при $n = m$ первое слагаемое образует отношение вида $\sin(0)/0$ и интеграл становится равным 1.

Задание 2.16. Показать что волновые функции первых двух уровней частицы в одномерной потенциальной яме

$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right), \quad \psi_2(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)$$

взаимно ортогональны.

Пример 2.7. Найдем коэффициенты разложения полной волновой функции $\Psi(x, t)$ для одномерной потенциальной ямы длиной a [3]. Напомним, что набор собственных функций гамильтониана $\psi_n(x)$ является полным, и любая другая волновая функция $f(x)$ может быть выражена в виде их линейной комбинации:

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right).$$

Коэффициенты c_n для функции $f(x)$ могут быть получены по формуле (1.4), что для стационарных состояний ямы даст

$$c_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) f(x) dx.$$

Теперь расширим это разложение на стационарные состояния, описываемые зависимым от времени уравнением Шрёдингера (2.1). Тогда линейная комбинация стационарных состояний запишется как

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}. \quad (2.14)$$

В этом случае коэффициенты c_n могут быть найдены по той же формуле (1.4), если будут вычисляться в момент времени $t = 0$, т.к.

$$\Psi(x, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x).$$

Для случая ямы и уравнения Шрёдингера, зависящего от времени, коэффициенты разложения будут определяться как

$$c_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \Psi(x, 0) dx. \quad (2.15)$$

Пример 2.8. Поведение частицы в одномерной яме $x \in (0, a)$ описывается начальной волновой функцией $\Psi(x, 0) = Ax(a - x)$, где A – некоторая константа [3]. Найти $\Psi(x, t)$.

Решение. Сперва найдем A , нормализуя функцию в начальный момент времени:

$$\int_0^a |\Psi(x, 0)|^2 dx = |A|^2 \int_0^a x^2(a - x)^2 dx = |A|^2 \frac{a^5}{30} = 1,$$

т.е. $A = \sqrt{30/a^5}$. Коэффициенты c_n найдем из уравнения (2.15):

$$\begin{aligned} c_n &= \sqrt{\frac{2}{a}} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \sqrt{\frac{30}{a^5}} x(a - x) dx = \\ &= \frac{2\sqrt{15}}{a^3} \left[a \int_0^a x \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx - \int_0^a x^2 \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx \right] = \\ &= \frac{2\sqrt{15}}{a^3} \left\{ a \left[\left(\frac{a}{n\pi}\right)^2 \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) - \frac{ax}{n\pi} \cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \right] \Big|_0^a - \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \left[\left(2 \frac{a}{n\pi} \right)^2 x \sin \left(\frac{n\pi}{a} x \right) - \frac{(n\pi/a)^2 - 2}{(n\pi/a)^3} \cos \left(\frac{n\pi}{a} x \right) \right] \Big|_0^a = \\
& = \frac{2\sqrt{15}}{a^3} \left[-\frac{a^3}{n\pi} \cos(n\pi) + a^3 \frac{(n\pi)^2 - 2}{(n\pi)^3} \cos(n\pi) + a^3 \frac{2}{(n\pi)^3} \cos(0) \right] = \\
& = \frac{4\sqrt{15}}{(n\pi)^3} [\cos(0) - \cos(n\pi)] = \begin{cases} 0 & , n - \text{нечетные,} \\ 8\sqrt{15}/(n\pi)^3 & , n - \text{четные.} \end{cases}
\end{aligned}$$

Теперь можно записать решение в виде (2.14):

$$\Psi(x, t) = \frac{8}{\pi^3} \sqrt{\frac{30}{a}} \sum_{n=1,3,5,\dots}^{\infty} \frac{1}{n^3} \sin \left(\frac{n\pi}{a} x \right) e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t}.$$

Пример 2.9. Начальная волновая функция $\Psi(x, 0) = Ax(a - x)$ в предыдущем примере очень похожа на функцию основного состояния ψ_1 . Это позволяет предположить, что вклад состояния ψ_1 доминирует и значение c_1^2 будет близко к единице. Так и есть:

$$|c_1|^2 = \left(\frac{8\sqrt{15}}{\pi^3} \right)^2 = 0.998555 \dots$$

Добавление остальных коэффициентов дополняет сумму до единицы:

$$\sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 = \left(\frac{8\sqrt{15}}{\pi^3} \right)^2 \sum_{n=1,3,5,\dots}^{\infty} \frac{1}{n^6} = \left(\frac{8\sqrt{15}}{\pi^3} \right)^2 \cdot \frac{\pi^6}{960} = 1.$$

Для решения мы применили табличную формулу суммы сходящегося ряда. Теперь найдем ожидаемое среднее значение энергии $\langle E \rangle = \sum |c_n|^2 E_n$:

$$\langle E \rangle = \sum_{n=1,3,5,\dots}^{\infty} \left(\frac{8\sqrt{15}}{\pi^3} \right)^2 \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} = \frac{480\hbar^2}{\pi^4 ma^2} \sum_{n=1,3,5,\dots}^{\infty} \frac{1}{n^4} = \frac{480\hbar^2}{\pi^4 ma^2} \cdot \frac{\pi^4}{96} = \frac{5\hbar^2}{ma^2}.$$

Это значение очень близко к первому уровню энергии $E_1 = \pi^2 \hbar^2 / 2ma^2$, но немного его превышает, поскольку в общее состояние дают вклад и высшие возбужденные состояния.

Задание 2.17. Для волновой функции из предыдущего примера ($\Psi(x, 0) = Ax(a - x)$) найти ожидаемое среднее значение E в момент времени $t = 0$, пользуясь классической формулой для нахождения среднего значения

$$\langle E \rangle = \int \Psi(x, 0)^* \hat{H} \Psi(x, 0) dx.$$

Сравните с полученным в предыдущем задании результатом $\langle H \rangle = 5\hbar^2/ma^2$. Указание – поскольку $\langle E \rangle$ не зависит от времени, мы ничего не теряем, подсчитав значение только в один момент.

Задание 2.18. В состоянии, описываемом волновой функцией $\psi(x) = A(a^2 - 4x^2)$, найти распределение вероятностей различных значений энергии частицы и ее среднее значение. Указание – ряд $\sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{(2m+1)^4} = \frac{\pi^4}{96}$.

Ответ. $A = \sqrt{15/8a^5}$, для четных уровней $c_n = 0$, для нечетных $c_m = 8\sqrt{15}(-1)^m/[\pi(2m+1)]^3$, $\rho(E_0) \approx 0.9986$, $\langle E \rangle \approx 1.013E_0$.

Задание 2.19. Частица в бесконечно глубокой потенциальной яме задана начальной волновой функцией

$$\Psi(x, 0) = \begin{cases} Ax, & 0 \leq x \leq a/2, \\ A(a-x), & a/2 \leq x \leq a. \end{cases}$$

Заметим, что требования дифференцируемости, вытекающие из уравнения Шрёдингера, на форму начальной функции не распространяются – достаточно того, что она нормирована.

- Нарисуйте $\Psi(x, 0)$, определите константу A .
- Найдите $\Psi(x, t)$.
- Какова вероятность того, что при измерении энергии будет получено значение E_1 ?
- Найдите ожидаемое среднее значение энергии.

Задание 2.20. Частица с массой m в бесконечно глубокой яме шириной a в момент $t = 0$ «стартует» из левой половины ямы.

- Какова начальная волновая функция $\Psi(x, 0)$? (Предположим, что она вещественна.)
- Какова вероятность того, что измерение энергии даст значение $\pi^2\hbar^2/2ma^2$?

Пример 2.10. Какова будет ожидаемая энергия частицы в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками при суперпозиции двух нижних состояний, взятых с равными весовыми коэффициентами?

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \int \Psi^* \hat{H} \Psi dx = \frac{1}{2} \int (\Psi_1 + \Psi_2)^* \hat{H} (\Psi_1 + \Psi_2) dx = \\ &= \frac{1}{2} \int (\Psi_1^* \hat{H} \Psi_1 + \Psi_2^* \hat{H} \Psi_2 + \Psi_1^* \hat{H} \Psi_2 + \Psi_2^* \hat{H} \Psi_1) dx = \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{2} \int (\psi_1^* \hat{H} \psi_1 + \psi_2^* \hat{H} \psi_2) dx + 0 + 0 = \frac{1}{2}(E_1 + E_2).$$

Ожидаемое значение энергии – константа и является средним между E_1 и E_2 .

$$\langle E \rangle = \frac{1}{2} \left(\frac{(1^2 + 2^2)\pi^2 \hbar^2}{2a^2 m} \right) = \frac{5}{4} \frac{\pi^2 \hbar^2}{a^2 m}$$

Напомним, что наблюдаться могут только величины E_1 или E_2 , а среднее значение мы получим, проведя серию измерений в системах, находящихся в одинаковых состояниях. Найдем теперь среднеквадратичное отклонение измеряемой величины.

$$\begin{aligned} \langle E^2 \rangle &= \int \Psi^* \hat{H}^2 \Psi dx = \frac{1}{2} \int (\Psi_1^* \hat{H}^2 \Psi_1 + \Psi_2^* \hat{H}^2 \Psi_2 + \Psi_1^* \hat{H}^2 \Psi_2 + \Psi_2^* \hat{H}^2 \Psi_1) dx = \\ &= \frac{1}{2} (E_1^2 + E_2^2) + 0 + 0 = \frac{1}{2} \left(\frac{(1^4 + 2^4)\pi^4 \hbar^4}{4a^4 m^2} \right) = \frac{17}{8} \frac{\pi^4 \hbar^4}{a^4 m^2}. \end{aligned}$$

Отклонение составит

$$\sigma_E = \sqrt{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2} = \frac{3}{4} \frac{\pi^2 \hbar^2}{a^2 m} = \frac{3}{5} \langle E \rangle$$

Теперь вернемся к временной зависимости. Где находится частица в состоянии суперпозиции?

$$\langle x \rangle = \frac{1}{2} \left(\int \Psi_1^* \hat{x} \Psi_1 dx + \int \Psi_2^* \hat{x} \Psi_2 dx + \int \Psi_1^* \hat{x} \Psi_2 dx + \int \Psi_2^* \hat{x} \Psi_1 dx \right).$$

Нужно оценить эти четыре слагаемых, найдем их прямым интегрированием. Первое слагаемое:

$$\int \Psi_1^* \hat{x} \Psi_1 dx = \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) e^{\frac{i\pi^2 \hbar}{2a^2 m} t} x \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) e^{-\frac{i\pi^2 \hbar}{2a^2 m} t} dx$$

Зависящие от времени части взаимно сокращаются, и интеграл теперь можно найти по табличной формуле

$$\int x \sin^2(kx) dx = \frac{x^2}{4} - \frac{x \sin(2kx)}{4k} - \frac{\cos(2kx)}{8k^2}$$

Результат расчетов прост и интуитивно понятен – среднее значение координаты частицы в стационарном состоянии находится посередине ямы.

$$\int \Psi_1^* \hat{x} \Psi_1 d\xi = \int \Psi_2^* \hat{x} \Psi_2 dx = \frac{a}{2}$$

Другие два слагаемых комплексно сопряжены друг с другом, оценим один из них:

$$\int \Psi_1^* \hat{x} \Psi_2 d\xi = \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) e^{\frac{i\pi^2 \hbar}{2a^2 m} t} x \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) e^{-\frac{i2^2 \pi^2 \hbar}{2a^2 m} t} dx$$

Временные множители не сокращаются, интеграл будет равен

$$\int \Psi_1^* \hat{x} \Psi_2 dx = -\left(\frac{16a}{9\pi^2}\right) e^{-i\frac{3\pi^2 \hbar^2}{2a^2 m} t}.$$

Поскольку $\int \Psi_1^* \hat{A} \Psi_2 d\xi = \left(\int \Psi_2^* \hat{A} \Psi_1 d\xi\right)^*$, то

$$\langle x \rangle = \frac{1}{2} \left(\frac{a}{2} + \frac{a}{2} + \int \Psi_1^* \hat{x} \Psi_2 dx + \left(\int \Psi_2^* \hat{x} \Psi_1 dx \right)^* \right).$$

Среднее положение частицы осциллирует относительно центра ямы на частоте, соответствующей разности энергий состояний, деленных на постоянную Планка

$$\langle x \rangle = \frac{a}{2} - \left(\frac{16a}{9\pi^2}\right) \cos\left(3\frac{\pi^2 \hbar^2}{2a^2 m} t\right)$$

Задание 2.21. Представим, что частица в бесконечно глубокой потенциальной яме шириной a в начальном состоянии находится в суперпозиции двух стационарных состояний [3]

$$\Psi(x, 0) = A [\psi_1(x) + \psi_2(x)].$$

а) Проведите нормировку функции $\Psi(x, 0)$. Указание – функции стационарных состояний ортогональны.

б) Найти $\Psi(x, t)$ и $\Psi(x, t)^2$. Выразить последнее как синусоидальную функцию от времени (см. раздел про суперпозицию 2.2.3).

в) Рассчитайте $\langle x \rangle$. Заметьте, что величина осциллирует во времени. Какова угловая частота осцилляций? Какова амплитуда осцилляций $\langle x \rangle$? (Заметим, что амплитуда не может превышать $a/2$).

г) Подсчитайте $\langle p \rangle$ (указание – примените формулу Эйлера, тогда мнимая единица сократится).

д) Какие значения энергии E_1 и E_2 при измерении этой частицы можно получить, с какой вероятностью? Найдите ожидаемое среднее значение $\langle H \rangle$, сравните его с E_1 и E_2 .

Ответ:

$$\langle x \rangle = \frac{a}{2} - \left(\frac{16a}{9\pi^2} \right) \cos \left(3 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2a^2 m} t \right), \quad \langle p \rangle = -\frac{8\hbar}{3a} \sin \frac{E_1 t}{\hbar}, \quad \langle H \rangle = \frac{5\pi^2 \hbar^2 n^2}{4a^2 m}.$$

Задание 2.22. Хотя абсолютная величина фазовых констант в волновых функциях физического значения не имеет (поскольку они уничтожаются при подсчете измеряемого значения), относительная фаза коэффициентов в (2.11) имеет значение [3]. Предположим, что в предыдущей задаче про суперпозицию состояний в потенциальной яме мы ввели относительную фазу между ψ_1 и ψ_2

$$\Psi(x, 0) = A \left[\psi_1(x) + e^{i\varphi} \psi_2(x) \right],$$

где φ – некоторая константа. Найдите $\Psi(x, t)$, $|\Psi(x, t)|^2$ и $\langle x \rangle$ и сравните результат с полученным в предыдущей задаче. Исследуйте специальные случаи $\varphi = \pi/2$ и $\varphi = \pi$.

Задание 2.23. В случае, когда частица находится в двумерной прямоугольной потенциальной яме размером $a \times b$, волновая функция и энергия описываются выражениями

$$\psi_{n,m}(x, y) = \frac{2}{\sqrt{ab}} \sin \left(\frac{n\pi x}{a} \right) \sin \left(\frac{m\pi y}{b} \right) \text{ и } E_{n,m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n^2}{a^2} + \frac{m^2}{b^2} \right),$$

где m, n – квантовые числа. Видно, что одному уровню энергии могут соответствовать разные наборы квантовых чисел и разные состояния. Подобным образом система может быть обобщена на случай высших порядков.

Какова степень вырождения g_N для каждого уровня энергии E_N квадратной ямы, где $N = 0, 1, 2 \dots$?

2.4. Гармонический осциллятор

Центральное место в квантовой оптике занимает гармонический осциллятор, поскольку это простейшая модель излучателя. Это еще одна из квантово-механических задач, для которых найдено точное аналитическое решение [1].

Рассмотрим пример с частицей массой m , прикрепленную к пружинке. По закону Гука на такую частицу действует сила $F = -kx$. Потенциал такой частицы опишется как

$$V(x) = - \int_{-\infty}^{\infty} (-kx) dx = V_0 + \frac{1}{2} kx^2$$

Таким потенциалом можно аппроксимировать произвольный потенциал в окрестности устойчивого положения равновесия. Если $V_0 = 0$, то гамильтониан системы будет

$$\hat{H} = \hat{E}_k + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2$$

Одномерное стационарное уравнение Шрёдингера для выбранного потенциала

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2\psi(x) = E\psi(x) \quad (2.16)$$

Решения такого уравнения (вывод можно найти в [5])

$$\psi_n(x) = A_n H_n(\beta x) e^{-\beta x^2/2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (2.17)$$

где H_n – полином Эрмита степени n

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

а величины β и A_n обозначают

$$\beta^2 = \frac{\omega m}{\hbar}, \quad A_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4}, \quad \omega^2 = k/m.$$

Уровни энергии такой системы $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$. Энергетический спектр гармонического осциллятора имеет три отличительные особенности: энергия дискретна, уровни отстоят друг от друга на одинаковое расстояние, а самый нижний уровень не равен потенциальной энергии дна ямы.

Задание 2.24[11]. Покажите, что волновая функция $\psi = C e^{-m\omega x^2/2\hbar}$ является собственной функцией гармонического осциллятора с энергией $\hbar\omega/2$. Найдите константу C .

Задание 2.25[11]. По аналогии с классическим осциллятором объясните, почему ожидаемые значения координаты x и импульса p_x будут равны нулю.

2.4.1. Формализм лестничных операторов. Более изящный способ не требует привлечения уравнения Шрёдингера – примерно так задача и была решена Гейзенбергом. Для начала перепишем уравнение (2.16) в более подходящей форме [3]

$$\frac{1}{2m} [p^2 + (m\omega x)^2] \psi = E\psi,$$

где $p = -i\hbar d/dx$ – оператор импульса. Основная идея – разложить на множители гамильтониан

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}[p^2 + (m\omega x)^2] \quad (2.18)$$

С числами было бы просто: $u^2 + v^2 = (iu + v)(-iu + v)$, однако в нашем случае p и x – некоммутирующие операторы. Поэтому вводятся дополнительные переменные

$$a_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(\mp ip + m\omega x)$$

Произведение этих двух величин

$$a_- a_+ = \frac{1}{2\hbar m\omega}(ip + m\omega x)(-ip + m\omega x) = \frac{1}{2\hbar m\omega}[p^2 + (m\omega x)^2 - im\omega(xp - px)],$$

где первые два слагаемых числителя дают гамильтониан (2.18), а последнее является коммутатором $[x, p] = i\hbar$. С учетом этого перепишем полученный результат как

$$a_- a_+ = \frac{1}{\hbar\omega}H + \frac{1}{2} \quad \text{или} \quad H = \hbar\omega\left(a_- a_+ - \frac{1}{2}\right) \quad (2.19)$$

Заметим, что порядок a_- и a_+ имеет значение, в частности – $[a_-, a_+] = 1$. Поэтому гамильтониан можно записать в виде эквивалентной формулы

$$H = \hbar\omega\left(a_+ a_- + \frac{1}{2}\right) \quad (2.20)$$

Таким образом, с использованием обозначений a_{\pm} стационарное уравнение Шрёдингера для гармонического осциллятора примет вид

$$\hbar\omega\left(a_{\pm} a_{\mp} \pm \frac{1}{2}\right)\psi = E\psi \quad (2.21)$$

Операторы a_- и a_+ часто называют операторами уничтожения и рождения фотонов, поскольку они переводят систему в состоянии с n фотонами $\hbar\omega$ в состояние с $n - 1$ или $n + 1$ фотонами, соответственно (или лестничными, т.к. они переводят систему на уровень выше или ниже). Эти операторы не являются эрмитовыми, однако эрмитовы некоторые их комбинации друг с другом или другими функциями. Часто операторы a_- и a_+ записывают как a и a^\dagger .

