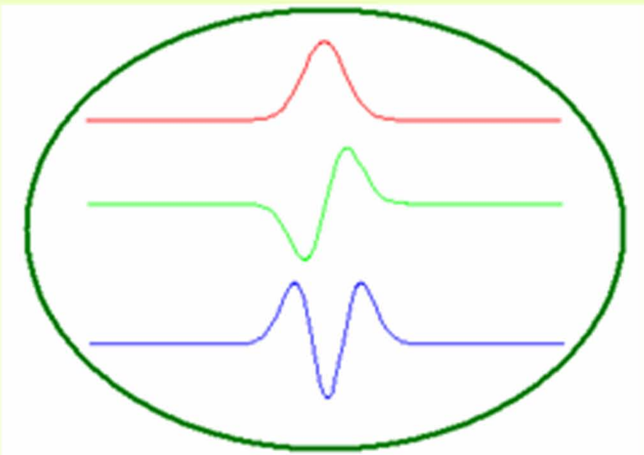
Министерство образования и науки,
молодежи и спорта Украины
Харьковский национальный университет
имени В.Н.Каразина

К 200-летию Харьковского университета

В.В.Ульянов

КОНСПЕКТ ВВОДНЫХ ЛЕКЦИЙ ПО КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

Часть третья



Харьков 2011

К 65-летию кафедры теоретической физики
имени академика И.М.Лифшица

В.В.Ульянов

КОНСПЕКТ ВВОДНЫХ ЛЕКЦИЙ ПО КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

I I I

Харьков 2011

УДК 530.145
ББК 22.314я73-1
У 51

У 51 **Ульянов В.В**. Конспект вводных лекций по квантовой механике. Ч.III/ В.В.Ульянов. - Х.: ХНУ имени В.Н.Каразина, 2011. - 52 с.

Эта часть вводных лекций составлена по конспекту одного из студентов, слушавших прочитанный автором курс квантовой механики.

Она продолжает серию изданий, приуроченную к 200-летию Харьковского университета и 65-летию кафедры теоретической физики имени академика И.М.Лифшица.

Посвящается Льву Элеазаровичу Паргаманику – профессору кафедры теоретической физики, известному физику-теоретику, воспитавшему многих выдающихся специалистов.

Предназначена для преподавателей, студентов и аспирантов физических специальностей вузов.

Рецензент –
доктор физ.-мат. наук, профессор А.М.Ермолаев.

Издается по решению кафедры теоретической физики
от 12 октября 2001 года

УДК 530.145
ББК 22.314я73-1

Если хорошо усвоены уроки прошлого, прогресс в науке будет достигнут быстрее и надежнее.
Дж. Бернал

ПРЕДИСЛОВИЕ

История создания этой части пособия такова. После приема экзаменов я обычно старался очищать аудиторию от бумажного мусора, оставляемого студентами: черновики, шпаргалки, конспекты и пр. И вот однажды я обнаружил в одном из столов анонимный конспект моих лекций по квантовой механике, который показался мне интересным. Я сохранил его и обнаружил в недрах своего архива после написания первых двух частей «Вводных лекций», решив использовать для их продолжения.

Таким образом, третья часть вводных лекций составлена по конспекту одного из студентов вечернего отделения физфака, слушавших прочитанный автором курс квантовой механики в начале 1970-х годов. Ее подготовили к изданию моя супруга Инэсса Павловна Ульянова, сумевшая расшифровать и переписать текст, написанный не очень разборчивым почерком, а также мой сын Николай, набравший текст, формулы и рисунки на компьютере. Я очень благодарен им за это.

Умышленно оставляю все в том виде, какой имели эти наброски в то время, лишь введя некоторые цитаты из книг, изданных в разные годы. Я не собирался их публиковать, но сейчас показалось, что они могут служить документальной страничкой истории нашей кафедры. Список литературы приведен в первой части “Вводных лекций”.

Посвящается Льву Элеазаровичу Паргаманику – профессору кафедры теоретической физики Харьковского университета, известному физику-теоретику. Лев Элеазарович в течение многих лет читал курс лекций по квантовой механике физикам и радиофизикам нашего Университета. Пусть эта небольшая книжечка записей лекций послужит выражением нашей признательности этому человеку, отдавшему лучшие годы своей жизни служению благородному делу университетского образования.

Издание приурочено к 200-летию Харьковского университета и 65-летию кафедры теоретической физики имени академика И.М.Лифшица.

Пособие предназначено для преподавателей, студентов и аспирантов физических специальностей вузов.

В.В.Ульянов

Волновое уравнение Шредингера. Гамильтониан

Если задана волновая функция $\Psi(t)$, то можно получить волновую функцию в момент времени $t+\Delta t$ в соответствии с принципом причинности.

$$\Psi(t+\Delta t) = \Psi(t) + \Delta t \frac{\partial \Psi}{\partial t}(t) ,$$

$\Delta t \to 0$

$$\boxed{\frac{\partial \Psi(t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Psi(t)}$$ Уравнение Шредингера.

Это дифференциальное уравнение 1-го порядка. Для решения необходимо знать $\Psi(t_0)$.

Уравнение Шредингера - количественная запись принципа причинности.

Свойства гамильтониана

1. Линейность следует из принципа суперпозиции.
2. Оператор $\hat{H}$ эрмитов:

$$(\Psi,\Psi)=1 \quad , \quad \|\Psi\|=1 \quad , \qquad \|\Psi\| = \sqrt{(\Psi,\Psi)} \ ,$$

$$\frac{d}{dt}(\Psi,\Psi) = (\dot{\Psi},\Psi) + (\Psi,\dot{\Psi}) = 0 \ ,$$

$$(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Psi,\Psi) + (\Psi,-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Psi) = 0 \ , \quad (\hat{H}\Psi,\Psi) - (\Psi,\hat{H}\Psi) = 0 \ ,$$

$(\hat{H}\Psi,\Psi) = (\Psi,\hat{H}\Psi)$ при произвольном Ψ

$$\hat{H}^{+} = \hat{H} .$$

3. Аддитивность.

Имеются 2 независимые физические системы,

каждая из которых имеет свой гамильтониан: $\hat{H}_1$ и $\hat{H}_2$.

① ②

$\hat{H}_1$ $\hat{H}_2$

Ψ_1 Ψ_2 Нужно найти гамильтониан всей системы $\hat{H}$.

$\Psi = \Psi_1\Psi_2$ Исходя из уравнений движения каждой системы

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \Psi_1}{\partial t} = -\dfrac{i}{\hbar}\hat{H}_1\Psi_1 \\ \dfrac{\partial \Psi_2}{\partial t} = -\dfrac{i}{\hbar}\hat{H}_2\Psi_2 \end{cases} ,$$

для уравнения движения всей системы

имеем $$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Psi, \text{ т. е.}$$

$$\frac{\partial(\Psi_1\Psi_2)}{\partial t} = \frac{\partial\Psi_1}{\partial t}\Psi_2 + \Psi_1\frac{\partial\Psi_2}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}[(\hat{H}_1\Psi_1)\Psi_2 + \Psi_1(\hat{H}_2\Psi_2)] =$$

$$= -\frac{i}{\hbar}[\hat{H}_1(\Psi_1\Psi_2) + \hat{H}_2(\Psi_1\Psi_2)] = -\frac{i}{\hbar}(\hat{H}_1 + \hat{H}_2)(\Psi_1\Psi_2) = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Psi,$$

значит, $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$.

4. Предельный переход к классике.

Для иллюстрации обратимся к оптико-механической аналогии

$$u(\vec{r},t) = A(\vec{r},t)\mathrm{e}^{i\Phi(\vec{r},t)} .$$

В области геометрической оптики главную роль играет фаза Φ:

$$\vec{k} = \frac{\partial\Phi}{\partial\vec{r}}, \quad \omega = -\frac{\partial\Phi}{\partial t}.$$

В классической механике

$$\vec{p} = \frac{\partial S}{\partial\vec{r}}, \qquad H = -\frac{\partial S}{\partial t}, \qquad S \text{ - действие}$$

H - функция Гамильтона, численно равная обобщенной энергии системы.

$$\vec{k}h \to \vec{p} \quad , \quad \omega\hbar \to E \quad , \quad \Phi\hbar \to S .$$

В случае волнового описания комплексную волновую функцию можно представить в виде $\Psi(\vec{r},t) = A(\vec{r},t)\mathrm{e}^{i\Phi(\vec{r},t)}$, где в квазиклассическом случае зависимостью амплитуды от переменных можно пренебречь, а фазу считать (в самом грубом приближении) равной $\Phi \approx \frac{S}{\hbar}$, где S - классическое действие.

Таким образом, волновая функция в квазиклассическом

приближении имеет вид $\Psi_{кв}(\vec{r},t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}S(\vec{r},t)}$.

При этом $\dfrac{\partial\Psi_{кв}}{\partial t} = Ae^{\frac{i}{\hbar}S}\dfrac{i}{\hbar}\dfrac{\partial S}{\partial t} = -\dfrac{i}{\hbar}H\Psi_{кв}$, т. е.

$$\hat{H}\Psi_{кв} = H\Psi_{кв} .$$

Таким образом, в предельном случае оператору движения $\hat{H}$ соответствует классическая функция Гамильтона - энергия (собственными значениями $\hat{H}$ являются значения энергии системы).

Далее рассматривается применение волнового уравнения Шредингера (нестационарного уравнения Шредингера).

Важнейшим является вопрос о быстроте изменения средних значений физической величины со временем.

Оператор скорости. Интегралы движения

Проследим за изменением со временем среднего значения $\langle f \rangle$:

$$\frac{d}{dt}\langle f \rangle = \frac{d}{dt}(\Psi, \hat{f}\Psi) = (\Psi, \frac{\partial \hat{f}}{\partial t}\Psi) + (\dot{\Psi}, \hat{f}\Psi) + (\Psi, \hat{f}\dot{\Psi}) =$$

$$= (\Psi, \frac{\partial \hat{f}}{\partial t}\Psi) + \frac{i}{\hbar}(\hat{H}\Psi, \hat{f}\Psi) - \frac{i}{\hbar}(\Psi, \hat{f}\hat{H}\Psi) = (\Psi, \frac{\partial \hat{f}}{\partial t}\Psi) +$$

$$+(\Psi, \frac{i}{\hbar}(\hat{H}\hat{f} - \hat{f}\hat{H})\Psi).$$

Введем оператор скорости изменения данной величины -

оператор производной по времени $\widehat{\dfrac{df}{dt}}$:

$$\boxed{\frac{d}{dt}\langle f \rangle = \langle \widehat{\frac{df}{dt}} \rangle} \quad .$$

На основании полученного результата

$$\widehat{\frac{df}{dt}} = \frac{\partial \hat{f}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}(\hat{H}\hat{f} - \hat{f}\hat{H}) \ .$$

В классической механике (метод Гамильтона) динамические переменные $f(q,p,t)$ изменяются со временем по закону

$\dfrac{df}{dt} = \dfrac{\partial f}{\partial t} + \{H, f\}$, где $\{H, f\}$ - классические скобки Пуассона.

Квантовая формула для производных при сравнении с соответствующей классической величиной производной показывает, что

$\dfrac{i}{\hbar}(\hat{H}\hat{f} - \hat{f}\hat{H})$ переходит в $\{H, f\}$.

