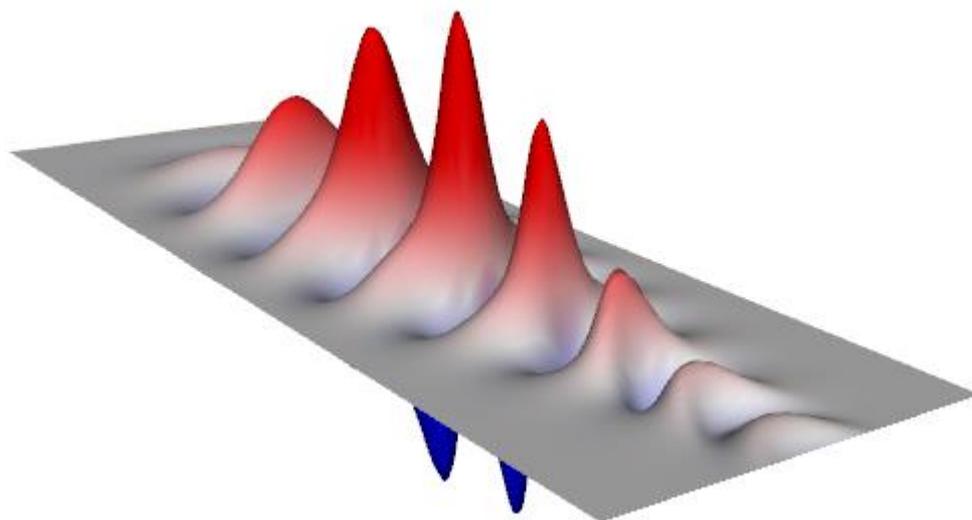


ІТМО

С.А. Козлов

ОПТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА.

**Часть 2. Полуклассический подход к описанию
явлений оптической физики**



Санкт-Петербург

2024

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

С.А. Козлов

ОПТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА.

Часть 2. Полуклассический подход к описанию явлений оптической физики

УЧЕБНОЕ ПОСОБИЕ

РЕКОМЕНДОВАНО К ИСПОЛЬЗОВАНИЮ В УНИВЕРСИТЕТЕ ИТМО
по направлению подготовки 12.03.03 Фотоника и оптоинформатика
в качестве учебного пособия для реализации основных профессиональных
образовательных программ высшего образования бакалавриата

ИТМО

Санкт-Петербург

2024

С.А. Козлов, Оптическая физика. Часть 2. Полуклассический подход к описанию явлений оптической физики. – СПб: Университет ИТМО, 2024. – 55 с.

Рецензент: Цыпкин Антон Николаевич, доктор физико-математических наук, руководитель научно-образовательного центра фотоники и оптоинформатики, руководитель лаборатории квантовых процессов и измерений.

Данное учебное пособие предназначено для студентов третьего курса бакалавриата Университета ИТМО, обучающихся по образовательному направлению 12.03.03 «Фотоника и оптоинформатика» на одноименной образовательной программе по дисциплине «Оптическая физика». В первой части пособия для описания явлений оптической физики был использован классический подход, при котором динамика поля электромагнитных волн изучается на основе уравнений Максвелла, а взаимодействие излучения с веществом рассматривается в рамках классической теории дисперсии света. В настоящей части пособия динамика поля излучения описывается, по-прежнему, классически, а вещество – законами квантовой физики. Представлена аксиоматика квантовой механики одной частицы и системы квантовых частиц. Приведены оптические аналоги типичных задач квантовой механики. Особое внимание уделено рассмотрению задач на определение средних физических величин квантовых частиц или их систем, находящихся в суперпозиционном состоянии. Изложены принципы полуклассического метода анализа взаимодействия света с веществом на основе уравнения Шредингера. Введено понятие матрицы плотности, и обосновано уравнение движения ее элементов. Изложены принципы полуклассического метода на основе уравнения движения матрицы плотности. Выведены материальные уравнения двухуровневой среды, описывающие однофотонное резонансное взаимодействие света с веществом. Приведены материальные уравнения для трехуровневых сред, описывающие двухфотонное поглощение и вынужденное комбинационное рассеяние света.

The logo of ITMO University, consisting of the letters 'ITMO' in a bold, black, sans-serif font. The 'I' and 'T' are connected, and the 'M' and 'O' are also connected.

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. Лидер проекта «Приоритет 2030».

© Университет ИТМО, 2024

© С.А. Козлов, 2024

Содержание

Введение.....	4
Лекция 1. Аксиоматика квантовой механики	5
Физический смысл волновой функции	7
Операторы физических величин.....	8
Уравнение Шредингера	10
Лекция 2. Оптические аналоги задач квантовой механики	14
Свободное движение квантовой частицы.....	14
Квантовая частица находится в бесконечно глубокой одномерной прямоугольной потенциальной яме	16
Квантовая частица находится в одномерной прямоугольной потенциальной яме конечной глубины	17
Прохождение квантовой частицы через потенциальный барьер.....	21
Квантовая частица в системе двух одномерных прямоугольных потенциальных ям конечной глубины	22
Лекция 3. Классическая механика как предельный случай квантовой механики.....	27
Среднее значение наблюдаемой	28
Динамика среднего значения наблюдаемой.....	29
Теорема Эренфеста	30
Соотношения неопределенностей	33
Лекция 4. Суть полуклассического метода анализа явлений оптической физики на основе уравнения Шредингера.....	35
Лекция 5. Аксиоматика квантовой механики системы частиц.	37
Лекция 6. Матрица плотности	40
Уравнение движения матрицы плотности.....	44
Лекция 7. Полуклассический метод на основе уравнения матрицы плотности	46
Динамика двухуровневых частиц.....	50
Динамика молекул при вынужденном комбинационном рассеянии.....	51
Заключение	52
Рекомендуемая литература	53

Введение

Уважаемый читатель! Настоящее пособие написано по материалам лекционного курса по дисциплине «Оптическая физика», который читается студентам Университета ИТМО в рамках образовательной программы «Фотоника и оптоинформатика» на третьем курсе бакалавриата.

Явления оптической физики можно теоретически изучать, используя различные методы анализа. Во-первых, основываясь на *методе классической оптики*. В этом случае динамика и поля, и вещества описывается классически. Именно этот подход использован в первой части учебного пособия [1]. Динамика поля электромагнитных волн изучалась на основе уравнений Максвелла, а взаимодействие излучения с веществом рассматривалось в рамках классической теории дисперсии света. Методами теории волн были рассмотрены явления дифракции, дисперсии, нелинейной оптики. При этом подробно обсуждались методы описания и закономерности этих явлений как для квазимонохроматических и параксиальных волн, так затрагивались и их особенности для непараксиального излучения и волн из малого числа колебаний.

Во-вторых, для описания ряда явлений оптической физики более достоверным может оказаться *полуклассический метод*, когда динамика поля описывается по-прежнему, классически, а вещество – законами квантовой физики. Этому подходу посвящена настоящая – вторая – часть пособия. При анализе оптических явлений с использованием квантового описания отклика вещества на поле электромагнитного излучения предполагалось, что основы квантовой механики и историю ее развития Вы внимательно прослушали в рамках курса «Общая физика», а в этом семестре уже изучаете дисциплину «Квантовая механика» по классическому учебнику, например, [2]. Поэтому в настоящем пособии читателю история развития и аксиоматика квантовой механики лишь напоминает. А особое внимание уделено оптическим аналогам характерных задач квантовой механики. Рассмотрены задачи на определение средних физических величин квантовых частиц или их систем, находящихся в суперпозиционном состоянии, которые не всегда входят в учебники по квантовой механике. Изложены принципы полуклассического метода анализа взаимодействия света с веществом на основе уравнения Шредингера. Введено понятие матрицы плотности, и обосновано уравнение движения ее элементов. Изложены принципы полуклассического метода на основе уравнения движения матрицы плотности. Выведены материальные уравнения «двухуровневой» среды, описывающие однофотонное резонансное взаимодействие света с веществом. Приведены материальные

уравнения для «трехуровневых» сред, описывающие двухфотонное поглощение и вынужденное комбинационное рассеяние света.

Кроме данного учебного пособия, в восприятии полуклассического метода анализа явлений оптической физики Вам также могут помочь информационно-емкий и подробный учебник [3] и научные монографии учебного характера [4, 5].

Лекция 1. Аксиоматика квантовой механики

“Если квантовая теория не вызывает на первых порах возмущения, то не может быть, что вы ее правильно поняли”

Нильс Бор

Напомним аксиоматику квантовой механики, изложив ее, следуя монографии [6], в виде трех основных постулатов.

Постулат 1. Состояние квантовой частицы полностью описывается волновой функцией.

Эту функцию от координаты \vec{r} и времени t обычно обозначают греческой буквой $\Psi(\vec{r}, t)$. Эта функция комплексная. Реже ее зависимость от времени могут рассматривать и в другом пространстве, например, импульсном.

Естественен вопрос: а что означает «полностью описывается»? Например, что можно сказать о хорошо понятных из нашей «классической» практики физических величинах $\vec{r}, \vec{p}, \vec{L}, E$ (координата, импульс, момент импульса, энергия) квантовой частицы в состоянии $\Psi(\vec{r}, t)$? Ответ на него дает следующий постулат.

Постулат 2. Каждой физической величине A ставится в соответствие определенный оператор $\hat{A}: A \rightarrow \hat{A}$. Этот оператор характеризуется собственными значениями и собственными функциями $\{a_n\}$ и $\{\varphi_n\}$. Любое состояние квантовой частицы представимо в виде разложения по собственным функциям данного оператора:

$$\Psi = \sum_n c_n \varphi_n . \quad (1.1)$$

Тогда значение $|c_n|^2$ - это вероятность при измерении физической величины A в состоянии Ψ квантовой частицы получить ее значение a_n .

Математическое приложение [7]: собственными значениями и собственными функциями оператора \hat{A} называют решения уравнения $\hat{A}\varphi = a\varphi$.

Постулат 3. Эволюция состояния квантовой частицы с течением времени описывается уравнением Шредингера:

$$i\hbar \frac{d\Psi}{dt} = \hat{H}\Psi, \quad (1.2)$$

где \hat{H} - гамильтониан.

Замечание: приведенная система постулатов является цельной. Действительно, чтобы пользоваться, например, «ньютоновской» механикой, какие сведения нам необходимы? Во-первых, надо понимать, как описывается состояние частицы. Во-вторых, нужно знать закон изменения этого состояния. Ответы на эти вопросы и составляют суть цельной классической теории, позволяющей решать человеку множество задач - от описания столкновения бильярдных шаров до проектирования космических полетов. В соответствии со вторым законом Ньютона ускорение $\ddot{\vec{r}}$ частицы массы m определяется силой \vec{F} , на нее действующей:

$$m\ddot{\vec{r}} = \vec{F}. \quad (1.3)$$

Уравнение, описывающее движение «классической» частицы (1.3), – это дифференциальное уравнение второго порядка, поэтому для его однозначного решения надо указать два начальных условия: координату \vec{r} и скорость $\dot{\vec{r}}$. Соответственно, знание о положении и скорости классической частицы в какой-то момент времени позволяет по уравнению ее динамики (1.3) полностью описать изменение этого положения к любому последующему моменту времени. Аналогично, знание о волновой функции квантовой частицы в какой-то момент времени позволяет по уравнению ее динамики (1.2) полностью описать изменение этого состояния к любому последующему моменту времени. Отметим при этом, что уравнение эволюции состояния частицы в квантовой механике (1.2) – это

дифференциальное уравнение первого порядка по времени, поэтому для однозначного решения уравнения достаточно знания одной величины, задающей начальное условие.

В классической механике теорию, дающую тот же результат, что и теория, основанная на законах Ньютона, можно выстраивать по-разному. Например, на основе гамильтонова формализма. В квантовой механике также существуют другие, но тоже дающие эквивалентные результаты, формализмы. Например, гейзенберговский матричный формализм решения квантовых задач. В настоящем пособии будем использовать только аксиоматику, основанную на постулатах, приведенных выше.

Отметив сходство в принципах построения классической и квантовой теории, теперь обратим внимание на их глубочайшие мировоззренческие различия. В классической механике состояние и движение частицы мы представляем вполне наглядно. Например, траекторию брошенного камня мы можем и увидеть (просто) и рассчитать по закону (1.3) (несколько сложнее). А что предсказывается в квантовой механике? Второй ее постулат говорит о том, что в результате измерения, например, энергии квантовой частицы, находящейся в одном и том же состоянии, мы можем обнаружить, в общем случае, и одно, и другое, и третье значения энергии частицы с определенной вероятностью. Посмотрите на эпиграф к этому разделу. По сути, Нильс Бор сказал, что если Вы не удивлены, то просто не поняли сути подобного утверждения. А если удивлены и даже не верите такому заявлению, то Вы не одиноки. Великий Альберт Эйнштейн не принял аксиоматику квантовой механики, поскольку до конца жизни не верил в то, «что Бог играет в кости». Тем не менее, многочисленные экспериментальные наблюдения в течение вот уже целого века и, главное, активное внедрение квантовых технологий в практическую жизнь человека убедительно подтверждает справедливость сформулированных постулатов.

Сделаем теперь краткий исторический экскурс.

Физический смысл волновой функции

Почти век назад в 1926 году Макс Борн предложил гипотезу о том, что квадрат модуля волновой функции $|\Psi|^2$ определяет плотность вероятности обнаружения частицы в пространстве. Т.е. вероятность обнаружения частицы в объеме dV может быть представлена в виде $dP = |\Psi|^2 dV$. Отсюда следует

часто используемое в конкретных задачах квантовой механики нормировки волновой функции условие

$$\int_V |\Psi|^2 dV = 1. \quad (1.4)$$

Соотношение (1.4) означает, что волновая функция квадратично интегрируема, т.е. относится к векторному пространству L_2 [7].