Последовательное применение оператора уничтожения рано или поздно приведет систему в состояние с энергией меньше нуля, которое

существовать не может. Установим нижний уровень энергии осциллятора. Нижнее состояние ψ_0 должно удовлетворять уравнению

$$a_-\psi_0 = 0 \quad (2.22)$$

С помощью (2.22) теперь можно определить ψ_0 :

$$\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(\hbar \frac{d}{dx} + m\omega x \right) \psi_0 = 0 \Rightarrow \frac{d\psi_0}{dx} = -\frac{m\omega}{\hbar} x \psi_0.$$

Это дифференциальное уравнение имеет простое решение

$$\int \frac{d\psi_0}{\psi_0} = -\frac{m\omega}{\hbar} \int x dx \Rightarrow \ln \psi_0 = -\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 + \text{const.}$$

Откуда $\psi_0(x) = A e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}$. Теперь нормализуем функцию

$$1 = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{m\omega}{\hbar} x^2} dx = |A|^2 \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}} \Rightarrow A^2 = \sqrt{m\omega/\pi\hbar}.$$

Полностью волновая функция основного состояния будет

$$\psi_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}. \quad (2.23)$$

Чтобы найти энергию, соответствующему основному состоянию, подставим (2.23) в уравнение Шрёдингера для осциллятора (2.21) и воспользуемся тем, что $a_-\psi_0 = 0$, тогда

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega.$$

Теперь, найдя основное состояние, можно найти возбужденные состояния, последовательно применяя оператор рождения и увеличивая с каждым шагом энергию на $\hbar\omega$

$$\psi_n(x) = A_n (a_+)^n \psi_0(x), \quad E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega,$$

где A_n – нормализованная константа. Можно показать [3], что

$$a_+\psi_n = \sqrt{n+1} \psi_{n+1}, \quad a_-\psi_n = \sqrt{n} \psi_{n-1},$$

следовательно $A_n = 1/\sqrt{n!}$. Также заметим, что $a_+ a_-\psi_n = n\psi_n$ и $a_- a_+\psi_n = (n+1)\psi_n$.

Пример 2.11. Покажем, что если функция ψ описывает состояние с энергией E (т.е. $H\psi = E\psi$), то функция $a_+\psi$ описывает состояние с энергией $E + \hbar\omega$, т.е. $H(a_+\psi) = (E + \hbar\omega)(a_+\psi)$ [3]. При решении воспользуемся коммутатором $[a_-, a_+] = 1$, также следует помнить, что операторы a_{\pm} , в отличие от констант E , \hbar и ω , не подчиняются переместительному закону:

$$\begin{aligned} H(a_+\psi) &= \hbar\omega \left(a_+a_- + \frac{1}{2} \right) a_+\psi = \hbar\omega \left(a_+a_-a_+ + \frac{1}{2}a_+ \right) \psi = \\ &= \hbar\omega a_+ \left(a_-a_+ + \frac{1}{2} \right) \psi = a_+ \left[\hbar\omega \left(a_+a_- + 1 + \frac{1}{2} \right) \right] \psi = \\ &= a_+(H + \hbar\omega)\psi = a_+(E + \hbar\omega)\psi = (E + \hbar\omega)a_+\psi. \end{aligned}$$

Задание 2.26. Покажите, что оператор уничтожения a_- понижает энергию системы на величину $\hbar\omega$.

Пример 2.12. Найдем среднее значение потенциальной энергии уровня n осциллятора [3]. Потенциальная энергия осциллятора $V = m\omega^2 x^2/2$, поэтому

$$\langle V_n \rangle = \frac{1}{2} m\omega^2 \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* x^2 \psi_n dx$$

Это хороший способ вычисления интегралов такого рода (включая степени x и p). Сперва запишем выражения для x и p через операторы рождения и уничтожения:

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a_+ + a_-), \quad p = i \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} (a_+ - a_-) \quad (2.24)$$

В этом примере нас интересует x^2 , для него

$$x^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} \left[(a_+)^2 + (a_+a_-) + (a_-a_+) + (a_-)^2 \right].$$

Поэтому

$$\langle V \rangle = \frac{\hbar\omega}{4} \int \psi_n^* \left[(a_+)^2 + (a_+a_-) + (a_-a_+) + (a_-)^2 \right] \psi_n dx.$$

Но $(a_+)^2\psi_n$ это, отличаясь только коэффициентом, ψ_{n+2} , которая ортогональна ψ_n . То же самое можно сказать про $(a_-)^2\psi_n$, которая про-

порциональна ψ_{n-2} . Следовательно эти слагаемые уничтожаются, и мы получаем

$$\langle V \rangle = \frac{\hbar\omega}{4}(n + (n + 1)) = \frac{\hbar\omega}{2}\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

Видно, что потенциальная энергия равна половине полной энергии.

Пример 2.13. В соответствие с нестационарной теорией возмущения скорость переходов в единицу времени между уровнями при резонансном возбуждении, т.е. когда частота ω возмущения V совпадает с расстоянием между уровнями $E = \hbar\omega$, равна

$$W_{kl} = \frac{2\pi}{\hbar^2} \left| \langle k | \hat{V} | l \rangle \right|^2$$

Здесь использована нотация Дирака, поэтому $\int \Psi^* \hat{Q} \Theta d\xi = \langle \Psi | \hat{Q} | \Theta \rangle$ (см. параграф 3.1.2). В случае квантового осциллятора полная формула равна

$$W_{kl} = \frac{\pi \mathbf{E}_0^2}{2\hbar^2} \cos^2 \theta \left| \frac{\partial \mu}{\partial x} \right| |\langle k | \hat{x} | l \rangle|^2$$

Вероятность перехода зависит от направлением напряженности внешнего поля и от дипольного момента (в данном случае для симметричных молекул переходы будут отсутствовать). Нам важна последняя часть, поскольку она учитывает номера уровней

$$W_{kl} \propto |\langle k | \hat{x} | l \rangle|^2$$

Учитывая, что $\hat{x} = \sqrt{\hbar/2m\omega_0}(a_+ + a_-)$, получаем правило отбора гармонического осциллятора

$$\langle k | a_+ + a_- | l \rangle = \langle k | a_+ | l \rangle + \langle k | a_- | l \rangle = \begin{cases} 1, & \text{если } k - l = \pm 1 \\ 0, & \text{если } k - l \neq \pm 1 \end{cases}$$

Соответственно переходы происходят исключительно между соседними уровнями.

Задание 2.27. Подсчитайте значение $\langle x \rangle$, $\langle p \rangle$, $\langle x^2 \rangle$ и $\langle p^2 \rangle$ для состояния ψ_0 осциллятора. Проверьте выполнение соотношения неопределенности. Указание – используйте сокращения $\xi = \sqrt{m\omega/\hbar}x$ и $\alpha = (m\omega/\pi\hbar)^{1/4}$ [3].

Задание 2.28[2]. Эффективная масса μ электрона в одномерной потенциальной яме $\mu = 0,07 m_e$. Предположим, что $\hbar\omega = 0.06$ эВ, т.е. $\omega/2\pi = 1.45 \times 10^{13}$ Нз.

1. Найдите характеристический размер осциллятора $x_0 = \sqrt{\hbar/\mu}$.
2. Населенность каких уровней осциллятора существенна при температуре 10 К?
3. Какова длина волны поглощаемого излучения? Какой это диапазон?

Решение:

1. $l_0 = 4.3$ нм.
2. Распределение частиц по энергиям в потенциальном поле задается распределением Больцмана, из которого известно отношение концентраций:

$$\frac{n_2}{n_1} = e^{-\frac{E_2 - E_1}{k_B T}}$$

Если подставить разность энергий $\hbar\omega$, то станет видно, что соотношение равно $4 \cdot 10^{-31}$, т.е. заселен практически один нижний уровень (постоянная Больцмана $k_B = 8.82 \times 10^{-5}$ эВ·К).

3. $\lambda = 2\pi c/\omega = 21$ мкм. Инфракрасный диапазон.

Задание 2.29. Частица в гармоническом осцилляторе находится в состоянии [3]

$$\Psi(x, 0) = A[3\psi_0(x) + 4\psi_1(x)].$$

- а) Найдите A .
- б) Сконструируйте $\Psi(x, t)$ и $|\Psi(x, t)|^2$.
- в) Найдите $\langle x \rangle$ и $\langle p \rangle$. Они осциллируют? Что будет, если в условии заменить ψ_1 на ψ_2 ?
- г) Если измерять энергию такой частицы, какое значение можно получить, с какой вероятностью?

Задание 2.30[2]. Представим, что электрон находится в двумерной квантовой яме, описываемой формулой

$$V(x, y) = \frac{1}{2}\mu\omega^2(x^2 + y^2)$$

Какова степень вырождения g_N для каждого уровня энергии E_N , где $N = 0, 1, 2 \dots$?

Ответ. Уровню энергии $E_N = \hbar(N + 1)$ соответствует $N + 1$ возможных пар (n_x, n_y) : $(N, 0)$, $(N - 1, 1)$, ..., $(0, N)$. Следовательно степень вырождения $g_N = N + 1$.

2.4.2. Когерентные состояния. Из всех собственных состояний гармонического осциллятора только основное состояние $n = 0$ достигает предела неопределенности $\sigma_x \sigma_p = \hbar/2$. Для других состояний $\sigma_x \sigma_p = (2n + 1)\hbar/2$. Но определенные линейные комбинации состояний,

называемые «когерентными», также минимизируют это произведение. В когерентном состоянии волновой пакет, образованный суперпозицией состояний осциллятора, не расплывается, а его центр движется по классической траектории. Когерентные состояния Ψ^α являются собственными функциями оператора уничтожения

$$a_- \Psi^\alpha = \alpha \Psi^\alpha \quad (2.25)$$

где α – комплексное число, которое эволюционирует во времени как $\alpha(t) = e^{-i\omega t} \alpha(0)$. Комплексность объясняется неэрмитовостью a_- . Функция Ψ^α может быть разложена по ортогональным функциям стационарных состояний осциллятора

$$\psi^\alpha = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \psi_n, \quad (2.26)$$

откуда можно найти вероятность осциллятору находиться в n -м состоянии

$$P_n = e^{-|\alpha|^2} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!}$$

Это пуассоновское распределение, и значение $|\alpha|^2$ определяет, какие стационарные состояния дают основной вклад.

Задание 2.31[3].

а) Подсчитайте $\langle x \rangle$, $\langle x^2 \rangle$, $\langle p \rangle$ и $\langle p^2 \rangle$ для состояния Ψ^α , учитывая разложение (2.26).

б) Найдите σ_x и σ_p , покажите что $\sigma_x \sigma_p = \hbar/2$.

Ответ.

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \alpha \sqrt{\frac{2\hbar}{\omega m}} & \langle p \rangle &= 0 & \sigma_x^2 &= \frac{\hbar}{2\omega m} \\ \langle x^2 \rangle &= \frac{\hbar}{2\omega m} (4\alpha^2 + 1) & \langle p^2 \rangle &= \frac{\hbar\omega m}{2} & \sigma_p^2 &= \frac{\hbar\omega m}{2} \end{aligned}$$

Глава 3

МАТРИЧНАЯ ФОРМА КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Предыдущее изложение основывалось на двух концепциях – состояние системы представлялось волновой функцией, а наблюдаемым величинам соответствовали операторы. Более естественным инструментом описания квантовой механики является язык линейной алгебры (какой, исторически, и была ее первая формулировка). При таком подходе состояния системы описываются абстрактными векторами, а операторам соответствуют линейные преобразования [1].

3.1. Гильбертово пространство

Основу формализма квантовой механики составляет введение некоторого абстрактного пространства векторов, описывающих чистые состояния. Такие пространства являются обобщением на бесконечномерный случай евклидова пространства и называются гильбертовыми пространствами L^1 .

В n -мерном пространстве вектор α можно представить, через набор n ортогональных базисных компонент $\{a_n\}$, как вектор-столбец $|\alpha\rangle$ (читается как «кет-альфа»):

$$|\alpha\rangle \rightarrow \mathbf{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}.$$

Первым шагом при таком рассмотрении является отождествление подходящего гильбертова пространства состояний с системой, описанной в пространстве функций. Так, если квантовая система имеет n ортогональных состояний Ψ_n , то состояние такой системы будет представлено вектором в n -мерном гильбертовом пространстве. Выбранные n состояний формируют ортогональный базис векторного пространства

¹ В честь математика Д. Гильберта, исследовавшего абстрактные линейные пространства, а сам термин «гильбертово пространство» предложил Дж. фон Нейман в своей работе об эрмитовых операторах

– $\{|1\rangle, |2\rangle \dots |k\rangle\}$. Тогда состояние физической системы $\Psi(t)$ в любой момент времени t будет определяться вектором $|\Psi(t)\rangle$.

$$\Psi = \sum a_n \Psi_n \rightarrow |\Psi\rangle = \sum a_n |n\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}$$

Очевидно, что собственному состоянию Ψ_n будет соответствовать вектор, у которого от нуля будет отличен только n -й компонент.

Любая функция может быть представлена в виде набора ортогональных, поэтому все функции f образуют гильбертово пространство. Но в нашем случае физический смысл имеют только квадратично-интегрируемые комплексные функции Ψ , квадрат модуля которых в области определения образует сходящийся интеграл

$$\int |\Psi|^2 d\xi < \infty. \quad (3.1)$$

Такие функции образуют векторное подпространство, обозначаемое в математике L_2 . Обычно, когда в физике упоминается «гильбертово пространство», имеется в виду именно L_2 . Поскольку введенные таким образом векторы соответствуют функциям, в большинстве случаев образованных бесконечным набором ортогональных базисных функций, то обычно они оперируют в бесконечномерных пространствах. Хотя функции непрерывного спектра не удовлетворяют правилу (3.1) и нормируются на дельта-функцию, их кет-векторы также ортогональны между собой и могут быть использованы как непрерывный базис [1].

Пример 3.1. Двухуровневая система описывается двумерным гильбертовым пространством. Состояниям такой системы Ψ_1 и Ψ_2 , образующим базис пространства $\{\Psi_1, \Psi_2\}$, соответствуют векторы

$$|\Psi_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ и } |\Psi_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Пример 3.2. Функция $\Psi = \sin(\pi x/l)$, определенная в интервале $0, l$, принадлежит гильбертову пространству, поскольку

$$\int_D |\Psi|^2 d\xi = \int_0^l \sin^2\left(\frac{\pi x}{l}\right) dx < \infty$$

Функция $\operatorname{tg}(\pi x/l)$, определенная на том же интервале, гильбертову пространству не принадлежит, поскольку обращается в бесконечность при $l/2$.

Задание 3.1[3]. В каком диапазоне должна находиться величина ν , чтобы функция $f(x) = x^\nu$, определенная на интервале $(0, 1)$, была в гильбертовом пространстве? Считать, что ν действительна, но обязательно положительна.

Задание 3.2[3]. Для частного случая из предыдущей задачи $\nu = 1/2$ функция $f(x) = x^\nu$ находится в гильбертовом пространстве? А такие функции, как $x \cdot f(x)$ и $\frac{d}{dx}f(x)$?

3.1.1. Сфера Блоха. Наиболее распространенным способом геометрического представления состояния двухуровневой системы является сфера Блоха. В соответствии с принципом суперпозиции, если $|\Psi_1\rangle$ и $|\Psi_2\rangle$ – два возможных состояния данной физической системы, то любая их линейная комбинация

$$|\Psi\rangle = c_1|\Psi_1\rangle + c_2|\Psi_2\rangle, \text{ или } |\Psi\rangle = c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

где c_1 и c_2 комплексные числа, является возможным состоянием системы. Учитывая комплексность коэффициентов ($c_n = c_n^{Re} + ic_n^{Im}$), состояния должны быть отображены в четырехмерном пространстве. Поскольку при описании двухуровневой системы реальное физическое значение имеет только относительный фазовый сдвиг между состояниями, то один из коэффициентов делают вещественным. Тогда нормированное на единицу представление $|\Psi\rangle$ будет

$$|\Psi\rangle = \cos\theta|1\rangle + e^{i\varphi}\sin\theta|2\rangle = \cos\theta|1\rangle + (\cos\varphi + i\sin\varphi)\sin\theta|2\rangle,$$

где $0 \leq \theta \leq \pi$ и $0 \leq \varphi < 2\pi$. В декартовых координатах совокупность состояний $|\Psi\rangle = (\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta)$ образует сферу единичного радиуса, которую и называют «сферой Блоха» (рис. 3.1). Точки, лежащие на поверхности сферы, соответствуют чистым состояниям, а внутри сферы – смешанным. В общем случае, без нормировки, чистое состояние системы будет представляться в виде луча, выходящего из начала координат, а не в виде точки на сфере.

Задание 3.3[11]. Найдите на сфере Блоха точку, соответствующую следующим состояниям, записав ответ в декартовых координатах:

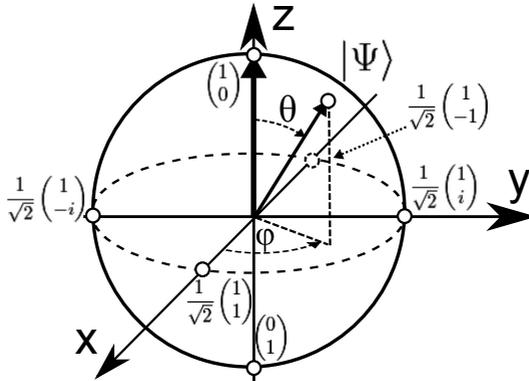


Рис. 3.1. Сфера Блоха. Жирной стрелкой выделено состояние $|1\rangle$.

- а) $\psi = (\sqrt{1/3})|1\rangle + (\sqrt{2/3})|2\rangle$
 б) $\psi = (\sqrt{2/3})|1\rangle - (i/\sqrt{3})|2\rangle$
 в) $\psi = (e^{i\pi/4}|1\rangle + |2\rangle)/\sqrt{2}$

Задание 3.4[11]. Укажите на сфере Блоха векторный эквивалент ансамблю двухуровневых атомов, 60% атомов находятся в возбужденном состоянии и 40% - в основном состоянии.

3.1.2. Обозначения Дирака. Введенное ранее обозначение «кет-вектора» происходит из разновидности обозначения скалярного произведения векторов $\langle\alpha|\beta\rangle$. Скалярное произведение двух векторов состояния α и β является комплексным числом и задается в квантовой механике формулой

$$\langle\alpha|\beta\rangle = a_1^*b_1 + a_2^*b_2 + \dots + a_n^*b_n, \quad (3.2)$$

где * – знак комплексного сопряжения (отметим, что в алгебре произведения векторов задается как $\langle\alpha|\beta\rangle = \sum a_n b_n^*$). Дирак предложил разбить «скобочную» запись скалярного произведения векторов состояния $\langle\alpha|\beta\rangle$ на две части $\langle\alpha|$ и $|\beta\rangle$, названные «бра» и «кет» (от англ. *bracket*, т.е. скобка).