Поэтому в квантовой механике соответствующую величину называют квантовой скобкой Пуассона:

$$\{\hat{A}, \hat{B}\} \equiv \frac{i}{\hbar}[\hat{A}, \hat{B}] = \frac{i}{\hbar}(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) \ .$$

Таким образом,

$$\boxed{\frac{\widehat{df}}{dt} = \frac{\partial \hat{f}}{\partial t} + \{\hat{H}, \hat{f}\}} .$$

Величина называется интегралом движения, если среднее значение ее <u>при любых начальных</u> условиях постоянно:

$$\frac{d}{dt}\langle f \rangle = 0 .$$

Отсюда $\langle \frac{\widehat{df}}{dt} \rangle = (\Psi, \frac{\widehat{df}}{dt}\Psi) = 0$, что для произвольной Ψ возможно лишь при $\frac{\widehat{df}}{dt} = 0$, или

$$\frac{\partial \hat{f}}{\partial t} + \{\hat{H}, \hat{f}\} = 0 .$$

Пусть $\frac{\partial \hat{f}}{\partial t} = 0$ (для многих представляющих физический интерес величин именно это и имеет место), тогда

$$\{\hat{H}, \hat{f}\} = 0.$$

Итак, если физическая величина - интеграл движения, то ее оператор коммутирует с гамильтонианом. Обратное утверждение тоже верно: если оператор коммутирует с гамильтонианом, то соответствующая ему физическая величина будет интегралом движения.

Интегралы движения тесно связаны со скобками Пуассона.

<u>Примеры</u> отыскания операторов производных.

Если x - координата частицы, то оператор производной соответствующего ей оператора $\frac{\widehat{dx}}{dt} = \hat{v}_x$ называют оператором скорости в узком смысле (скорость вдоль оси x).

Смысл этой величины - интегральный: $\frac{d}{dt}\langle x \rangle = \langle \frac{\widehat{dx}}{dt} \rangle$.

Вычисление связано с расчетом скобки Пуассона:

$$\hat{v}_x = \cancelto{0}{\frac{\partial \hat{x}}{\partial t}} + \{\hat{H}, \hat{x}\}$$

Правила квантования

В самом широком смысле слова квантование - сопоставление физическим величинам операторов. Говорят: проквантуем энергию, т. е. найдем ее гамильтониан (в узком смысле - найдем уровни энергии).

В простейшем случае схема правил квантования проста:

$q_k \to \hat{q}_k$ (в координатном представлении q_k),

$p_k \to \hat{p}_k$ (в координатном представлении $\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q_k}$),

$$H = H(p,q,t) \to \hat{H}(\hat{p},\hat{q},t).$$

Однако следует учесть возможные добавки чисто квантовой природы в гамильтониан (например, для частицы с собственным магнитным моментом $\hat{\vec{\mu}}$ в магнитном поле $\vec{H}$ получается добавка в гамильтониан $-\hat{\vec{\mu}}\hat{\vec{H}}$, соответствующая формально классической - электродинамической - потенциальной энергии магнитного момента в магнитном поле).

Примеры гамильтонианов

1. Одна частица в свободном движении (нет полей):

$$H = T = \frac{\vec{p}^2}{2m} = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m}$$ (изотропный квадратичный

$$\hat{H} = \hat{T} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} = \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2}{2m}$$ закон дисперсии).

В координатном представлении явный вид действия гамильтониана на основе $\hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i}\nabla$ связан с оператором Лапласа:

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

2. Свободно движутся две частицы без взаимодействия:

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 = \hat{T}_1 + \hat{T}_2 = \frac{\hat{\vec{p}}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{\vec{p}}_2^2}{2m_2} .$$

В координатном представлении явный вид такого гамильтониана:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\Delta_2 .$$

3. Частица находится в потенциальном поле:

$$H = T + U = \frac{\vec{p}^2}{2m} + U(\vec{r},t),$$

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + \hat{U}(\vec{r},t).$$

Например, в однородном силовом поле $\vec{F}(t)$

$$U(\vec{r},t) = -\vec{F}(t)\cdot\vec{r}.$$

В координатном представлении

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\vec{r},t).$$

(Это значит, что $\hat{U}\Psi(\vec{r}_0) = U(\vec{r}_0)\Psi(\vec{r}_0)$ - локальное действие - умножение на функцию в соответствующей точке $\vec{r}_0$.)

4. Две взаимодействующие частицы в потенциальном поле:

$$H = H_1 + H_2 + U_{12}(\vec{r}_1,\vec{r}_2),$$

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + U_{12}(\hat{\vec{r}}_1,\hat{\vec{r}}_2).$$

В координатном представлении

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\Delta_1 + U_1(\vec{r}_1,t) - \frac{\hbar^2}{2m_2}\Delta_2 + U_2(\vec{r}_2,t) + U_{12}(\vec{r}_1,\vec{r}_2).$$

5. В электромагнитном поле (заряд и собственный магнитный момент $\hat{\vec{\mu}}$)

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{\vec{P}} - \frac{e}{c}\hat{\vec{A}})^2 + e\hat{\varphi} - \hat{\vec{\mu}}\hat{\vec{H}}.$$

<u>Стабильность интегралов движения</u>

Среднее значение интеграла движения постоянно: $\langle f \rangle = \mathrm{const}$. Однако у интегралов движения могут “сохраняться” и собственные значения. Это - важный частный случай. В классическом пределе это одно и то же. Покажем, что интегралы движения стабильны, т. е. если в некоторый момент времени t состояние отвечает собственному значению интеграла движения f, то и в дальнейшем волновая функция (изменяясь!) будет оставаться собственной функцией этой величины, принадлежащей тому же собственному значению f.

Итак, $\Psi(t) = \psi_f$.

При движении системы $\Psi(t+\Delta t)_{\Delta t\to 0} = \Psi(t) + \Delta t\dfrac{\partial\Psi}{\partial t} =$

$$= \Psi(t) - \frac{i}{\hbar}\Delta t\hat{H}\Psi(t).$$ Тогда $\left(\dfrac{\partial\hat{f}}{\partial t} = 0\,!\right)$

$$\hat{f}\Psi(t+\Delta t) = \hat{f}\Psi(t) - \frac{i}{\hbar}\Delta t\hat{f}\hat{H}\Psi(t) = \hat{f}\Psi(t) - \frac{i}{\hbar}\Delta t\hat{H}\hat{f}\Psi(t) =$$

$= f\left(\Psi(t) - \dfrac{i}{\hbar}\Delta t\hat{H}\Psi(t)\right) = f\Psi(t+\Delta t)$, что и требовалось показать.

Кратко можно записать, что $f_n = \text{const}$ в случае сохранения определенного значения физической величины - интеграла движения.

Свойства скобок Пуассона

$$\{\hat{a},\hat{b}\} = \frac{i}{\hbar}(\hat{a}\hat{b} - \hat{b}\hat{a}).$$

1. Если одна из величин есть c-число, то скобка равна 0, то же для $\hat{b} = \hat{a}$:

$$\{\hat{a},c\} = 0,\ \{\hat{a},\hat{a}\} = 0.$$

Вообще, $\{\hat{a},\hat{b}\} = 0$ для коммутирующих операторов.

2. Антисимметрия: $\{\hat{a},\hat{b}\} = -\{\hat{b},\hat{a}\}$.
3. Линейность по отношению к каждому оператору

$$\{\alpha\hat{a},\hat{b}\} = \alpha\{\hat{a},\hat{b}\},$$

$$\{\hat{a}_1 + \hat{a}_2,\hat{b}\} = \{\hat{a}_1,\hat{b}\} + \{\hat{a}_2,\hat{b}\}.$$

4. $\{\hat{a}\hat{b},\hat{c}\} = \hat{a}\{\hat{b},\hat{c}\} + \{\hat{a},\hat{c}\}\hat{b}$.

Не участвующий во взаимодействии оператор отходит в соответствующую сторону (сохраняется порядок $\hat{a}\hat{b}$).

Доказывается прямым сравнением левой и правой частей равенства:

$$\frac{i}{\hbar}(\hat{a}\hat{b}\hat{c} - \hat{c}\hat{a}\hat{b}), \qquad \frac{i}{\hbar}[\hat{a}\hat{b}\hat{c} - \hat{a}\hat{c}\hat{b} + \hat{a}\hat{c}\hat{b} - \hat{c}\hat{a}\hat{b}].$$

Пример

$$\{\hat{a}^2,\hat{c}\} = \hat{a}\{\hat{a},\hat{c}\} + \{\hat{a},\hat{c}\}\hat{a},$$

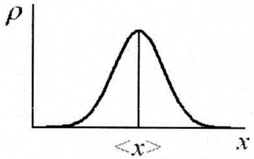
$$\{\hat{a}^3,\hat{c}\} = \hat{a}^2\{\hat{a},\hat{c}\} + \hat{a}\{\hat{a},\hat{c}\}\hat{a} + \{\hat{a},\hat{c}\}\hat{a}^2.$$

Уравнение движения одной частицы в потенциальном поле

(Теоремы Эренфеста)

Будут использованы декартова система координат и координатное представление. Уравненния дают возможность проследить за изменением положения среднего значения координаты x .

Иллюстрация для одномерия:



I теорема Эренфеста. Оператор скорости. Кинематический смысл импульса.

Вычислим оператор скорости.

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + \hat{U}(\hat{\vec{r}}, t),$$

$$\hat{v}_x = \widehat{\frac{dx}{dt}} = \frac{\partial \hat{x}}{\partial t} + \{\hat{H}, \hat{x}\}.$$ Пользуясь свойствами скобок Пуассона, получаем:

$$\{\hat{H}, \hat{x}\} = \{\hat{T} + \hat{U}, \hat{x}\} = \{\hat{T}, \hat{x}\} + \{\hat{U}, \hat{x}\} =$$

$$= \frac{1}{2m}\{\hat{\vec{p}}^2, \hat{x}\} + \{\hat{U}, \hat{x}\} = \frac{1}{2m}\left(\{\hat{p}_x^2, \hat{x}\} + \{\hat{p}_y^2, \hat{x}\} + \{\hat{p}_z^2, \hat{x}\}\right) =$$

(U и ***x*** коммутируют – в координатном представлении сводятся к умноженню)

$$= \frac{1}{2m}\{\hat{\vec{p}}^2, \hat{x}\} = \frac{1}{2m}\left(\hat{p}_x\{\hat{p}_x, \hat{x}\} + \{\hat{p}_x, \hat{x}\}\hat{p}_x\right) =$$

$$= \frac{\hat{p}_x}{m} \quad \text{в силу} \quad \{\hat{p}_x, \hat{x}\} = 1 \ .$$

Таким образом, $\hat{v}_x = \dfrac{1}{m}\hat{p}_x$.

В электромагнитном поле

$$\boxed{\begin{aligned}&\hat{\upsilon}_x = \frac{\hat{dx}}{dt} = \{\hat{H}, \hat{x}\} = \frac{1}{2m}\left\{(\hat{P}_x - \frac{e}{c}\hat{A}_x)^2, \hat{x}\right\} = \\ &= \frac{1}{m}(\hat{P}_x - \frac{e}{c}\hat{A}_x), \text{ т. е.} \\ &m\hat{\vec{v}} = \hat{\vec{P}} - \frac{e}{c}\hat{\vec{A}}\,.\end{aligned}}$$

При чтении справа налево - получается явное выражение для оператора скорости частицы в потенциальном поле. При чтении слева направо - определен кинематический смысл оператора импульса частицы:

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \langle\hat{\upsilon}_x\rangle = \frac{1}{m}\langle p_x\rangle\,.$$

Для остальных компонент аналогичные соотношения. Окончательно, в векторной форме, на уровне операторном

$$\boxed{\hat{\vec{\upsilon}} = \frac{1}{m}\hat{\vec{p}}},$$

а непосредственный смысл заключается в соотношении

$$\boxed{\frac{d}{dt}\langle\vec{r}\rangle = \frac{1}{m}\langle\vec{p}\rangle}\,.$$

Таким образом, 1-я теорема Эренфеста относится к кинематике.