Обсуждение и принятие научной общественностью аксиоматики квантовой механики шло в многочисленных дискуссиях и довольно продолжительное время. Нобелевскую премию "за фундаментальные труды по квантовой механике и особенно за статистическую интерпретацию волновой функции" (это формулировка Нобелевского комитета) Макс Борн получил только в 1954 году, когда постулаты квантовой механики, в том числе о физическом смысле волновой функции, стали общепринятыми. Ведь выводы из удивительной теории, предложенной еще в 20-е годы, к 50-ым годам подтвердились многочисленными экспериментами и уже воплотились в технологических достижениях, определивших во многом техническое развитие человеческой цивилизации в двадцатом веке.

Операторы физических величин

Из аксиоматики квантовой механики понятны требования к операторам физических величин:

1. Собственные значения операторов должны быть вещественными, поскольку сами физические величины, значения которых определяются в экспериментах, являются вещественными.
2. Системы собственных функций операторов должны быть полными, чтобы произвольные ограниченные волновые функция могли быть разложены в ряд или интеграл по собственным функциям.

При дискретном спектре оператора должно выполняться разложение

$$\Psi = \sum_n c_n \varphi_n, \text{ где } c_n = \int \varphi_n^* \Psi dV. \text{ При непрерывном спектре оператора}$$

$$\text{выполняется представление } \Psi = \int c(\lambda) \varphi_\lambda d\lambda, \text{ где } c(\lambda) = \int \varphi_\lambda^* \Psi dV.$$

Таковыми свойствами обладают самосопряженные (эрмитовы) операторы [7].

Математическое приложение [7]:

Линейный оператор \hat{A} в гильбертовом пространстве U называется *самосопряженным (эрмитовым)*, если выполняется соотношение $(x, \hat{A}y) = (\hat{A}x, y)$ для всех x и y из пространства U .

В векторном пространстве квадратично интегрируемых функций это определение принимает вид

$$\int_V f^* \hat{A} \varphi dV = \int_V \varphi (\hat{A} f)^* dV. \quad (1.5)$$

Для понимания определения самосопряженного оператора также напомним, что *гильбертово пространство* - это полное унитарное векторное пространство. А *унитарное пространство* - это векторное пространство, в котором определено скалярное произведение.

Для самосопряженного оператора собственные функции, соответствующие разным собственным значениям, взаимно ортогональны:

$$\int \varphi_m^* \varphi_n dV = \delta_{mn} \quad \text{- для дискретного спектра}$$

$$\int \varphi_\lambda^* \varphi_{\lambda'} dV = \delta(\lambda - \lambda') \quad \text{- для непрерывного спектра}$$

Замечание: особый случай - вырождение собственного значения.

Напомним теперь из курса дисциплины «Квантовая механика» [2] операторы некоторых основных физических величин.

Оператор координаты квантовой частицы $\hat{r} \rightarrow \vec{r}$.

Оператор любой функции координаты, например, потенциальной энергии квантовой частицы $\hat{U}(\vec{r}) \rightarrow U(\vec{r})$.

Оператор импульса квантовой частицы $\hat{p} = -i\hbar \nabla$.

Оператор энергии квантовой частицы (гамильтониан) $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{U}$.

Оператор момента импульса квантовой частицы $\hat{L} = (\hat{r} \times \hat{p})$.

По сути, вид этих операторов в квантовой механике тоже постулируется. Впрочем, первые два оператора можно обосновать, если исходным постулатом считать гипотезу М. Борна о физическом смысле волновой функции. Обратим внимание, что, зная вид оператора координаты или потенциальной энергии квантовой частицы и ее импульса, вид других операторов можно определить по формулам классической механики, в которых физическая величина заменяется ее оператором. Так выше построен гамильтониан и оператор момента импульса частицы.

В заключение этой лекции напомним, когда впервые в научной литературе появилось уравнение динамики волновой функции, названное потом уравнением Шредингера.

Уравнение Шредингера

В уже далеком 1926 году Эрвин Шредингер в статье "Квантование как задача о собственных значениях" угадал математический аппарат квантовой механики. В этой статье (см. также прекрасную монографию, посвященную истории развития квантовой механики, [8]) Шредингер (далее цитирование по книге [8]) «рассматривая квадратичные формы от некоторой функции и ее производных, которые экстремизируют интеграл по конфигурационному пространству, для атома водорода получил»:

$$\left(-\frac{K^2}{2m} \Delta - \frac{e^2}{r} \right) \Psi = E \Psi, \quad (1.6)$$

где второе слагаемое под скобками в левой части уравнения – это потенциальная энергия электрона $U(r)$; m , e - масса и заряд электрона.

Уравнение (1.6) – это задача на определение собственных функций и собственных значений оператора $\left(-\frac{K^2}{2m} \Delta - \frac{e^2}{r} \right)$. Оказалось, что спектр этого оператора имеет вид $E_n = -\frac{me^2}{2K} \frac{1}{n^2}$, и при $K = \hbar^2$ полностью совпадает с хорошо к тому времени изученным спектром боровского атома. Так в статье появилось уравнение

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{r}) \right] \Psi = E \Psi, \quad (1.7)$$

которое позже назвали стационарным (не зависящим от времени) уравнением Шредингера. В статье, в которой он его представил, Шредингер постулировал, что это уравнение позволяет определять возможные энергетические состояния частицы массы m в потенциальном поле U .

При анализе временного поведения волновой функции стационарное уравнение (1.7) Эрвин Шредингер обобщил до вида

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{r}) \right] \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}, \quad (1.8)$$

Чтобы пояснить это обобщение, продемонстрируем решение временного уравнения Шредингера (1.8) методом разделения переменных [7], полагая

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Phi(\vec{r}) T(t). \quad (1.9)$$

Поиск решения уравнения (1.8) в виде (1.9) приводит к соотношению

$$T \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U \right) \Phi = i\hbar \Phi \frac{\partial T}{\partial t}. \quad (1.10)$$

Его можно переписать в виде

$$\frac{1}{\Phi} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U \right) \Phi = i\hbar \frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial t} = E, \quad (1.11)$$

где E - это некоторая константа, поскольку левая часть соотношения (1.11) не зависит от времени, а правая от координаты. А это возможно только тогда, когда обе эти части не зависят ни от времени, ни от координаты.

Таким образом, (1.11) позволяет, во-первых, определить временную зависимость $T(t)$ в функции (1.9), найдя решение уравнения

$$i\hbar \frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial t} = E, \quad (1.12)$$

Это решение имеет вид

$$T = ce^{-i\frac{E}{\hbar}t} \quad (1.13)$$

Во-вторых, из (1.10) следует, что зависимость от координаты $\Phi(\vec{r})$ может быть найдена из уравнения

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U\right)\Phi = E\Phi. \quad (1.14)$$

Это уравнение есть не что иное, как стационарное уравнение Шредингера. Становится тогда ясным и смысл появившейся в ходе решения уравнения (1.8) константы E . Это энергия, которую может иметь квантовая частица.

Пусть решение стационарного уравнения Шредингера известно и имеет вид совокупности собственных функций и собственных значений $\{\varphi_n(\vec{r}), E_n$. Тогда общее решение временного уравнения Шредингера (1.8) определяется через решения стационарного уравнения Шредингера (1.14) следующим образом:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_n c_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \varphi_n(\vec{r}) \quad (1.15)$$

Вывод: и стационарное, и общее уравнения Шредингера постулируются в квантовой механике как подтверждаемые уже почти век в многочисленных экспериментах и воплощенные во многих технологиях.

Обратим внимание читателя на то, что, предложив рассмотренный нами только что математический аппарат решения задач квантовой механики, Эрвин Шредингер на знал, каков смысл введенной им волновой функции. Одна из его ранних идей заключалась в том, что дуализма нет, существуют только волны, а частицы – это хорошо известные в оптике волновые пакеты. На рисунке 1 приведена «мгновенная» фотография (в момент времени $t = t_0$) распределения волновой функции от координаты \mathcal{X} . И, например, для электрона в такой трактовке волновая функция Ψ характеризует и распределение заряда.

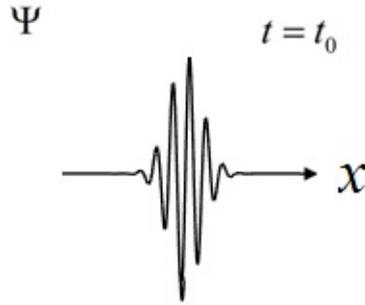


Рисунок 1.1 - Иллюстрация ранней идеи Эрвина Шредингера о представлении квантовой частицы как волнового пакета

Однако такая идея оказалась нежизнеспособной, поскольку волновой пакет оказался бы неустойчивым, и из-за дифракции тот же электрон быстро бы расплылся в большие размеры. Подобные оценки мы обсудим позднее.

Упражнения и вопросы для самоконтроля

Упражнение 1. Записать вид гамильтониана \hat{H} для свободного пространства.

Указание. Использовать в операторе импульса выражение

$$\nabla = \vec{i} \frac{\partial}{\partial x} + \vec{j} \frac{\partial}{\partial y} + \vec{k} \frac{\partial}{\partial z}. \quad (1.16)$$

Ответ: $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$

Упражнение 2. Записать уравнение Шредингера для свободного пространства.

Ответ: $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi. \quad (1.17)$

Сравнить его с уравнением параксиальной дифракции монохроматических волн [1]

$$-2ik \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial z} + \Delta_{\perp} \mathcal{E} = 0. \quad (1.18)$$

и с уравнением дисперсии оптического импульса [1]

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial z'} + i \frac{\beta_2}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{E}}{\partial \tau^2} = 0. \quad (1.19)$$

Замечание. Обоснование и решения дифракционного и дисперсионного уравнений (1.16) и (1.17) мы подробно обсудили в первой части этого пособия. Математическая эквивалентность их с уравнением Шредингера для свободного пространства позволяет легко представить решения и этого уравнения.

Упражнение 3. Сформулировать основные постулаты квантовой механики.

Вопрос 1. Каков физический смысл волновой функции?

Вопрос 2. Каков вид операторов импульса, момента импульса, энергии квантовой частицы?

Вопрос 3. Каков вид стационарного уравнения Шредингера?

Вопрос 4. Каков вид временного уравнения Шредингера?

Лекция 2. Оптические аналоги задач квантовой механики

Напомнив в предыдущей лекции аксиоматику квантовой механики, вернемся к обсуждению методов анализа явлений оптической физики. Рассмотрим в этой лекции оптические аналоги задач квантовой механики. Математический аппарат многих задач квантовой механики и оптической физики оказывается идентичным. Не случайно в свое время квантовую механику называли волновой механикой. Это означает, что если Вы разобрались в деталях с некоторой задачей движения квантовой частицы, то Вы решили в подробностях и математически ей эквивалентную задачу из оптики. И наоборот. Рассмотрим несколько примеров таких ситуаций.

Свободное движение квантовой частицы

Эволюция волновой функции квантовой частицы при таком движении, как выше рассмотрели в упражнении 2 при лекции 1, описывается уравнением Шредингера вида

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi. \quad (2.1)$$

Оптический аналог этой задачи квантовой механики, как уже отметили в этом же упражнении, – это *дифракция параксиальной монохроматической волны*, которая описывается уравнением

$$-2ik \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial z} + \Delta_{\perp} \mathcal{E} = 0. \quad (2.2)$$

Сопоставление уравнения дифракции (2.2) с уравнением Шредингера (2.1) показывает, что математически они полностью идентичны при замене функции $\mathcal{E} \rightarrow \Psi$, переменной $z \rightarrow t$, и параметра $k \rightarrow \frac{m}{\hbar}$, а также возможного различия в размерности лапласиана.

В первой части учебного пособия «Оптическая физика» [1] мы уже отметили подобную математическую аналогию уравнения дифракции монохроматической волны (2.2) с уравнением дисперсии квазимонохроматического импульса

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial z'} + i \frac{\beta_2}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{E}}{\partial \tau^2} = 0. \quad (2.3)$$

Это означает, что знание решения задач дифракции (2.2) или дисперсии (2.3), которые приведены, например, в [1], позволяет соответствующей заменой переменных получить результат расчета расплывания волновой функции квантовой частицы (2.1). В упражнении 1 к данной лекции приведен простой метод оценки времени заметного расплывания волновой функции, аналогичный оценке длины перетяжки при дифракции гауссова пучка. Заметим, что именно эти оценки демонстрируют несостоятельность раннего представления Шредингера квантовой частицы волновым пакетом.

К самому, наверное, распространенному классу задач, рассматриваемому в учебниках квантовой механики, относятся расчеты энергии, которые может иметь частица или система квантовых частиц в различных условиях. Начиная с расчета значений энергии, которые может иметь квантовая частица в модельных идеализированных потенциалах, продолжая расчетами в более сложных задачах определения энергии, которую могут иметь атомы и молекулы, и обычно заканчивая обсуждением квантования энергии в твердых телах [2] - все эти задачи математически формулируются одинаково: надо найти собственные значения и собственные функции стационарного уравнения Шредингера

$$\hat{H}\Psi = E\Psi. \quad (2.4)$$

Разумеется, задачи существенно отличаются видом гамильтониана и его размерностью. Начнем рассмотрение с, пожалуй, самой простой задачи из этого класса.