В конечно-размерном векторном пространстве, где векторы состояний «кет» представлены в виде колонок

$$|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix},$$

соответствующий «бра» есть вектор-строка, составленная из элементов, комплексно-сопряженных элементам вектора «кет»:

$$\langle \alpha | = (a_1^* a_2^* \dots a_n^*).$$

Совокупность «бра»-векторов образует свое, «сопряженное» векторное пространство.

В то время как скалярное произведение $\langle \alpha | \beta \rangle$ является числом, «вывернутое» произведение $|\alpha\rangle\langle\beta|$ является матрицей размерностью $2^n \times 2^n$:

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} (b_1^* b_2^* \dots b_n^*) = \begin{pmatrix} a_1 b_1^* & a_1 b_2^* & \dots & a_1 b_n^* \\ a_2 b_1^* & a_2 b_2^* & \dots & a_2 b_n^* \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ a_n b_1^* & a_n b_2^* & \dots & a_n b_n^* \end{pmatrix}.$$

«Кет-бра» произведение базисного вектора на самого себя $|n\rangle\langle n|$ образует квадратную матрицу с единственным равным 1 диагональным элементом, положение которого по строке и столбцу определяется числом n , и остальными нулями (это произведение играет важную роль в конструировании матрицы плотности). Соответственно сумма таких произведений по всем состояниям системы даст единичную матрицу с размерностью, равной размерности используемого пространства

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = \mathbf{I} \quad (3.3)$$

В пространстве функций вектор «кет» $|\Psi\rangle$ эквивалентен домножению на функцию Ψ , а вектор «бра», связанный с комплексно-сопряженной функцией Ψ^* , может быть записан как правило интегрирования:

$$\langle \Psi | \dots \equiv \int \Psi^* [\dots] d\xi,$$

где вместо многоточия нужно подставить функцию, записанную на месте «кет». Такая нотация существенно упрощает запись функций. Так, скалярное произведение двух функций Ψ и Φ определяется как

$$\langle \Psi | \Phi \rangle \equiv \int \Psi^* \Phi d\xi. \quad (3.4)$$

Если обе функции Ψ и Φ квадратично-интегрируемы (что следует из того, что они представлены в гильбертовом пространстве), то их скалярное произведение гарантированно существует и интеграл (3.4) даст конечное число. Заметим, в частности, что

$$\langle \Phi | \Psi \rangle = \langle \Psi | \Phi \rangle^*. \quad (3.5)$$

Более того, скалярное произведение Ψ само на себя

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \int |\Psi|^2 d\xi$$

действительно и неотрицательно, за исключением случая $\Psi(\xi) = 0$.

Использование символов «бра» и «кет» подразумевает нормализацию к 1 в бесконечном пространстве

$$\langle n | n \rangle = \int \Psi_n^* \Psi_n d\xi = 1$$

Две функции или два состояния ортогональны, если их скалярное произведение $\langle \Psi | \Phi \rangle = 0$, а набор функций или состояний ($\{\Psi_n\}$ или $\{|n\rangle\}$) называется ортонормированным, если они нормализованы и взаимно ортогональны:

$$\langle \Psi_m | \Psi_n \rangle = \delta_{mn}.$$

Наконец, набор функций или состояний называется полным если любая другая функция (в выбранном пространстве) может быть выражена через их линейную комбинацию:

$$\Psi = \sum_{n=1}^{\infty} c_n |\Psi_n\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \langle \Psi_n | \Psi \rangle |\Psi_n\rangle$$

Тут c_n – коэффициент из разложения Фурье (см. (1.4)). Часто в обозначениях Дирака указывают только индекс базисного элемента, например $|m\rangle$ вместо $|\Psi_m\rangle$.

Ожидаемое значение наблюдаемой Q будет записано как

$$\langle Q \rangle = \int \Psi^* \hat{Q} \Psi d\xi = \langle \Psi | \hat{Q} \Psi \rangle \text{ или } \langle \Psi | \hat{Q} | \Psi \rangle$$

Теперь, поскольку измерение дает вещественную величину и в силу эрмитовости оператора \hat{Q} , среднее множества измерений тоже вещественно:

$$\langle Q \rangle = \langle Q \rangle^*$$

Но комплексное сопряжение скалярного произведения записывается в обратном порядке (см. (3.5)), поэтому

$$\langle \Psi | \hat{Q} \Psi \rangle = \langle \hat{Q} \Psi | \Psi \rangle,$$

и это должно быть справедливо для любой волновой функции. Можно показать аналогично и справедливость более строго условия

$$\langle \Psi | \hat{Q} \Phi \rangle = \langle \hat{Q} \Psi | \Phi \rangle \quad \text{для всех } \Psi \text{ и всех } \Phi \quad (3.6)$$

Пример 3.3. Двухмерное пространство образовано базисом $\{|1\rangle, |2\rangle\}$. Дан вектор $|\alpha\rangle = |1\rangle + i|2\rangle$. Сконструировать вектор $\langle\alpha|$ в сопряженном базисе. Сконструировать матрицу из произведения $|\alpha\rangle\langle\alpha|$. Нормировать $|\alpha\rangle$.

Решение. Сопряженный вектор $\langle\alpha| = \langle 1| - i\langle 2|$. В матричном виде ненормированные вектора примут вид

$$|\alpha\rangle = |1\rangle + i|2\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + i \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \quad \text{и} \\ \langle\alpha| = \langle 1| - i\langle 2| = (1 \ 0) - i(0 \ 1) = (1 \ -i),$$

соответственно произведение

$$|\alpha\rangle\langle\alpha| = \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} (1 \ -i) = \begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & 1 \end{pmatrix}.$$

Нормировочный коэффициент $N = \sqrt{1^2 + |i|^2} = \sqrt{2}$, нормированный вектор $|\alpha\rangle = (|1\rangle + i|2\rangle) / \sqrt{2}$.

Задание 3.5[3]. Даны два вектора

$$|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} 2+i \\ 2+2i \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad |\beta\rangle = \begin{pmatrix} 1+i \\ 1+2i \end{pmatrix}$$

С помощью правила перемножения векторов (3.2) показать, что $\langle\alpha|\beta\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle^*$.

Ответ. $\langle\alpha|\beta\rangle = 9 - 3i$, $\langle\beta|\alpha\rangle = 9 + 3i$.

Задание 3.6[3]. Рассмотрим трехмерное векторное пространство, образованное ортонормированным базисом $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$. Даны векторы $|\alpha\rangle$ и $|\beta\rangle$:

$$|\alpha\rangle = i|1\rangle - |2\rangle - i|3\rangle, \quad |\beta\rangle = i|1\rangle + 2|3\rangle$$

а) Сконструировать $\langle\alpha|$ и $\langle\beta|$ (в сопряженном базисе $\langle 1|, \langle 2|, \langle 3|$).

б) Найдите $\langle\alpha|\beta\rangle$ и $\langle\beta|\alpha\rangle$, подтвердите что $\langle\alpha|\beta\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle^*$.

в) Сконструировать матрицу \mathbf{A} из произведения $|\alpha\rangle\langle\beta|$. Будет ли она эрмитовой (т.е. такой, что $a_{nm} = a_{mn}^*$)?

3.2. Матрицы

Линейное преобразование в пространстве функций осуществляют операторы. В векторном пространстве линейное преобразование \mathbf{T} задается матрицей (соответствующей выбранному базису), которая действует на вектор по правилу умножения матриц. В результате получается новый вектор [1]:

$$T|\alpha\rangle = |\beta\rangle \rightarrow \mathbf{T}\mathbf{a} = \mathbf{b} \rightarrow \begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} & \cdots & t_{1N} \\ t_{21} & t_{22} & \cdots & t_{2N} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ t_{N1} & t_{N2} & \cdots & t_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

Жирным шрифтом обозначаются матрицы.

Пример 3.4. На примере двухмерного вектора состояния $|2, 1\rangle$ покажем несколько простейших операций преобразования:

$$\text{масштабирование в 3 раза по оси } |1\rangle - \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 \\ 1 \end{pmatrix},$$

$$\text{поворот на } 90^\circ \text{ градусов} - \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \end{pmatrix},$$

$$\text{отражение относительно одной из осей} - \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Задание 3.7. Проведите подобные операции масштабирования, отражения и поворота вектора $|3, 5\rangle$

3.2.1. Матрицы операторов. Линейному эрмитову оператору \hat{Q} , действующему на систему ортонормированных базисных функций или состояний $|\Psi_n\rangle$, можно поставить в соответствие матрицу. Для этого, действуя этим оператором на одну из базисных функций $|\Psi_n\rangle$, получаем новую функцию, которая может быть разложена по базисным функциям, т.е.

$$\hat{Q}|\Psi_n\rangle = \sum_m Q_{mn}|\Psi_m\rangle, \text{ где } Q_{mn} = \int_D \Psi_m^* \hat{Q}\Psi_n d\xi = \langle \Psi_m | \hat{Q} | \Psi_n \rangle$$

Или, если расписать сумму подробнее

$$\begin{aligned}\hat{Q}|\Psi_1\rangle &= Q_{11}|\Psi_1\rangle + Q_{21}|\Psi_2\rangle + \dots + Q_{n1}|\Psi_n\rangle \\ \hat{Q}|\Psi_2\rangle &= Q_{12}|\Psi_1\rangle + Q_{22}|\Psi_2\rangle + \dots + Q_{n2}|\Psi_n\rangle \\ &\vdots \\ \hat{Q}|\Psi_n\rangle &= Q_{1n}|\Psi_1\rangle + Q_{2n}|\Psi_2\rangle + \dots + Q_{nn}|\Psi_n\rangle\end{aligned}$$

Здесь Q_{mn} – это элементы матрицы, порождаемой оператором \hat{Q} в системе базовых функций $|\Psi_n\rangle$. О каждом из Q_{mn} говорят как о матричном элементе, соответствующем переходу из состояния n в состояние m под действием оператора \hat{Q} [5, 12]. Можно также сказать, что матричный элемент преобразует компоненты одного вектора состояния $|\alpha\rangle$ к другому вектору $|\beta\rangle$:

$$b_m = \sum_n a_n Q_{mn}$$

Если система обладает некоторым числом независимых линейных состояний n , то в этом случае состояние $|\Psi\rangle$ находится в n -мерном векторном пространстве. В нем состояние будет представлено как столбец из n компонент (соответственно выбранному базису), а операторы примут форму квадратных матриц $n \times n$. В случае бесконечного числа состояний операторы являются квадратными матрицами бесконечной размерности. В случае непрерывного спектра оператор является бесконечномерной непрерывной диагональной матрицей и удобнее записывается в виде интеграла.

Введенное определение матрицы устанавливает ее тесную связь с операторами. Так, вследствие эрмитовости операторов, их матрицы обладают свойством $a_{nm} = a_{mn}^*$. Такие матрицы, у которых комплексно-сопряжены элементы, расположенные симметрично относительно диагонали, называются эрмитовыми.

Далее, необходимым и достаточным условием коммутативности матриц является коммутативность соответствующих операторов. Коммутирование матриц означает, как и в случае операторов, что соответствующие им физические величины могут быть измерены одновременно со сколь угодно большой точностью, и что спектры коммутируемых операторов принадлежат одному и тому же набору базисных функций.

Перестановочный коммутатор операторов p_x и x в матричном виде запишется как $(p_x x)_{mn} - (x p_x)_{mn} = -i\hbar\delta_{mn}$.

Пример 3.5. Эрмитова матрица и матрица, эрмитово-сопряженная с ней (т.е. такая, что $a_{nm} = b_{nm}^*$)

$$\begin{pmatrix} 1 & 3+i \\ 3-i & 2 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 1 & 3-i \\ 3+i & 2 \end{pmatrix}$$

Задание 3.8. Приведите пример эрмитовой матрицы размером 3×3 , найдите эрмитово-сопряженную ей матрицу. Приведите пример не эрмитовой матрицы того же размера.

Пример 3.6. Дано два ортонормированных базисных вектора $|U_1\rangle$ и $|U_2\rangle$. Допустим, что действие оператора \hat{T} на базисные состояния задается уравнениями $\hat{T}|U_1\rangle = 2|U_1\rangle$ и $\hat{T}|U_2\rangle = 3|U_1\rangle - i|U_2\rangle$. Найдем матричное представление оператора \hat{T} :

$$\begin{pmatrix} \langle U_1|\hat{T}|U_1\rangle & \langle U_1|\hat{T}|U_2\rangle \\ \langle U_2|\hat{T}|U_1\rangle & \langle U_2|\hat{T}|U_2\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle U_1|2|U_1\rangle & \langle U_1|(3|U_1\rangle - i|U_2\rangle) \\ \langle U_2|2|U_1\rangle & \langle U_2|(3|U_1\rangle - i|U_2\rangle) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 3 \\ 0 & -i \end{pmatrix}$$

3.2.2. Унитарные преобразования и преобразование координат.

В пространстве обычно можно выбрать бесконечное количество возможных базовых векторов. Но, независимо от их выбора, длина вектора состояния, а также угол между такими векторами, должны оставаться неизменными. Преобразования, изменяющие состояние системы, но не меняющие длину вектора, называются «унитарными» и определяются как

$$\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1},$$

т.е. для унитарного оператора обратный оператор совпадает с комплексно-сопряженным.

Рассмотрим преобразование базиса. Пусть набор $\{f_n\}$ обозначает новый базис, связанный посредством унитарного преобразования \hat{U} со старым базисом φ_n [7]:

$$|f_n\rangle = \sum_p |\varphi_p\rangle \langle \varphi_p | f_n \rangle = \sum_p (U_{np})^* |\varphi_p\rangle, \quad (3.7)$$

где матричные элементы $(U_{np})^* = \langle \varphi_p | f_n \rangle$ (соответственно $U_{np} = \langle f_n | \varphi_p \rangle$) являются проекциями векторов старого базиса на новый.

Теперь рассмотрим, как произвольный вектор Ψ трансформируется в компоненты нового базиса $\{f_n\}$. В новом базисе компоненты вектора

$$\psi'_n = \langle f_n | \Psi \rangle. \quad (3.8)$$

Комплексно-сопряженный набор (3.7) будет

$$\langle f_n | = \sum_p U_{np} \langle \varphi_p | \quad (3.9)$$

Подставим (3.9) в (3.8)

$$\psi'_n = \sum_p U_{np} \langle \varphi_p | \psi \rangle.$$

Это матричное представление уравнения

$$|\psi'\rangle = \hat{U}|\Psi\rangle, \quad (3.10)$$

которое говорит, как вектор состояния трансформируется при смене базиса.

Если $|\varphi\rangle$ и $|\psi\rangle$ – два произвольных вектора гильбертова пространства, то под действием преобразования \hat{U} они преобразуются к векторам $|\varphi'\rangle$ и $|\psi'\rangle$ в соответствии с

$$\begin{aligned} |\varphi'\rangle &= \hat{U}|\varphi\rangle \\ |\psi'\rangle &= \hat{U}|\psi\rangle \end{aligned}$$

Преобразование сохраняет неизменным скалярное произведение

$$\langle \psi' | \varphi' \rangle = \langle \psi | \varphi \rangle.$$

При $|\psi\rangle = |\varphi\rangle$ это произведение даст $\langle \psi' | \psi' \rangle = \langle \psi | \psi \rangle$. Такое преобразование сохраняет длину векторов и угол между ними.

Теперь рассмотрим действие преобразования на операторы. Типичное операторное уравнение записывается как

$$\hat{F}|\varphi\rangle = |\psi\rangle \quad (3.11)$$

В новом базисе оба вектора состояния будут преобразованы в соответствии с (3.10). Поделим оба уравнения на \hat{U}

$$\begin{aligned} |\varphi\rangle &= \hat{U}^{-1}|\varphi'\rangle \\ |\psi\rangle &= \hat{U}^{-1}|\psi'\rangle \end{aligned}$$

и подставим в уравнение (3.11)

$$\hat{F}\hat{U}^{-1}|\varphi'\rangle = \hat{U}^{-1}|\psi'\rangle$$

Домножив на \hat{U} получим

$$\hat{F}'|\varphi'\rangle = |\psi'\rangle,$$

где

$$\hat{F}' = \hat{U}\hat{F}\hat{U}^{-1}. \quad (3.12)$$

Преобразование сохранило форму исходного типичного уравнения. Как и в специальном случае ($\varphi = \psi$) видно, что уравнение на собственные значения для \hat{F} сохраняется при таком преобразовании.

Задание 3.9. В базисе $\{e_1, e_2\}$ задана матрица некоторого оператора

$$A_e = \begin{pmatrix} 0 & -3 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$$

Найти матрицу в базисе $\{f_1, f_2\}$, где $f_1 = 2e_1 + 3e_2$ и $f_2 = e_1 + e_2$.

Решение. Элементы матрицы преобразования $U_{mn} = \langle m|\hat{U}|n\rangle$, в соответствие с правилами перехода $\hat{U}|f_1\rangle = 2|e_1\rangle + 3|e_2\rangle$ и $\hat{U}|f_2\rangle = |e_1\rangle + |e_2\rangle$, будут

$$A_f = \begin{pmatrix} \langle e_1|(2|e_1\rangle + 3|e_2\rangle) & \langle e_1|(|e_1\rangle + |e_2\rangle) \\ \langle e_2|(2|e_1\rangle + 3|e_2\rangle) & \langle e_2|(|e_1\rangle + |e_2\rangle) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 3 & 1 \end{pmatrix}$$

Задание 3.10. Поляризованный свет, распространяющийся вдоль оси z , описывается состояниями правой и левой поляризации, выраженными в состояниях света, поляризованного вдоль осей x и y как

$$|R\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|x\rangle + iy\rangle), \quad |L\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|x\rangle - iy\rangle). \quad (3.13)$$

а. Выразите состояния $|45\rangle$ и $|135\rangle$, соответствующие свету, линейно поляризованному под углами 45° и 135° соответственно, через состояния $|R\rangle$ и $|L\rangle$.

б. Подсчитайте матрицу 2×2 преобразования из базиса $\{45, 135\}$ в $\{R, L\}$. Покажите что матрица преобразования унитарна.

Решение.

а. Поскольку $|45\rangle = (|x\rangle + |y\rangle)/\sqrt{2}$ и $|135\rangle = (|x\rangle - |y\rangle)/\sqrt{2}$, то, выразив $|x\rangle$ и $|y\rangle$ через $|R\rangle$ и $|L\rangle$, получим

$$|45\rangle = (|R\rangle + |L\rangle + i(|R\rangle - |L\rangle))/\sqrt{2}, \quad |135\rangle = (|R\rangle + |L\rangle - i(|R\rangle - |L\rangle))/\sqrt{2}.$$

б. Правила преобразования $|\varphi'\rangle = \hat{U}|\varphi\rangle$ заданы выражениями (3.13). Выразив $|R\rangle$ и $|L\rangle$ через $|45\rangle$ и $|135\rangle$, вычислим матрицу преобразования

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \langle 45|\hat{U}|R\rangle & \langle 45|\hat{U}|L\rangle \\ \langle 135|\hat{U}|R\rangle & \langle 135|\hat{U}|L\rangle \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1+i & 1-i \\ 1-i & 1+i \end{pmatrix}$$

Комплексно-сопряженная и обратная матрица равны, следовательно матрица преобразования унитарна:

$$U^+ = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1-i & 1+i \\ 1+i & 1-i \end{pmatrix}, U^{-1} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1-i & 1+i \\ 1+i & 1-i \end{pmatrix}$$

3.2.3. Квантовые гейты. В квантовом компьютере аналогом обычных битов являются кубиты – т.е. биты, обладающие квантовыми свойствами (q-бит, от *quantum bit*). В качестве кубита может быть использована любая двухуровневая квантово-механическая система – спин электрона, ядерный спин атома, направление поляризации фотона и пр. Такой кубит находится в состоянии ψ , являющемся суперпозицией двух базовых состояний $|0\rangle$ и $|1\rangle$, т.е. $\psi = a|0\rangle + b|1\rangle$. Измерение состояния кубита с вероятностью a^2 даст 0, и с вероятностью $b^2 - 1$, но до момента измерения он находится одновременно в суперпозиции двух состояний. Вследствие этого система из N кубитов имеет 2^N базовых состояний, во всех из которых она находится одновременно. Теоретически это обеспечивает большой параллелизм вычислений.