Вторая же теорема Эренфеста имеет дело с динамикой. Определяется оператор силы и ускорения.

$$\frac{\widehat{dp_x}}{dt} = \frac{\partial}{\partial t}\hat{p}_x + \{\hat{H}, \hat{p}_x\} = \{\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}, \hat{p}_x\} + \{\hat{U}, \hat{p}_x\} =$$

$$= \{\hat{U}, \hat{p}_x\} = -\frac{\partial\hat{U}}{\partial x}$$ (так как в координатном представлении без $\hbar/i$

$$\{\hat{U}, \hat{p}_x\} = U\frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}(U) = U\frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial U}{\partial x} - U\frac{\partial}{\partial x} = -\frac{\partial U}{\partial x}),$$

$$\widehat{\frac{dp_x}{dt}} = \hat{F}_x = -\frac{\partial \hat{U}}{\partial x} ,$$

$$\frac{d}{dt}\langle p_x \rangle = -\langle \frac{\partial U}{\partial x} \rangle .$$ Изменение со временем <u>среднего значения</u>

$$\widehat{\frac{dp_x}{dt}} = -\frac{\partial \hat{U}}{\partial x}$$ компоненты импульса определяется <u>средним</u> значением компоненты силы.

II теорема Эренфеста в векторной форме

$$\widehat{\frac{d\vec{p}}{dt}} = -\nabla \hat{U} , \qquad \frac{d}{dt}\langle \vec{p} \rangle = -\langle \nabla U \rangle .$$

Объединение теорем дает квантовый аналог уравнения Ньютона (III-я теорема Эренфеста):

$$\frac{d}{dt}\langle x \rangle = \frac{1}{m}\langle p_x \rangle ,$$

$$\frac{d^2}{dt^2}\langle x \rangle = \frac{1}{m}\frac{d}{dt}\langle p_x \rangle = \frac{1}{m}\langle \frac{d\hat{p}_x}{dt} \rangle = -\frac{1}{m}\langle \frac{\partial U}{\partial x} \rangle = \frac{1}{m}\langle F_x \rangle .$$

Явный вид уравнения $$m\frac{d^2\hat{x}}{dt^2} = \hat{F}_x$$

В векторной форме $m\frac{d^2}{dt^2} < \vec{r} > = - < \nabla U >$, или $m\frac{d^2\hat{\vec{r}}}{dt^2} = \hat{\vec{F}}$.

<u>Нелокальный характер движения и условия классичности</u>

Вновь иллюстрируется на примере одномерия:

$$m\frac{d^2\overline{x}}{dt^2} = \overline{F} ,$$

$$F(x) = F(\overline{x}) + (x-\overline{x})\frac{\partial F}{\partial x}(\overline{x}) + \frac{(x-\overline{x})^2}{2}\frac{\partial^2 F}{\partial x^2}(\overline{x}) .$$

Усреднение дает

$$\overline{F} = F(\overline{x}) + \frac{\overline{(x-\overline{x})^2}}{2}\frac{\partial^2 F}{\partial x^2}(\overline{x})$$

(квантовая добавка)

Подстановка в уравнение дает

$$m\frac{d^2\overline{x}}{dt^2} = F(\overline{x}) + \frac{(\Delta x)^2}{2}\frac{\partial^2 F}{\partial x^2}(\overline{x}),$$

где дисперсия координаты x $\quad D = \overline{(x-\overline{x})^2} = (\Delta x)^2$.

Задаемся некоторой точностью определения координаты частицы - δ - заданный допустимый интервал определения положения частицы.

Неопределенность по координате не должна превышать этого заданного интервала:

$$1)\ \Delta x \lesssim \delta$$

первое условие

(должно выполняться в течение всего наблюдаемого движения, так как излишняя локализация $\Delta x \to 0$ в некоторый момент времени приведет к очень быстрому расплыванию такого пакета с нарушением в дальнейшем условия 1))

Далее, необходимо чтобы в уравнении движения, которое с учетом условия 1) отвечает локальному характеру движения, но содержит чисто квантовый член, этот квантовый член был мал:

$$(\Delta x)^2\left|\frac{\partial^2 F}{\partial x^2}\right| << |F| \ ,$$

т. е. второе условие классичности

2) $$(\Delta x)^2\left|\frac{\partial^3 U}{\partial x^3}\right| \ll \left|\frac{\partial U}{\partial x}\right|$$

отвечает плавным полям (не допустима резкая пространственная неоднородность).

Кроме того, чтобы сохранить классическую кинематику, необходимо, чтобы неопределенность скорости была мала.

В силу

$$\Delta p \geq \frac{\hbar}{2\Delta x} > \frac{\hbar}{2\delta},$$

получаем ограничение на скорости или массы:

3) $$v \gg \Delta v > \frac{\hbar}{2m\delta} .$$

При фиксированной массе и δ выполнению условия 3) способствуют большие скорости. При фиксированной скорости и δ - при большой массе.

Таким образом, условие классичности заключается в

1) малых неопределенностях координаты $\Delta x < \delta$,

2) плавности полей

$$(\Delta x)^2\left|\frac{\partial^3 U}{\partial x^3}\right| \ll \left|\frac{\partial U}{\partial x}\right| ,$$

3) массивности тела (или большой его скорости)

$$v \geq \frac{\hbar}{2m\delta} .$$

Вектор плотности потока вероятности. Вычисление средних токов

Рассматривается движение одной частицы в потенциальном поле. Ставится вопрос о локальной (пространственной) форме сохранения вероятности.

Гамильтониан $\hat{H} = \hat{T} + \hat{U}$ в координатном представлении

равен $\hat{H} = \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \frac{1}{2m}\Delta + U(\vec{r},t)$.

Плотность вероятности координат $\rho(\vec{r},t) = \left|\Psi(\vec{r},t)\right|^2$.

Проследим, как изменяется эта величина со временем:

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Psi, \quad \frac{\partial\Psi}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}\left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \frac{1}{2m}\Delta\Psi + \frac{i}{\hbar}U\Psi = 0,$$

$$\begin{array}{l|l} \Psi^* & \dfrac{\partial\Psi}{\partial t} + \dfrac{\hbar}{2mi}\Delta\Psi + \dfrac{i}{\hbar}U\Psi = 0 \\ \Psi & \dfrac{\partial\Psi^*}{\partial t} - \dfrac{\hbar}{2mi}\Delta\Psi^* - \dfrac{i}{\hbar}U\Psi^* = 0 \end{array},$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^*\Psi) + \frac{\hbar}{2mi}(\Psi^*\Delta\Psi - \Psi\Delta\Psi^*) = 0$$ (U выпадает из уравнения).

Полученное уравнение $\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\hbar}{2mi}(\Psi^*\Delta\Psi - \Psi\Delta\Psi^*) = 0$ можно записать в виде уравнения непрерывности

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \mathrm{div}\vec{j} = 0,$$ где вектор плотности потока вероятности

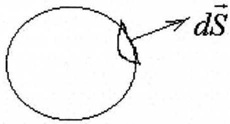
$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi}(\Psi^*\nabla\Psi - \Psi\nabla\Psi^*),$$ $\mathrm{div}\vec{j}=$

$$= \frac{\hbar}{2mi}(\Psi^*\Delta\Psi + \nabla\Psi^*\nabla\Psi - \Psi\Delta\Psi^* - \nabla\Psi\nabla\Psi^*) = \frac{\hbar}{2mi}(\Psi^*\Delta\Psi - \Psi\Delta\Psi^*).$$

Вектор $\vec{j}$ определяет величину вероятности, проходящей в единицу времени через единичную площадку, ориентированную нормально к нему.

Проиллюстрируем это непосредственно.

Если взять весь доступный движению объем, то $\int \rho dV = 1$, но для некоторого объема ΔV вероятность пребывания внутри будет изменяться со временем. Именно это изменение и представляет интерес. Для этого проинтегрируем уравнение непрерывности по объему ΔV :



$$\int\limits_{\Delta V} \frac{\partial \rho}{\partial t} dV + \int\limits_{\Delta V} \operatorname{div} \vec{j} dV = 0$$

$$\frac{d}{dt} \int\limits_{\Delta V} \rho dV + \oint \vec{j} d\vec{S} = 0$$

↑ вероятность пребывать внутри объема ΔV .

$$\int \rho dV = \int\limits_{\Delta V} \rho dV + \int' \rho dV .$$

Второе слагаемое $\oint \vec{j} d\vec{S}$ определяет изменение во времени вероятности пребывания вне объема - выход вероятности - вероятность выхода.

В единицу времени через площадку $d\vec{S}$ проходит количество вероятности $\boxed{\vec{j} d\vec{S}}$. Если же ориентировать $d\vec{S} \parallel \vec{j}$, то вероятность выхода в единицу времени через единичную площадку, ориентированную таким образом, и дается j. Таким образом, устанавливается физический смысл всего вектора (направление $\vec{j}$ показывает направление наивероятного выхода).

<u>Вычисление средних потоков</u>

Вводится плотность по частицам ρ_N. Среднее значение этой величины - среднее число частиц в единице объема.

Выбирается элементарный объем dV. Тогда среднее значение числа частиц в таком объеме равно

$\langle dN \rangle = \langle \rho_N dV \rangle = \langle \rho_N \rangle dN$, а с другой стороны,

оно может быть подсчитано, как и всякое среднее значение, умножением возможных значений на их вероятности:

$\langle dN \rangle = 0 \cdot W_0 + 1 \cdot W_1 = W_1$ - вероятность найти

одну частицу в объеме dV,

что есть ρdV .

Таким образом, $\boxed{\langle \rho_N \rangle = \rho}$

Это показывает непосредственный смысл величины плотности вероятности ρ .

Аналогичным образом среднее значение плотности массы и заряда: $\langle \rho_m \rangle = m\rho$, $\langle \rho_e \rangle = e\rho$.

Подобным же образом считаются и средние потоковые характеристики. Вводится вектор плотности потока числа частиц j_N и соответствующее ему среднее значение определит среднее число частиц, проходящих в единицу времени через поперечную площадку $d\vec{S}$

$\langle \vec{j}_N d\vec{S} \rangle = \langle \vec{j}_N \rangle d\vec{S}$. Прямой подсчет дает $0 \cdot W_0' + 1 \cdot W_1' = \vec{j} d\vec{S}$ по смыслу вектора плотности потока вероятности $\vec{j}$. Таким образом, видно, что вектор плотности потока вероятности $\vec{j}$ равен среднему значению вектора плотности потока числа частиц: $\boxed{\langle \vec{j}_N \rangle = \vec{j}}$.

Аналогично для потока массы и заряда:

$$\langle \vec{j}_m \rangle = m\vec{j} \quad , \quad \langle \vec{j}_e \rangle = e\vec{j} \; .$$

Выпишем подробнее явный вид среднего значения вектора плотности электрического тока

$$\boxed{\langle \vec{j}_e \rangle = \frac{e\hbar}{2mi}(\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*)} \; .$$

Рассмотрим несколько примеров.

1. Преобразовать формулу для $\vec{j}$, связав ее с операторами скорости и импульса.

$$\vec{j} = \frac{1}{2m}(\Psi^* \frac{\hbar}{i} \nabla \Psi - \Psi \frac{\hbar}{i} \nabla \Psi^*) = \frac{1}{2m} 2\,\mathrm{Re}(\Psi^* \frac{\hbar}{i} \nabla \Psi) \; ,$$

$$\boxed{\vec{j} = \frac{1}{m} \mathrm{Re}(\Psi^* \hat{\vec{p}} \Psi)} \; ,$$

$$\boxed{\vec{j} = \mathrm{Re}(\Psi^* \hat{\vec{\upsilon}} \Psi)} \; .$$

В квазиклассическом случае $\hat{\vec{p}} \Psi_{кв} = \vec{p} \Psi_{кв}$, так что

$\vec{j}_{кв} = \vec{v} |\Psi|^2 = \vec{v} \rho = \vec{v} \rho_N$, как и должно быть для вектора плотности потока числа частиц.