Квантовая частица находится в бесконечно глубокой одномерной прямоугольной потенциальной яме

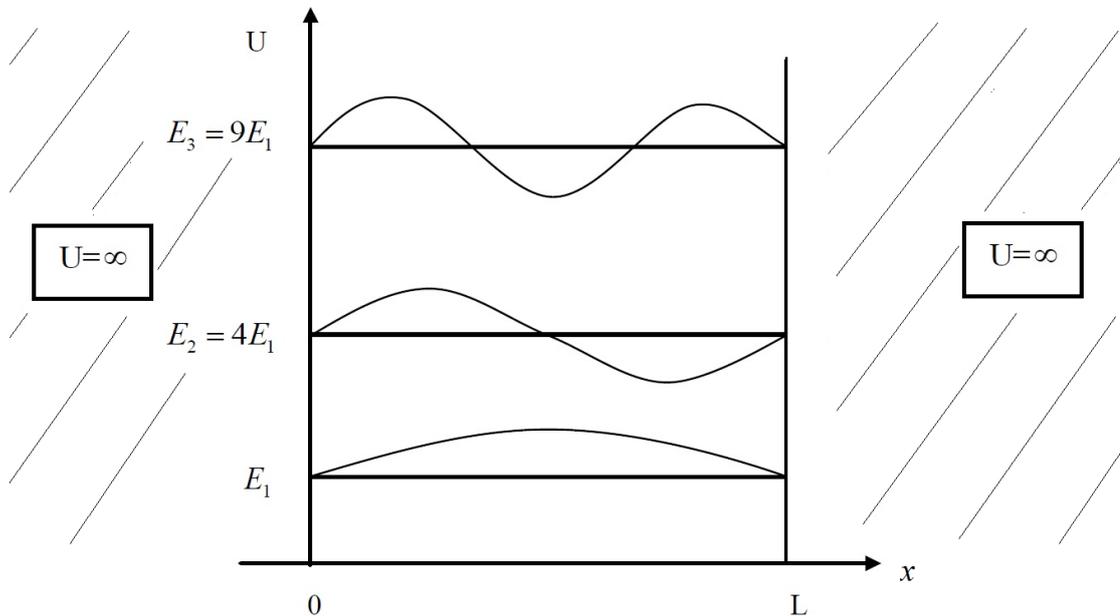


Рисунок 2.1 - Квантовая частица в одномерной бесконечно глубокой потенциальной яме. U – потенциальная энергия частицы, которая бесконечна за пределами ямы и равна нулю в ее пределах, x – координата одномерной задачи, L – ширина ямы, E_1, E_2, E_3 – энергии, которую может иметь частица в потенциальной яме, кривые линии – отражают вид волновых функций, соответствующих приведенным значениям энергии.

Решение этой задачи приводится в любом учебнике по квантовой механике. Значения энергии, которые может принимать частица в простейшем потенциале, приведенном на рисунке, описываются соотношением

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2 \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.5)$$

Соответствующие им волновые функции имеют вид

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi n}{L} x \quad (2.6)$$

Тогда общее решение стационарного уравнения Шредингера (1.8) для рассматриваемой задачи может быть представлено в виде ряда (см. Лекцию 1)

$$\Psi(x,t) = \sum_n c_n \sqrt{\frac{2}{L}} e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} \sin \frac{\pi n}{L} x . \quad (2.7)$$

Решение задачи нахождения собственных значений и собственных функций гамильтониана (2.4) для рассмотренного случая простейшего потенциала, как видим, описывается в элементарных функциях и доступно студентам даже со слабой математической подготовкой. Эта простая в решении задача методически очень удобна для демонстрации студентам того, как в рамках аксиоматики квантовой механики появляется дискретность значений энергии, которые может иметь квантовый объект. Однако эта задача, выглядящая модельной и удобной лишь в методическом плане, не столь уж абстрактна. Она весьма близка к физически очень важной в проблематике современных материалов задаче расчета параметров квантовых точек.

Оптическим аналогом рассмотренной задачи квантовой механики является *расчет мод в металлическом волноводе*. Этот вопрос радиотехники при обучении в высшей школе обычно рассматривается после рассмотрения основ квантовой механики. Таким образом, к математическому аппарату расчета мод металлического волновода Вы уже подготовлены.

Квантовая частица находится в одномерной прямоугольной потенциальной яме конечной глубины

Эта задача тоже обычно подробно разбирается во всех учебниках по квантовой механике. Стационарное уравнение Шредингера (2.4) для такой задачи принимает вид

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)\Psi = 0, \quad (2.8)$$

где U_0 – глубина потенциальной ямы. Решение уравнения (2.8) иллюстрировано на рисунке 2.2. На нем введено обозначение $-\kappa = \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)$.

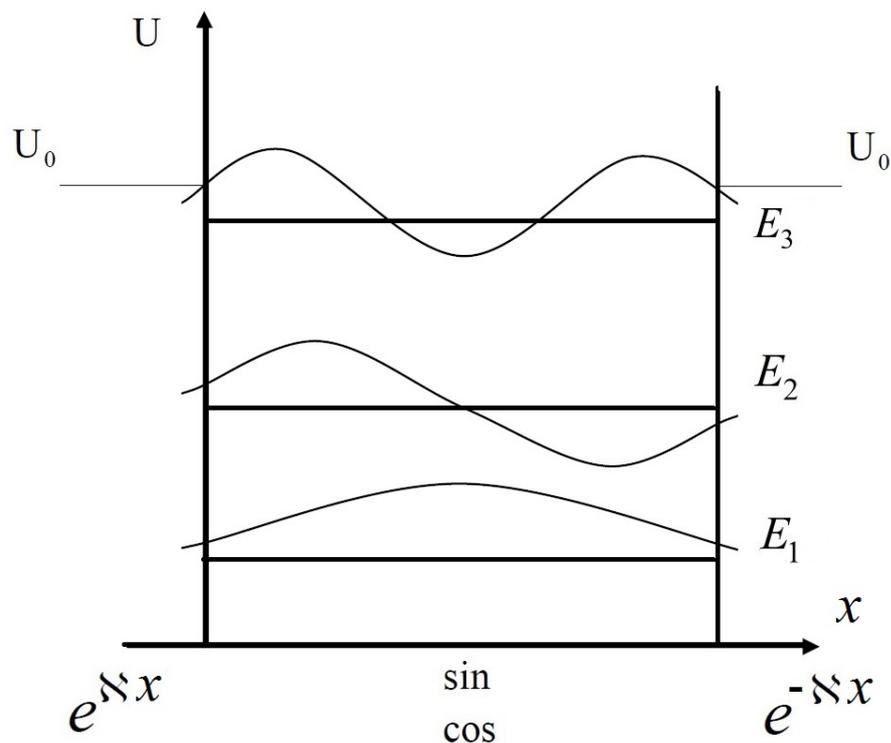


Рисунок 2.2 - Квантовая частица в одномерной потенциальной яме конечной глубины. U – потенциальная энергия частицы, которая равна нулю в пределах ямы. U_0 – глубина потенциальной ямы, x – координата одномерной задачи, L – ширина ямы, E_1, E_2, E_3 – энергии, которую может иметь частица в потенциальной яме, кривые линии – отражают вид волновых функций, соответствующих приведенным значениям энергии.

Из уравнения (2.8) и рисунка 2.2 видно, что спектр гамильтониана при $E < U_0$ дискретен, вид волновых функций в яме синусо-косинусный, а за ее пределами экспоненциальный (спадающий). Количество значений энергии, которые может иметь частица в яме конечной глубины, конечно. Оно зависит от глубины и ширины ямы. Важно, что для «неглубокой» и «неширокой» ямы обязательно есть, как минимум, одно дискретное значение энергии частицы. Волновые функции и, следовательно, по их физическому смыслу сама частица при условии $E < U_0$ локализована возле ямы.

При $E > U_0$ спектр непрерывный, и волновые функции квантовой частицы как внутри ямы, так и вне ее имеют синусо-косинусный вид. Говорят, что частица в таких состояниях *делокализована*, поскольку плотность вероятности обнаружить при измерении частицу с такой энергией не нулевая в сколь угодно далеких областях пространства.

Оптическим аналогом рассмотренной задачи квантовой механики является *расчет мод планарного диэлектрического волновода*. На рисунке 2.3 иллюстрирован такой волновод. Он представляет собой слои прозрачных диэлектриков с разными показателями преломления. Внутренний слой имеет показатель преломления больший, чем внешние слои $n_2 > n_1$, так, что в этом слое волновода для части излучения выполняется условие полного внутреннего отражения. На рисунке 2.4 приведены пары волн, идущие во внутреннем слое волновода под разными углами друг к другу и к плоскостям слоя. Внутри слоя решения для таких пар волн синусно-косинусные. При малых углах между направлениями этих пар (рисунок 2.4 а) выполняется условие полного внутреннего отражения. Поэтому во внешних слоях волновода поле экспоненциально спадает. Такие синусно-косинусные по форме внутри слоя и экспоненциальные вне его структуры поля называют *модами* планарного диэлектрического волновода. Они характеризуют поперечную структуру излучения, распространяющегося без изменения этой структуры на значительные расстояния в прозрачном волноводе. При больших углах между парами волн (рисунок 2.4 б) для них условие полного внутреннего отражения уже не выполняется, и появляется выходящее из внутреннего слоя волновода излучение. Устойчивые моды не формируются. Физически понятно, что количество мод тем больше, чем больше разница показателей преломления слоев и больше ширина слоя. Но, как минимум, одна мода всегда существует. В этом случае волновод называют *одномодовым*.

Расчет мод оптического волновода математически полностью аналогичен расчету собственных функций квантовой частицы в потенциальной яме конечной глубины. Профиль показатель преломления слоистой диэлектрической структуры, в которой распространяется излучение, аналогичен профилю потенциальной ямы, в которой существует квантовая частица. Структура поля моды в волноводе соответствует собственной функции квантовой частицы в потенциальной яме $\mathcal{E} \rightarrow \Psi$.

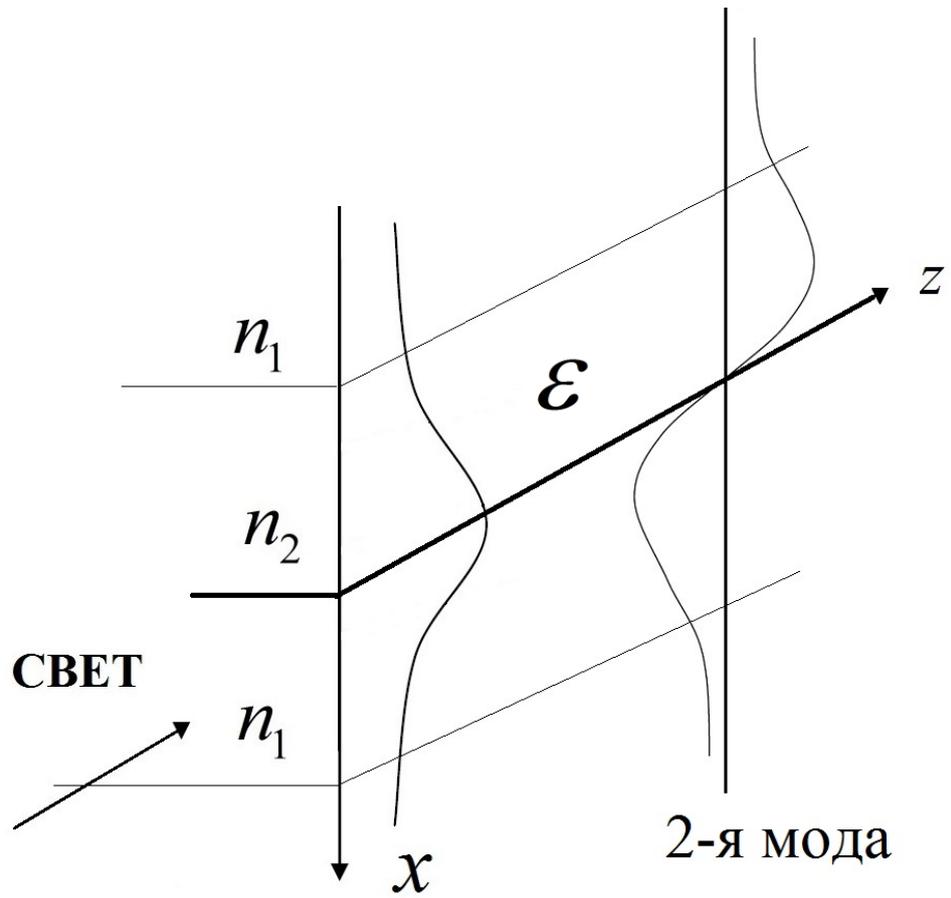


Рисунок 2.3 - Распространение света в диэлектрическом планарном волноводе вдоль оси z . x – поперечная координата планарного волновода, n_1 и n_2 – показатели преломления слоев диэлектрической среды, кривые линии – отражают вид поля мод волновода \mathcal{E}

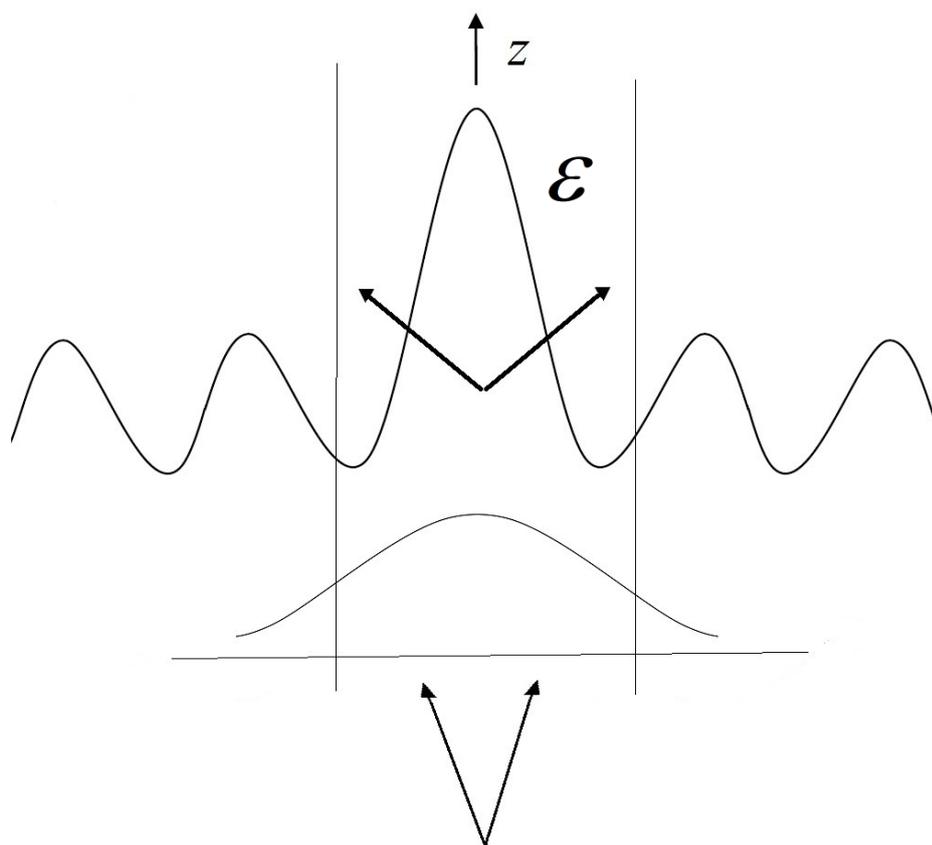


Рисунок 2.4 - Формирование мод \mathcal{E} планарного диэлектрического волновода

Теорию оптических диэлектрических волноводов в обучении в высшей школе обычно тоже рассматривается после рассмотрения основ квантовой механики. Таким образом, изучив задачу об энергетических состояниях и соответствующих им волновых функциях квантовой частицы в потенциальной яме конечной глубины, Вы уже подготовлены и к восприятию математического аппарата расчета оптических мод планарного диэлектрического волновода. А это важная и, по-прежнему, актуальная для практики задача оптической физики и фотоники.