Внешние воздействия, по определенному алгоритму производящие преобразования над кубитами, называют логическими гейтами (или вентилями). Математически действие гейтов эквивалентно умножению двумерного вектора состояния квантового регистра, состоящего из N кубитов, на унитарную матрицу $2^N \times 2^N$. Отдельные кубиты могут быть приведены в состояние «запутанности», например, тогда, когда нужно инвертировать значение, не проводя измерение, или когда нужно воздействовать на несколько кубитов одновременно.

В течение заданного времени после записи начальных состояний кубиты взаимодействуют друг с другом, а также подвергаются воздействиям логических гейтов. Происходящая при этом эволюция системы сопровождается созданием новых суперпозиций состояний и происходит одновременно во всех возможных состояниях системы.

Пример 3.7. Рассмотрим несколько унитарных преобразований на примере логических гейтов, меняющих состояние кубитов.

Преобразование NOT, переводит кубит из состояния 1 в 0, и наоборот.

$$NOT = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Преобразование Адамара

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

переводит базисные состояния $|0\rangle$ в $\frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}$ и $|1\rangle$ в $\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}$. Представляет собой поворот на π вокруг x и z -оси. Это один из самых важных вентилей, используемых в квантовых алгоритмах. Заметим, что он эрмитов, и что $H^2 = I$.

Фазовый сдвиг

$$Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

действует в базисе состояний $|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$ и $|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$, в котором $Z|+\rangle = |-\rangle$ и $Z|-\rangle = |+\rangle$.

X -, Y - и Z -преобразования Паули вращают кубит вокруг соответствующих осей сферы Блоха на π радиан

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad Y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

3.2.4. Собственные значения и собственные вектора. Задавание матрицы эквивалентно заданию самого оператора. В частности, оно позволяет определить собственные значения данной величины и соответствующие им собственные функции. Собственные значения и вектора матриц находятся в однозначном соответствии собственным значениям и функциям соответствующих им операторов.

Если умножить квадратную матрицу \mathbf{A} на произвольный ненулевой вектор-столбец \mathbf{x} , то в общем случае получится новый вектор. Если направление нового вектора не меняется и он отличается только длиной, т.е. выполняется условие

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}, \quad (3.14)$$

где λ – комплексное число, то такой вектор и такое число называются «собственными». Условие можно переписать в виде

$$(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})\mathbf{x} = \mathbf{0}, \quad (3.15)$$

где \mathbf{I} – единичная матрица.

Для матрицы 2×2 равенство (3.14) запишется в виде:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix},$$

а условие (3.15) в виде

$$\left[\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{21} \end{pmatrix} - \lambda \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} - \lambda & a_{12} \\ a_{21} & a_{21} - \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = \mathbf{0}, \quad (3.16)$$

что даст систему из двух уравнений

$$\begin{cases} (a_{11} - \lambda)u_1 + a_{12}u_2 = 0 \\ a_{21}u_1 + (a_{22} - \lambda)u_2 = 0 \end{cases} . \quad (3.17)$$

Нужно, чтобы система (3.16) имела нетривиальное (ненулевое) решение. Это означает, что нулевым должен быть детерминант матрицы $(\mathbf{A} - \lambda I)$, что и дает уравнение на собственные числа $|\mathbf{A} - \lambda I| = 0$, для нашего случая это

$$\begin{vmatrix} a_{11} - \lambda & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} - \lambda \end{vmatrix} = 0$$

Раскрыв определитель и приравняв его нулю, получим решения $\lambda_{1,2}$. После того, как собственные числа найдены, надо каждое из них по очереди подставить в систему (3.17) и решить ее. Результатом будут соответствующие собственные векторы. Следует иметь в виду, что они не будут единственными, т.к. каждый собственный вектор определен с точностью до произвольного постоянного множителя.

Пример 3.8. Найдем собственные числа и собственные векторы матрицы

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

Решение.

$$\begin{vmatrix} 1 - \lambda & 1 \\ 1 & 1 - \lambda \end{vmatrix} = (1 - \lambda)^2 - 1 = \lambda^2 - 2\lambda$$

Отсюда собственные числа 0 и 2. Теперь нужно решить последовательно две системы уравнений. Первая система, для $\lambda = 0$

$$\begin{cases} (1 - 0)u_1 + 1u_2 = 0 \\ 1u_1 + (1 - 0)u_2 = 0 \end{cases} ,$$

имеет решения при $u_1 = -u_2$, второе – при $u_1 = u_2$. Возможные собственные вектора

$$\begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Если векторы дополнительно нормировать на единицу, то собственные вектора будут

$$\begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

Задание 3.11. Найдите собственные числа и собственные векторы матрицы

$$\text{а) } \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \text{ б) } \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}$$

Ответ. Собственные числа а) 1 и -1 , б) -1 и 3, собственные вектора

$$\text{а) } \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}; \text{ б) } \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Задание 3.12. Найдите собственные числа и собственные векторы матриц

$$\begin{pmatrix} 1 & -3 & 4 \\ 4 & -7 & 8 \\ 6 & -7 & 7 \end{pmatrix}$$

Ответ. Собственные числа -1 и 3, собственные вектора

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix}$$

Задание 3.13. Дана матрица

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}.$$

Найдите собственные значения и собственные вектора \mathbf{M} [3].

Задание 3.14. Дана матрица

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Найдите собственные значения и собственные вектора \mathbf{M} [3].

3.3. Матрицы гамильтониана

Особо важный класс квантово-механических матриц образуется, когда в качестве базисных функций берутся собственные функции гамильтониана \hat{H} . Такой базис, или представление, называют энергетическим. Такое представление удобно в т.ч. потому, что энергетический

спектр систем практически всегда дискретный. Рассмотрим матрицу гамильтониана в его собственном, энергетическом представлении.

Оператору \hat{H} , действующему на систему ортонормированных функций Ψ_n , ставится в соответствие матрица $\hat{H}\Psi_n = \sum H_{nm}\Psi_m$. Если для стационарных состояний разделить переменные $\Psi_n^m = \psi_n(\xi)e^{-iE_n t/\hbar}$, то

$$H_{nm}(t) = \int \Psi_n^* \hat{H} \Psi_m d\xi = \int \psi_n^* \hat{H} \psi_m d\xi e^{i\omega_{nm}t} = H_{nm} e^{i\omega_{nm}t},$$

где $\omega_{nm} = (E_n - E_m)/\hbar$ – частота перехода. Матрица, образованная элементами $H_{nm}(t)$ – диагональная, т.к.

$$H_{nm} = \int \psi_n^* \hat{H} \psi_m d\xi = E_m \int \psi_n^* \psi_m d\xi = E_m \delta_{nm}, \quad (3.18)$$

на главной диагонали – собственные значения энергии (при условии, что функции, соответствующие вырожденным значениям, взаимно ортогональны), которые, во-первых, вещественны, а во-вторых – не зависят от времени. Заметим, что это общее свойство матриц всех операторов в собственном представлении – они диагональны, а на главной диагонали стоят собственные числа операторов. Выражение (3.18) можно также явно записать в виде диагональной матрицы

$$H = \sum_n E_n |n\rangle \langle n| = \sum_n \hbar \omega_n |n\rangle \langle n|$$

Если базис выбран другой, то сведение матрицы гамильтониана к диагональному виду (т.е. нахождение ее собственных значений), эквивалентно решению дифференциального уравнения Шрёдингера [1].

Пример 3.9. Для частицы, находящейся в бесконечно глубокой потенциальной яме, образованный собственными функциями гамильтониана базис будет

$$\mathfrak{B} = \frac{2}{L} \left\{ \sin \frac{\pi x}{L}, \sin \frac{2\pi x}{L}, \sin \frac{3\pi x}{L}, \dots \right\},$$

матрица гамильтониана в энергетическом представлении

$$H = E_1 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 4 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 9 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} = \sum_n^\infty E_n |n\rangle \langle n|$$

Пример 3.10. Базис пространства одномерного осциллятора будет (из (2.17))

$$\mathfrak{B} = e^{-\beta x^2/2} \{A_1 H_1(\beta x), A_2 H_2(\beta x), A_3 H_3(\beta x), \dots\}.$$

Матрица гамильтониана в этом представлении

$$H = \hbar\omega_0 \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 3/2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 5/2 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

Пример 3.11. Собственные функции $\{|n\rangle\}$ гамильтониана гармонического осциллятора являются векторами-столбцами, у которых от нуля отличается только ячейка $n + 1$:

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \dots$$

Зависящие от времени собственные состояния гамильтониана получаются добавлением временного множителя:

$$\Psi_0 = e^{-iE_0 t/\hbar} |0\rangle = e^{-i\omega t/2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \Psi_1 = e^{-i3\omega t/2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \dots$$

Пример 3.12. Выражения для операторов рождения и уничтожения в энергетическом представлении

$$a_{nk+} = \langle n|\hat{a}_+|k\rangle = k^{1/2}\langle n|n-k\rangle = k^{1/2}\delta_{n,k-1}$$

$$a_{nk-} = \langle n|\hat{a}_-|k\rangle = (k+1)^{1/2}\langle n|n+k\rangle = (k+1)^{1/2}\delta_{n,k+1}$$

дают матрицы

$$a_- = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \text{ и } a_+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

Сравним действия операторов a_+ и a_- на состояние $|1\rangle$.

$$a_-|1\rangle = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} = \sqrt{1} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} = |0\rangle$$

$$a_+|1\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} = \sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} = \sqrt{2}|3\rangle$$

Пример 3.13. Оператор числа фотонов $\hat{N} = \hat{a}_+ \hat{a}_-$ в энергетическом представлении имеет диагональный вид

$$\hat{N} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 2 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 3 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 4 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

Понятно, что умножение \hat{N} на вектор состояния $|n\rangle$ даст $n|n\rangle$, где n – число фотонов.

3.3.1. Гамильтонианы многоуровневых систем [3]. С помощью матрицы гамильтониана можно описать поведение многоуровневой системы. Представим систему, образованную двумя линейными независимыми состояниями [3]:

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ и } |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Состояние в общем случае является нормализованной линейной комбинацией

$$|\Psi\rangle = a|1\rangle + b|2\rangle, \text{ где } |a|^2 + |b|^2 = 1.$$

Собственные вектора состояний и собственные значения оператора \hat{H} связываются стационарным уравнением Шрёдингера (2.4): $\hat{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$. Эволюция состояния во времени задается уравнение Шрёдингера (2.1)

$$i\hbar \frac{d}{dt}|\Psi\rangle = \hat{H}|\Psi\rangle.$$

Предположим что гамильтониан системы

$$H = \begin{pmatrix} h & g \\ g & h \end{pmatrix},$$

где g и h – вещественные константы. Вопрос – если система в начальном положении (при $t = 0$) находится в состоянии $|1\rangle$, то какого ее состояние в момент времени t ?

Начнем со стационарного уравнения Шрёдингера. Запишем уравнения для определения собственных значений в виде детерминанта

$$\begin{vmatrix} h - E & g \\ g & h - E \end{vmatrix} = (h - E)^2 - g^2 = 0 \Rightarrow E_{\pm} = h \pm g.$$

Очевидно, что допустимы уровни энергии системы $(h + g)$ и $(h - g)$. Для нахождения собственных векторов умножим матрицу оператора \hat{H} на искомый вектор, записанный как столбец:

$$\begin{pmatrix} h & g \\ g & h \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = (h \pm g) \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \Rightarrow h\alpha + g\beta = (h \pm g)\alpha \Rightarrow \beta = \pm\alpha.$$

Тогда нормализованные векторы запишутся как

$$|\Psi_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix}.$$

Теперь представим начальное состояние в виде линейной комбинации состояний собственных векторов оператора Гамильтона:

$$|\Psi(0)\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\Psi_{+}\rangle + |\Psi_{-}\rangle).$$

Наконец, мы добавим зависящую от времени часть $e^{-iE_n t/\hbar}$:

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= \frac{[e^{-i(h+g)t/\hbar}|\Psi_{+}\rangle + e^{-i(h-g)t/\hbar}|\Psi_{-}\rangle]}{\sqrt{2}} = \frac{e^{-iht/\hbar}}{2} \left[e^{-igt/\hbar} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + e^{igt/\hbar} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \right] = \\ &= \frac{e^{-iht/\hbar}}{2} \begin{pmatrix} e^{-igt/\hbar} + e^{igt/\hbar} \\ e^{-igt/\hbar} - e^{igt/\hbar} \end{pmatrix} = e^{-iht/\hbar} \begin{pmatrix} \cos(gt/\hbar) \\ -i \sin(gt/\hbar) \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Результат фактически аналогичен тому, что было получено при рассмотрении суперпозиции стационарных состояний – состояние изолированной системы осциллируют во времени. Если в момент времени $t = 0$ система была в состоянии $|1\rangle$, и гамильтониан имеет ненулевые внедиагональные элементы (в нашем случае это g), то вероятность обнаружения системы в каком-либо из состояний будет носить периодический характер, поскольку с течением времени она окажется в состоянии $|2\rangle$ и затем вернется обратно.

Задание 3.15. Показать, что результат предыдущего примера удовлетворяет уравнению Шрёдингера, указать состояние системы в момент времени $t = 0$ [3].

Пример 3.14. Рассмотрим двухуровневую систему. Собственные состояния удовлетворяют равенствам

$$\begin{aligned} H_0|1\rangle &= \hbar\omega_1|1\rangle \\ H_0|2\rangle &= \hbar\omega_2|2\rangle \end{aligned}$$

Так что полный гамильтониан системы H_0 в базисе $\{|1\rangle, |2\rangle\}$ будет представляется матрицей

$$H_0 = \hbar\omega_1|1\rangle\langle 1| + \hbar\omega_2|2\rangle\langle 2| = \hbar \begin{pmatrix} \omega_1 & 0 \\ 0 & \omega_2 \end{pmatrix}$$

Эволюция системы во времени будет задаваться как

$$|\Psi(t)\rangle = |1\rangle e^{-i\omega_1 t} \langle 1|\Psi(0)\rangle + |2\rangle e^{-i\omega_2 t} \langle 2|\Psi(0)\rangle$$

Предположим, что мы изменили гамильтониан, например включив внешнее поле. Теперь $H = H_0 + W$, где оператор потенциального поля

$$\begin{aligned} W &= \begin{pmatrix} W_{11} & W_{12} \\ W_{12}^* & W_{22} \end{pmatrix} \\ H &= \begin{pmatrix} \hbar\omega_1 + W_{11} & W_{12} \\ W_{12}^* & \hbar\omega_2 + W_{22} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Задание 3.16. Что случится с энергией собственных состояний в предыдущем примере? Если внедиагональные элементы задают вероятность перехода между состояниями, то можно ли таким образом вызвать переходы из $|1\rangle$ в $|2\rangle$?

Задание 3.17. Гамильтониан некоторой трехуровневой системы представлен матрицей

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} a & 0 & b \\ a & c & 0 \\ b & 0 & a \end{pmatrix},$$

где a , b и c – действительные числа (пусть $a - c \neq \pm b$) [3]. Найти $|\Psi(t)\rangle$, если начальное состояние системы

$$\text{а) } |\Psi(0)\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \text{б) } |\Psi(0)\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Задание 3.18[10]. Молекула двуокиси углерода CO_2 имеет линейную структуру (ОСО) и легко присоединяет лишний электрон, превращаясь в отрицательный ион. Предположим, что этот электрон будет иметь энергию E_O , если присоединится к атому кислорода, и E_C , если к атому углерода. Однако эти энергии не соответствуют стационарным состояниям, поскольку существует вероятность перехода лишнего электрона с кислорода на углерод и обратно (вероятностью перехода с одного атома кислорода на другой можно пренебречь). Задание – а) получить значения уровней энергии молекулы и б) дать физическое описание для случая, если $E_O = E_C$ и $A^* = A$.

Решение. Пронумеруем атомы в составе молекулы по порядку: 1 – О, 2 – С, 3 – О, волновая функция электрона в молекуле в нашем случае образуется тремя базисными состояниями. Составим вековой определитель матрицы энергии в общем виде и примем следующие допущения – $H_{13} = H_{31} = 0$, т.к. переходом между атомами кислорода пренебрегаем по условиям, обозначим уровни энергии как $H_{11} = H_{33} = E_O$, $H_{22} = E_C$, матричные элементы перехода между состояниями как $H_{12} = H_{32} = A$ (из-за симметрии молекулы) и комплексно сопряженные им элементы как $H_{21} = H_{23} = A^*$:

$$\begin{vmatrix} H_{11} - E & H_{12} & H_{13} \\ H_{21} & H_{22} - E & H_{23} \\ H_{31} & H_{32} & H_{33} - E \end{vmatrix} \Rightarrow \begin{vmatrix} E_O - E & A & 0 \\ A^* & E_C - E & A^* \\ 0 & A & E_O - E \end{vmatrix}$$

Раскрытый определитель даст $\det = (E_O - E)^2(E_C - E) - 2AA^*(E_O - E)$. Приравняем определитель к нулю и решим получившееся квадратное уравнение относительно E . Получится три значения энергии:

$$E_1 = E_O, \quad E_{2,3} = \frac{E_O + E_C}{2} \pm \sqrt{\frac{(E_O + E_C)^2}{4} - (E_O \cdot E_C - 2AA^*)}$$

Т.е. один уровень совпадает с энергией электрона, находящегося на атоме кислорода, а два других – отстоят на равном расстоянии от среднего уровня энергии двух атомов.

Теперь из системы уравнений (4.5) найдем коэффициенты разложения по базисным состояниям, считая что $E_O = E_C$ и $A^* = A$:

$$\begin{cases} c_1 \cdot (E_O - E_i) + c_2 \cdot A & + c_3 \cdot 0 & = 0 \\ c_1 \cdot A & + c_2 \cdot (E_O - E_i) + c_3 \cdot A & = 0 \\ c_1 \cdot 0 & + c_2 \cdot A & + c_3 \cdot (E_O - E_i) = 0 \end{cases}$$

Подставляя значения E_i и решая систему уравнений относительно c_i (учитывая $\sum_i |c_i|^2 = 1$) получаем следующие решения:

- 1) $E_1 = E_O, \quad c_1 = c_3 = 1/\sqrt{2}, \quad c_2 = 0,$
- 2) $E_2 = E_O + |A|\sqrt{2}, \quad c_1 = c_3 = 1/2, \quad c_2 = +1/\sqrt{2},$
- 3) $E_3 = E_O - |A|\sqrt{2}, \quad c_1 = c_3 = 1/2, \quad c_2 = -1/\sqrt{2}.$

Физическое описание следующее: в состоянии молекулы на уровне E_1 электрон с вероятностью 50% обнаружится на одном из атомов кислорода ($c_{1,3}^2 = 1/2$), в состояниях $E_{2,3}$ вероятность обнаружения электрона на атоме углерода 50% ($c_2^2 = 1/2$) и по 25% – на атомах кислорода ($c_{1,3}^2 = 1/4$).