2. Показать потоковую роль фазы волновой функции координатного представления.

$$\Psi(\vec{r},t) = A(\vec{r},t)\mathrm{e}^{i\Phi(\vec{r},t)},$$

$$\rho(\vec{r},t) = A^2,$$

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{m}\mathrm{Re}(\Psi^* \frac{1}{i}\nabla\Psi) = \frac{\hbar}{m}\mathrm{Re}[A\mathrm{e}^{-i\Phi}\frac{1}{i}(\mathrm{e}^{i\Phi}\nabla A + i\nabla\Phi A\mathrm{e}^{i\Phi}) =$$

$$= \frac{\hbar}{m}A^2\nabla\Phi.$$

Следовательно, фаза волновой функции в координатном

$$\boxed{\vec{j} = \frac{\hbar}{m}\rho\nabla\Phi}$$

представлении <u>определяет поток</u> (управляет средними токами).

Существенна именно координатная зависимость фазы (фазовое же преобразование $\mathrm{e}^{i\alpha}$ с постоянной добавкой α не влияет ни на какие величины).

Таким образом, комплексность волнового поля отвечает токовым состояниям. Вещественное поле не имеет токов.

3. Выяснить потоковый смысл вектора импульса частицы.

Собственные функции импульса в координатном представлении

$\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = C\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}}$ обладают фазой $\Phi = \dfrac{\vec{p}\vec{r}}{\hbar}$ с

$\nabla\Phi = \dfrac{\vec{p}}{\hbar}$. Значит, таким состояниям

отвечают токи с $\vec{j} = \dfrac{\vec{p}}{m}|C|^2$, что показывает непосредственный физический смысл состояний с определенным значением импульса, т. е. смысл самих собственных значений импульса (другой же кинематический смысл импульса связан со средними мерами движения).

4. Замечание.

а) При выводе $\vec{j}$ на основе уравнения непрерывности возникает, вообще говоря, неопределенность: $\vec{j}$ определяется таким способом с точностью до rot некоторого вектора.

Фактически же такой вклад возникает лишь в релятивизме, при учете спиновых влияний (возникает “спиновый” ток, который нужно в общем случае также учитывать). Непосредственный вывод $\vec{j}$ в общем случае связан с варьированием гамильтониана (см. Л.Л.).

б) В случае электромагнитного поля можно провести аналогичные чисто потенциальному полю выкладки и показать, что в явном выражении для $\vec{j}$ появляется член за счет векторного потенциала $\vec{A}$. Однако можно получить этот результат непосредственно, если исходить из формулы

$$\vec{j} = \mathrm{Re}(\Psi^* \hat{\vec{\upsilon}} \Psi),$$

считая ее справедливой в самом общем случае (полученной как бы на основе квантования классического выражения $\hat{\vec{\upsilon}}\rho_N$ с симметризацией). В таком случае на основании

$$\vec{v} = \frac{\vec{p}}{m} = \frac{1}{m}(\vec{\mathrm{P}} - \frac{e}{c}\vec{A})$$

и

$$\hat{\vec{v}} = \frac{\hat{\vec{p}}}{m} = \frac{1}{m}(\hat{\vec{\mathrm{P}}} - \frac{e}{c}\hat{\vec{A}})$$

получаем $\vec{j} = \vec{j}_0 - \dfrac{e}{mc}\vec{A}|\Psi|^2 = \dfrac{1}{m}\mathrm{Re}(\Psi^* \hat{\vec{\mathrm{P}}}\Psi) - \dfrac{e}{mc}\vec{A}\rho =$

$$= \frac{\hbar}{2mi}(\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) - \frac{e}{mc}\vec{A}|\Psi|^2 .$$

в) Можно получить и операторы рассмотренных потоковых и плотностных локальных характеристик на основе квантования их классических величин с соответствующей симметризацией. Например, для системы N частиц плотность числа частиц $\rho_N(\vec{r}) = \sum_{a=1}^{N} \delta(\vec{r} - \vec{r}_a)$ квантуется по правилу $\hat{\rho}_N(\vec{r}) = \sum_{a=1}^{N} \delta(\vec{r} - \hat{\vec{r}}_a)$, а вектор плотности потока числа частиц $\vec{j}_N(\vec{r}) = \sum_{a=1}^{N} \hat{\vec{\upsilon}}_a \delta(\vec{r} - \vec{r}_a)$ дает оператор с симметризацией вида

$$\hat{\vec{j}}_N(\vec{r}) = \frac{1}{2}\sum_{a=1}^{N}[\hat{\vec{\upsilon}}_a \delta(\vec{r} - \hat{\vec{r}}_a) + \delta(\vec{r} - \hat{\vec{r}}_a)\hat{\vec{\upsilon}}_a]$$

Дальнейшее применение этих операторов для вычисления средних значений дает полученные ранее результаты связи средних потоков с вероятностными мерами.

Закон сохранения энергии и стационарные состояния

Нужно установить, когда гамильтониан будет интегралом движения. В общем случае

$$\frac{\widehat{df}}{dt}=\frac{\partial\hat{f}}{\partial t}+\{\hat{H},\hat{f}\},$$

а для гамильтониана

$$\frac{\widehat{dH}}{dt}=\frac{\partial\hat{H}}{\partial t}+\cancel{\{\hat{H},\hat{H}\}}^{0}=\frac{\partial\hat{H}}{\partial t},$$

так что все зависит от того, есть ли явная зависимость $\hat{H}$ от t или ее нет.

Если $\frac{\partial\hat{H}}{\partial t}=0$, то $\frac{\widehat{dH}}{dt}=0$ и $\langle E\rangle=\mathrm{const}$ (в частности, $E_n=\mathrm{const}$).

Физически условие независимости $\hat{H}$ от t означает однородность времени.

Если система изолирована или внешнее влияние постоянно, то $\frac{\partial\hat{H}}{\partial t}=0$. В случае же переменных внешних воздействий энергия сохраняться не будет.

В условиях сохранения энергии, когда $\frac{\partial\hat{H}}{\partial t}=0$, возможны два случая: когда энергия постоянна в среднем, т. е. $\langle E\rangle=\mathrm{const}$, но состояние не является собственным состоянием энергии (это самый общий случай - пакеты ψ_E), и второй случай - когда состоянию соответствует определенное значение энергии (стабильность интеграла движения! -

$$E_n=\mathrm{const}).$$

Стационарные состояния - это состояния с определенным значением энергии. В условиях сохранения энергии возможны и нестационарные состояния - пакеты стационарных состояний. Это слабая нестационарность (внутренняя нестационарность начальных условий). В случае же переменных внешних воздействий возникает ситуация сильной нестационарности, существенной нестационарности (внешней).

Стационарным сотояниям отвечает застывшая картина средних (все средние значения физических величин постоянны) с отличными от нуля, вообще говоря, средними токами.

Сохранение распределения энергии - самая общая форма квантового закона сохранения энергии.

Свойства стационарных состояний
(общие)

1. Волновая функция стационарного состояния зависит от времени.

$$\Psi(t)=\hat{U}(t|t_0)\Psi(t_0)\quad,\qquad \hat{U}(t\,|\,t_0)\text{ - оператор движения}$$

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t}=-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Psi\,,$$

$$\frac{\partial\hat{U}}{\partial t}\Psi(t_0)=-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\hat{U}\Psi(t_0)\qquad \begin{cases}\dfrac{\partial\hat{U}}{\partial t}=--\dfrac{i}{\hbar}\hat{H}\hat{U}\\ \hat{U}(t_0|t_0)=1\end{cases}$$

В рассматриваемом случае $\dfrac{\partial\hat{H}}{\partial t}=0$, так что фактически есть лишь один оператор $\hat{H}$, т. е. алгебра коммутативная. Решается формально, как обычное дифференциальное уравнение:

$$\hat{U}(t|t_0)=\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}}\hat{c},$$ где на основе начальных условий $\hat{c}=1$

непосредственная подстановка в уравнение подтверждает правильность решения.

Итак, оператор эволюции при сохранении энергии равен

$$\boxed{\hat{U}(t|t_0)=\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}}}$$ Оператор де Бройля.

Если $\Psi(t_0)=\psi_E$, то

$$\Psi(t)=\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}}\psi_E=\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)E}\psi_E$$

$$(\hat{H}\psi_E=E\psi_E,\ \hat{H}^2\psi_E=E^2\psi_E,\ \hat{H}^3\psi_E=E^3\psi_E,\ldots,$$

$$\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}}\psi_E=\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)E}\psi_E)$$

Таким образом, в стационарном состоянии изменяется только фаза волновой функции (с частотой $E/\hbar$)

$$\boxed{\psi(t)=\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)E}\psi_E}$$

В любом представлении изменяется лишь фаза волновой функции.

2. Вероятности всех физических величин не изменяются со временем:

$$W_f=\left|\Psi(f,t)\right|^2=\left|\psi_E(f)\right|^2=\mathrm{const}$$ (или плотности вероятностей)

в частности, все плотности вероятности координат $\rho(\vec{r})=\mathrm{const}$.

3. Средние значения всех физических величин постоянны:

$$W_f = \text{const} \Rightarrow \quad \langle f \rangle = \text{const} .$$

В частности, все средние потоки $= \text{const}$ в силу

$$\Phi(\vec{r},t) = -\frac{(t-t_0)E}{\hbar} + \Phi_0(\vec{r}), \text{ т. е. } \nabla\Phi = \nabla\Phi_0 = \overrightarrow{\text{const}} .$$

<u>Канонические преобразования</u>

Переход от описания с помощью Ψ к описанию с Ψ'. Например, от координатного представления $\Psi(\vec{r})$ к импульсному $\Psi(\vec{p})$.

Новый вектор получается из старого на основе некоторой операции $\hat{O}$

$$\Psi' = \hat{O}\Psi .$$

При этом считается, что обратный оператор $\hat{O}^{-1}$ также существует

$$\Psi = \hat{O}^{-1}\Psi' .$$

Основное условие, накладываемое на преобразование - инвариантность скалярных произведений, непосредственно связанных с физическими характеристиками - вероятностями, средними:

$$(\Psi, \Phi) = (\Psi', \Phi') .$$

Отсюда для оператора $\hat{O}$ получается соответствующее условие унитарности

$$(\Psi', \Phi') = (\hat{O}\Psi, \hat{O}\Phi) = (\Psi, \hat{O}^{+}\hat{O}\Phi), \text{ т. е.}$$

$$\hat{O}^{+}\hat{O} = 1, \text{ или } \hat{O}^{-1} = \hat{O}^{+} .$$

Канонические преобразования унитарны.

В частности, остается неизменной норма волновой функции $\|\Psi'\| = \|\Psi\|$.

Особый вопрос: как изменятся операторы при таком преобразовании.

Если $\hat{A}\psi = \varphi$, то в новом представлении можно считать, что $\hat{A}'$ - это такой оператор, для которого

$$\hat{A}'\psi' = \varphi', \text{ что дает}$$

$$\hat{A}'\hat{O}\psi = \hat{O}\varphi = \hat{O}\hat{A}\psi. \text{ Таким образом,}$$

$$\hat{A}'\hat{O} = \hat{O}\hat{A}, \qquad \text{или} \qquad \hat{A}' = \hat{O}\hat{A}\hat{O}^{-1} .$$

Если оператор не меняется при К.П., то он коммутирует с преобразованием $\hat{O}$. И наоборот.

Краткие итоги: $\Psi' = \hat{O}\Psi$, $\hat{O}^{+} = \hat{O}^{-1}$, $\hat{A}' = \hat{O}\hat{A}\hat{O}^{-1}$.