Прохождение квантовой частицы через потенциальный барьер

Еще одна типичная задача из курса «Квантовая механика» иллюстрирована на рисунке 2.5. Прохождение потенциального барьера частицей, энергия которой меньше высоты этого барьера, с точки зрения классической механики и обыденной практики невозможно. Решение этой задачи в квантовой механике такую возможность предусматривает. Обнаружение квантовой частицы за потенциальным барьером в подобной ситуации называют «туннельным эффектом».

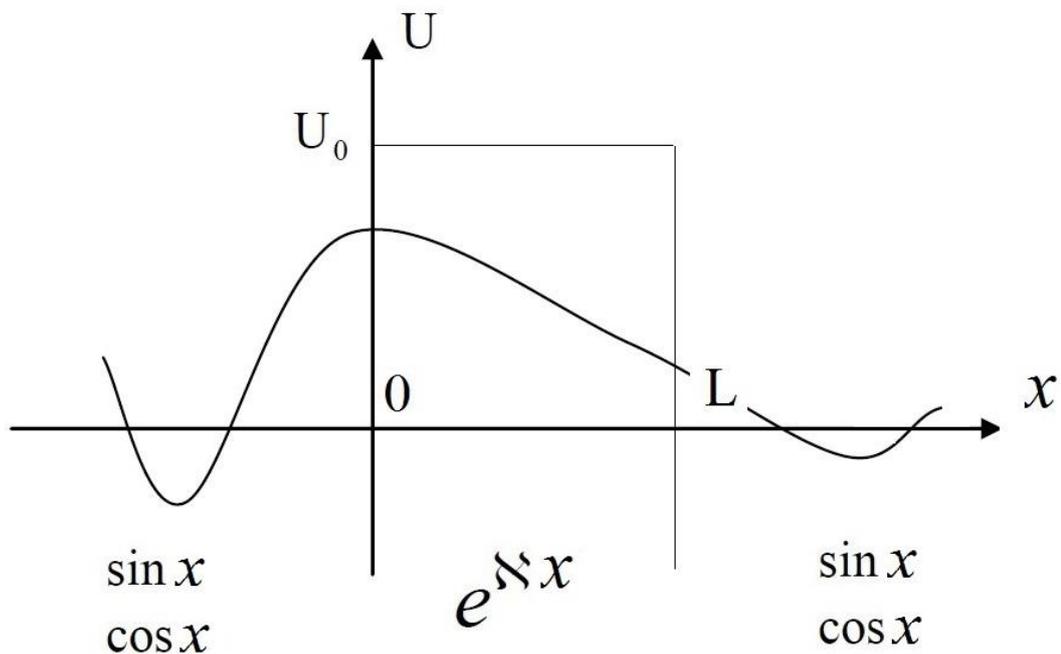


Рисунок 2.5 - Прохождение квантовой частицы через одномерный прямоугольный потенциальный барьер. U – потенциальная энергия частицы, которая равна нулю вне барьера. U_0 – высота потенциального барьера, x – координата одномерной задачи, кривые линии отражают вид возможной волновой функции

Какое явление в оптике описывается полностью аналогичным математическим аппаратом, как и «туннельный эффект»? Этот вопрос и ответ на него находится в разделе **Упражнения** настоящей лекции.

Квантовая частица в системе двух одномерных прямоугольных потенциальных ям конечной глубины

Обсудим еще одну задачу квантовой механики, решение которой описывается в задачниках к этой дисциплине. Рассмотрим эволюцию волновой функции квантовой частицы, находящейся в системе двух рядом расположенных прямоугольных потенциальных ям. Решение такой задачи и соотнесение его с оптическим аналогом интересно тем, что оно позволяет понять принципы работы важнейших элементов оптических интегральных схем, а также логических элементов оптических квантовых вычислителей.

На рисунке 2.6 иллюстрированы две одномерные потенциальные ямы одинаковой глубины и ширины.

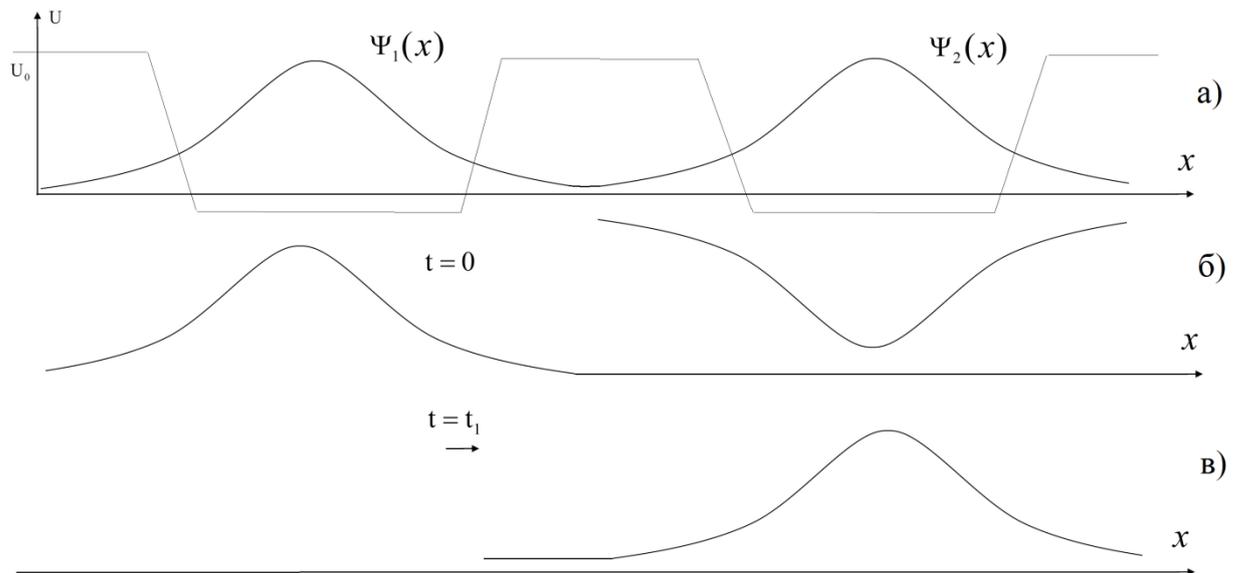


Рисунок 2.6 - Квантовая частица в системе двух одномерных потенциальных ям конечной глубины. U – потенциальная энергия частицы, которая равна нулю в пределах ям, U_0 – глубина потенциальных ям, x – координата одномерной задачи, L – ширина ям. (а) Кривые линии отражают вид симметричной и антисимметричной волновых функций, соответствующий наименьшим значениям энергии частицы в системе ям. (б) Кривая линия отражает вид волновой функции частицы в момент времени $t = 0$, который соответствует локализации частицы в левой яме. (в) Кривая линия отражает вид волновой функции в момент времени $t = t_1$, который соответствует локализации частицы в правой потенциальной яме.

В приближении слабой связи потенциальных ям наименьшим энергетическим состояниям частицы в таких условиях соответствуют симметричная (для самого малого значения энергии) и антисимметричная (для несколько большего значения энергии) волновые функции вида

$$\Psi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \Psi_1 + \frac{1}{\sqrt{2}} \Psi_2$$

$$\Psi_- = \frac{1}{\sqrt{2}} \Psi_1 - \frac{1}{\sqrt{2}} \Psi_2, \quad (2.9)$$

где $\Psi_1(x)$ и $\Psi_2(x)$ – собственные функции задачи (2.8) для частицы, находящейся в, соответственно, левой и правой одиночных потенциальных ямах.

Пусть в момент времени $t = 0$ квантовая частица находится, например, в левой потенциальной яме (см. рисунок 2.6 б), и ее волновая функция равна $\Psi_1(x)$. Этой волновой функции соответствует значение энергии E_1 при решении стационарного уравнения Шредингера (2.8) для одиночной потенциальной ямы. Но эта функция уже не соответствует определенному значению энергии частицы в системе двух потенциальных ям и не является собственной волновой функцией вида (2.9). Говорят, что частица находится в *суперпозиционном состоянии*. Тогда с течением времени ее волновая функция изменяется по формуле (1.15). Используя решения временного уравнения Шредингера вида (1.15), можно показать, что состояние $\Psi_1(x)$ с течением времени перейдет в состояние $\Psi_2(x)$ (рисунок 2.6 с). Потом состояние $\Psi_2(x)$ перейдет обратно в состояние $\Psi_1(x)$. Таким образом, динамика волновой функции квантовой частицы, находящейся в рассматриваемом *суперпозиционном состоянии*, является периодической. Период процесса определяется параметрами ям и расстоянием между ними.

Для обсуждения оптического аналога задачи о квантовой частице в системе двух потенциальных ям напомним ряд базовых понятий квантовой информатики.

Приложение: о некоторых понятиях квантовой информатики.

Кубит (quatum bit) - наименьшая единица информации в квантовых вычислениях и квантовой информатике.

Кубит допускает как квантовые состояния φ_1 и φ_2 (с соответствующими им собственными значениями a_1 и a_2 оператора некоторой физической величины \hat{A}), так и их линейную комбинацию

$$\Psi = c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2. \quad (2.10)$$

Состояние (2.10) называют *суперпозицией* двух собственных состояний φ_1 и φ_2 .

Напомним, что в соответствии с аксиоматикой квантовой механики при измерении физической величины A квантового объекта в состоянии (2.10) измерения будут давать значения этой физической величины то a_1 , то a_2 с вероятностями $|c_1|^2$ и $|c_2|^2$.

Обсудим теперь физические реализации кубитов. Поскольку мы изучаем оптическую физику, то рассмотрим *оптические кубиты*. На рисунке 2.7 приведен пример приведения фотона в суперпозицию двух мод. Единичный фотон попадает на полупрозрачное зеркало (разветвитель), после которого может попасть как в волновод 1, так и в волновод 2. Вероятность зарегистрировать единичный фотон на выходе из первого, либо из второго волновода определяется характеристиками разветвителя. До регистрации фотона на выходе из приведенного на рисунке устройства он находится в суперпозиционном состоянии (2.10).

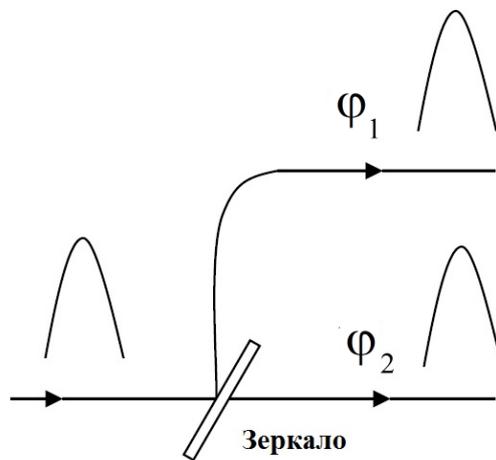


Рисунок 2.7 - Фотон в суперпозиции двух мод.

На рисунке 2.8 приведена реализуемая на практике схема оптического разветвителя. Линиями отражены планарные волноводы в диэлектрической плате (ее показатель преломления несколько меньше показателя преломления волнопроводов). Квант света, попадая, например, на входе устройства в волновод 1 на плате, на участке ОА переходит в состояние суперпозиции (2.10). Под ОА понимаем оптический аналог. Задача о перераспределении поля излучения \mathcal{E} в системе ОА двух расположенных рядом планарных волнопроводов из одного волновода в другой по математическому формализму является полным аналогом рассмотренной выше задачи об эволюции со временем волновой функции Ψ квантовой частицы в системе двух потенциальных ям и изменении ее локализации из одной ямы в другую. Необходима в математическом описании лишь замена функции $\mathcal{E} \rightarrow \Psi$ и переменной $z \rightarrow t$.

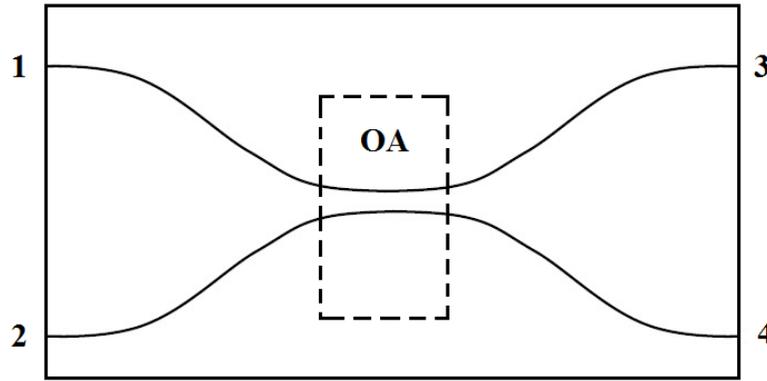


Рисунок 2.8 - Простейший элемент оптического процессора: диэлектрические близко расположенные волноводы на плате. ОА – оптический аналог

Таким образом, в поле лазерного излучения элемент, представленный на рисунке 2.8, при попадании излучения на вход 1 платы становится разветвителем с коэффициентом разветвления на выход 3 и выход 4 платы, который определяется длиной ограниченного пунктирной линией участка близкого расположения волноводов (временем в задаче - аналоге о движении квантовой частицы в системе двух потенциальных ям).