Следует иметь в виду, что полная система уравнений для рассмотренной молекулы гораздо сложнее и учитывает большее количество условий, а также то, что $A^* \neq A$.

Задание 3.19[10]. В молекуле метана CH_4 атомы водорода располагаются в вершинах октаэдра, атом углерода – в его центре. В результате ионизации на одной из четырех связей углерода с водородом образуется «дырка», которая может «перескакивать» с одной связи на другую. Это пример системы с четырьмя состояниями. Опираясь на соображения симметрии молекулы, сведите к минимуму число матричных элементов векового определителя и предскажите число различных энергетических уровней, которые должны наблюдаться у электронной оболочки иона метана. Выразите расстояние между уровнями через минимально возможное число матричных элементов.

Решение. Составим вековой определитель, корнями которого будут уровни энергии E , при которых система устойчива. Поскольку молекула CH_4 образует правильный октаэдр, в котором любой атом водорода расположен одинаковым образом относительно других атомов водорода, то значения матричных элементов, соответствующих переходу дырки с одной связи на другую, одинаковы:

$H_{12} = H_{21} = H_{13} = H_{31} = \dots = v$, причем $v = v^*$. Из тех же соображений симметрии $H_{11} = H_{22} = \dots = H_{33} = H_{44} = E_0$. Составив определитель, прибавим к первому столбцу остальные, затем вычтем первую строку из остальных:

$$\begin{aligned} & \begin{vmatrix} E_0 - E & v & v & v \\ v & E_0 - E & v & v \\ v & v & E_0 - E & v \\ v & v & v & E_0 - E \end{vmatrix} = \\ & = \begin{vmatrix} E_0 + 3v - E & v & v & v \\ 3v + E_0 - E & E_0 - E & v & v \\ 3v + E_0 - E & v & E_0 - E & v \\ 3v + E_0 - E & v & v & E_0 - E \end{vmatrix} = \\ & = \begin{vmatrix} E_0 + 3v - E & v & v & v \\ 0 & E_0 - v - E & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_0 - v - E & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_0 - v - E \end{vmatrix} = \\ & = (E_0 + 3v - E)(E_0 - v - E)^3 = 0. \end{aligned}$$

Отсюда $E_{1,2,3} = E_0 - v$, $E_4 = E_0 + 3v$. Четвертый уровень отделен от первых трех интервалом $4|v|$.

3.4. Многочастичные системы

Представим две квантовые системы – первая имеет n различающихся состояний (и описывается n -мерным гильбертовым пространством L^n), вторая – m состояний (и описывается m -мерным пространством L^m). Число состояний системы, образованной двумя такими системами, будет равно $n \cdot m$, поскольку каждая пара состояний образует новое состояние общей системы. Гильбертово пространство, сопоставленное объединенной системе, будет L^{nm} .

Математически объединение пространств V и W с размерностью n и m соответственно в пространство размерностью nm показывается с помощью тензорного произведения $V \otimes W$. Пусть системы A и B обладали базисами $\{|\alpha_1\rangle, \dots, |\alpha_n\rangle\}$ и $\{|\beta_1\rangle, \dots, |\beta_m\rangle\}$ соответственно, тогда возможным базисом пространства объединенной системы будет

$$\{|\alpha_1\rangle \otimes |\beta_1\rangle, |\alpha_1\rangle \otimes |\beta_2\rangle, \dots, |\alpha_n\rangle \otimes |\beta_{m-1}\rangle, |\alpha_n\rangle \otimes |\beta_m\rangle\},$$

где пары образуют все сочетания индексов от 0 до n для $|v\rangle$ и от 0 до m для $|w\rangle$, поэтому размерность пространства будет равна $n \cdot m$.

Вектор состояния общей системы может быть записан в базисе тензорного произведения подпространств

$$|\Psi\rangle = \sum_{m,n} C_{m,n} |\alpha_m\rangle \otimes |\beta_n\rangle,$$

тогда состояние называется факторизуемым (или сепарабельным).

В общем случае системы, состоящей из двух частей, произвольное состояние $|\Psi\rangle$ необязательно факторизуемо и между двумя квантовыми подсистемами имеется квантовая корреляция. Такое состояние $|\Psi\rangle$ называется «запутанным» [1].

Пример 3.15. Кубит описывается двухмерным пространством L^2 и имеет два состояния $|0\rangle$ и $|1\rangle$. Система из двух кубитов $V = L^2 \otimes L^2$ опишется четырехмерным пространством, возможные состояния которого будут $|0\rangle \otimes |0\rangle$, $|1\rangle \otimes |0\rangle$, $|0\rangle \otimes |1\rangle$ и $|1\rangle \otimes |1\rangle$, или $|00\rangle$, $|10\rangle$, $|01\rangle$, $|11\rangle$.

Система из n кубитов опишется пространством

$$L^2 \otimes \dots \text{ (n раз) } \dots \otimes L^2 = L^{2^n}$$

Пример 3.16. Рассмотрим случай, когда квантовое состояние одной частицы определяется комплексным числом для каждого возможного положения, которое может занимать частица. В случае двух частиц возможные положения частиц образуют набор вариантов взаимного расположения, каждый из которых должен иметь некоторую амплитуду вероятности. Следовательно, волновая функция должна быть не просто функцией наложения, а функцией двух положений.

Предположим, что разрешены 3 положения, заданных ортонормированными состояниями $|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle$. Тогда состояние $|\psi\rangle$ одной частицы описывается линейной комбинацией

$$|\psi\rangle = a_0|0\rangle + a_1|1\rangle + a_2|2\rangle,$$

где a_i задают амплитуды вероятности. В случае двухчастичного состояния потребуется по амплитуде для каждой пары положений, т.е. $3^2 = 9$. Они будут описаны в новых базисных векторах $|0\rangle|0\rangle$, $|0\rangle|1\rangle$, $|1\rangle|1\rangle \dots |2\rangle|2\rangle$, а общее двухчастичное состояние будет представлено как

$$|\psi\rangle = a_{00}|0\rangle|0\rangle + a_{01}|0\rangle|1\rangle + a_{11}|1\rangle|1\rangle + \dots + a_{22}|2\rangle|2\rangle.$$

Произведение $|\alpha\rangle|\beta\rangle$ интерпретируется как конъюнкция «первая система находится в состоянии $|\alpha\rangle$ » и «вторая система находится в состоянии $|\beta\rangle$ »

Пример 3.17. Рассмотрим две не взаимодействующие системы A и B , которым соответствуют пространства H_A и H_B . Гильбертово пространство объединенной системы будет тензорным произведением $H_A \otimes H_B$. Если первая система находится в состоянии $|\Psi\rangle_A$, а вторая – $|\Phi\rangle_B$, то состояние объединенной системы будет $|\psi\rangle_A \otimes |\varphi\rangle_B$. Это сепарабельные состояния.

Теперь зафиксируем базис $\{|i\rangle_A\}$ для H_A и базис $\{|j\rangle_B\}$ для H_B . В общем случае состояние $H_A \otimes H_B$ записывается в форме

$$|\psi\rangle_{AB} = \sum_{i,j} c_{ij} |i\rangle_A \otimes |j\rangle_B.$$

Это состояние сепарабельно, если $c_{ij} = c_i^A c_j^B$ ($|\psi\rangle_A = \sum_i c_i^A |i\rangle_A$ и $|\varphi\rangle_B = \sum_j c_j^B |j\rangle_B$). И несепарабельно (и называется запутанным), если $c_{ij} \neq c_i^A c_j^B$.

Например, дан двумерный базис $\{|0\rangle_A, |1\rangle_A\}$ для H_A , и базис $\{|0\rangle_B, |1\rangle_B\}$ для H_B . Запутанным будет следующее состояние:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle_A \otimes |1\rangle_B - |1\rangle_A \otimes |0\rangle_B)$$

Составную систему, находящуюся в таком состоянии, невозможно факторизовать на системы A и B , описанные в чистом состоянии.

3.5. Матрица плотности

Выше мы имели дело с чистыми состояниями, описываемыми суперпозицией

$$|\Psi\rangle = \sum_n \alpha_n |n\rangle.$$

Но это не самое общее состояние, которое можно представить. Мы можем рассмотреть и вероятностное распределение чистых состояний, такое как $|0\rangle$ с вероятностью $1/2$ и $|1\rangle$ с вероятностью $1/2$. Или, например, смесь суперпозиций состояний

$$\begin{cases} |+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \\ |-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) \end{cases}$$

В общем случае мы можем представить смешанное состояние как набор чистых состояний $|\Psi_n\rangle$, каждое из которых связано с вероятностью p_n и ограничено условиями $0 \leq p_n \leq 1$ и $\sum_n p_n = 1$.

Акцент на смешанных состояниях и способе их описания важен по нескольким причинам. Во-первых, состояние системы редко бывает «чистым». Часто реальная система является статистическим ансамблем подсистем, и результаты эксперимента определяются определенным усредненным значением. Наглядным примером смешанного состояния является лазерный пучок, поскольку фотоны в нем имеют определенный разброс параметров (поляризация, частота, направление). Во-вторых, вследствие взаимодействия с окружающей средой чистое состояние системы, пребывающей в состоянии квантовой суперпозиции, довольно быстро теряет определенные фазовые соотношения между долями состояниями. При этом чистое состояние разрушается, происходит «декогеренция». Примерами таких процессов являются нестабильность кубита в квантовых вычислителях и разделение сцепленного (чистого) состояния между участниками обмена при квантовой криптографии [1].

Теперь рассмотрим результат измерения смешанного квантового состояния. Предположим, что мы имеем смесь квантовых состояний $|\Psi_n\rangle$ с вероятностями p_n . Каждое состояние $|\Psi_n\rangle$ может быть представлено вектором в гильбертовом пространстве и ассоциировано с оператором плотности $\rho_n = |\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|$, который является матрицей $2^n \times 2^n$. Мы теперь можем взять среднее этих матриц и получить матрицу плотности смеси $\{\rho_n, |\Psi_n\rangle\}$:

$$\rho = \sum_n p_n |\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|.$$

Свойства матрицы плотности [13]: оператор плотности и матрица – эрмитовы, диагональные элементы матрицы (и собственные значения Π_n оператора плотности) неотрицательны и находятся в диапазоне от 0 до 1, след матрицы всегда равен 1. Для чистого состояния также выполняется равенство $\rho^2 = \rho$.

Физический смысл диагональных элементов – вероятность обнаружения системы с соответствующим состоянием или, например, населенность соответствующих уровней. Физический смысл внедиагональных элементов, во-первых – вероятность перехода между состояниями, и во-вторых – учитывая то, что они представляют собой усреднение коэффициентов с фазовыми множителями вида $a_n e^{i\varphi}$, они говорят о «когерентности» в ансамбле между двумя состояниями, т.е. о наличии одинаковой разности фаз между состояниями для всех систем в ансамбле [9].

Ожидаемое значение системы равно следу произведения матрицы плотности с матрицей оператора (Tr или Sp, от англ. *Trace* или нем. *Spur*):

$$\langle A \rangle = \text{Sp}(\rho A)$$

Эволюция во времени вектора состояния $|\Psi\rangle$ определяется уравнением Шрёдингера, поэтому эволюция оператора плотности также задается уравнением

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho}(t) = [\hat{H}(t), \hat{\rho}(t)],$$

при этом сумма диагональных элементов должна оставаться равной единице, а сумма производных диагональных элементов – нулю, т.к. общая населенность не меняется, и скорость уменьшения одних элементов равна скорости увеличения других.

Описание с помощью матрицы плотности является наиболее общей формой квантовомеханического описания систем. Описание с помощью волновой функции является частным случаем описания с помощью матрицы плотности.

Пример 3.18. Рассмотрим матрицу плотности системы $|+\rangle$, образованной суперпозицией двух состояний

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |2\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Матрица плотности такой системы

$$\rho_{|+\rangle} = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

Равенство элементов главной диагонали говорит об одинаковой вероятности регистрации каждого их состояний. Перемножив матрицу саму на себя можно показать, что $\rho = \rho^2$.

Пример 3.19. Теперь рассмотрим смесь состояний $|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, представленного с вероятностью $1/2$, и $|1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ с той же вероятностью. Тогда

$$|0\rangle\langle 0| = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

и

$$|1\rangle\langle 1| = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

В этом случае матрица плотности

$$\rho = \frac{1}{2}|0\rangle\langle 0| + \frac{1}{2}|1\rangle\langle 1| = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix}.$$

Видно, что $\rho \neq \rho^2$.

Задание 3.20. Найти матрицу плотности смеси состояний $|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ и $|-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$, имеющих одинаковую вероятность $1/2$.

Ответ. $\rho = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix}$.

Заметим, что матрицы плотности могут оказаться идентичными несмотря на то, что изначально смешиваются разные состояния. Тем не менее, матрица плотности смеси полностью определяет результаты измерения системы.

Задание 3.21[11]. Составьте матрицу плотности для следующих состояний суперпозиции:

- а) $|2\rangle$,
- б) $(|1\rangle + |2\rangle)/\sqrt{2}$,
- в) $(1/\sqrt{3}|1\rangle) + (\sqrt{2/3}i|2\rangle)$.

Пример 3.20. Рассмотрим эксперимент Штерна-Герлаха. Вдоль оси x летят атомы серебра. В атоме серебра на верхней орбите $5s$ находится всего один электрон, благодаря чему его спин может быть измерен вместе с атомом. Выберем два базовых состояния $|\uparrow\rangle$ и $|\downarrow\rangle$, соответствующие направления спина вверх и вниз соответственно (в то время как измерение состояний по-отдельности даст только проекции на вертикальную ось). Суперпозиция таких состояний при измерении даст спин $|\uparrow_x\rangle$, направленный вдоль оси x . Покажем это:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \hat{\rho} = |\uparrow_x\rangle\langle\uparrow_x| = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

Теперь найдем среднее значение спина при измерениях по всем трем осям. Оператор спина $\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}\sigma_x$:

$$\langle S_x \rangle = \text{Sp}(\hat{\rho}\hat{S}_x) = \frac{\hbar}{2} \frac{1}{2} \text{Sp} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}$$

$$\langle S_y \rangle = \text{Sp}(\hat{\rho}\hat{S}_y) = \frac{\hbar}{2} \frac{1}{2} \text{Sp} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = 0$$

$\langle S_z \rangle$ также равен нулю.

Теперь рассмотрим смесь состояний $|\uparrow\rangle$ и $|\downarrow\rangle$, взятых в равных пропорциях:

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + \frac{1}{2}|\downarrow\rangle\langle\downarrow| = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Для такой системы след $\text{Sp}(\rho S_x) = 0$, то же самое для S_y и S_z . Этот же нулевой результат будет, если смешать состояния

$$|\uparrow_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) \quad \text{и} \quad |\downarrow_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle),$$

т.к. это даст такую же матрицу плотности. А состояние, чистое либо смешанное, сохраняется независимо от выбора базиса.

Пример 3.21. В качестве примера статистического состояния системы рассмотрим состояния поляризации монохроматического светового пучка [14]. Если зафиксировать дополнительные оптические степени свободы (направление распространения и частоту), то пучок будет иметь только два независимых состояния, соответствующих двум линейным поляризациям. Поскольку возможны только два независимых состояния поляризации, применим двумерное гильбертово пространство. Тогда чистое состояние, отвечающее 100%-ой поляризации, можно будет представить нормированным двухкомпонентным вектором

$$|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}, \quad \langle\Psi|\Psi\rangle = |u_1|^2 + |u_2|^2 = 1. \quad (3.19)$$

Значения u_n определяют характер поляризации. Например, при $u_1 = 0$, $u_2 \neq 0$ (или наоборот) свет линейно поляризован. Если $u_1 = u_2$, то свет поляризован по кругу, а если $u_1 = \pm iu_2$, то поляризован циркулярно. В общем случае, когда $u_1 \neq u_2$, свет поляризован эллиптически.

Матрица плотности чистого состояния (3.19) представляет собой эрмитову матрицу второго порядка со следом, равным единице:

$$\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi| = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1^* & u_2^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_1^*u_1 & u_2^*u_1 \\ u_1^*u_2 & u_2^*u_2 \end{pmatrix}.$$

Степень поляризации \wp , независимо от вида поляризации, если ρ_1 и ρ_2 – собственные значения матрицы ρ , будет равна

$$\wp = (\rho_1 - \rho_2)^2$$

Для чистого состояния степень поляризации $\wp = 1$, а для смешанного состояния $\wp < 1$. Полностью хаотическое состояние имеет степень поляризации $\wp = 0$ и задается матрицей плотности

$$\rho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Такое излучение можно разложить по любым двум ортогональным поляризациям с одинаковыми вероятностями.

ПРИБЛИЖЕННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ

4.1. Стационарная теория возмущений

Точное решение уравнения Шрёдингера может быть найдено лишь в небольшом числе простейших случаев, большинство других задач квантовой механики приводит к слишком сложным уравнениям. Однако, часто в условиях задачи оказываются малые величины, после пренебрежения которыми задача упрощается настолько, что становится возможным её точное решение. В таком случае первый шаг в решении поставленной задачи состоит в решении упрощенной задачи, а второй – в приближенном вычислении поправок, обусловленных малыми членами, отброшенными в упрощенной задаче. Такой метод вычисления называется теорией возмущений [5, 15].

Предположим, что нам известны собственные значения $E_n^{(0)}$ и собственные функции $\psi_n^{(0)}$ гамильтониана невозмущенной системы \hat{H}_0 : $\hat{H}_0\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(0)}$, и необходимо определить энергии и собственные функции возмущенного гамильтониана: $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$, где \hat{V} – малая поправка (возмущение) к «невозмущенному» оператору \hat{H}_0 .

Истинные энергии и волновые функции возмущенной системы записываются в виде рядов, суммирующих поправки

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \dots, \quad \psi_n = \psi_n^{(0)} + \psi_n^{(1)} + \psi_n^{(2)} + \dots$$

Введем матрицу V_{mn} оператора возмущения \hat{V} , определенную с помощью невозмущенных функций $\psi_n^{(0)}$:

$$V_{mn} = \int \psi_m^{(0)*} \hat{V} \psi_n^{(0)} d\xi$$

Поправка первого порядка к собственному значению $E_n^{(1)}$ будет равна среднему значению возмущения в состоянии $\psi_n^{(0)}$:

$$E_n^{(1)} = V_{nn} = \int \psi_n^{(0)*} \hat{V} \psi_n^{(0)} d\xi = \langle \psi_n^{(0)*} | \hat{V} | \psi_n^{(0)} \rangle. \quad (4.1)$$

Поправка первого порядка к волновой функции будет

$$\psi_n^{(1)} = \sum'_m \frac{\int \psi_m^{(0)*} \hat{V} \psi_n^{(0)} d\xi}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)}, \quad (4.2)$$

штрих у знака суммы означает, что при суммировании по m надо опустить член с $m = n$. Из формулы видно условие применимости рассматриваемого метода – матричные элементы возмущения должны быть малы в сравнении с соответствующими разностями невозмущенных уровней энергии. В противном случая ряд, образованный поправками, окажется расходящимся.