Примеры канонических преобразований

1) Фазовые преобразования $\hat{O} = \mathrm{e}^{i\alpha}$, $\mathrm{e}^{i\alpha}$ - фазовый множитель

$$\hat{O}^{+} = \mathrm{e}^{-i\alpha} \quad , \quad \mathrm{e}^{-i\alpha}\mathrm{e}^{i\alpha} = 1$$ (унитарность проверена)

$$\Psi \to \Psi' = \mathrm{e}^{i\alpha}\Psi \quad , \quad \hat{O}^{+} = \hat{O}^{-1} ,$$

$$\hat{A} \to \hat{A}' = \hat{O}\hat{A}\hat{O}^{-1} = \mathrm{e}^{i\alpha}\hat{A}\mathrm{e}^{-i\alpha} = \hat{A} ,$$ все операторы (линейные!) не изменяются .

2) В рамках координатной картины изменяется фаза волновой функции, зависящая от координат:

$$\hat{O} = \mathrm{e}^{i\varphi(q)} \quad , \quad \Psi(q) \to \Psi'(q) = \mathrm{e}^{i\varphi(q)}\Psi(q) ,$$

$\hat{q}' = \mathrm{e}^{i\varphi} q \mathrm{e}^{-i\varphi} = q$. Импульсы же изменяются:

$$\hat{p}' = \mathrm{e}^{i\varphi}\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q}\mathrm{e}^{-i\varphi} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q} - \hbar\varphi'$$

(соответствующим преобразованием можно всегда импульсы привести к виду $\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q}$) .

3) Переход от одного представления (в узком смысле слова) к другому. Например, $\Psi(\vec{r}) \to \Psi(\vec{p})$.

4) Движение - каноническое преобразование. Вводится оператор движения, оператор эволюции, оператор переноса во времени - пропагатор $\hat{U}(t|t_0)$:

$$\Psi(t) = \hat{U}(t|t_0)\Psi(t_0)$$

(интегральная форма записи принципа причинности).

Для двух случаев этот оператор можно получить в явном виде

а) $\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0$ (в условиях сохранения энергии),

$$\hat{U}(t|t_0) = \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}}$$ оператор эволюции

сводится к оператору де Бройля (получен уже ранее).

б) Для малого интервала времени δt

$$\hat{U}(t+\delta t \mid t) = 1 - \frac{i}{\hbar}\delta t \hat{H}$$ (также уже был)

генератор движения $-\frac{i}{\hbar}\hat{H}$.

5) Сдвиги (трансляции) и вращения в координатном пространстве.

Рассмотрим перенос на расстояние a вдоль оси x:

$$x \to x' = x + a \ ,$$

$$\Psi(x+a) = \Psi(x) + a\frac{\partial\Psi}{\partial x} + \frac{a^2}{2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \ldots = \mathrm{e}^{a\frac{\partial}{\partial x}}\Psi(x) \ .$$

Оператор сдвига - транслятор $\hat{T}_a\Psi(x) = \Psi(x+a)$,

$\hat{T}_a = \mathrm{e}^{a\frac{\partial}{\partial x}}$, или в инвариантной форме $\hat{T}_a = \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}a\hat{p}_x}$.

Если подействовать сначала вдоль оси z на a_z, затем вдоль оси y на a_y и на a_x вдоль x:

$$\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}a_x\hat{p}_x}\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}a_y\hat{p}_y}\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}a_z\hat{p}_z}\Psi(\vec{r}) = \Psi(\vec{r}+\vec{a}) \ .$$

В силу коммутативности трансляторов вдоль разных осей, получаем единую форму записи пространственного транслятора $\hat{T}_{\vec{a}} = \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\vec{a}\hat{\vec{p}}}$.

Между трансляцией во времени и в пространстве имеется аналогия:

для конечных промежутков времени $\hat{U} = \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}}$ при $\dfrac{\partial H}{\partial t} = 0$,

для бесконечно малых - $\hat{U} = 1 - \dfrac{i}{\hbar}\delta t\hat{H}$.

Соответствующие трансляции $\hat{T}_a = e^{\frac{i}{\hbar}\vec{a}\hat{\vec{p}}}$, $\quad \hat{T}_{\delta\vec{a}} = 1 + \dfrac{i}{\hbar}\delta\vec{a}\hat{\vec{p}}$,

$$-\frac{i}{\hbar}\hat{H} \leftrightarrow \frac{i}{\hbar}\hat{\vec{p}} \ .$$

В случае системы частиц бесконечно малое преобразование

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

$$\Psi(\vec{r}_a) \to \Psi(\vec{r}_a + \delta\vec{r}_a) = \Psi(\vec{r}_a) + \sum_{a=1}^{N}\delta\vec{r}_a\frac{\partial\Psi}{\partial\vec{r}_a} + \ldots \ .$$

а) Пусть $\delta\vec{r}_a = \delta\vec{r}$, т. е. для всех частиц одинаково (трансляция - параллельный перенос системы как целого).

Тогда $\Psi(\vec{r}_a + \delta\vec{r}_a) = (1 + \delta\vec{r}\sum\limits_{a=1}^{N}\dfrac{\partial}{\partial\vec{r}_a})\Psi(\vec{r}_a)$.

Таким образом, оператор трансляции для системы при бесконечно малом переносе

$\hat{T}_{\delta\vec{r}}\Psi(\vec{r}_a) = \Psi(\vec{r}_a + \delta\vec{r})$ есть

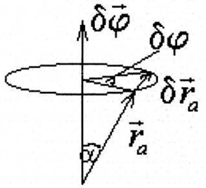
$$\hat{T}_{\delta\vec{r}} = 1 + \delta\vec{r}\sum_{a=1}^{N}\frac{\partial}{\partial\vec{r}_a} .$$

Вводя аддитивную величину импульса системы $\hat{\vec{P}} = \sum_{a=1}^{N}\hat{\vec{p}}_a$, получим

$$\hat{T}_{\delta\vec{r}} = 1 + \frac{i}{\hbar}\delta\vec{r}\hat{\vec{P}} .$$

Аналогичным образом для конечного смещения $\hat{T}_{\vec{a}} = e^{\frac{i}{\hbar}\vec{a}\hat{\vec{P}}}$.

б) Случай вращения системы как целого. Бесконечно малый поворот $\delta\vec{\varphi}$:



$$\delta\vec{r}_a = [\delta\vec{\varphi}\,\vec{r}_a]$$

$$\Psi(\vec{r}_a + \delta\vec{r}_a) = (1 + \sum_{a=1}^{N}[\delta\vec{\varphi}\,\vec{r}_a]\frac{\partial}{\partial\vec{r}_a})\Psi(\vec{r}_a)$$

$$\hat{T}_{\delta\vec{\varphi}} = 1 + \frac{i}{\hbar}\sum_{a=1}^{N}[\delta\vec{\varphi}\,\vec{r}_a]\hat{\vec{p}}_a .$$

Смешанное произведение для этих величин

$[\delta\vec{\varphi}\vec{r}_a]\hat{\vec{p}}_a = \delta\vec{\varphi}[\vec{r}_a\hat{\vec{p}}_a]$, так что

$$\hat{T}_{\delta\vec{\varphi}} = 1 + \frac{i}{\hbar}\delta\vec{\varphi}\sum_{a=1}^{N}[\vec{r}_a\ \hat{\vec{p}}_a] ,$$

$$\hat{T}_{\delta\vec{\varphi}} = 1 + \frac{i}{\hbar}\delta\vec{\varphi}\hat{\vec{M}}$$

Естественным образом входит аддитивная величина, аналогичная классическому моменту системы

$$\hat{\vec{M}} = \sum_{a=1}^{N}\hat{\vec{M}}_a = \sum_{a=1}^{N}[\hat{\vec{r}}_a\hat{\vec{p}}_a],$$

геометрический смысл которой устанавливается на основе оператора бесконечно малого поворота:

генератор вращения $\frac{i}{\hbar}\hat{\vec{M}}$.

Связь свойств симметрии и законов сохранения

Если при некотором преобразовании гамильтониан системы не изменяется, то это означает наличие симметрии.

На языке канонических преобразований это означает, что оператор такого преобразования симметрии $\hat{O}$ будет коммутировать с оператором Гамильтона

$$\hat{H}\hat{O} = \hat{O}\hat{H}, \qquad \text{или} \qquad \{\hat{H}, \hat{O}\} = 0 .$$

Откуда, в свою очередь, для генераторов соответствующих преобразований следует коммутативность с $\hat{H}$ и в силу их явной независимости от времени - сохранение.

Далее рассматриваются конкретные примеры разного рода симметрий и вытекающих из них сохранений.

1) Однородность пространства. Свойства системы не изменяются при переносе системы как целого - трансляции. Достаточно рассмотреть бесконечно малый перенос, определяемый каноническим преобразованием сдвига

$$\hat{O} = \hat{T}_{\delta\vec{r}} = 1 + \frac{i}{\hbar}\delta\vec{r}\hat{\vec{P}}.$$

Закон симметрии $\{\hat{H}, \hat{T}_{\delta\vec{r}}\} = 0$ означает, что $\{\hat{H}, 1 + \frac{i}{\hbar}\delta\vec{r}\hat{\vec{P}}\} = 0$ или

$$\boxed{\delta\vec{r}\{\hat{H}, \hat{\vec{P}}\} = 0} \quad . \qquad *$$

В случае полной симметрии (однородности во всех направлениях) $\delta\vec{r}$ произвольно, так что отсюда следует, что $\{\hat{H}, \hat{\vec{P}}\} = 0$, т. е. импульс системы $\hat{\vec{P}}$ является интегралом движения. Значит, $\langle\vec{P}\rangle = \overrightarrow{\text{const}}$, а также возможна стабильность собственных значений, причем в силу физической совместимости P_x, P_y и P_z возможны состояния с $\vec{P} = \overrightarrow{\text{const}}$ (им соответствует в координатах центра инерции плоская волна $\psi_{\vec{P}}(\vec{R}) = C\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\vec{P}\vec{R}}$).

Однако возможны и частные случаи сохранения отдельных компонент импульса. Если система обладает однородностью в некотором направлении x, т. е. $\delta\vec{r}$ в * направлена вдоль оси x, а следовательно, * переходит в

$$\delta x\{\hat{H}, \hat{P}_x\} = 0 \text{, или } \{\hat{H}, \hat{P}_x\} \Rightarrow \langle P_x\rangle = \text{const} \text{ или}$$

в частном случае $P_x = \text{const}$.

Замечания

1. Полная однородность пространства фактически реализуется в случае отсутствия полей, т. е. в замкнутой (изолированной) системе, а частные случаи сохранения отдельных компонент - например, в однородном силовом поле (постоянном) для $\perp$ ему направлений.
2. Непосредственная проверка инвариантности гамильтониана под действием преобразования трансляции возможна в явном виде в координатном представлении: например, в системе частиц (изолированной) $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2}\sum_{a=1}^{N}\frac{\Delta_a}{m_a} + \frac{1}{2}\sum_{a,b}U(\vec{r}_a - \vec{r}_b)$.

2) Изотропность пространства. Если при вращении системы как целого вокруг некоторой оси она попадает в одинаковые условия, то можно говорить о симметрии по отношению к операции вращения. При этом количественная запись симметрии в форме инвариантности гамильтониана при преобразовании вращения $\hat{T}_{\delta\vec{\varphi}}$ имеет вид

$\{\hat{H}, \hat{T}_{\delta\vec{\varphi}}\} = 0$, где $\hat{T}_{\delta\vec{\varphi}} = 1 + \frac{i}{\hbar}\delta\vec{\varphi}\hat{\vec{M}}$, так что получаем, как и в случае сдвига,

$$\boxed{\delta\vec{\varphi}\{\hat{H}, \hat{\vec{M}}\} = 0} . \qquad **$$

Если $\delta\vec{\varphi}$ произвольно по направлению, т. е. полная изотропия, то отсюда следует, что

$\{\hat{H}, \hat{\vec{M}}\} = 0$, а следовательно, $\hat{\vec{M}}$ есть интеграл движения -

$$\langle\vec{M}\rangle = \overrightarrow{\mathrm{const}}.$$

Однако в данном случае это есть сохранение трех величин, причем несовместимых, так что особенность стабильности собственных значений здесь заключается в невозможности состояния с определенным $\vec{M}$. Возможны лишь состояния с определенным значением одной из компонент импульса, например $M_z = \mathrm{const}$. Вообще говоря, можно рассматривать, наряду с проекцией, квадрат момента $\vec{M}^2$, который также сохраняется при сохранении $\vec{M}$, что приводит к законам сохранения в виде:

$$<\vec{M}^2>= \mathrm{const}\ ,\ \langle\vec{M}\rangle = \overrightarrow{\mathrm{const}},$$

в частных случаях $\vec{M}^2 = \mathrm{const}, \quad M_z = \mathrm{const}$.