В поле единичных фотонов такой элемент может быть кубитом и использоваться для создания более сложных логических элементов квантовых вычислителей [6].

Упражнения и вопросы для самоконтроля

Упражнение 1. Произвести нормировку уравнения Шредингера при начальном условии

$$\Psi(r,0) = \Psi_0 e^{-\frac{r^2}{a^2}},$$

где $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$, введя безразмерные величины $\Psi' = \frac{\Psi}{\Psi_0}$ и $r' = \frac{r}{a}$

Ответ: $-i \frac{\partial \Psi'}{\partial t} = \frac{1}{T_{диск}} \Delta' \Psi'$, где $T_{диск} = \frac{2ma^2}{\hbar}$.

Упражнение 2. Оценить характерное время дисперсионного расплывания волнового пакета

$$T_{диск} = \frac{2ma^2}{\hbar}$$

Указание: полагать $m = 0,91 \cdot 10^{-30}$ кг, $\hbar = 1,05 \cdot 10^{-34}$ Дж/Гц. Рассмотреть два случая: $a_1 = 1 \text{ \AA}$ ($a = 0,53 \cdot 10^{-10}$ м, - боровский радиус, т.е. полагаем, что изначально волновая функция локализована в объеме атома водорода), $a_2 = 1$ мм – характерный размер зерна фотоэмульсии.

Ответ: $T = 200 \text{ ас}$ ($2 \cdot 10^{-16} \text{ с}$), $T = 20 \text{ мс}$ ($2 \cdot 10^{-2} \text{ с}$),

Вопрос 1. Что является оптическим аналогом «туннельного эффекта» в квантовой механике?

Ответ: эффект нарушенного полного внутреннего отражения.

Вопрос 2. Какое состояние квантовой частицы называют суперпозиционным?

Вопрос 3. Что такое кубит?

Лекция 3. Классическая механика как предельный случай квантовой механики

Настоящая часть учебного пособия по оптической физике посвящена полуклассическому подходу, в рамках которого отклик вещества на силовое воздействие электромагнитного поля описывается законами квантовой механики. Описание взаимодействия света с веществом опирается при этом, как и в классическом подходе, на материальные уравнения, записываемые для макроскопических характеристик вещества, например, для поляризованности оптической среды.

Поляризованность среды – это усредненный по единичному объему индуцированный в оптическом поле дипольный момент квантовых частиц, составляющих среду. Согласно аксиоматике квантовой механики результаты измерения дипольного момента отдельной частицы носят вероятностный характер. При большом числе частиц в макроскопическом объеме естественно анализировать усредненное значение измеряемой физической величины, которую в квантовой механике часто также называют *наблюдаемой* (в противовес, например, «не наблюдаемой» волновой функции). Поэтому в данной лекции обсудим понятие среднего значения наблюдаемой и уравнения ее движения.

Методически полезным окажется вывод о том, что движение средних значений физических величин (наблюдаемых) соответствует известным

классическим уравнениям движения. Иными словами, покажем, что классическая механика является предельным случаем квантовой механики.

Но, конечно, далее в этом пособии мы приведем и примеры задач оптической физики, для анализа которых классического подхода оказывается недостаточно. Так, квантовомеханическое описание отклика вещества на поле излучения, например, даст возможность получить более адекватные экспериментам материальные уравнения, характеризующие резонансное взаимодействие света с веществом.

Среднее значение наблюдаемой

Если известны значения a_n физической величины A , которые могут быть обнаружены в эксперименте, и вероятность их обнаружения $|c_n|^2$, то среднее значение физической величины определяется соотношением [7]

$$\langle A \rangle \equiv \sum_n a_n |c_n|^2 . \quad (3.1)$$

В квантовой механике чаще используют другое соотношение [2]:

$$\langle A \rangle = \int_v \Psi^* \hat{A} \Psi dV . \quad (3.2)$$

Покажем, что определения (3.1) и (3.2) эквивалентны.

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \int_v \Psi^* \hat{A} \Psi dV = \int \sum_n c_n^* \varphi_n^* \hat{A} \sum_m c_m \varphi_m dV = \\ &= \int \sum_n c_n^* \varphi_n^* \sum_m c_m a_m \varphi_m dV = \sum_{nm} c_n^* c_m a_m \int \varphi_n^* \varphi_m dV = \sum_n |c_n|^2 a_n \end{aligned}$$

В ходе преобразований выше использовали представление волновой функции в виде разложения $\Psi = \sum_n c_n \varphi_n$ по собственным функциям оператора \hat{A} , определение собственных чисел и функций $\hat{A}\varphi = a\varphi$, а также ортогональность собственных функций оператора физической величины $\int \varphi_m^* \varphi_n dV = \delta_{mn}$.

Замечание: об операторе координаты.

Согласно определению среднего значения физической величины (3.2), вытекающего из постулата 2 аксиоматики квантовой механики (лекция 1 настоящего пособия), для среднего значения координаты квантовой частицы справедливо соотношение

$$\langle \vec{r} \rangle = \int_v \Psi^* \hat{r} \Psi dV . \quad (3.3)$$

С другой стороны, согласно борновской трактовке волновой функции, справедливо

$$\langle \vec{r} \rangle = \int_v \vec{r} |\Psi|^2 dV . \quad (3.4)$$

Сопоставляя соотношения (3.3) и (3.4), получаем, что оператор координаты квантовой частицы есть умножение на эту координату

$$\hat{r} \rightarrow \vec{r} .$$

То же для оператора любой функции координаты, например, потенциальной энергии квантовой частицы $\hat{U}(\vec{r}) \rightarrow U(\vec{r})$.

Таким образом, можно сказать, что вид оператора такой физической величины, как координата квантовой частицы, не постулируется, а следует из постулата 2 и трактовки волновой функции Борном.

Динамика среднего значения наблюдаемой

Изменение со временем среднего значения наблюдаемой A описывается уравнением

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \left\langle \frac{d\hat{A}}{dt} \right\rangle + \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}\hat{A}] \rangle . \quad (3.5)$$

Это уравнение несложно получить из определения среднего значения (3.2) и учета того, что производная волновой функции по времени может быть выражена через гамильтониан из временного уравнения Шредингера (1.2). Вывод уравнения (3.5) вынесен в упражнение 1 данной лекции.

Если оператор \hat{A} явно от времени не зависит, то уравнение (3.5) сводится к виду

$$\frac{d}{dt}\langle A \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}\hat{A}] \rangle. \quad (3.6)$$

Напомним определение коммутатора [2], фигурирующего в формуле (3.5) и в (3.6),

$$[\hat{H}\hat{A}] = \hat{H}\hat{A} - \hat{A}\hat{H}. \quad (3.7)$$

Таким образом, из (3.6) следует, что изменение со временем среднего значения физической величины A определяется коммутатором гамильтониана \hat{H} и ее оператора \hat{A} .

Используем общую формулу (3.6) для вывода уравнений динамики средних значений конкретных физических величин.

Теорема Эренфеста

Рассмотрим, как изменяется со временем среднее значение координаты квантовой частицы. Проведем цепочку преобразований, используя сначала формулу (3.6), представив гамильтониан в виде суммы операторов кинетической и потенциальной энергий, а также вид коммутатора (3.7):

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle \hat{r} \rangle &= \frac{i}{\hbar} \left\langle \left[\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{U}, \hat{r} \right) - \left(\hat{r}, \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{U} \right) \right] \right\rangle = \\ &= \frac{i}{\hbar} \left\langle \left[\left(\frac{\hat{p}^2}{2m}, \hat{r} \right) + (\hat{U}, \hat{r}) - \left(\hat{r}, \frac{\hat{p}^2}{2m} \right) - (\hat{r}, \hat{U}) \right] \right\rangle = \frac{i}{2m\hbar} \left\langle \left[(\hat{p}^2, \hat{r}) - (\hat{r}, \hat{p}^2) \right] \right\rangle = \\ &= -i \frac{\hbar}{2m} \langle (\Delta \vec{r} - \vec{r} \Delta) \rangle = \end{aligned}$$

в выкладках выше учли, что операторы координаты и потенциальной энергии коммутируют, и вид $\hat{p}^2 = (-i\hbar\nabla)^2 = -\hbar^2\Delta$, получив соотношение

$$= -i \frac{\hbar}{2m} \int \psi^* (\Delta \vec{r} \varphi - \vec{r} \Delta \varphi) dV =$$

для продолжения преобразование приведем **вспомогательные выкладки**:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \vec{i} x \psi = \vec{i} \frac{\partial}{\partial x} \left(\psi + x \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) = \vec{i} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\partial \psi}{\partial x} + x \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \vec{j} \psi = \vec{j} \psi \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2},$$

здесь \vec{i} и \vec{j} - орты декартовой системы координат.

Учтя эти выкладки, завершим преобразования:

$$= -i \frac{\hbar}{2m} \int \psi (\vec{r} \Delta \psi + 2 \nabla \psi \cdot \vec{r} \Delta \psi) dV = + \frac{1}{m} \int \psi^* (-i \hbar \nabla) \psi dV = \frac{\langle \hat{p} \rangle}{m}. \quad (3.8)$$

Вывод: в результате характерных для задач квантовой механики преобразований получили хорошо известное в классической механике соотношение скорости частицы (производная координаты по времени) и ее импульса и массы.

В качестве **упражнения** предлагаем, используя формализм квантовой механики, вывести еще одно хорошо известное в классической механике соотношение. Теперь следует вывести формулу, которая описывает изменение со временем среднего значения импульса квантовой частицы

$$\frac{d\langle \hat{p} \rangle}{dt} = - \langle \nabla U \rangle, \quad (3.9)$$

здесь U – это потенциальная энергия частицы. Как видим, формула для связи средних значений физических величин (3.9) есть известный Вам еще со школы второй закон Ньютона.

Таким образом, на частных примерах доказана **теорема Эренфеста:** уравнения движения для средних значений наблюдаемых величин в квантовой механике соответствуют известным уравнениям классической динамики.

Это очень важный вывод. В первой части [1] настоящего учебного пособия по оптической физике взаимодействие излучения с веществом мы анализировали на основе элементарной теории дисперсии Лорентца. Эта теория в основе имеет описание динамики оптического электрона в атоме на базе ньютоновских уравнений его движения. В первой части пособия мы уделили много времени и внимания физическим выводам этой теории. Они хорошо согласуются и с многочисленными физическими экспериментами.

Как теперь убедились, несмотря на весьма удивительную аксиоматику квантовой механики, она вовсе не отрицает известные и подтвержденные

экспериментами закономерности классической физики. Ведь уравнения для средних значений физических величин в этом формализме и в классической механике могут быть одинаковы или очень близки. Впрочем, в настоящем пособии мы рассмотрим и закономерности взаимодействия света с веществом, которые в рамках классической теории дисперсии обнаружить оказывается затруднительно.

Продолжим анализировать выводы из соотношения (3.6). Покажем, что оно также позволяет судить о сохраняющихся при движении квантовой частицы величинах.

Пусть нам известны решения $\{E_n\}, \{\varphi_n(\vec{r})\}$ стационарного уравнения Шредингера $\hat{H}\varphi = E\varphi$ для квантовой частицы при некотором заданном гамильтониане (например, при любом рассмотренном в лекции 2). При изучении динамики квантовой частицы различают два существенно различающихся описанием случая.

Говорят, что квантовая частица находится в *собственном состоянии* оператора физической величины (в данном случае гамильтониана), если ее волновая функция есть одна из собственных функций этого оператора $\psi(t, \vec{r}) = C_m(t)\varphi_m(\vec{r})$, (3.10)

где m – конкретное целое число. Тогда согласно аксиоматике квантовой механики при измерении энергии частицы в таком состоянии всегда будет наблюдаться одно и то же значение

$$\langle E \rangle = E_m = const \tag{3.11}$$

Говорят, что квантовая частица находится в *суперпозиционном состоянии* оператора физической величины (в данном случае гамильтониана), если ее волновая функция составлена из нескольких собственных функций этого оператора:

$$\psi(t, \vec{r}) = \sum_n C_n(t)\varphi_n(\vec{r}), \tag{3.12}$$

При измерении энергии частицы в таком состоянии будут наблюдаться те или иные значения энергии E_m с вероятностью $|C_m|^2$.

Возникает вопрос: а как тогда понимать закон сохранения энергии? Ведь в экспериментах в одном и том же состоянии частицы регистрируем

разные, причем, возможно, очень сильно различающиеся энергии этой частицы. Гамильтониан коммутирует сам с собой, и из (3.6) следует, что неизменным оказывается среднее значение энергии

$$\langle E \rangle = \sum_n |C_n(t)|^2 E_n = E = \text{const} \quad (3.13)$$

Именно относительно средней величины (3.13) в квантовой механике формулируется закон сохранения энергии частицы, движущейся в силовом поле, не зависящем от времени.

Уместно теперь напомнить **принцип соответствия Бора** [8]: классическую механику следует считать предельным случаем квантовой механики.

В заключение данной лекции напомним об еще одном важном аспекте квантовой механики: о соотношениях неопределенностей [2].

Соотношения неопределенностей

В 1927 году Вернер Гейзенберг в статье "О наглядном содержании квантовомеханической кинематики" дал анализ понятий положения, скорости, траектории частицы с точки зрения квантовой механики. В этой статье он привел знаменитые соотношения

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar \quad \Delta y \Delta p_y \geq \hbar \quad \Delta z \Delta p_z \geq \hbar . \quad (3.14)$$

Суть этих соотношений неопределенностей такова: частица не может существовать в состоянии с точно определенной координатой и скоростью.