Иногда достаточно учесть лишь поправку первого порядка к энергии, но часто все же необходимо рассчитать еще и поправку второго порядка. Она вычисляется с учетом искажения волновых функций невозмущенной системы, поэтому сперва следует определить искажение волновых функций, а после этого вычислить среднее от энергии возмущения по этим искаженным волновым функциям:

$$E_n^{(2)} = \sum'_m \frac{|V_{mn}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} = \sum'_m \frac{\left| \int \psi_m^{(0)*} \hat{V} \psi_n^{(0)} d\xi \right|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}. \quad (4.3)$$

Последующие приближения можно вычислить аналогичным образом, но обычно поправки более высокого порядка не рассчитывают. Заметим, что поправка первого порядка к энергии равна среднему значению возмущения, а поправка второго порядка к энергии всегда отрицательна.

Дальнейшим развитием стационарной теории возмущения являются теория возмущений при наличии вырождения (рассматривает вырожденные состояния) и теория возмущений, зависящих от времени (таким возмущением является, в частности, световая волна) [1].

Задание 4.1[15]. Каковы, по порядку величины, поправки первого и второго порядка к энергии и поправка первого порядка к волновой функции, если возмущение с энергией, эквивалентной 10^{-2} эВ, действует на систему с расстояниями между уровнями порядка 1 эВ?

Решение. Поправка к энергии первого порядка будет равна возмущению, т.е. 10^{-2} эВ. Поправка к волновой функции будет не более чем отношение возмущения к разности между уровнями, т.е. будет на два порядка меньше разности между уровнями (и то в случае, если интеграл в числителе не обратится в ноль – что будет при возмущении-константе). Поправка второго порядка к энергии пропорциональна

квадрату возмущения, поэтому не превысит одной сотой от возмущения по тем же причинам.

Пример 4.1[3]. Предположим, что возмущение системы заключается в том, что дно бесконечно глубокой потенциальной ямы поднялось на константу V_0 . Найдем первый порядок поправки к энергии и волновой функции.

Решение. Первая поправка к энергии в состоянии n

$$E_n^{(1)} = \langle \psi_n^{(0)} | V_0 | \psi_n^{(0)} \rangle = V_0 \langle \psi_n^{(0)} | \psi_n^{(0)} \rangle = V_0.$$

Скорректированный уровень $E_n = E_n^{(0)} + V_0$, он просто сдвинулся на величину V_0 и совпал с точным значением. Это общее свойство всех постоянных возмущений, при их вычислении поправки высших порядков обращаются в нуль. Вид волновой функции не изменится, т.к. все внедиагональные матричные элементы возмущения ($n \neq m$) обращаются в нуль из-за ортогональности функций.

Пример 4.2[7]. Теперь рассмотрим ту же яму, но в которой возмущение V_0 присутствует только на интервале $x \in (0, a/2)$. Тогда

$$E_n^{(1)} = \frac{2V_0}{a} \int_0^{a/2} \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx = \frac{V_0}{2}.$$

В этом случае все уровни энергии сдвинутся на $V_0/2$.

Задание 4.2[7]. Рассчитать поправку первого порядка к волновой функции, описанной в предыдущем примере (воспользоваться формулой (E.10)).

Ответ.

$$\psi_n^{(1)} = \sqrt{\frac{2}{a}} \frac{V_0}{E_1 \pi} \sum_m' \frac{m^2 n^2}{n^2 - m^2} \left(\frac{\sin[(n-m)\pi/2]}{n-m} - \frac{\sin[(n+m)\pi/2]}{n+m} \right) \sin\left(\frac{m\pi x}{a}\right)$$

Задание 4.3. Запишите три первых ненулевых слагаемых для волновой функции основного состояния в обозначениях невозмущенного состояния ψ_1 . Рассчитайте вторую поправку к энергии основного состояния.

Решение. В общем виде искомая величина

$$\psi_1 = \psi_1^{(0)} + \sum_{n>1} \frac{\langle \psi_n | V | \psi_1 \rangle}{E_1^{(0)} - E_n^{(0)}} \psi_n^{(0)}, \text{ где}$$

$$\langle \psi_n | V | \psi_1 \rangle = \frac{V_0}{\pi} \left(\frac{\sin[(n-1)\pi/2]}{n-1} - \frac{\sin[(n+1)\pi/2]}{n+1} \right)$$

Для всех нечетных n матричный элемент $\langle \psi_n | V | \psi_1 \rangle = 0$.

$$\begin{aligned} \langle \psi_2 | V | \psi_1 \rangle &= \frac{4V_0}{3\pi}, & \langle \psi_4 | V | \psi_1 \rangle &= -\frac{8V_0}{15\pi}, \\ E_1^{(0)} - E_2^{(0)} &= -\frac{3\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}, & E_1^{(0)} - E_4^{(0)} &= -\frac{15\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}. \end{aligned}$$

Соответственно $\psi_1 = \psi_1^{(0)} - \frac{8V_0ma^2}{9\pi^3\hbar^2}\psi_2^{(0)} + \frac{16V_0ma^2}{225\pi^3\hbar^2}\psi_4^{(0)} + \dots$. Если сложить гармонические функции с учетом знака, будет видно, что распределение $|\psi_1|^2$ сместилось в сторону области с меньшим потенциалом. Вторая поправка к энергии основного состояния

$$E_0^{(2)} = \sum_{n>1} \frac{|\langle \psi_n | V | \psi_1 \rangle|^2}{E_0^{(1)} - E_0^{(n)}} = -\frac{\left(\frac{4V_0}{3\pi}\right)^2}{\frac{3\pi^2\hbar^2}{2ma^2}} - \frac{\left(\frac{8V_0}{15\pi}\right)^2}{\frac{15\pi^2\hbar^2}{2ma^2}} - \dots = -\frac{3V_0^2ma^2}{8\pi^4\hbar^2} \left(1 + \frac{4}{125} + \dots\right).$$

Задание 4.4[3]. В центре потенциальной ямы имеется возмущение в виде дельта-функции $V(x) = \alpha\delta(x - a/2)$, где α – константа. Оцените смещение уровней энергии в первом порядке.

Решение. Исходя из свойства дельта-функции (см. Приложение В)

$$E_n^{(1)} = \frac{2}{a} \int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \alpha\delta(x - a/2) dx = \frac{2\alpha}{a} \sin^2\left(\frac{n\pi}{2}\right) = \begin{cases} 2\alpha/a, & \text{если } n \text{ четное,} \\ 0, & \text{если } n \text{ нечетное.} \end{cases}$$

Пример 4.3. Рассмотрим основное состояние нелинейного осциллятора с помощью теории поправок первого порядка. Для этого представим его как гармонический осциллятор с нелинейным возмущением и гамильтонианом

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} + \lambda x^4$$

Основное состояние гармонического осциллятора

$$\psi_0 = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\alpha x^2/2}, \quad \text{где } \alpha = m\omega/\hbar.$$

С помощью формулы для первой поправки имеем

$$E_0^{(1)} = \lambda \left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2/2} x^4 e^{-\alpha x^2/2} dx = \lambda \left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} x^4 e^{-\alpha x^2} dx = \frac{3\lambda\hbar^2}{4m^2\omega^2}$$

Пример 4.4. Рассмотрим квантовый маятник, описываемый гамильтонианом

$$H = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - \lambda \cos \varphi,$$

где потенциальная энергия, взятая как возмущение, $V = -\lambda \cos \varphi$.

Невозмущенные нормированные волновые функции жесткого ротатора задаются как

$$\psi_n(\varphi) = e^{in\varphi} / \sqrt{2\pi}, \quad \text{а энергии } E_n^{(0)} = \frac{\hbar^2 n^2}{2ma^2}.$$

Первый порядок поправки к энергии ротатора, вызванный потенциальной энергией, будет

$$E_n^{(1)} = -\frac{\lambda}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-in\varphi} \cos \varphi e^{in\varphi} d\varphi = -\frac{\lambda}{2\pi} \int_0^{2\pi} \cos \varphi d\varphi = 0$$

Применение формулы для поправок второго порядка дает, с учетом формулы Эйлера,

$$\begin{aligned} E_n^{(2)} &= \frac{ma^2 \lambda^2}{2\pi^2 \hbar^2} \sum_k' \frac{\left| \int e^{-ik\varphi} \cos \varphi e^{in\varphi} d\varphi \right|^2}{n^2 - k^2} = \frac{ma^2 \lambda^2}{2\hbar^2} \sum_k' \frac{(\delta_{n,k-1} + \delta_{n,k+1})^2}{n^2 - k^2} = \\ &= \frac{ma^2 \lambda^2}{2\hbar^2} \left(\frac{1}{2n-1} + \frac{1}{-2n-1} \right) = \frac{ma^2 \lambda^2}{\hbar^2} \frac{1}{4n^2 - 1} \end{aligned}$$

Задание 4.5[15]. Рассмотрим волновую функцию частицы в одномерной прямоугольной потенциальной яме ($x \in (0, a)$) с бесконечно высокими стенками и предположим, что на эту систему действует возмущение вида $-qx$. Найти в первом порядке теории возмущений энергии и волновые функции системы.

Решение. Найдем поправку первого порядка к энергии по формулам (4.1) и (E.6):

$$E_n^{(1)} = \int_0^a \left(\sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi n x}{a} \right)^2 (-qx) dx = \frac{-2q}{a} \int_0^a x \sin^2 \frac{\pi n x}{a} dx = \frac{-qa}{2}.$$

Поправка первого порядка к волновой функции

$$\begin{aligned}\psi_n^{(1)} &= \frac{-2qma^2}{\pi^2 \hbar^2} \sum'_m \frac{\int_0^a \sin \frac{\pi n x}{a} x \sin \frac{\pi m x}{a} dx}{m^2 - n^2} \psi_m^{(0)} = \\ &= \frac{-4qma^3}{\pi^4 \hbar^2} \sum'_m \frac{mn(\cos \pi m \cos \pi n - 1)}{(m^2 - n^2)^2} \psi_m^{(0)}.\end{aligned}$$

4.2. Теория возмущений при наличии вырождения

В случае наличия в системе вырожденных состояний применение обычной теории возмущений невозможно – во-первых, знаменатели в формулах будут обращаться в нуль, а во-вторых – нет причины доверять даже первой поправке к энергии. Вырождение в квантовой механике вытекает из симметрии, присущих системе. Любое искажение такой симметрии должно, как правило, удалить соответствующее вырождение. Так, q -вырожденный уровень может разделиться на q отдельных уровней. Основной задачей вырожденной теории возмущения является нахождение таких новых уровней энергии [3, 5, 7].

Вернемся к формуле поправки первого порядка (4.2). Волновая функция собственного состояния невозмущенного гамильтониана \hat{H}_0 при действии возмущения \hat{V}

$$\psi_n^{(1)} = \sum'_m c_{nm} \psi_m^{(0)}, \quad \text{где } c_{nm} = \frac{\langle \psi_n^{(0)} | \hat{V} | \psi_m^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}.$$

Если уровень $E_1^{(0)}$ вырожден q раз, то $E_1^{(0)} = E_2^{(0)} = \dots = E_q^{(0)}$, и c_{nm} обращается в бесконечность при $n, m \leq q$. Ситуация разрешается конструированием нового набора базисных функций из набора $\{\psi_n^{(0)}\}$, который диагонализует подматрицу гамильтониана V_{nm} для элементов $n, m \leq q$. Прочие диагональные элементы гамильтониана могут быть найдены в соответствии со стационарной теорией возмущения.

Обозначим q волновых функций, диагонализующих подматрицу V_{nm} через $\bar{\psi}$.

$$\bar{\psi} = \sum_{m=1}^q a_{nm} \psi_m^{(0)}$$

Эти линейные комбинации вырожденных собственных состояний $\{\psi_m^{(0)}\}$ диагонализуют V_{mn} , поэтому

$$\langle \bar{\psi}_n | \hat{V} | \bar{\psi}_p \rangle = V_{np} \delta_{np} \quad (n, p \leq q)$$

Функции $\bar{\psi}$ вместе со всеми невырожденными состояниями $\psi_m^{(0), m > q}$ дают базис

$$\mathfrak{B} = \{\bar{\psi}_1, \bar{\psi}_2, \dots, \bar{\psi}_q, \psi_{q+1}^0, \psi_{q+2}^0, \dots\}$$

Матрица гамильтониана в таком базисе запишется как

$$\hat{V} = \begin{pmatrix} \begin{bmatrix} V_{11} & & & 0 \\ & V_{22} & & \\ & & \ddots & \\ & 0 & & V_{qq} \end{bmatrix} & V_{1,q+1} & \dots \\ V_{q+1,1} & & & V_{q+1,q+1} \\ \vdots & & & \ddots \end{pmatrix}$$

Диагонализированная подматрица отмечена квадратными скобками. Для её диагонализации необходимо решить систему уравнений

$$\sum_{m=1}^q (V_{pm} - E_n^{(1)} \delta_{pm}) a_{nm} = 0 \quad (n, p \leq q) \quad (4.4)$$

Эта система линейных уравнений имеет отличные от нуля решения при условии обращения в нуль определителя, составленного из коэффициентов при неизвестных:

$$|V_{pm} - E_n^{(1)} \delta_{pm}| = 0 \quad (4.5)$$

Уравнение называют «секулярным», оно имеет q различных вещественных корней, которые и представляют собой поправки первого приближения к собственным значениям [1].

Пример 4.5[5]. Определим поправки первого порядка к собственному значению и правильные волновые функции нулевого приближения для двукратно вырожденного уровня, соответствующего состояниям $\psi_1^{(0)}$ и $\psi_2^{(0)}$.

Правильные функции нулевого приближения имеют вид

$$\psi^{(0)} = c_1^{(0)} \psi_1^{(0)} + c_2^{(0)} \psi_2^{(0)}$$

Коэффициенты c_1 и c_2 определяются из системы уравнений

$$\begin{cases} (V_{11} - E^{(1)}) c_1 + V_{21} c_2 = 0 \\ V_{12} c_1 + (V_{22} - E^{(1)}) c_2 = 0, \end{cases} \quad (4.6)$$

где $V_{nm} = \langle \psi_n | \hat{V} | \psi_m \rangle$. Секулярное уравнения (4.5) имеет вид

$$\begin{vmatrix} V_{11} - E^{(1)} & V_{21} \\ V_{12} & V_{22} - E^{(1)} \end{vmatrix} = 0,$$

Решением является

$$E^{(1)} = \frac{1}{2} [V_{11} + V_{22} \pm \hbar\omega^{(1)}], \text{ где } \pm \hbar\omega^{(1)} = \sqrt{(V_{11} - V_{22})^2 + 4|V_{12}|^2}$$

То есть исходный уровень расщепляется на два подуровня, отличающиеся на $\hbar\omega^{(1)}$.

Решая далее уравнения (4.6) с полученными значениями $E^{(1)}$, дополненные условием нормировки $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$, получим для коэффициентов правильных функций нулевого приближения значения

$$c_1^{(0)} = \left\{ \frac{V_{12}}{2|V_{12}|} \left[1 \pm \frac{V_{11} - V_{22}}{\hbar\omega^{(1)}} \right] \right\}^{1/2},$$

$$c_2^{(0)} = \pm \left\{ \frac{V_{21}}{2|V_{12}|} \left[1 \mp \frac{V_{11} - V_{22}}{\hbar\omega^{(1)}} \right] \right\}^{1/2}.$$

Пример 4.6[3]. Рассмотрим кубическую потенциальную яму с бесконечно высокими стенками.

$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a, 0 < y < a, 0 < z < a; \\ \infty & \text{в других областях.} \end{cases}$$

Стационарные состояния

$$\psi_{n_x n_y n_z}^{(0)}(x, y, z) = \left(\frac{2}{a}\right)^{3/2} \sin\left(\frac{n_x \pi}{a} x\right) \sin\left(\frac{n_y \pi}{a} y\right) \sin\left(\frac{n_z \pi}{a} z\right),$$

где n_x, n_y и n_z – положительные целые числа. Соответствующие уровни энергии

$$E_{n_x n_y n_z}^{(0)} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2).$$

Основное состояние системы ψ_{111} не вырождено и соответствует уровню энергии $E_0^{(0)} = 3\pi^2 \hbar^2 / 2ma^2$. Но первое возбужденное состояние вырождено трижды:

$$\psi_a \equiv \psi_{112}, \psi_b \equiv \psi_{121} \text{ и } \psi_c \equiv \psi_{211}.$$

Все эти состояния соответствуют энергии $E_1^{(0)} = 3\pi^2 \hbar^2 / ma^2$

Теперь добавим в систему возбуждение, действующее в четверти объема куба:

$$V = \begin{cases} V_0, & 0 < x < a/2 \text{ и } 0 < y < a/2; \\ 0 & \text{в других областях.} \end{cases}$$

Поправка первого порядка к энергии основного состояния будет равна $V_0/4$, т.к. возмущение V_0 действует в четверти объема куба. $E_0^{(1)} = \langle \psi_{111} | V | \psi_{111} \rangle =$

$$= \left(\frac{2}{a}\right)^3 V_0 \int_0^{a/2} \sin^2\left(\frac{\pi}{a}x\right) dx \int_0^{a/2} \sin^2\left(\frac{\pi}{a}y\right) dy \int_0^a \sin^2\left(\frac{\pi}{a}z\right) dz = \frac{V_0}{4}$$

Для первого возбужденного состояния теперь можно применить вырожденную теорию возмущений. Сконструируем матрицу \mathbf{W} , её диагональные элементы равны возмущению основного состояния (за исключением того, что при вычислении один из синусов берется дважды, результат получается тот же)

$$W_{aa} = W_{bb} = W_{cc} = \frac{V_0}{4}$$

Внедиагональные элементы более интересны

$$W_{ab} = \left(\frac{2}{a}\right)^3 V_0 \int_0^{a/2} \sin^2\left(\frac{\pi}{a}x\right) dx \int_0^{a/2} \sin\left(\frac{\pi}{a}y\right) \sin\left(\frac{2\pi}{a}y\right) dy \int_0^a \sin\left(\frac{2\pi}{a}z\right) \sin\left(\frac{\pi}{a}z\right) dz.$$

Интеграл по z равен нулю, это же справедливо для W_{ac} . Поэтому $W_{ab} = W_{ba} = W_{ac} = W_{ca} = 0$. Наконец, $W_{bc} =$

$$\begin{aligned} &= \left(\frac{2}{a}\right)^3 V_0 \int_0^{a/2} \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right) \sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right) dx \int_0^{a/2} \sin\left(\frac{2\pi}{a}y\right) \sin\left(\frac{\pi}{a}y\right) dy \int_0^a \sin^2\left(\frac{\pi}{a}z\right) dz = \\ &= 16V_0/9\pi^2. \end{aligned}$$

Теперь

$$\mathbf{W} = \frac{V_0}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & k \\ 0 & k & 1 \end{pmatrix}$$

где $k \equiv (8/3\pi)^2 \approx 0.72$. Решим характеристическое уравнение для матрицы \mathbf{W} относительно $\omega \equiv 4\mathbf{W}/V_0$:

$$(1 - \omega)^3 - k^2(1 - \omega) = 0.$$

Его корни $\omega_1 = 1$, $\omega_2 = 1 + k \approx 1.72$ и $\omega_3 = 1 - k \approx 0.28$. Уровни энергии, таким образом

$$E_1 = \begin{cases} E_1^{(0)} + V_0/4, \\ E_1^{(0)} + (1+k)V_0/4, \\ E_1^{(0)} + (1-k)V_0/4. \end{cases}$$

Видно, что возмущение снимает вырождение, разделяя $E_1^{(0)}$ на три разных уровня. Заметим, что применение невырожденной теории возмущения дало бы одинаковый результат $V_0/4$ для всех трех состояний, и результат бы совпал только для одного из них.