Физически случай полной изотропности (относительно любой оси) реализуется в замкнутой системе, где сохраняется момент относительно любой точки в пространстве, а также в случае поля со сферической симметрией, когда ось вращения должна проходить через центр поля, т. е. сохраняется момент, но только относительно центра поля.

Возможны также частные законы сохранения, когда сохраняется лишь одна из проекций момента.

Так, если система обладает аксиальной (осевой) симметрией по отношению к вращению вокруг оси z, то в ** $\delta\vec{\varphi}$ имеет фиксированное направление (ось z), так что получается

$$\delta\varphi\{\hat{H}, \hat{M}_z\} = 0, \text{ или } \{H, M_z\} = 0,$$

что дает закон сохранения момента вдоль оси z (момент рассчитан по отношению к точке, лежащей на этой оси). В таком случае фактически реализуется частный закон сохранения, физически встречающийся, когда поле образовано цилиндром, нитью и т. п., а также, например, в случае однородного силового поля, когда сохраняется проекция момента на направление силового поля (или напряженности однородного магнитного поля). Причем, если в первом случае точка отсчета момента должна лежать на фиксированной оси, то во втором - сама ось может проходить в любом месте пространства.

Представление Гейзенберга

Рассмотренные до сих пор картины движения системы, когда вектор состояния $\Psi(t)$ изменяется со временем (вращение вектора единичной нормы в абстрактном векторном пространстве - гильбертовом пространстве), а физические величины представлены неизменяющимися со временем операторами и соответствующими собственными функциями, все это есть картина Шредингера (представление Шредингера в широком смысле слова - в смысле канонических преобразований).

Изменение со временем средних значений физических величин обязано изменению именно вектора состояния (за редким исключением явно зависящих от времени величин). В другой картине - представлении Гейзенберга - вектор состояния не изменяется, а изменяются операторы физических величин

$\dfrac{\partial\Psi_{\Gamma}}{\partial t} = 0$. Причем Ψ_{Γ} можно отождествить с $\Psi_{\text{Ш}}(t_0)$. В таком случае переход от Шредингеровского представления к представлению Гейзенберга соответствует обратной движению операции:

$\Psi(t) = \hat{U}(t|t_0)\Psi(t_0)$ можно трактовать как каноническое преобразование $\Psi_Ш(t)=\hat{U}(t|t_0)\Psi_Г$, т. е.

$\Psi_Г=\hat{U}^{-1}(t|t_0)\Psi_Ш(t)$, так что в соответствии с общими правилами канонических преобразований операторы в новом представлении $\hat{A}_Г(t)=\hat{U}^{-1}(t|t_0)\hat{A}_Ш\hat{U}(t|t_0)$.

Особенно просто это преобразование выглядит в случае сохранения энергии системы, т. е. для $\dfrac{\partial\hat{H}}{\partial t}=0$, когда $\hat{U}(t|t_0)=\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}}$.

Часто также выбирается $\Psi_Г\equiv\Psi_Ш(0)$, т. е. $t_0=0$.

Тогда $\Psi_Г=\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}t\hat{H}}\Psi_Ш(t)$, $\hat{A}_Г(t)=\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}t\hat{H}}\hat{A}_Ш\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}}$.

Замечание

а) Возможно использование промежуточного представления (представления взаимодействия, представления Дирака), когда часть гамильтониана $\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}_1$ $\hat{H}_0$ генерирует переход к временной зависимости физических величин (он эволюционирует естественным для системы образом - по закону $\hat{H}_0$), а дополнительная часть $\hat{H}_1$ (“взаимодействие”) генерирует (оставлена за нею эта роль) изменение самого вектора состояния. Такой подход, в частности, удобен в задачах кинетики, когда $\hat{H}_1$ зависит от времени.

б) Вообще говоря, подход Гейзенберга является более общим, хотя он в рассмотренном преобразовании получался как полностью эквивалентный Шредингеровскому. Фактически же картина Шредингера имеет один существенный недостаток: когда речь идет о корреляции величин в разные моменты времени, то неясно, каким образом посчитать в квантовом случае величину, аналогичную классической величине $\overline{A(t_1)B(t_2)}$, так как в картине Шредингера A и B не зависят от времени, а состояние определяется лишь одним временным аргументом, т. е. это представление не приспособлено для многовременного формализма. В то же время, в картине Гейзенберга этот вопрос легко решается (отвлекаясь от проблемы симметризации $AB\to\dfrac{\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}}{2}$):

$$\overline{A(t_1)B(t_2)}\to\left(\Psi_Г,\frac{\hat{A}_Г(t_1)\hat{B}_Г(t_2)+\hat{B}_Г(t_2)\hat{A}_Г(t_1)}{2}\Psi_Г\right).$$

Следует отметить, что если уже в таком выражении переходить к Шредингеровским величинам, то получается достаточно сложное выражение, содержащее в общем случае много временных аргументов.
Таким образом, в какой-то мере представления Шредингера и Гейзенберга не являются физически эквивалентными - предпочтительнее гейзенберговское, но традиционно изложение строится по Шредингеру, что, видимо, более доступно усвоению из-за наглядности пространственной картины с переменной плотностью вероятности координат $\rho(\vec{r},t)=\left|\Psi_{\text{Ш}}(\vec{r},t)\right|^2$.

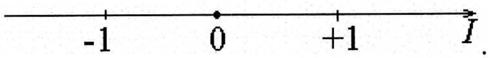
Закон сохранения четности

Четность

Рассматривается операция отражения от центра - инверсия: $\hat{I}\Psi(\vec{r})=\Psi(-\vec{r})$. Соответствующая физическая величина носит название четности из-за ее спектра и смысла собственных функций. Ставится задача об отыскании собственных значений и собственных функций оператора инверсии

$$\hat{I}\Psi = I\Psi.$$

В силу $\hat{I}^2=1 \quad \Psi = I^2\Psi$, т. е. $I=\pm 1$. Таким образом, спектр четности состоит из двух значений:



Соответствующие собственные функции: $\Psi(-\vec{r})=I\Psi(\vec{r})$

1) $I=1 \qquad \Psi_g(-\vec{r})=\Psi_g(\vec{r})$ - четные функции, g - gerade.

2) $I=-1 \qquad \Psi_u(-\vec{r})=-\Psi_u(\vec{r})$ - нечетные функции, u - ungerade.

Произвольную функцию можно всегда представить в виде суммы четной и нечетной частей, что соответствует разложению по собственным функциям четности:

$$\Psi(\vec{r})=\frac{\Psi(\vec{r})+\Psi(-\vec{r})}{2}+\frac{\Psi(\vec{r})-\Psi(-\vec{r})}{2}.$$

Сохранение четности

Если система находится в таких условиях, что $\hat{H}$ симметрично относительно отражения от некоторого центра, то

$$\left\{\hat{H},\hat{I}\right\}=0.$$

С другой стороны, отсюда следует, что соответствующее свойство не будет изменяться со временем. По свойству стабильности собственных значений интеграла движения следует, что если состояние системы было четным, то оно и будет четным, если нечетным, то и будет нечетным ("$I = \mathrm{const}$"), если же четность не имела определенных значений, то и не будет состояние системы иметь определенной четности при движении.

Когда же фактически четность сохраняется. Если вообще нет поля, то в механике одной свободной частицы гамильтониан $\hat{H} = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\Delta$ инвариантен относительно инверсии (по отношению к любому центру в пространстве).

Пусть имеются две частицы, взаимодействующие между собой по закону $U(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$. Тогда $\hat{H} = -\dfrac{\hbar^2}{2m_1}\Delta_1 - \dfrac{\hbar^2}{2m_2}\Delta_2 + U(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$ также не изменится при $\vec{r}_{1,2} \to -\vec{r}_{1,2}$.

Рассмотренный вначале оператор инверсии одной частицы фактически определен для любой системы частиц, если под $\vec{r}$ понимать весь набор координат всех частиц. Причем в системе частиц этот оператор можно выразить через операторы инверсии для отдельной частицы:

$$\hat{I}\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots, \vec{r}_N) = \Psi(-\vec{r}_1, -\vec{r}_2, \ldots, -\vec{r}_N), \text{ а}$$

$$\hat{I}_a\Psi(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_a, \ldots, \vec{r}_N) = \Psi(\vec{r}_1, \ldots, -\vec{r}_a, \ldots, \vec{r}_N), \text{ так что}$$

$$\hat{I} = \prod_{a=1}^{N} \hat{I}_a,$$

т. е. инверсия (четность) есть величина мультипликативная (порядок в произведении не играет роли, так как все $\hat{I}_a$ коммутируют, действуя на разные переменные). Например, $\hat{H} = -\dfrac{\hbar^2}{2m_1}\Delta_1 - \dfrac{\hbar^2}{2m_2}\Delta_2 + U(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$, скажем, для кулоновского взаимодействия двух частиц. В такой системе сохраняется четность системы, а четность одной частицы сохраняться не будет, так как при $\vec{r}_1 \to -\vec{r}_1$ $|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| \to |\vec{r}_1 + \vec{r}_2|$ и гамильтониан изменяется при инверсии координат одной из частиц.

Импульс (сводка результатов)

Импульс одной частицы.

1. $\hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i}\nabla$ явный вид оператора вектора импульса в координатном представлении говорит о его геометрическом смысле - генератор бесконечно малого сдвига в пространстве

$$\hat{T}_{\delta\vec{r}} = 1 + \frac{i}{\hbar}\delta\vec{r}\hat{\vec{p}}.$$

Конечный сдвиг тоже определяется этим оператором:

$$\hat{T}_{\vec{a}} = \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\vec{a}\hat{\vec{p}}}.$$

2. $-\infty < p_x, p_y, p_z < \infty$. Спектр сплошной (непрерывный). Собственные функции $\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \frac{\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}$ соответствуют плоским волнам.

Совместимость всех трех проекций. (Особый случай квантования импульса при наложении искусственных циклических граничных условий в прямоугольном ящике - условие Борна-Кармана дает

$p_k = \frac{h}{L_k} n_k, \quad n_k = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$ с нормированными на этот спектр волновыми функциями $\psi_{\vec{n}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}_{\vec{n}}\vec{r}}$).

3. Соотношение коммутации Гейзенберга $\begin{cases} \hat{p}_x\hat{x} - \hat{x}\hat{p}_x = \hbar / i \\ \hat{p}_y\hat{y} - \hat{y}\hat{p}_y = \hbar / i \\ \hat{p}_z\hat{z} - \hat{z}\hat{p}_z = \hbar / i \end{cases}$.

Взаимодействие между импульсом и координатой. Несовместимость импульса и соответствующей ему координаты. Отсутствие локального смысла импульса (и скорости).

$$\left\{\hat{p}_k, \hat{x}_l\right\} = \delta_{kl}.$$

4. Соотношения неопределенностей Гейзенберга - количественная мера несовместимости

$$\Delta p_x \Delta x \geq \hbar / 2, \quad \Delta p_y \Delta y \geq \hbar / 2, \quad \Delta p_z \Delta z \geq \hbar / 2.$$

5. Кинематический смысл импульса $\hat{\vec{p}} = m\hat{\vec{\upsilon}}$: $\langle \vec{p} \rangle = m\frac{d}{dt}\langle \vec{r} \rangle$.