В 1927 году Руарк Кеннард из формализма квантовой механики показал, что необходимым и достаточным условием того, что две физические величины могут быть одновременно точно измерены, является коммутативность их операторов.

Соотношение неопределенностей «энергия-время»:

$$\Delta E \Delta \tau \geq \hbar . \quad (3.15)$$

Этому соотношению присущи две трактовки. Первая: чем короче время существования состояния, тем с меньшей определенностью можно говорить об энергии частицы в этом состоянии. Вторая: чем короче длительность измерения энергии частицы, тем больше ее неопределенность.

Соотношение между углом поворота и моментом импульса частицы относительно оси z

$$\Delta\alpha_z \Delta L_z \geq \hbar. \quad (3.16)$$

Соотношение между числом квантов и фазой колебаний

$$\Delta N \Delta \Phi \geq 1. \quad (3.17)$$

Упражнения и вопросы для самоконтроля

Упражнение 1. Вывести уравнение изменения со временем среднего значения наблюдаемой A

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \left\langle \frac{dA}{dt} \right\rangle + \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}\hat{A}] \rangle. \quad (3.5)$$

Упражнение 2. Вывести соотношение между средним значением импульса квантовой частицы и средним значением потенциальной энергии

$$\frac{d\langle \hat{p} \rangle}{dt} = - \langle \nabla U \rangle. \quad (3.9)$$

Ответ:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{p} \rangle &= \frac{i}{\hbar} \left\langle \left[\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{U}, \hat{p} \right) - \left(\hat{p}, \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{U} \right) \right] \right\rangle = \\ &= \frac{i}{\hbar} \left\langle \left[\left(\frac{\hat{p}^2}{2m}, \hat{p} \right) + (\hat{U}, \hat{p}) - \left(\hat{p}, \frac{\hat{p}^2}{2m} \right) - (\hat{p}, \hat{U}) \right] \right\rangle = \frac{i}{\hbar} \int_{\nu} \psi (-U i \hbar \nabla + i \hbar \nabla U) \psi dV = \\ &= \int_{\nu} \psi (U \nabla \psi - \nabla U \psi) dV = \int_{\nu} \psi (U \nabla \psi - (\nabla U) \psi - U \nabla \psi) dV = - \int_{\nu} \psi^* \nabla U \psi dV = - \langle \nabla U \rangle \end{aligned}$$

Вопрос 1. Что в квантовой механике называют наблюдаемой?

Вопрос 2. Дать определение среднего значения наблюдаемой.

Вопрос 3. Сформулируйте теорему Эренфеста.

Вопрос 4. Сформулируйте принцип соответствия Бора.

Вопрос 5. Какие соотношения неопределенностей Вы знаете?

Лекция 4. Суть полуклассического метода анализа явлений оптической физики на основе уравнения Шредингера

Теперь мы готовы обсудить метод анализа явлений оптической физики на основе классических уравнений Максвелла, но с материальными уравнениями, получаемыми из формализма квантовой механики.

Изложим этот метод согласно тому, как это предложили М.О. Скалли и М.С. Зубайри в известной монографии учебного характера [9]. На рисунке 4.1 приведена схема, иллюстрирующая полуклассический метод расчета динамики поля излучения в оптической среде.



Рисунок 4.1 - Уравнения самосогласованной полуклассической теории [9]

Как видно из схемы, приведенной на рисунке, «некоторое поле $\vec{E}'(\vec{r}, t)$ возмущает i -й атом согласно законам квантовой механики, индуцируя электрический дипольный момент» [9]. Макроскопическая поляризованность \vec{P} – сумма этих усредненных дипольных моментов в единице объема оптической среды. Поляризованность действует как источник в волновом уравнении для поля $\vec{E}(\vec{r}, t)$. «Предполагаемое поле $\vec{E}'(\vec{r}, t)$, приравнивается создаваемому полю $\vec{E}(\vec{r}, t)$ » [9]. В результате получаем самосогласованную задачу динамики классического поля излучения в среде (4.3), эволюция

оптических электронов в атомах которой в этом поле описывается квантовомеханическим уравнением Шредингера (4.1), а макроскопическая поляризованность получается статистическим усреднением (4.2). В уравнении (4.1) согласно [9] рассматриваются одноэлектронные атомы с гамильтонианом H_0 , используется электродипольное приближение при описании взаимодействия поля $\vec{E}'(\vec{r}, t)$ с веществом. Отметим, что в рамках полуклассического метода, основанного на уравнении Шредингера, возможны и другие приближения.

В предыдущей лекции мы показали, что динамика средних значений физических величин квантовых частиц описывается классическими уравнениями. Можно ожидать того же и для поляризованности среды (4.2). Действительно, в двухуровневом энергетическом приближении квантовой частицы (например, электрона в поле ядра атома) среднее значение ее дипольного момента описывается уравнением классического осциллятора [10]. В чем тогда смысл полуклассического метода анализа оптических явлений, если материальные уравнения (4.1) и (4.2) могут свестись к известным в классической физике? Разумеется, такой подход оказывается полезным только тогда, когда квантовомеханические уравнения (4.1) и (4.2) к классическим не сводятся. Например, если излучение имеет или приобретает при распространении широкий спектр, становится существенным наличие большого числа энергетических состояний атома, особенно, если излучение интенсивное и важен нелинейный характер взаимодействия излучения с веществом. Смотрим, например, объяснение в обзорной статье [11] при использовании полуклассического подхода на основе уравнения Шредингера для электрона в кулоновском потенциале атома и многочастотном поле интенсивного лазерного излучения закономерностей таких нелинейно-оптических явлений в атомарных газах, как генерация терагерцового излучения и одновременная генерация гармоник высокого порядка.

Однако полуклассическому методу анализа оптических явлений с использованием уравнения Шредингера свойственен очень важный недостаток. Поэтому он не получил широкого распространения. Согласно рассмотренной аксиоматике квантовой механики, если частица находится в собственном состоянии оператора некоторой физической величины, то при измерении значения этой величины Вы будете получать его со 100% вероятностью. При этом вероятность результата такого измерения с течением времени не изменяется. Например, если электрон в атоме водорода находится в фиксированном высоковозбужденном состоянии, то он будет согласно

решению уравнения Шредингера (1.15) находится в этом состоянии вечно. Чего на практике, конечно, нет. В рассмотренной квантовой теории одной частицы, базирующейся на анализе решения записанного для нее уравнения Шредингера, пока не учитывается возможность релаксация квантовой системы из высоковозбужденного состояния в состояние с более низкой энергией.

Обратимся к аксиоматике квантовой механики многих частиц. И рассмотрим, как такую релаксацию можно учесть.

Вопросы для самоконтроля

Вопрос 1. В каких случаях для анализа явлений оптической физики целесообразно использовать полуклассический метод на основе уравнения Шредингера?

Вопрос 2. Каковы недостатки полуклассического метода анализа явлений оптической физики на основе уравнения Шредингера?

Лекция 5. Аксиоматика квантовой механики системы частиц

При рассмотрении динамики волновой функции одиночной квантовой частицы согласно уравнению Шредингера (1.2) ее взаимодействие с другими материальными объектами учитывалось конкретным видом потенциальной энергии в гамильтониане. В большом числе задач квантовой механики (например, во всех задачах, рассмотренных в лекции 2) потенциальная энергия (и гамильтониан) рассматривается от времени не зависящей. Это означает, что обратное влияние эволюции квантовой частицы на объекты, обуславливающие ее потенциальную энергию, не учитывается.

Есть и задачи, в которых эволюция волновой функции квантовой частицы рассматривается в условиях зависящей от времени ее потенциальной энергии. Например, при изучении движения одноэлектронного атома в поле электромагнитной волны (4.1). При этом полуклассический метод задачу (4.1) – (4.3) предполагал самосогласованной. Движение электрона в атоме в силовом поле волны вносит вклад в изменение поляризованности среды. Поляризованность среды, в свою очередь, определяет изменение структуры волны и ее поля в области атома. Изменяется потенциальная энергия атома. Однако в этой самосогласованной задаче внешний по отношению к квантовой частице объект – поле излучения – описывался классически.

Рассмотрим теперь всю систему взаимодействующих объектов квантовомеханически. Изложим основы квантовой механики системы частиц в виде набора постулатов, который по своей логике схож с тем, который мы рассмотрели в лекции 1 при обсуждении аксиоматики квантовой механики одной частицы.

Постулат 1. Состояние системы частиц полностью описывается волновой функцией $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t)$.

Этот постулат повторяет свой аналог в системе постулатов квантовой механики одной частицы. Но для системы N частиц Ψ - это комплексная функция в N-мерном конфигурационном пространстве.

Тогда $dP = |\Psi|^2 dV_1, dV_2, \dots, dV_N$ - это вероятность обнаружить каждую частицу в соответствующем элементе объема.

Постулат 2. Эволюция состояния системы частиц описывается уравнением Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi, \quad (5.1)$$

здесь $\hat{H}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$ - гамильтониан системы частиц.

Как видим, для описания эволюции во времени системы частиц по-прежнему используется уравнение Шредингера, но записанное теперь в пространстве большей размерности.

Постулат 3. О вероятности результатов измерения физических величин.

Пусть $\Psi = \Psi(q, Q)$, где q - координата первой частицы, Q - координата второй частицы (двумя частицами ограничились для краткости, обобщение на большее число объектов понятно); \hat{A} - оператор физической величины, относящейся к первой частице, $\{a_i\}, \{\varphi_i(q)\}$ - собственные значения и собственные функции этого оператора; \hat{B} - оператор физической величины, относящейся ко второй частице, $\{b_j\}, \{\eta_j(Q)\}$ - его собственные значения и собственные функции.

При этих условиях в любой момент времени возможно представление волновой функции в виде

$$\Psi = \sum_{ij} c_{ij} \varphi_i(q) \eta_j(Q), \quad (5.2)$$

Тогда $|c_{ij}|^2$ – это вероятность при измерении одновременного обнаружения значений первой физической величины a_i и второй физической величины b_j .

Как видим, и этот постулат аналогичен постулату квантовой механики одной частицы, поскольку тоже утверждает вероятностный характер результатов измерения физических параметров квантовых частиц.

Рассмотрим некоторые следствия из вышеизложенного набора постулатов.

1. Среднее значение физической величины A одной из частиц определяется соотношением

$$\langle A \rangle = \int \Psi^* \hat{A} \Psi dq dQ = \sum_{ij} |c_{ij}|^2 a_i. \quad (5.3)$$

Обоснование соотношения предлагаем выполнить в виде **Упражнения**, которое приведено в конце лекции.

2. Для невзаимодействующих частиц волновая функция факторизуется, т.е. представляется в виде произведения волновых функций, зависящих только от координат «своей» частицы:

$$\Psi(q, Q) = \Psi_1(q) \Psi_2(Q). \quad (5.4)$$

Для факторизованной волновой функции системы двух частиц плотность вероятности обнаружения этих частиц в соответствующих элементах объема имеет вид

$$|\Psi|^2 (dq, dQ) = |\Psi_1|^2 dq |\Psi_2|^2 dQ, \quad (5.5)$$

т.е. представляется в виде умножения вероятностей $|\Psi_1|^2 dq$ и $|\Psi_2|^2 dQ$, что, как известно из теории вероятностей, реализуется для независимых событий [7]. Таким образом, такие частицы можно рассматривать независимыми друг от друга, и для анализа их движения использовать подход, обсуждавшийся в предыдущих лекциях.

3. Если две частицы провзаимодействовали, то, в общем случае, каждой из них уже нельзя сопоставить свою волновую функцию. Необходимо рассматривать общую для этих двух частиц волновую функцию (5.2).

Упражнения и вопросы для самоконтроля

Упражнение 1. Показать, что среднее значение физической величины A одной из частиц определяется соотношением

$$\langle A \rangle = \int \Psi^* \hat{A} \Psi dq dQ = \sum_{ij} |c_{ij}|^2 a_i \quad (5.3)$$

Ответ: $\langle A \rangle = \int \Psi^* \hat{A} \Psi dq dQ = \int \sum_{ij} c_{ij}^* \varphi_i^* \eta_j^* \hat{A} \sum_{ke} c_{ke} \varphi_k \eta_e dq dQ =$

$$\int \sum_{ijke} c_{ij}^* c_{ke} \int \varphi_i^* \eta_j^* a_k \varphi_k \eta_e dq dQ = \sum_{ijke} c_{ij}^* c_{ke} a_{ke} \int \varphi_i^* \varphi_k dq \int \eta_j^* \eta_e dQ =$$

$$\sum_{ij} c_{ij}^* c_{ij} a_i = \sum_{ij} |c_{ij}|^2 a_i$$

Вопрос 1. Сформулируйте основные постулаты квантовой механики системы частиц.

Вопрос 2. Что означает термин «волновая функция системы частиц факторизуется»?

Лекция 6. Матрица плотности

Как выяснили на предыдущей лекции, согласно аксиоматике квантовой механики системы частиц, если, например, две частицы в момент времени $t = t_0$ существовали независимо друг от друга, то волновая функция системы этих частиц факторизована и имеет вид

$$\Psi(t = t_0, \mathbf{q}, \mathbf{Q}) = \Psi_1(\mathbf{q}) \Psi_2(\mathbf{Q}). \quad (6.1)$$

В последующем в течение промежутка времени Δt эти частицы могут взаимодействовать, и тогда, в общем случае, каждой из них уже нельзя будет сопоставить свою волновую функцию. Необходимо рассматривать общую для этих двух частиц волновую функцию вида

$$\Psi(t = t_0 + \Delta t, \mathbf{q}, \mathbf{Q}) = \sum_{ij} c_{ij} \varphi_i(\mathbf{q}) \eta_j(\mathbf{Q}). \quad (6.2)$$

Позволим себе теперь философского уровня размышление. В мире абсолютно изолированных систем не бывает, ведь даже на затерявшуюся в межзвездном пространстве космическую «пылинку» действует хоть и ничтожно малое, но воздействие, гравитационное или электромагнитное, со стороны пусть даже очень далеких объектов. Тогда естественен следующий вопрос: «Чтобы рассмотреть движение лишь одного электрона, надо обязательно анализировать движение всей Вселенной?» Ведь состояние этого электрона может не описываться собственной волновой функцией, и надо анализировать тогда эволюцию волновой функции (6.2) большой системы, строго говоря, всей Вселенной, этот электрон включающей?