Осталось найти волновые функции. «Правильные» невозбужденные состояния являются линейными комбинациями вида

$$\psi^{(0)} = \alpha\psi_a + \beta\psi_b + \gamma\psi_c,$$

где коэффициенты α , β и γ образуют собственные вектора матрицы \mathbf{W} :

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & k \\ 0 & k & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} = \omega \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix}$$

При $\omega = 1$ имеем $\alpha = 1$, $\beta = \gamma = 0$, при $\omega = 1 \pm k$ получаем $\alpha = 0$, $\beta = \pm\gamma = 1/\sqrt{2}$ (коэффициенты нормализованы). Таким образом, «правильные» состояния

$$\psi^{(0)} = \begin{cases} \psi_a, \\ (\psi_b + \psi_c)/\sqrt{2}, \\ (\psi_b - \psi_c)/\sqrt{2}. \end{cases}$$

Задание 4.6[3]. На кубическую потенциальную яму с бесконечно высокими стенками накладывается возмущение в виде дельта-функции в точке $(a/4, a/2, 3a/4)$:

$$H' = a^3 V_0 \delta(x - a/4) \delta(x - a/2) \delta(x - 3a/4)$$

Найдите поправку первого порядка к энергии основного состояния и первые, трижды вырожденные, возбужденные состояния.

Задание 4.7[3]. Квантовая система имеет три линейно независимых состояния и описывается гамильтонианом

$$\mathbf{H} = V_0 \begin{pmatrix} (1 - \varepsilon) & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \varepsilon \\ 0 & \varepsilon & 2 \end{pmatrix},$$

где V_0 – постоянная, а ε – некоторое малое число, описывающее возмущение ($\varepsilon \ll 1$).

а) Запишите собственные вектора и собственные значения невозмущенного гамильтониана (при $\varepsilon = 0$).

б) Найдите собственные значения возмущенного гамильтониана \mathbf{H} , представьте каждое из них как степенной ряд ε (до второго порядка).

в) Используя невырожденную теорию возмущения найдите приближительное значение, которое получится из невозмущенного собственного вектора $H^{(0)}$. Сравните результат с полученным в п. а)

г) Используя вырожденную теорию возмущений найдите поправку первого порядка к двум начальным вырожденным состояниям. Сравните полученные результаты.

Задание 4.8[7]. Частица находится в двумерной квадратной потенциальной яме с $x \in (0, a)$, $y \in (0, a)$. Дважды вырожденным собственным состоянием является

$$\psi_{np}(x, y) = \frac{2}{a} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{p\pi y}{a}\right), \quad E_{np} = E_1 (n^2 + p^2).$$

Что с этими энергиями будет при возмущении $V = 10^{-3} E_1 \sin(\pi x/a)$?

Задание 4.9[10]. Молекула состоит из трех атомов, расположенных в вершинах равностороннего треугольника. В отрицательном ионе такой молекулы есть дополнительный электрон, способный перескакивать с каждого из трех атомов на любой другой.

а) Пусть матричный элемент перехода равен $-A$. Рассчитайте расстояние между уровнями молекулярного иона.

б) Ион помещен в электрическое поле так, что одна из осей симметрии иона, проходящая через вершину треугольника и середину противоположной стороны, параллельна вектору напряженности электрического поля. Напряженность поля такова, что потенциальная энергия «вершинного» электрона на величину $\varepsilon A = 0,01A$ больше других, чья потенциальная энергия изменилась из-за внешнего поля на величину Δ . Как изменится расстояние между уровнями?

Решение. а) Уровни энергии найдем из корней векового определителя.

$$\begin{vmatrix} E_0 - E & -A & -A \\ -A & E_0 - E & -A \\ -A & -A & E_0 - E \end{vmatrix} = (E_0 - E)^3 - 2A^3 - 3A^2(E_0 - E) = \\ = (E_0 - E + A)^2(E_0 - E - 2A) = 0.$$

Отсюда $E_{1,2} = E_0 + A$, $E_3 = E_0 - 2A$. Два уровня рассматриваемого иона имеют равную энергию, а третий отделен от них интервалом $3|A|$.

б) Действие внешнего поля отразим дополнительными слагаемыми в диагональных элементах – энергия двух базисных состояний изменится на величину Δ , а третьего, т.е. «вершинного», на величину $\Delta + \varepsilon A$. Тогда уровни энергии находятся из определителя

$$\begin{aligned}
 & \begin{vmatrix} E_0 + \Delta - E & -A & -A \\ -A & E_0 + \Delta - E & -A \\ -A & -A & E_0 + \Delta + \varepsilon A - E \end{vmatrix} = \\
 & = \begin{vmatrix} E_0 + \Delta - E & -A & -A \\ -A & E_0 + \Delta - E & -A \\ -A & -A & E_0 + \Delta - E \end{vmatrix} + \\
 & \quad + \begin{vmatrix} E_0 + \Delta - E & -A & -A \\ -A & E_0 + \Delta - E & -A \\ 0 & 0 & \varepsilon A \end{vmatrix} = \\
 & = \begin{vmatrix} E_0 + \Delta - E & -A & -A \\ -A & E_0 + \Delta - E & -A \\ -A & -A & E_0 + \Delta - E \end{vmatrix} + \\
 & \quad + \varepsilon A \begin{vmatrix} E_0 + \Delta - E & -A \\ -A & E_0 + \Delta - E \end{vmatrix} = \\
 & = (E_0 + \Delta - E + A)^2(E_0 + \Delta - E - 2A) + \varepsilon A((E_0 + \Delta - E)^2 - A^2) = \\
 & = (E_0 + \Delta - E + A)[(E_0 + \Delta - E + A)(E_0 + \Delta - E - 2A) + \\
 & \quad + \varepsilon A(E_0 + \Delta - E - A)] = (E_0 + \Delta - E + A)[E^2 + bE + c] = 0,
 \end{aligned}$$

где $b = -2E_0 - 2\Delta + A - \varepsilon A$, $c = E_0^2 + 2E_0\Delta + E_0A + \Delta^2 - \Delta A - 2A^2 + \varepsilon A(E_0 + \Delta - A)$. Первый корень $E_1 = E_0 + \Delta + A$, остальные два значения находим из квадратного уравнения в квадратных скобках. Пренебрегая членами второго порядка по ε , получаем

$$E_2 = E_0 + \Delta + A + \frac{1}{3}\varepsilon A, \quad E_3 = E_0 + \Delta - 2A + \frac{2}{3}\varepsilon A.$$

Таким образом, если до наложения электрического поля два уровня иона имели одинаковую энергию, то теперь они расщепились на величину $\frac{1}{3}|\varepsilon A| = A/300$, а интервал между первым и третьим уровнями изменился незначительно и стал равным $|3A - \frac{2}{3}\varepsilon A| \approx 2,993|A|$.

4.3. Возмущения, зависящие от времени

Если возмущение V зависит от времени, то говорить о поправках к собственным значениям энергии нельзя, поскольку в возмущенном гамильтониане $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$ энергия не сохраняется и, следовательно, стационарных состояний не существует. В этом случае задача заключается в приближенном вычислении волновых функций по волновым функциям стационарных состояний невозмущенной системы:

$$\Psi(t) = \sum_n c_n(t) \Psi_n^{(0)}(t), \text{ где } \Psi_n^{(0)}(t) = \psi_n^{(0)} e^{-iE_n^{(0)}t/\hbar}.$$

Величины $|c_n|^2$ определяют вероятность обнаружения системы в том или ином состоянии, поэтому основной задачей является вычисление этих коэффициентов.

Возмущение теперь зависит от времени, поэтому от времени зависят и матричные элементы возмущения:

$$V_{fi}(t) = \langle \psi_f^{(0)} | \hat{V} | \psi_i^{(0)} \rangle = V_{fi} e^{i\omega_{fi}t} \text{ где } \hbar\omega_{fi} = E_f^{(0)} - E_i^{(0)},$$

причем, при зависящем явно от времени \hat{V} величины V_{fi} также являются функциями времени.

Пусть система изначально, при $t \rightarrow -\infty$ находилась в определенном собственном состоянии H_0 , например описываемом ψ_i (от *initial*, для него $c_i(-\infty) = 1$). Тогда для состояний $f \neq i$ (*final*, для него $c_f(-\infty) = 0$) в первом порядке теории возмущений решение будет

$$c_f(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t V_{fi} e^{i\omega_{fi}t} dt. \quad (4.7)$$

Вероятность перехода из начального состояния ψ_i в другое состояние ψ_f невозмущенного гамильтониана H_0 в первом порядке теории возмущений равна

$$P_{if} = |c_f|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^t V_{fi} e^{i\omega_{fi}t} dt \right|^2. \quad (4.8)$$

Обратим внимание на последовательность индексов – в матричных элементах начальное состояние указывается вторым (как V_{fi}), в то время как в обозначении вероятности – первым (как P_{if}) [1].

Пример 4.7. Рассмотрим одномерную бесконечно глубокую потенциальную яму. Пусть в момент времени $t = 0$ на интервале $a/4 < x < 3a/4$ появляется постоянное возмущение V_0 . Какова вероятность того, что система, находившаяся в состоянии ψ_3 в момент времени $t = 0$, будет найдена в состоянии ψ_1 в момент времени t ?

Решение. Вероятность найти систему в собственном состоянии $|f\rangle$ гамильтониана H_0 , на который действует слабое возмущение V , в первом порядке теории возмущения будет (4.8). Т.к. возмущение V_0 не зависит от времени, и оно прибавляется к гамильтониану в момент $t = 0$, то его можно вынести из под интеграла

$$\begin{aligned} P_{fi}(t) &= \frac{1}{\hbar^2} |\langle f|V_0|i\rangle|^2 \left| \frac{e^{\frac{i}{\hbar}(E_f - E_i)t} - 1}{\frac{i}{\hbar}(E_f - E_i)} \right|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |\langle f|V_0|i\rangle|^2 \left| \frac{e^{-\frac{i}{\hbar}E_i t} - e^{-\frac{i}{\hbar}E_f t}}{\frac{i}{\hbar}(E_f - E_i)} \right|^2 = \\ &= \frac{|\langle f|V_0|i\rangle|^2}{(E_f - E_i)^2} \left| 2 \sin \frac{(E_f - E_i)t}{2\hbar} \right|^2 = \frac{|\langle f|V_0|i\rangle|^2}{(\hbar\omega_{fi})^2} 4 \sin^2 \frac{\omega_{fi}t}{2}, \end{aligned}$$

где $\omega_{fi} = (E_f - E_i)/\hbar$. Также мы воспользовались $|e^{i\theta} - e^{i\varphi}| = 2 \sin \frac{\theta - \varphi}{2}$.

Волновые функции для бесконечно глубокой потенциальной ямы и уровни приведены в (2.12) и (2.13). Для вероятности первого уровня имеем

$$P_{13}(t) = \frac{|\langle \psi_1|V_0|\psi_3\rangle|^2}{(\hbar\omega_{13})^2} 4 \sin^2 \frac{\omega_{13}t}{2}, \quad \text{где } \omega_{13} = \frac{E_1 - E_3}{\hbar} = -\frac{4\pi^2\hbar}{ma^2}.$$

Теперь отдельно рассчитаем матричный элемент перехода $\langle \psi_1|V_0|\psi_3\rangle =$

$$\begin{aligned} &= \int_{a/4}^{3a/4} \psi_1 V_0 \psi_3 dx = \frac{2V_0}{a} \int_{a/4}^{3a/4} \sin \frac{\pi x}{a} \sin \frac{3\pi x}{a} dx = \frac{2V_0}{4\pi} \left(\sin \frac{2\pi}{a} x + \sin \frac{4\pi}{a} x \right) \Big|_{a/4}^{3a/4} = \\ &= -\frac{V_0}{\pi}. \end{aligned}$$

Подставим результат в формулу вероятности и получим

$$P_{13}(t) = \frac{4m^2 a^4 V_0^2}{64\pi^6 \hbar^4} 4 \sin^2 \frac{2\pi^2 \hbar^2}{ma^2} t = \frac{m^2 a^4 V_0^2}{4\pi^6 \hbar^4} \sin^2 \frac{2\pi^2 \hbar^2}{ma^2} t.$$

Видно, что вероятность осциллирует во времени.

Пример 4.8. Предположим, что электрон находится в одномерном гармоническом осцилляторе в основном состоянии на частоте ω . К

осциллятору в течение интервала времени T прикладывается слабое электрическое поле E . Подсчитайте вероятность перехода в первое возбужденное состояние.

Решение. Разность частот между соседними уровнями осциллятора $\omega_{10} = \omega$. Возмущение составляет eEx в период $0 < t < T$ и равно нулю в остальное время. Запишем его в терминах операторов рождения и уничтожения

$$V = eE \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a_- + a_+)$$

Теперь подсчитаем вероятность перехода. В соответствие с теорией возмущений, зависящих от времени (4.7), для первого возбужденного состояния

$$\begin{aligned} c_1 &= \frac{1}{i\hbar} eE \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \int_0^T e^{i\omega t} \langle 1|a_- + a_+|0\rangle dt = \frac{eE}{i\hbar} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \int_0^T e^{i\omega t} dt = \\ &= \frac{eE}{i\hbar} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\frac{e^{i\omega t}}{i\omega} \right) \Big|_0^T = \frac{eE}{i\hbar} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\frac{e^{i\omega T} - 1}{i\omega} \right) = \\ &= \frac{eE}{i\hbar} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} e^{i\omega T/2} \left(\frac{e^{i\omega T/2} - e^{-i\omega T/2}}{i\omega} \right) = \frac{eE}{i\hbar} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} e^{i\omega T/2} \frac{2}{\omega} \sin(\omega T/2) \end{aligned}$$

Поясним, что

$$\langle 1|a_- + a_+|0\rangle = \langle 1|a_-|0\rangle + \langle 1|a_+|0\rangle = \langle 1| \cdot 0 + \langle 1|1\rangle = 1$$

Тогда вероятность перехода

$$P_1 = \frac{e^2 E^2}{\hbar^2 \omega^2} \frac{\hbar}{2m\omega} 4 \sin^2(\omega T/2) = \frac{2e^2 E^2}{m\hbar \omega^3} \sin^2(\omega T/2)$$

Поскольку поле E мало, начальное состояние не будет существенно обеднено, поэтому сделанные допущения возможны. Видно, что вероятность перехода осциллирует со временем и, применяя переменное поле, можно увеличить вероятность перехода. Также очевидно, что вероятность перехода во второе возбужденное состояние равна нулю в первом порядке поправок. И высчитать его можно только воспользовавшись результатами для первого возбужденного состояния.

Пример 4.9[7]. Такой же резонатор подвергается такому возмущению, что

$$\hat{V}_{10}(t) = -eE \langle 1|x|0\rangle e^{-t^2/\tau^2}$$

При $t = -\infty$ невозмущенная система находится в основном состоянии $|0\rangle$. Какова вероятность того, что при $t = \infty$ система перейдет в состояние $|1\rangle$?

Решение. Подсчитаем c_1 по формуле (4.7).

$$c_1 = ieE\tau \sqrt{\frac{\pi}{2m\omega\hbar}} e^{-\omega^2\tau^2/4},$$

поскольку

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-t^2/\tau^2} e^{i\omega t} d(t) = \sqrt{\pi}\tau e^{-\omega^2\tau^2/4}$$

Теперь вероятность

$$P_{0 \rightarrow 1} = (eE\tau)^2 \frac{\pi}{2m\omega\hbar} e^{-\omega^2\tau^2/2}$$

Вероятность перехода пропорциональна квадрату возмущения, и чем больше расстояние между уровнями – тем меньше вероятность перехода, поскольку $\omega = E_1 - E_0$. Кроме того вероятность максимизируется при $\tau = 1/\omega$.

4.3.1. Периодические возмущения. Если возмущение синусоидально, т.е. $\hat{V}(t) = \hat{V} \cos \omega t$, то

$$\hat{V}_{fi}(t) = V_{fi} \cos \omega t, \text{ где } V_{fi} = \langle \psi_f | V | \psi_i \rangle.$$

В первом порядке приближения, обозначив $\omega_{fi} = \omega_0$

$$c_f(t) \cong -\frac{i}{\hbar} V_{if} \int_0^t \cos(\omega t) e^{i\omega_0 t} dt = -\frac{iV_{if}}{2\hbar} \int_0^t \left(e^{i(\omega_0+\omega)t} + e^{i(\omega_0-\omega)t} \right) dt = \quad (4.9)$$

$$= -\frac{V_{if}}{2\hbar} \left(\frac{e^{i(\omega_0+\omega)t} - 1}{\omega_0 + \omega} + \frac{e^{i(\omega_0-\omega)t} - 1}{\omega_0 - \omega} \right). \quad (4.10)$$

Выражение существенно упрощается, если $\omega_0 + \omega \gg |\omega_0 - \omega|$ (т.е. частота возмущения близка к частоте перехода между уровнями), т.к. основной вклад вносится слагаемым $\omega_0 - \omega$, и первым слагаемым можно пренебречь. С учетом формулы $e^{i\theta} - 1 = 2ie^{i\theta/2} \sin(\theta/2)$

$$c_f(t) \cong -i \frac{V_{fi}}{\hbar} \frac{\sin[(\omega_0 - \omega)t/2]}{\omega_0 - \omega} e^{i(\omega_0 - \omega)t/2}.$$

Тогда вероятность найти систему в состоянии f

$$P_f(t) = |c_f(t)|^2 \cong \frac{|V_{fi}|^2 \sin^2 \frac{\omega_0 - \omega}{2} t}{\hbar^2 (\omega_0 - \omega)^2} \quad (4.11)$$

Видно, что вероятность обнаружения системы в состоянии f осциллирует синусоидально и в определенные моменты времени $t_n = 2n\pi/|\omega_0 - \omega|$, где n – целое, возвращается в начальное, нижнее состояние.

Если вернуться к формуле (4.9), то будет видно, что резонансные частоты соответствуют двум энергиям. Энергия $E_f = E_i + \hbar\omega$ соответствует поглощению кванта излучения и переходу системы на более высокий уровень, а энергия $E_f = E_i - \hbar\omega$ – излучению кванта с уменьшением энергии. Это соответствует вынужденному поглощению и излучению, и формула (4.11) описывает именно переход в состояние с большей энергией.

В случае длительного возмущения частотный спектр возбуждения превращается в пик на частоте возбуждения и формула вероятности становится

$$P_f(t) \rightarrow \frac{2\pi t |V_{fi}|^2}{\hbar^2} \delta(\omega_0 \mp \omega), \quad (4.12)$$

где \mp соответствует поглощению и эмиссии излучения. Если возбуждение длится короткий интервал, такой что $(\omega_0 - \omega)t \ll 1$, вероятность линейно растёт со временем

$$P_f(t) = \frac{t^2 |V_{fi}|^2}{4\hbar^2}$$

Если двухуровневая система освещается резонансным когерентным излучением, вызывающим переход в основного состояния в возбужденное, то система будет циклически поглощать фотоны и переизлучать их посредством вынужденного излучения, что приведет к циклическому изменению вероятности обнаружения системы в возбужденном состоянии. Такое поведение системы называется «осцилляции Раби», частота которых

$$\Omega_0 = \frac{V_{ab}}{\hbar} = \frac{\mathbf{d} \cdot \mathcal{E}}{\hbar} \quad (4.13)$$

где \mathbf{d} – дипольный момент, \mathcal{E} – электрическое поле излучения.