6. Непосредственный смысл импульса:

$$\vec{j} = \frac{\vec{p}}{m}|\psi|^2$$ в состоянии с волновой функцией $\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = c\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}}$.

Далее идут коллективные свойства.

7. Аддитивность $\hat{\vec{P}} = \sum_{a=1}^{N} \hat{\vec{p}}_a$.

8. Соответствующий $\hat{\vec{P}}$ геометрический смысл $\hat{T}_a = \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\vec{a}\hat{\vec{P}}}$, в частности, $\hat{T}_{\delta\vec{a}} = 1 + \frac{i}{\hbar}\delta\vec{a}\hat{\vec{P}}$. Именно оператор импульса системы определяет бесконечно малое смещение всей системы в пространстве.

9. Закон сохранения.

В замкнутой системе сохраняется импульс, т. е. $\langle \vec{P} \rangle = \overrightarrow{\mathrm{const}}$, или $\vec{P} = \overrightarrow{\mathrm{const}}$.

Возможны и частные законы сохранения $\langle P_x \rangle = \mathrm{const}$; $P_x = \mathrm{const}$.

Энергия. Стационарные состояния

Свойства движения в стационарных состояниях.

Уравнение Шредингера для стационарных состояний (стационарное уравнение Шредингера) $\hat{H}\Psi = E\Psi$. Проблема собственных значений энергии - основная проблема (определяет, например, все термодинамические свойства системы). Второй вопрос - явный вид соответствующих векторов состояния (необходимо, например, в задачах кинематических, в задаче рассеяния и т. д.).

Энергетические спектры непрерывные, дискретные, смешанные.
Самое наименьшее значение энергии - нормальный, или основной уровень энергии. Соответствует ему основное состояние (обычно одно). Все остальные состояния называют возбужденными.

Связь финитности движения с видом спектра

а) Дискретному спектру соответствует финитное движение

$$E_n \to \text{финитность,} \quad \hat{H}\psi_n = E_n\psi_n .$$

$\int|\psi_n|^2 dV = 1$ условие нормировки для дискретного спектра.

б) Непрерывному спектру соотвествует инфинитное движение

$$E \to \text{инфинитность,} \quad \hat{H}\psi_E = E\psi_E .$$

Собственные функции непрерывного спектра имеют нормировку на δ-функции Дирака:

$$\left(\psi_f, \psi_{f'}\right) = \delta(f - f').$$

В данном случае в координатном представлении

$$\int \psi_E^*(\vec{r})\psi_{E'}(\vec{r})dV = \delta(E - E').$$

Значит, $\int \left|\psi_E(\vec{r})\right|^2 dV = \infty.$

V Выделение любого конечного объема V и остальной части пространства позволяет сравнить вероятность пребывания частицы в соответствующих областях (в данном случае $|\psi|^2$ показывает относительную плотность вероятности)

$$\int_V \left|\psi_E(\vec{r})\right|^2 dV + \int' \left|\psi_E(\vec{r})\right|^2 dV = \infty.$$

$$\frac{\int_V \left|\psi_E(\vec{r})\right|^2 dV}{\int' \left|\psi_E(\vec{r})\right|^2 dV} = 0.$$ Частица пребывает вдали от конечного объема V.

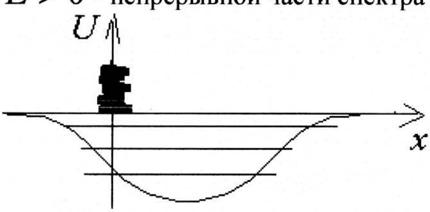
Энергетический спектр имеет ограничение снизу - всегда система может дойти до устойчивого состояния.

Спектр начинается выше min потенциальной энергии $E_n > U_{\min}$ в силу $\hat{H} = \hat{T} + \hat{U}$. $E_n = \langle H \rangle_n = \langle T \rangle_n + \langle U \rangle_n \geq \langle U \rangle_n > U_{\min}$.

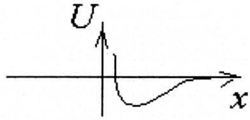
(Любое среднее всегда больше минимума, а равенство лишь в собственном состоянии, но одновременно определенных значений T и U иметь не могут, так что знаки равенства отсутствуют).

Связь вида потенциала с характером спектра

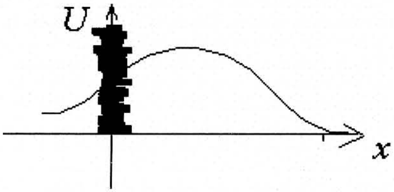
а) Пусть $U \to 0$ вдали и есть $U_{\min} < 0$. Тогда $E < 0$ (если есть) соответствует дискретным уровням, т. е. финитному движению, а $E > 0$ - непрерывной части спектра (инфинитность).



Показать, что при $E < 0$ будет дискретный спектр можно так. Предположим, что движение в этом случае инфинитно, тогда система проводит все время там, где $U = 0$ и $E = \langle H \rangle = \langle T \rangle > 0$ (вклада от U практически нет), что противоречит предположению.

(Это справедливо и для потенциалов типа ).

б) Пусть $U \to 0$, но есть лишь $U_{\max} > 0$.



В этом случае $E > 0$ и возможен лишь непрерывный спектр.

Доказательство для а) и б) в случае $E > 0$ проводится совместно:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi, \qquad \hat{H} = \hat{T} + \hat{U} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U,$$

$$\Delta\Psi + \frac{2m}{\hbar^2}[E - U(\vec{r})]\Psi = 0.$$

Рассматривается поведение решений при $r \to \infty$

$$\Delta\Psi + \frac{2mE}{\hbar^2}\Psi = 0.$$

В сферической системе координат $\Delta = \Delta_r + \dfrac{\Delta_{\theta,\varphi}}{r^2}$,

$$\Delta_r\Psi + k^2\Psi = 0,\ \Delta_r = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(2\ldots) = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r},$$

$$(r\Psi)'' + k^2(r\Psi) = 0,\ \Psi = A\frac{\mathrm{e}^{ikr}}{r} + B\frac{\mathrm{e}^{-ikr}}{r}.$$

$$\int|\Psi|^2 dV \cong \int{}'|\Psi|^2 dV = \oint d\Omega\int_1^\infty r^2 dr\,\frac{1}{r^2}\left|A\mathrm{e}^{ikr} + B\mathrm{e}^{-ikr}\right|^2 = \infty,$$ что отвечает непрерывному спектру и инфинитному движению.

Волновая функция основного состояния не имеет узлов (нулей) внутри области движения - теорема из вариационного исчисления.

Отсюда следует, что основной уровень невырожденный

$$E_0 \leftrightarrow \Psi_0.$$

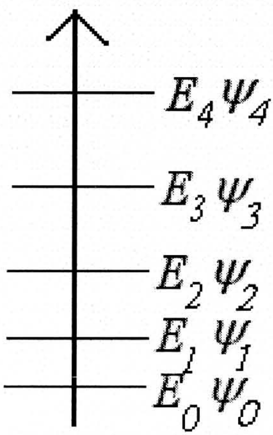
Если бы E_0 принадлежало несколько волновых функций, то можно было бы из них построить такую линейную комбинацию (тоже собственную функцию E_0), чтобы она имела где-нибудь узел.

Второе следствие: возбужденным состояниям соответствуют волновые функции с узлами (иначе $\int \psi_0^* \psi_n dV = 0$ не будет выполняться) - ортогональность требует узлов.

Для одномерного движения существует бóльшая определенность в отношении вырождения и числа узлов волновых функций.

Во-первых, дискретный спектр не имеет вырождения, непрерывный спектр с двусторонней инфинитностью - двукратное вырождение, а с односторонней - без вырождения.

Во-вторых, существует для дискретного спектра (невырожденного!) <u>осцилляционная теорема.</u>



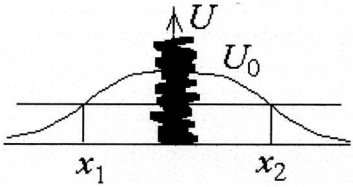
Волновая функция основного состояния не имеет узлов. Волновая функция ψ_1 первого возбужденного состояния имеет 1 узел. Волновая функция ψ_2 имеет два узла и т. д.

Число возбуждений равно числу узлов (внутри области движения!).

Это, в частности, позволяет представить себе вид волновых функций в произвольном поле.

Качественное исследование движения по графику потенциальной энергии. Квантовые эффекты

1-й случай



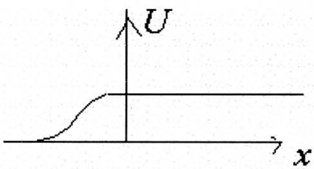
Поле отталкивания

Для классического описания два режима движения с $0 < E < U_0$ и $E > U_0$ совершенно различны.

По квантовым же законам в обоих случаях имеются общие свойства благодаря двум квантовым эффектам: проникновение в классически недоступную область и соответствующее ему туннелирование, а также надбарьерное отражение (волновое свойство рассеяния - отражение волн неоднородностью).

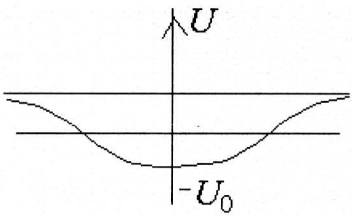
Во всех случаях имеется двукратное вырождение из-за двусторонней инфинитности (этому соответствует и двукратное вырождение в классическом описании).

2-й случай



Соответствует, например, картине отражения в модели сглаженного потенциала Зоммерфельда у границы металла. Надбарьерное отражение уменьшает эмиссию.

3-й случай

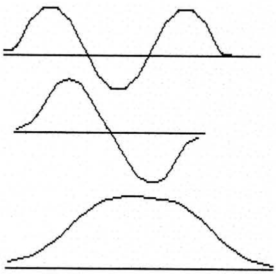


Поле притяжения.

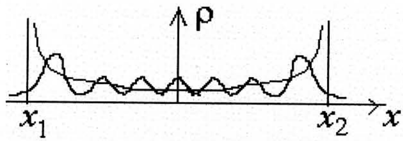
При $-U_0 < E < 0$ имеется дискретный спектр - квантовый эфеект.

Деталь: в одномерном случае (при $U(\pm\infty)=0$) всегда есть хотя бы один уровень энергии, в двумерном - также, но в трехмерном случае уже слабая яма (малая глубина или малая ширина) не в состоянии удержать частицу. (Также некоторый квантовый эффект - весьма важно из-за резонансного рассеяния на связанных состояниях).

Осцилляционная теорема позволяет представить себе волновые функции в основном и возбужденных состояниях.



Резкое различие между колебаниями классическими и квантовой картиной движения при малых энергиях и постепенный переход (при больших квантовых числах) к среднему распределению, соответствующему классике, на фоне которого имеются квантовые осцилляции.



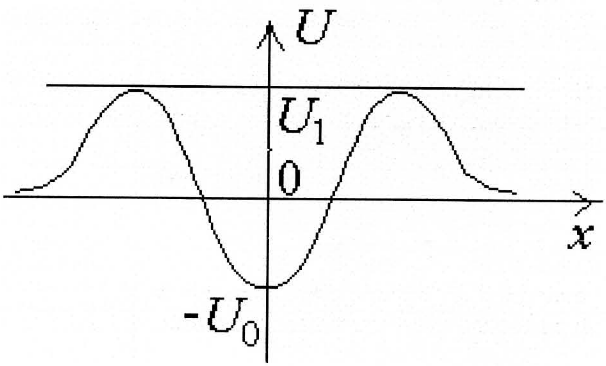
Еще <u>один квантовый эффект</u> - существование $E_0 > U_{\min}$ - <u>нулевые колебания</u>.