Для ответа на такой мировоззренческий вопрос в 1927 году Джон фон Нейман ввел понятие матрицы плотности. Мы это понятие ниже обсудим, следуя рассмотрению его Ричардом Фейнманом в монографии учебного характера [10].

Выделим во Вселенной изучаемую нами систему α (например, упомянутый электрон), и обозначим остальную часть Вселенной как подсистему β (см. рисунок 6.1)

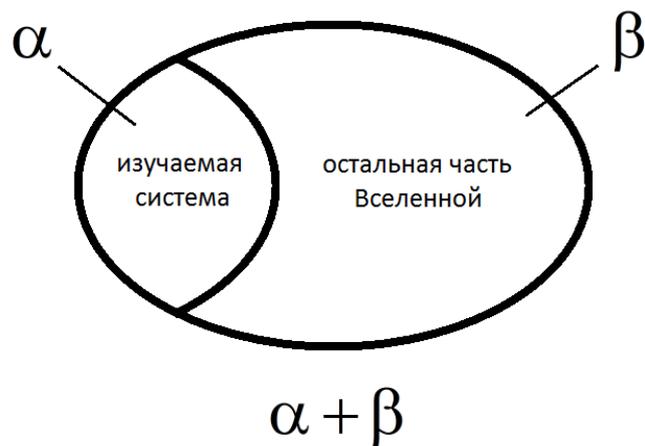


Рисунок 6.1 - Изучаемая система α , как часть всей Вселенной $\alpha + \beta$ [10]

Рассмотрим волновую функцию системы квантовых частиц (пусть даже всей Вселенной) в виде $\Psi(q, Q)$, где q – это координата подсистемы α (отдельного электрона), Q - координата подсистемы β (остальной части Вселенной). Пусть $\{\varphi_i(q)\}$ - некоторый полный набор в пространстве подсистемы α , а $\{\eta_i(Q)\}$ - полный набор в пространстве подсистемы β .

Тогда в любой момент времени волновую функцию системы $\alpha + \beta$ можно представить в виде

$$\Psi(t, q, Q) = \sum_{ij} c_{ij}(t) \varphi_i \eta_j(Q) . \quad (6.3)$$

Пусть нас интересует физическая величина A такая, что ее оператор \hat{A} действует только на подсистему α . Тогда для среднего значения этой физической величины имеем

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \int_{qQ} \Psi^* \hat{A} \Psi dq dQ = \int_{qQ} \sum_{ijke} c_{ij}^* \varphi_i^* \eta_j^* \hat{A} c_{ke} \varphi_k \eta_e dq dQ = \\ &= \sum_{ijke} c_{ij}^* c_{ke} \int_Q \eta_i^* \eta_e dQ \int_q \varphi_i^* \hat{A} \varphi_k dq = \sum_{ijk} c_{ij}^* c_{kj} \int_q \varphi_i^* \hat{A} \varphi_k dq \end{aligned}$$

Введем на этом этапе преобразований обозначение $\rho_{ki} = \sum_j c_{ij}^* c_{kj}$, и назовем эти величины *элементами матрицы плотности*. Введем также обозначение матричных элементов $a_{ik} = \int_q \varphi_i^* \hat{A} \varphi_k dq$ оператора \hat{A} , которые считаются известными. Заметим, что $\varphi_k(q)$ обычно не есть собственные функции оператора \hat{A} . Введение приведенных обозначений дает окончательное равенство

$$\langle A \rangle = \sum_{ik} \rho_{ki} a_{ik} . \quad (6.4)$$

Определим оператор $\hat{\rho}$ так, что его матричные элементы $\rho_{ki} = \int_q \varphi_k^* \hat{\rho} \varphi_i dq$ действуют только на функции переменных q и, соответственно, характеризуют только интересующую нас подсистему α . Получаем

$$\langle A \rangle = \sum_{ik} \rho_{ki} a_{ik} = \text{Sp} \hat{\rho} \hat{A} \quad (6.5)$$

Математическое приложение [7]: след (шпур) матрицы $A \equiv [a_{ik}]$ размера $n \times n$ есть сумма вида

$$\sum_{i=1}^n a_{ii} \equiv \text{Tr}(A) \equiv \text{Sp}(A) . \quad (6.6)$$

Выводы:

1. Описание с помощью матрицы плотности является наиболее общей формой описания квантовых систем.

Определение: Состояние, которому можно сопоставить волновую функцию, называют *чистым*.

Определение: Состояние, которому можно сопоставить только матрицу плотности, называют *смешанным*.

Отметим, что иногда дают и дополнительные определения этим понятиям. Прочитируем (близко к тексту) учебное пособие [3]:

а) Термин "*смешанное состояние*" относится к подсистеме из-за того, что волновая функция всей системы не факторизуется.

б) Однако часто этот термин относят и ко всей системе в целом. Тогда "*смешанным*" называют состояние системы, при котором известен набор чисел P_i , определяющих вероятность того, что система находится в состоянии Ψ_i . Но точная волновая функция системы при этом не определена.

Проводя аналогию между формализмом квантовой механики и оптической физики, в [3] отмечается, что «различие между чистым суперпозиционным состоянием и смешанным аналогично различию между когерентной и некогерентной смесью оптических полей». Действительно, пусть $\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$ - чистое состояние, тогда

$$\begin{aligned}\langle A \rangle &= \int \Psi^* \hat{A} \Psi dq = \int (c_1^* \Psi_1^* + c_2^* \Psi_2^*) (c_1 \hat{A} \Psi_1 + c_2 \hat{A} \Psi_2) dq = \\ &= |c_1|^2 \int \Psi_1^* \hat{A} \Psi_1 dq + |c_2|^2 \int \Psi_2^* \hat{A} \Psi_2 dq + c_1^* c_2 \int \Psi_1^* \hat{A} \Psi_2 dq + c_2^* c_1 \int \Psi_2^* \hat{A} \Psi_1 dq = \\ &= P_1 a_{11} + P_2 a_{22} + 2 \operatorname{Re}(c_1^* c_2 a_{12}),\end{aligned}\tag{6.7}$$

где $P_i = |c_i|^2$ и $a_{ij} = \int \Psi_i^* \hat{A} \Psi_j dq$. Слагаемое $2 \operatorname{Re}(c_1^* c_2 a_{12})$ в (6.7) в смешанном состоянии отсутствует.

2. Зная матрицу плотности, можно вычислить среднее значение любой физической величины, характеризующей систему, по формуле

$$\langle A \rangle = \text{Spr} \hat{\rho} \hat{A}. \quad (6.8)$$

3. Интегрированием по координате Q подсистемы β мы исключили подробности не интересующей нас части общей системы, но по существу $\hat{\rho}$ зависит от состояния всей системы в целом.

Уравнение движения матрицы плотности

Рассмотрим сначала матрицу плотности всей системы $\alpha + \beta$, полагая ее замкнутой. Пусть волновая функция

$$\Psi(t, q, Q) = \sum_n c_n(t) \varphi_n(q, Q). \quad (6.9)$$

описывает чистое состояние этой системы, здесь φ_n - собственные функции оператора некоторой физической величины (например, гамильтониана $H_{\alpha+\beta}$).

Выведем из уравнения Шредингера, описывающего эволюцию волновой функции (6.9) замкнутой системы $\alpha + \beta$, уравнение для ее матрицы плотности. Подставив представление волновой функции (6.9) в уравнение Шредингера (5.1), получаем соотношение

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sum_n c_n \varphi_n = \hat{H} \sum_n c_n \varphi_n. \quad (6.10)$$

Теперь умножим левую и правую части соотношения (6.10) на φ_m^* и проинтегрируем их по всему объему конфигурационного пространства

$$i\hbar \frac{\partial c_m}{\partial t} = \sum_n c_n \int \varphi_m^* \hat{H} \varphi_n dV. \quad (6.11)$$

Используя обозначение $H_{mn} = \int \varphi_m^* \hat{H} \varphi_n dV$, (6.11) переписываем в виде

$$i\hbar \frac{\partial c_m}{\partial t} = \sum_n c_n H_{mn}. \quad (6.12)$$

Умножим (6.12) слева на c_k^*

$$i\hbar c_k^* \frac{\partial c_m}{\partial t} = \sum_n H_{mn} c_k^* c_n \quad (6.13)$$

и добавим комплексно сопряженное уравнение

$$-i\hbar c_k \frac{\partial c_m^*}{\partial t} = \sum_n H_{nm} c_k c_n^* . \quad (6.14)$$

Здесь учли эрмитовость оператора $H^+ = H$.

Сложим уравнения (6.13) и (6.14) и учтем, что, по определению, элементы матрицы плотности $\rho_{mk} = c_k^* c_m$. Тогда, в конечном счете, получаем уравнение эволюции этих элементов в виде

$$i\hbar \frac{\partial \rho_{mk}}{\partial t} = \sum_n (H_{mn} \rho_{nk} - \rho_{mn} H_{nk}) . \quad (6.15)$$

Запишем (6.15) и в операторном виде

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}_{\alpha+\beta}}{\partial t} = \left[\hat{H}_{\alpha+\beta}, \hat{\rho}_{\alpha+\beta} \right] . \quad (6.16)$$

Уравнение (6.16) называют уравнением Неймана. Оно описывает эволюцию матрицы плотности всей замкнутой системы $\alpha + \beta$. Как видим, его для системы в чистом состоянии можно получить из уравнения Шредингера. И в его введении особого смысла в этом случае нет. Впрочем, уместно вспомнить замечание Ричарда Фейнмана [10]: "Находится ли вся Вселенная в чистом состоянии, неизвестно".

На практике используют редуцированное уравнение Неймана для матрицы плотности. Поясним, как она вводится. Гамильтониан всей системы $\alpha + \beta$ (возможно, даже целой Вселенной) обычно можно представить в виде

$$\hat{H}_{\alpha+\beta} = \hat{H}_{\alpha} + \hat{H}_{\beta} + \hat{H}_{\alpha\beta} , \quad (6.17)$$

где $\hat{H}_{\alpha}, \hat{H}_{\beta}$ - это гамильтонианы подсистем, а оператор $\hat{H}_{\alpha\beta}$ характеризует их взаимодействие. После усреднения по координатам подсистемы β и ряда упрощающих предположений можно получить уравнение для редуцированной матрицы плотности интересующей нас подсистемы α вида

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}_{\alpha}}{\partial t} = \left[\hat{H}_{\alpha}, \hat{\rho}_{\alpha} \right] + \left[\hat{R}, \hat{\rho}_{\alpha} \right] , \quad (6.18)$$

В (6.18) второе слагаемое в правой части уравнения описывает релаксационные процессы в подсистеме α , вызванные взаимодействием с

подсистемой β . Представление уравнения динамики редуцированной матрицы плотности (6.18) справедливо, если β "большая", и можно пренебречь обратным влиянием подсистемы α на подсистему β . Например, если α - это активаторный ион в кристалле (динамическая подсистема), β - сам кристалл (диссипативная система или термостат), в котором этот ион внедрен.

Выше использовали понятие *термостат*, под которым в термодинамике понимают систему с большим числом степеней свободы, с большой теплоемкостью, и ее состояние можно считать не зависящим от динамики интересующей нас подсистемы α .

Характерный вид релаксационного слагаемого в уравнении (6.18) рассмотрим в следующей лекции.

Вопросы для самоконтроля

Вопрос 1. Как определяются элементы матрицы плотности?

Вопрос 2. Какие состояния квантовых частиц называют чистыми, а какие смешанными?

Вопрос 3. Запишите уравнение для матрицы плотности (уравнение Неймана).

Лекция 7. Полуклассический метод на основе уравнения матрицы плотности

Явления оптической физики полуклассическим методом с использованием уравнения для матрицы плотности обычно рассматривают на основе решения классического волнового уравнения

$$\nabla_{\mathbf{x}}(\nabla_{\mathbf{x}}\vec{E}) + \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = -\mu_0 \frac{\partial^2 \vec{P}}{\partial t^2} \quad (7.1)$$

совместно с материальным уравнением для поляризованности среды

$$\vec{P} = N \langle \hat{\vec{p}} \rangle, \quad (7.2)$$

где N – концентрация структурных единиц среды (атомов, молекул), $\hat{\vec{p}}$ – дипольный момент этих атомов или молекул, среднее значение которого определяется согласно формализму матрицы плотности по формуле

$$\langle \hat{\vec{p}} \rangle = \text{Sp} \rho \hat{\vec{p}}. \quad (7.3)$$

Динамика самой матрицы плотности рассматривается с помощью уравнения Неймана

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = [\hat{H}, \hat{\rho}] + [\hat{R}, \hat{\rho}] . \quad (7.4)$$

Использование полуклассического метода на основе формализма матрицы плотности для анализа широкого круга явлений оптической физики можно найти, например, в книгах [3, 5, 13].

Обсудим вид уравнений, описывающих эволюцию во времени элементов матрицы плотности, подробнее.

Напомним, что $\hat{\rho}$ - эрмитов оператор, то есть для недиагональных элементов матрицы справедливо $\rho_{mn}^* = \rho_{nm}$. Диагональные элементы ρ_{nn} имеют смысл вероятности обнаружения атома молекулы в n-ом состоянии. Они подчиняются условию нормировки

$$\text{Sp} \hat{\rho} = \sum_n \rho_{nn} = 1 . \quad (7.5)$$

В редуцированном уравнении для матрицы плотности в задачах оптической физики гамильтониан обычно рассматривают в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} , \quad (7.6)$$

где \hat{H}_0 - гамильтониан атома (или молекулы), \hat{V} описывает взаимодействие атома с излучением.