Если такая система, с частотой перехода между уровнями ω_0 , подвергается резонансному лазерному воздействию с частотой ω_L , и в начальный момент времени $t = 0$ система находится в состоянии $|0\rangle$, то вероятность найти ее в состоянии $|1\rangle$ в момент времени t будет

$$P(t) = \frac{\Omega_0}{\Omega} \sin^2\left(\frac{\Omega t}{2}\right),$$

где обобщенная частота Раби $\Omega^2 = \Omega_0^2 + (\omega_L - \omega_0)^2$, а $\omega_L - \omega_0$ – отстройка частоты возбуждения от частоты излучения между уровнями [1].

Задание 4.10. Квантовая точка имеет два состояния $|1\rangle$ с энергией $E_1^{(0)} = 0$ и $|2\rangle$ с энергией $E_2^{(0)} = \Delta E > 0$. Лазерное поле обеспечивает периодическое возмущение $\hat{V}(t) = 2\hat{F} \cos \omega t$, находящееся в резонансе с расстоянием между уровнями, т.е. $\Delta E = \hbar\omega$. Матричные элементы мы полагаем

$$\langle i|\hat{F}|j\rangle = \begin{pmatrix} 0 & F \\ F & 0 \end{pmatrix}, \quad F \in \mathbb{R}.$$

Пусть система в момент времени $t = 0$ находится в состоянии $|1\rangle$. Найдите вероятность перехода $P_{1 \rightarrow 2}(t)$ как функцию времени в первом порядке F , используя уравнение (4.8).

4.3.2. Золотое правило Ферми. Пусть система в начальном состоянии находится в собственном состоянии $|i\rangle$ энергии E_i и под действием монохроматического возмущения \hat{V} переходит в состояние $|f\rangle$ из непрерывного спектра собственных состояний $\{|f\rangle\}$. Тогда, суммируя формулу (4.12) по всем конечным состояниям, можно получить скорость перехода

$$R_{i \rightarrow f} = \frac{1}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f|\hat{V}|i\rangle|^2 \rho(\omega_0) \quad (4.14)$$

Вероятность найти систему в исходном состоянии $|i\rangle$ во время $t > 0$ задается экспонентой $e^{-t/\tau}$ со скоростью перехода $\tau = 1/R$. Правило (4.14) называют «золотым правилом Ферми» и оно говорит, что скорость переходов зависит только от величины матричного элемента оператора \hat{V} между начальным и конечным состояниями. Функция $\rho(\omega_0)$ описывает плотность конечных состояний, для нерелятивистских частиц

$$\rho(\omega) = \frac{mL^3 \sqrt{2m\hbar\omega}}{2\pi^2 \hbar^3},$$

где L^3 – нормализованный объем, используемый для определения волновой функции.

Теперь рассмотрим систему, переходящую из состояния $|i\rangle$ под действием монохроматического возмущения \hat{V} в состояние $|f\rangle$ дискретного спектра [3]. Если напряженность монохроматического поля $\mathbf{E} = E_0 \hat{k} \cos(\omega t)$, и оно, допустим, поляризовано строго вертикально вдоль оси z , то гамильтониан возмущения

$$V(t) = -eE_0 z \cos(\omega t),$$

где e – заряд электрона. Соответственно $V_{fi} = -pE_0 \cos(\omega t)$, где p – матричный элемент электрического дипольного момента между двумя состояниями ($p = e\langle f|\mathbf{r}|i\rangle$).

Если теперь система стартует из нижнего состояния ψ_i , то вероятность перехода под действием монохроматического излучения

$$P_{i \rightarrow f}(t) = \left(\frac{|pE_0|}{\hbar} \right)^2 \frac{\sin^2[(\omega_0 - \omega)t/2]}{(\omega_0 - \omega)^2} \quad (4.15)$$

Такой же результат получится, если рассчитать вероятность перехода из верхнего состояния в нижнее (это уже упомянутые выше случаи вынужденного поглощения и эмиссии).

Перейдем к плотности энергии электромагнитной волны $u = \varepsilon_0 E_0^2/2$. Пусть теперь возбуждение происходит немонохроматическим излучением, тогда формула (4.15) должна быть проинтегрирована по всему диапазону частот. Т.к. в большинстве приложений возбуждение осуществляется излучением со спектральным распределением $\rho(\omega)$, которое представляет собой острый пик в окрестностях ω_0 , то функцию распределения, обозначенную как $\rho(\omega_0)$, можно вынести из-за интеграла

$$P_{i \rightarrow f}(t) \cong \frac{2|p|^2}{\varepsilon_0 \hbar^2} \rho(\omega_0) \int_0^\infty \frac{\sin^2[(\omega_0 - \omega)t/2]}{(\omega_0 - \omega)^2} d\omega \cong \frac{\pi|p|^2}{\varepsilon_0 \hbar^2} \rho(\omega_0) t,$$

т.к. $\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 x}{x^2} dx = \pi$.

Теперь видно, что осцилляции во времени отсутствуют, и скорость перехода $R = dP/dt$ является константой

$$R_{i \rightarrow f}(t) = \frac{\pi}{\varepsilon_0 \hbar^2} |p|^2 \rho(\omega_0)$$

Результат получен для нехроматического возбуждения вертикально поляризованным излучением, распространяющимся вдоль оси y [1].

Если обобщить его на случай излучения, поляризованного по всем направлениям, и приходящего со всех сторон, то скорость поглощения

$$R_{i \rightarrow f} = \frac{\pi}{3\varepsilon_0 \hbar^2} |p|^2 \rho(\omega_0).$$

Скорость вынужденного излучения равна скорости поглощения.

Скорость спонтанного излучения двухуровневой системы с частотой перехода между уровнями $\hbar\omega_0$

$$A = \frac{\omega_0^3 |p|^2}{3\pi\varepsilon_0 \hbar^2 c^3}$$

Отметим, что «золотое правило» Ферми дает постоянную скорость перехода, т.е. вероятность найти систему в новом состоянии линейно растет во времени. В то время как при осцилляции Раби $P_f(t) \sim \sin^2(\Omega_R t/2)$, причем в начальный момент $P_f(t) \sim t^2$. Причина заключается в том, что во втором случае мы имеем систему с двумя состояниями и фиксированной частотой, поэтому там нет непрерывного спектра конечных состояний $|f\rangle$ или спектра частот ω . А степенной закон при малых t получается и из формулы (4.15), если лазерное поле находится в резонансе с энергией разности обоих состояний.

ПРИЛОЖЕНИЯ

А. Сферическая система координат

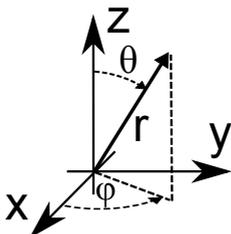


Рис. П.1. Сферическая система координат.

Обратите внимание на пределы изменения переменных в сферических координатах: $0 \leq r < \infty$, $0 \leq \varphi < 2\pi$ и $0 \leq \theta < \pi$.

Площадь элемента dS сферической поверхности радиусом r , ограниченного углами от θ до $\theta + d\theta$ и от φ до $\varphi + d\varphi$ равен

$$dS_r = r^2 \sin \theta d\theta d\varphi.$$

Объем элемента dV пространства, ограниченного радиусом от r до $r + dr$, и углами от θ до $\theta + d\theta$, и от φ до $\varphi + d\varphi$ будет

$$dV_{r,r+dr} = r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi.$$

В частном случае интегрирования по всей поверхности сферы, т.е. при $0 \leq \varphi < 2\pi$ и $0 \leq \theta < \pi$

$$dS_r = \pi r dr, \quad \text{и} \quad dV = 4\pi r^2 dr$$

Произвольный элементарный объем задается тройным интегралом

$$dV = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{\infty} r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi.$$

При переходе от двухмерных координат к полярным необходимо воспользоваться якобианом

$$dx dy = r dr d\varphi$$

Б. Символ Кронекера

Функция индикации равенства элементов обозначается символом, введенном Кронекером в 1866 году. Функция равна 1, если элементы равны, и равна 0 в противном случае:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{если } i = j \\ 0, & \text{если } i \neq j \end{cases}$$

Часто используется в квантовой физике для записи условия ортонормированности базиса, а также для записи разнообразных результатов или условий. Например, справедлива запись

$$\int_0^{2\pi} e^{i\varphi(n-m)} d\varphi = 2\pi\delta_{n,m},$$

поскольку при нулевом показателе степени, т.е. при $n = m$, интеграл равен 2π , а при ненулевом – нулю.

В. Дельта-функция Дирака

Дельта-функция Дирака характеризуется двумя основными параметрами. Первое задает значение дельта-функции, второе – интеграла от дельта-функции:

$$\delta(x) = \begin{cases} 0, & \text{если } x \neq 0 \\ \infty, & \text{если } x = 0 \end{cases}, \quad \text{при } \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1.$$

Из основных свойств функции отметим, во-первых, что функция $\delta(x - a)$ будет обладать бесконечным значением при $x = a$. Во-вторых, умножение $\delta(x - a)$ на функцию $f(x)$ равно тому же умножению на $f(a)$, т.к. произведение равно нулю везде, кроме точки a :

$$f(x)\delta(x - a) = f(a)\delta(x - a).$$

В частности

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x - a) dx = f(a) \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - a) dx = f(a).$$

Это самое важное свойство дельта-функции – под интегралом она служит для «выбора» значения $f(x)$ в точке a .

Г. Тригонометрическая запись комплексного числа

В квантовой физике комплексные числа часто записываются в тригонометрическом виде по формуле Эйлера – $e^{ix} = \cos x + i \sin x$. Формула происходит из разложения в ряд основания натурального логарифма и тригонометрических функций:

$$\begin{aligned} e^{ix} &= 1 + \frac{ix}{1!} + \frac{(ix)^2}{2!} + \frac{(ix)^3}{3!} + \dots = \\ &= \left(1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \dots\right) + i\left(\frac{x}{1!} - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \dots\right) = \cos x + i \sin x \end{aligned} \quad (\Gamma.1)$$

При помощи формулы Эйлера можно записать синус и косинус как

$$\sin x = \left(\frac{e^{ix} - e^{-ix}}{2i}\right) \quad \text{и} \quad \cos x = \left(\frac{e^{ix} + e^{-ix}}{2}\right).$$

Д. Тензорное произведение

Если матрицы имеют вид

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & \dots & a_{mn} \end{bmatrix} \quad \text{и} \quad B = \begin{bmatrix} b_{11} & \dots & b_{1q} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{p1} & \dots & b_{pq} \end{bmatrix},$$

то матрица их тензорного произведения запишется в виде блочной матрицы, где каждый элемент является подматрицей меньшей, кратной размерности:

$$A \otimes B = \begin{bmatrix} a_{11}B & \dots & a_{1n}B \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1}B & \dots & a_{mn}B \end{bmatrix}$$

Приведем два частных случая тензорного произведения. Умножение вектора-столбца на вектор-строку представляет собой произведение

$$\mathbf{a} \otimes \mathbf{b} \rightarrow \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \end{bmatrix} [b_1 \quad b_2 \quad b_3] = \begin{bmatrix} a_1b_1 & a_1b_2 & a_1b_3 \\ a_2b_1 & a_2b_2 & a_2b_3 \\ a_3b_1 & a_3b_2 & a_3b_3 \\ a_4b_1 & a_4b_2 & a_4b_3 \end{bmatrix},$$

При одинаковой размерности векторов произведение $|\alpha\rangle\langle\beta|$ дает квадратную матрицу, что можно видеть при, например, конструировании оператора плотности $|\alpha\rangle\langle\alpha|$.

Перемножение матриц-столбцов представляет собой произведение

$$\mathbf{a} \otimes \mathbf{b} \rightarrow \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 \mathbf{b} \\ a_2 \mathbf{b} \\ a_3 \mathbf{b} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 b_1 \\ a_1 b_2 \\ a_2 b_1 \\ a_2 b_2 \\ a_3 b_1 \\ a_3 b_2 \end{bmatrix},$$

результатом которого является столбец с размерностью, равной произведению размерностей исходных векторов. Такая операция наблюдается при конструировании пространства, описывающего многочастичные состояния.

Е. Некоторые табличные интегралы

$$\int_0^{+\infty} e^{-ax} dx = \frac{1}{a}, \quad a > 0 \quad (\text{E.1})$$

$$\int_0^{+\infty} x e^{-ax} dx = \frac{1}{a^2}, \quad a > 0 \quad (\text{E.2})$$

$$\int_0^{+\infty} x^2 e^{-ax} dx = \frac{2}{a^3}, \quad a > 0 \quad (\text{E.3})$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}, \quad a > 0 \quad (\text{E.4})$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-ax^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2a^{3/2}}, \quad a > 0 \quad (\text{E.5})$$

$$\int x \sin^2(kx) dx = \frac{x^2}{4} - \frac{x \sin(2kx)}{4k} - \frac{\cos(2kx)}{8k^2} \quad (\text{E.6})$$

$$\int \sin^2(kx) dx = \frac{x}{2} - \frac{\sin(2kx)}{4k} \quad (\text{E.7})$$

$$\int x^2 \sin^2(kx) dx = \frac{x^3}{6} - \frac{(2k^2 x^2 - 1) \sin(2kx)}{8k^3} - \frac{x \cos(2kx)}{4k^2} \quad (\text{E.8})$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^4 e^{-ax^2} dx = 3 \sqrt{\pi} / (4a^{5/2}), \quad a > 0 \quad (\text{E.9})$$

$$\int \sin mx \sin nx dx = \frac{\sin[(m-n)x]}{2(m-n)} - \frac{\sin[(m+n)x]}{2(m+n)}, \quad m^2 \neq n^2 \quad (\text{E.10})$$

Ж. Основные физические константы

Постоянная Планка:	$\hbar = 1.054 \times 10^{-34}$ Дж·с
	$h = 6.626 \times 10^{-34}$ Дж·с
Скорость света:	$c = 2.997 \times 10^8$ м/с
Масса электрона:	$m_e = 9.109 \times 10^{-31}$ кг
Масса протона:	$m_p = 1.672 \times 10^{-27}$ кг
Заряд электрона:	$e = 1.602 \times 10^{-19}$ Кл
Постоянная Больцмана:	$k_B = 1.380 \times 10^{-23}$ Дж/К
Электронвольт:	1 эВ = 1.602×10^{-19} Дж

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Парфенов П.С.* Квантовая механика. Методическое пособие к практикуму по квантовой физике. СПб: НИУ ИТМО, 2012. 133 с.
2. *Basdevant J.-L., Dalibard J.* The Quantum Mechanics Solver. How to Apply Quantum Theory to Modern Physics. Springer, 2006. 292 pp.
3. *Griffiths David J.* Introduction to Quantum Mechanics. Pearson Education, Inc., 2005. 470 pp.
4. *de Бройль Л.* Соотношения неопределенностей Гейзенберга и вероятностная интерпретация волновой механики. М.: Мир, 1986. 344 с.
5. *Ландау Л. Д., Лившиц Е. М.* Курс теоретической физики. В 10 т. Т. 3. Квантовая механика (нерелятивистская теория). 6-е изд. М.: Физматлит, 2008. 800 с.
6. *Двайт Г. Б.* Таблицы интегралов и другие математические формулы: Пер. с англ., Под ред. *К.А. Семендяева.* М.: Наука, 1973. 228 с.
7. *Liboff R. L.* Introductory quantum mechanics. New York: Addison-Wesley, 2003. 878 pp.
8. *Мартинсон Л. К., Смирнов Е. В.* Квантовая физика : учеб. пособие. М.: МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2012. 527 с.
9. *Мэйтлэнд А., Данн М.* Введение в физику лазеров. Пер. с англ., Под ред. *С. И. Анисимова.* М.: Наука, 1978. 407 с.
10. *Фейнман . Ф., Лейтон Р. Б., Сэндс М.* Фейнмановские лекции по физике. Задачи и упражнения с ответами и решениями к выпускам 5—9. М.: Мир, 1966. 625 с.
11. *Fox M.* Quantum Optics. An Introduction. Oxford: Oxford University Press, 2006. 378 pp.
12. *Фейнман Р. Ф., Лейтон Р. Б., Сэндс М.* Фейнмановские лекции по физике. Том 8. Квантовая механика (1). М.: Мир, 1966. 272 с.
13. *Балашов В.В., Долинов В.К.* Курс квантовой механики. Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2001. 336 с.
14. *Клаудер Дж., Сударшан Э.* Основы квантовой оптики. Пер. с англ., Под ред. *А. А. Ахманова.* М.: Мир, 1970. 428 с.
15. *Эткинс П.* Кванты. Справочник концепций. М: Мир, 1977. 496 с.

Миссия университета – открывать возможность для гармоничного развития конкурентноспособной личности и вдохновлять на решение глобальных задач.

КАФЕДРА ОПТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ И СОВРЕМЕННОГО ЕСТЕСТВОЗНАНИЯ

Кафедра основана в 2002 году под названием «Оптическая физика и современное естествознание» в составе факультета «Фотоники и оптоинформатики». Первым заведующим кафедрой был избран доктор физ.-мат. наук М.Н. Либенсон, возглавлявший лабораторию «Фотофизика поверхности» в Государственном оптическом институте (ГОИ) им. С.И. Вавилова. С 2006 г. ею руководил доктор физ.-мат. наук, профессор А.В. Федоров, с 2017 г. кафедрой руководит к.ф.-м.н А.В. Иванов.

Образовательные программы бакалавриата и магистратуры кафедры ОФиСЕ сориентированы на актуальные потребности предприятий и организации высокотехнологичных направлений экономики в специалистах, а также учитывают новейшие достижения и тенденции развития нанотехнологий, фотоники и оптоинформатики.

В настоящее время на кафедре преподают профессора А.В. Баранов, Т.А. Вартанян, Е.А. Коншина, В.Г. Маслов, А.О. Орлова, Е.Ю. Перлин, А.В. Федоров, доценты Л.П. Амосова, Г.Н. Виноградова, В.Л. Комолов, М.Ю. Леонов, П.С. Парфенов, Е.В. Ушакова.

Автор данного учебного пособия – доцент кафедры, кандидат техн. наук Парфенов Петр Сергеевич – специалист в области экспериментальных исследований и диагностики наноструктур различными методами оптической микроскопии и спектроскопии.

Петр Сергеевич Парфенов

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА.
МЕТОДИЧЕСКОЕ ПОСОБИЕ К ПРАКТИКУМУ ПО
СПЕЦИАЛЬНЫМ РАЗДЕЛАМ ФИЗИКИ

Учебное пособие для профиля «Физика наноструктур»

В авторской редакции

Редакционно-издательский отдел Университета ИТМО

Зав. РИО

Н.Ф. Гусарова

Лицензия ИД N00408 от 05.11.99

Подписано к печати

Заказ N

Тираж

Отпечатано на ризографе

Редакционно-издательский отдел
Университета ИТМО
197101, Санкт-Петербург, Кронверский пр.,49