Полагается, что для гамильтониана атома решения стационарного уравнения Шредингера известны:

$$\hat{H}_0 \varphi_k = E_k \varphi_k . \quad (7.7)$$

Рассмотрим теперь уравнения динамики элементов матрицы плотности, начиная с более простых ситуаций и переходя от них к более сложным.

1. В случае квантовой частицы (атома или молекулы), находящейся в чистом состоянии, и в отсутствии внешнего поля, т.е. при $\hat{R} = 0$ и $\hat{V} = 0$, уравнение (7.4) для элементов матрицы плотности преобразуются наиболее просто.

$$i\hbar \frac{\partial \rho_{mk}}{\partial t} = \sum_n (H_{mn} \rho_{nk} - \rho_{mn} H_{nk}) =$$

вводим обозначение $H_{mn} = \int \phi_m^* \hat{H} \phi_n dV = E_m$, где учитываем то, что ϕ_m - собственные функции гамильтониана, тогда продолжение преобразования приводит к выражению

$$= E_m \rho_{mk} - \rho_{mk} E_k = (E_m - E_k) \rho_{mk}.$$

В итоге вид уравнения (7.4) для элементов матрицы плотности системы в чистом состоянии принимает вид

$$\frac{\partial \rho_{mk}}{\partial t} = -i\omega_{mk} \rho_{mk}, \quad (7.8)$$

$$\text{где } \omega_{mk} = \frac{E_m - E_k}{\hbar}.$$

Решение уравнения (7.8) имеет вид

$$\rho_{mk}(t) = \rho_{mk}(0) e^{-i\omega_{mk}t}. \quad (7.9)$$

Квантовая частица существует в исходном состоянии, не релаксируя из него. Это мы отмечали ранее, обсуждая недостатки полуклассического метода анализа, основанного на уравнении Шредингера. В рассмотренном случае частицы в чистом состоянии недостатки те же.

2. Рассмотрим теперь квантовую частицу по-прежнему в отсутствии поля излучения (при $\hat{V} = 0$), но уже при учете взаимодействия квантовой системы с термостатом (при $\hat{R} \neq 0$). Релаксационный оператор в (7.7) добавляют обычно следующим образом [13]

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + i\omega_{mk} \right) \rho_{mk} = -\gamma_{mk} \rho_{mk} \quad \text{при } m \neq k \quad (7.10)$$

$$\frac{\partial \rho_m}{\partial t} = \sum_n (\omega_{mn} \rho_{nm} - \omega_{nm} \rho_{mn}) \quad \text{при } m = k \quad (7.11)$$

Решение системы уравнений (7.10) и (7.11) отличается от решения (7.9) наличием релаксационного слагаемого

$$\rho_{mk}(t) = \rho_{mk}(0) e^{-i\omega_{mk}t} e^{-\gamma_{mk}t}. \quad (7.12)$$

В отличие от полуклассического подхода на основе уравнения Шредингера, теперь мы учитываем релаксацию квантовой частицы (атома или молекулы) из-за ее взаимодействия с диссипативной системой.

3. Делаем заключительный шаг, и учитываем на этот раз как релаксацию, так и воздействие электромагнитной волны на квантовую частицу. Взаимодействие излучения с атомом или молекулой обычно рассматривают электродипольным, полагая

$$\hat{V} = -\hat{\vec{p}}\vec{E}, \quad (7.13)$$

$$V_{mn} = -\vec{p}_{mn} \vec{E}, \quad (7.14)$$

где $\vec{p}_{mn} = \int_v \varphi_m^* e r \varphi_n dV$ и $\vec{p}_{mn}^* = \vec{p}_{nm}$ (из эрмитовости оператора).

Аппарат матрицы плотности чаще всего используют для описания резонансного взаимодействия света с веществом [13]. При таком взаимодействии обычно используют приближение малого числа энергетических состояний квантового объекта (для которых выполняются резонансные условия), см. рисунки 7.1 и 7.2, иллюстрирующие в поле излучения «двухуровневую» и «трехуровневую» квантовые частицы.

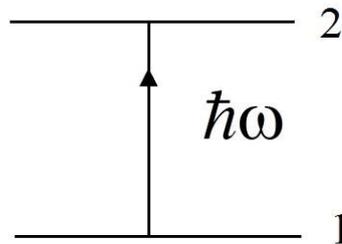


Рисунок 7.1 - Активаторный ион в усиливающей среде лазера, ω – частота излучения лазера

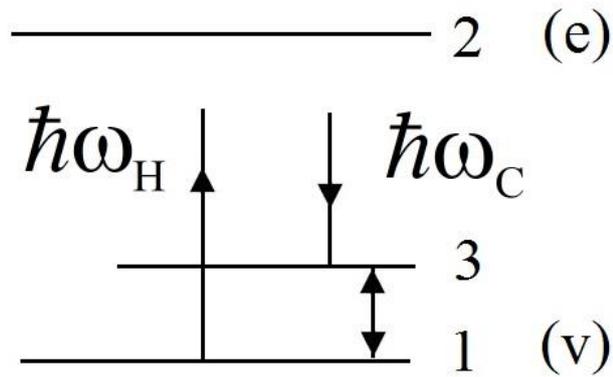


Рисунок 7.2 - Комбинационно-активные электронные (e) и колебательные (v) состояния молекулы, ω_H – частота излучения накачки, ω_C – частота генерируемой в среде стоксовой компоненты излучения

Из рисунка 7.1 видно, что энергия кванта излучения лазера $\hbar\omega$ близка разности энергий частицы в состоянии 1 и состоянии 2. Имеем однофотонный резонанс. Из рисунка 7.2 следует, что разность энергий кванта волны накачки и генерируемого кванта стоксовой волны близка разности энергий частицы в состоянии 1 и состоянии 3. Имеем двухфотонный резонанс.

Приведем уравнения динамики элементов матрицы плотности и вытекающих из них материальных уравнений для этих двух, важных на практике, случаев.

Динамика двухуровневых частиц

Динамика элементов матрицы плотности частицы с двумя энергетическими состояниями 1 и 2 описывается системой уравнений вида [3, 13]

$$\frac{\partial \rho_{12}}{\partial t} + \left(i\omega_{12} + \frac{1}{T_{12}} \right) \rho_{12} = \frac{i}{\hbar} [(\rho_{22} - \rho_{11}) \vec{p}_{12} \vec{E}],$$

$$\rho_{21} = \rho_{12}^*,$$

$$\frac{\partial \rho_{11}}{\partial t} + \frac{1}{\tau_{11}} \rho_{11} - \frac{1}{\tau_{12}} \rho_{22} = \frac{i}{\hbar} (\rho_{21} \vec{p}_{12} - \rho_{12} \vec{p}_{21}) \vec{E},$$

$$\frac{\partial \rho_{22}}{\partial t} - \frac{1}{\tau_{21}} \rho_{11} + \frac{1}{\tau_{22}} \rho_{22} = \frac{i}{\hbar} (\rho_{12} \vec{p}_{21} - \rho_{21} \vec{p}_{12}) \vec{E}, \quad (7.15)$$

где T_{12} и $\tau_{i,j}$ при $i,j=1,2$ – времена поперечной и продольной релаксации.

Для линейно поляризованного излучения, вводя поляризованность среды по формулам (7.2) – (7.3) как $P = N(\rho_{21}\rho_{12} + \rho_{12}\rho_{21})$, и определив разность заселенностей энергетических состояний 1 и 2 двухуровневой квантовой частицы как $N_{12} = \rho_{11} - \rho_{22}$, из уравнений (7.14) можно получить хорошо известную в оптической физике систему [3, 13]

$$\frac{\partial^2 P}{\partial t^2} + \frac{2}{T_{21}} \frac{\partial P}{\partial t} + \left(\omega_{21}^2 + \frac{1}{T_{21}^2} \right) P = \frac{2\omega_{21}^2}{\hbar} |\rho_{12}|^2 N_{12} E \quad (7.16)$$

$$\frac{\partial N_{12}}{\partial t} + \frac{N_{12} - N_{12}^{(0)}}{\tau_{12}} = -\frac{2}{\hbar\omega_{21}} \left(\frac{\partial P}{\partial t} + \frac{1}{T_{21}} P \right) E \quad (7.17)$$

где $N_{12}^{(0)}$ - равновесная разность заселенностей.

Первое уравнение системы (7.16) описывает динамику поляризованности среды в поле излучения, второе уравнение (7.17) описывает изменение заселенностей резонансных уровней. Видно, если изменение заселенностей энергетических состояний частицы мало, то материальное уравнение (7.16) идентично тому, что мы обсуждали в рамках классической теории дисперсии света [1]. Таким образом, лишний раз подчеркнем, что квантовая теория вовсе не перечеркивает классическую, а определяет пределы ее применимости.

Учет изменений заселенностей энергетических состояний частицы в поле излучения приводит к нелинейности отклика среды и многообразию удивительных явлений оптической физики [3, 4, 5, 13].

Динамика молекул при вынужденном комбинационном рассеянии

При описании вынужденного комбинационного рассеяния в приближении трехуровневой квантовой системы (см. рисунок 7.2) как можно показать [3], материальные уравнения принимают вид

$$\frac{\partial^2 P}{\partial t^2} + \frac{2}{T_{21}} \frac{\partial P}{\partial t} + \omega_{21}^2 P = 2\omega_{21}^2 \frac{1}{\hbar} |\rho_{12}|^2 N_{12} E + \omega_{21} \frac{1}{\hbar} R E \quad (7.18)$$

$$\frac{\partial^2 R}{\partial t^2} + \frac{2}{T_{31}} \frac{\partial R}{\partial t} + \omega_{31}^2 R = \omega_{31} \frac{1}{\hbar} |p_{23}|^2 PE, \quad (7.19)$$

здесь $R = \rho_{32} P_{12} P_{23} + \rho_{12} P_{32} P_{21}$

Первое уравнение (7.18) системы материальных уравнений описывает динамику поляризованности среды электронной природы. Уравнение (7.19) описывает колебательный осциллятор, переходы между энергетическими состояниями которого в электродипольном приближении запрещены. Его колебания вызываются квадратом амплитуды поля. В линейной спектроскопии переходы между данными колебательными состояниями не обнаруживаются. Изменением населенностей уровней в таких процессах обычно пренебрегают, они - более высокого порядка малости.

Изучению особенностей вынужденного комбинационного рассеяния посвящена многочисленная научная литература учебного характера (см. [3, 5, 14, 15]).

Вопросы для самоконтроля

Вопрос 1. Каков физический смысл диагональных элементов матрицы плотности?

Вопрос 2. Как обычно описываются релаксационные процессы в уравнениях динамики элементов матрицы плотности?

Вопрос 3. Как выглядит оператор электродипольного взаимодействия квантовой частицы с полем излучения?

Заключение

Уважаемый читатель! На этом мы завершаем избранные лекции по курсу «Оптическая физика». Вторая часть этого учебного пособия заканчивается, но, разумеется, приведенные в нем методы Вы можете использовать для раскрытия для себя новых увлекательных оптических явлений. Прежде всего, явлений нелинейной оптики [3, 14, 15, 16]. Полагаю, что теперь Вы сможете читать свободнее специализированную литературу по оптике, фотонике и оптоинформатике.

Ваш Сергей Аркадьевич Козлов

Рекомендуемая литература

1. И.Р. Арцер, А.А. Дроздов, С.А. Козлов. Оптическая физика. Часть 1. Классический подход к описанию явлений оптической физики. – СПб: Университет ИТМО, 2024. – 59 с.
2. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Теоретическая физика. Квантовая механика (нерелятивистская теория). – М.: Наука, 1989. – 768 с.
3. Д.Н. Клышко. Физические основы квантовой электроники. – М.: Наука, 1986. – 296 с.
4. С.А. Козлов, В.В. Самарцев. Оптика фемтосекундных лазеров. – СПб: СПбГУ ИТМО, 2007. – 218 с.
5. С.А. Козлов, В.В. Самарцев. Основы фемтосекундной оптики. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2009. – 292 с.
6. М. Нильсен, И. Чанг. Квантовые вычисления и квантовая информация. – М.: Мир, 2006. – 824 с.
7. Г. Корн, Т. Корн. Справочник по математике (для научных работников и инженеров). – М.: Наука, 1977. – 832 с.
8. М. Джеммер. Эволюция понятий квантовой механики. – М.: Наука, 1985. – 384 с.
9. М.О. Скалли, М.С. Зубайри. Квантовая оптика. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2003. 512 с.
10. Р. Лоудон. Квантовая теория света. – М.: Мир, 1976, 488 с.
11. С.Ю. Стремоухов, А.В. Андреев. Генерация терагерцового излучения атомными системами в многочастотных лазерных полях. – В кн.: Терагерцовая фотоника, РАН, 2024, с.152-221.
12. Р. Фейнман. Статистическая механика. – М.: Мир, 1978, 407 с.
13. В.С. Бутылкин, А.Е. Каплан, Ю.Г. Хронополо, Е.И. Якубович. Резонансные взаимодействия света с веществом. - М.: ФИЗМАТЛИТ, 1977, 352 с.
14. Г. Агравал. Нелинейная волоконная оптика. / Пер. с англ. М.: Мир, 1996. – 324 с.
15. С.А. Ахманов, В.А. Выслоух, А.С. Чиркин. Оптика фемтосекундных лазерных импульсов. – М.: Наука, 1988. – 312 с.
16. А.А. Дроздов, С.А. Козлов. Основы нелинейной оптики. – СПб.: Университет ИТМО, 2021. – 70 с.

Козлов Сергей Аркадьевич

Оптическая физика

Часть 2. Полуклассический подход к описанию явлений оптической физики

Учебное пособие

В авторской редакции

Редакционно-издательский отдел Университета ИТМО

Зав. РИО

Н.Ф. Гусарова

Подписано к печати

Заказ №

Тираж

Отпечатано на ризографе

Редакционно-издательский отдел

Университета ИТМО

197101, Санкт-Петербург, Кронверкский пр., 49, литер А