В случае $E>0$ имеется двукратное вырождение и <u>надъямное отражение</u>, эквивалентное надбарьерному отражению (вообще говоря, достаточно слабый эффект).

<u>4-й случай</u>

Имеются как область притяжения, так и области отталкивания.

При $-U_0 < E < 0$ новых явлений нет.



В случае же $0 < E < U_1$ имеется резкое различие между классической картиной, где в зависимости от начальных условий возможно как финитное движение в яме, так и инфинитное движение (вне ямы), и квантовым описанием, которое также обладает некоторыми промежуточными между чисто финитными и чисто инфинитными свойствами движения, хотя спектр энергии является чисто непрерывным. Эффект же заключается в существовании так называемых квазиуровней - дискретных элементов в непрерывном спектре.

Дело в том, что с точки зрения внешней, т. е. в задаче рассеяния, оказывается, что очень сильное отражение частиц двумя слабонепроницаемыми барьерами (а именно в таком случае и появляются квазиуровни) сменяется полной прозрачностью (для симметричного потенциала, - в несимметричном случае есть лишь увеличение прозрачности) при некоторых значениях энергии с определенной шириной резонанса.

При этом относительная величина $|\psi|^2$ в случае падения частиц слева такова, что вне квазиуровней она в яме становится меньше и вне ямы справа еще меньше, а при приближении к энергии квазиуровня она становится большой именно в яме.

В случае достаточно узких по энергии пакетов получается быстрое прохождение всей системы (хотя и с малой вероятностью) для всех энергий вне квазиуровней.

Для квазиуровней же возникает большое время задержки в области ямы: резонируют внешние волны с собственными колебаниями изолированной ямы, играющей роль резонатора.

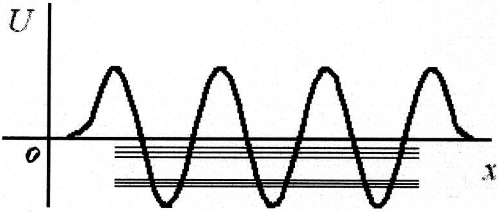
Другой подход к этой задаче отвечает рассмотрению пакета, локализованного вначале в яме. Такому широкому по координатам пакету отвечает узкое распределение по энергиям типа Лоренца, определяющее закон распада такого состояния, обычно долгоживущего, т. е. метастабильного.

Такого рода потенциалы играют роль ловушек, а квазиуровни описываются комплексной величиной, действительная часть которой соответствует значению энергии, а мнимая - ширине резонанса (обратное время жизни).

В случае энергий $E > U_1$ сохраняются все описанные свойства, однако в менее яркой степени: с увеличением энергии квазиуровни размываются, остается лишь достаточно слабое надъямное отражение частиц.

5-й случай

Возникновение зонного спектра энергии в случае нескольких одинаковых потенциальных ям, разделенных одинаковыми барьерами.



В случае энергий $E<0$ уровни отдельной ямки расщепляются на подуровни.

При увеличении числа ямок $N \to \infty$ образуются интервалы, непрерывно заполненные уровнями энергии - полосы разрешенных значений энергии - зоны, разделенные полосами запрещенных значений энергии.

С точки зрения одной ямы, зоны - результат объединения ямок - коллективный эффект взаимного туннелирования, кооперирование ямок, отсутствие строгой локализации частицы - расщепление уровня, переходящее с уширением в полосу-зону.

Если же проследить за таким предельным переходом с точки зрения задачи рассеяния (внешней), т. е. для значений энергии $E > 0$, то здесь происходит расщепление подуровней, для которых система ямок полностью прозрачна, а между этими подуровнями наблюдается полное отражение. Таким образом, в этом случае выясняется физический смысл промежутков между зонами: на фоне непрерывного спектра энергии формируются области запрещенных энергий.

Итак, в первом случае на фоне запрещенных вначале энергий расширяются отдельные разрешенные уровни в полосы-зоны, а во втором случае на фоне разрешенного сплошного спектра энергии формируются запрещенные щели между зонами.

Первый подход в случае слабого расщепления соответствует «сильной связи», а второй подход, когда сам потенциал является возмущением, соответствует методу «слабой связи».

Метод разделения переменных

Если в задаче $\hat{H}\Psi = E\Psi$ с $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$, где $\hat{H}_1$ и $\hat{H}_2$ действуют на разные переменные (естественно, эти операторы коммутируют), то решение можно найти в виде $\Psi = \Psi_1\Psi_2$, $E = E_1 + E_2$, где $\hat{H}_1\Psi_1 = E_1\Psi_1$, $\hat{H}_2\Psi_2 = E_2\Psi_2$. Так происходит разделение переменных с переходом к более простым задачам, в частности к одномерным.

Итак, ищем решение в виде $\Psi = \Psi_1\Psi_2$, где $\Psi_{1,2}$ зависят только от соответствующих переменных, тогда $(\hat{H}_1 + \hat{H}_2)\Psi_1\Psi_2 = E\Psi_1\Psi_2$ приводит к $\frac{\hat{H}_1\Psi_1}{\Psi_1} + \frac{\hat{H}_2\Psi_2}{\Psi_2} = E$, что возможно лишь при постоянных $\hat{H}_1\Psi_1 / \Psi_1$ и $\hat{H}_2\Psi_2 / \Psi_2$. Обозначив эти постоянные E_1 и E_2, приходим к указанному решению.

Если $\hat{H}_2$ также состоит из двух частей, то процедура повторяется уже по отношению к этому гамильтониану и т. д., т. е. если $\hat{H} = \Sigma\hat{H}_k$, то $\Psi = \prod\limits_k \Psi_k$, а $E = \sum\limits_k E_k$ с соответствующими Ψ_k и E_k. Метод интегралов движения совместно с методом разделения переменных - главные общие способы решения квантовомеханических задач. Часто эти методы сливаются.

Свободное движение одной частицы

$\hat{H} = \hat{T} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m}$. Решение можно искать в виде $\Psi = \psi_1\psi_2\psi_3$, где $\frac{\hat{p}_k^2}{2m}\psi_k = E_k\psi_k$, а $E = E_1 + E_2 + E_3$. Каждая же одномерная задача может быть решена, скажем, методом интеграла движения в силу сохранения соответствующих импульсов, так что

$\psi_1 = \psi_{p_x}(x) = \frac{\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}p_x x}}{\sqrt{2\pi\hbar}}$, а окончательное решение:

$\Psi = \frac{e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - Et)}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}$, $E = \frac{\vec{p}^2}{2m}$. Двукратное вырождение (кроме $p = 0$) в одномерном и бесконечной кратности в двумерном и трехмерном случаях.

Такой подход использует декартовы координаты, а можно искать решение задачи в других координатах, например в сферических. Тогда волновая функция будет строиться из угловой общего вида (сферические функции) и свободного движения вдоль r. Кроме того, методом интегралов движения в виде $\vec{p}$ - интеграл движения, можно сразу записать ответ без дробления разделением переменных, т. е. классифицировать стационарные состояния можно разным образом, что соответствует нахождению частных решений, а общее решение будет строиться из комбинаций таких частных решений.

П Р И Л О Ж Е Н И Е

О квантовой механике и ее творцах

Наука обладает удивительным свойством работать на будущее. Очень ярко это свойство проявилось в развитии квантовой механики. Теоретические идеи развивались по законам внутренней логики науки. Лишь годы спустя вовремя «заготовленные» теории находили порой неожиданные применения.

Это было удивительно – уравнения выдавали больше, чем, казалось, было заложено при их выводе.

Я.А.Смородинский

У теории, обладающей математической красотой, больше шансов быть правильной, чем у уродливой теории, подогнанной под некоторые экспериментальные факты.

П.А.М.Дирак

Physical laws should have mathematical beauty.

Надпись мелом на доске в Московском университете, оставленная Дираком осенью 1955 года.

Развитие квантовых представлений происходило по нескольким различным, хотя и связанным между собой направлениям, идущим от Планка и Эйнштейна. Эти направления опирались на идеи квантования энергии вещества, на идеи дискретности процессов взаимодействия вещества и излучения, с одной стороны, и в виде предположения о квантовании энергии собственных колебаний электромагнитного поля, с другой. Именно развитие, в значительной степени независимое, квантовых представлений в различных направлениях привело … к двум различным подходам при создании квантовой механики – к подходу, основанному на идеях принципа соответствия (Бор, Гейзенберг), и к подходу, основанному на идеях корпускулярного дуализма (Эйнштейн, де Бройль, Шредингер).

М.А.Ельяшевич

В моих научных работах, как и вообще в жизни, я никогда не придерживался какой-либо генеральной линии, не следовал руководящей программе, рассчитанной на длительные сроки. Хотя я очень плохо умею работать в коллективе, в том числе, к сожалению, и с учениками, тем не менее моя работа никогда не была совершенно самостоятельной, поскольку мой интерес к какому-либо вопросу всегда зависит от интереса, проявляемого к этому же вопросу другими. Я редко говорю первое слово, но часто второе, так как побудительным фактором для него обычно оказывается желание возразить или исправить.

Эрвин Шредингер

Рассказывают, что вскоре после приезда в Берлин Планк забыл, в какой аудитории должен читать лекцию, и зашел в канцелярию узнать об этом: «Скажите, пожалуйста, – обратился он к пожилому человеку, который ведал канцелярией, – в какой аудитории профессор Планк сегодня читает лекцию?» Старик похлопал его по плечу: «Не ходите туда, юноша, – сказал он. – Вы еще слишком молоды, чтобы понимать лекции нашего мудрого профессора Планка».

Из книги: Кляус Е.М., Франкфурт У.И. Макс Планк.

Во время лекции он не пользовался конспектом. Он никогда не допускал ошибок и не запинался. Очень редко доставал он заметки, бросив взгляд на доску, говорил «да» и снова прятал их. Он был лучшим докладчиком, какого я когда-либо слышал. У него не было никаких особых привычек, за исключением единственной: он клал перед собой параллельно два куска мела и, когда не писал, время от времени перекладывал их.

Из воспоминаний одного из студентов. Там же.

Если что нас поддерживает и возвышает в терпеливой, часто скромной работе, требующей напряжения наших духовных и телесных сил, то это сознание, что мы работаем не ради минутного успеха, а, так сказать, для вечности.

Макс Планк

Мы работаем над тем, чтобы извлечь из бездны невежества и предрассудков сокровища чистого знания и истины.

Макс Планк

В дальнейшем почти все эти проблемы столкнулись с проблемами квантовой механики и квантовой статистики и получили в них свое дальнейшее плодотворное развитие. Квантовая теория оказалась непосредственно связанной со всеми направлениями, создавшими в своей совокупности современную физику.

Из книги: Франкфурт У.И., Френк А.М. У истоков квантовой теории.

То, что сегодня кажется нам непонятным, когда-нибудь будет казаться, с более высокой точки зрения, особенно простым и гармоничным.
Макс Планк

ПОСЛЕСЛОВИЕ

Студенческий конспект содержит полный курс лекций, но поскольку уже изданы вступительные главы в «Вводных лекциях», то было решено начинать с дальнейших разделов.

Содержание этой части конспекта разбито на две примерно равные доли, так что предполагается еще выпуск четвертой части лекций.

Нужно иметь в виду, что данная (третья) часть лекций читалась вечерникам, для которых материал отбирался в соответствии с укороченной и упрощенной программой курса (в отличие от более подробной и полной программы в первых двух частях «Вводных лекций»).

Как уже отмечалось в «Предисловии», я старался не переделывать текст, а лишь проставил знаки препинания, которыми обычно пренебрегают в студенческих конспектах, да кое-где исправил замеченные неточности.

Еще раз нужно подчеркнуть, что материал прошел три стадии возможных искажений: при записи слушателем реально читаемых лекций, при переписывании с расшифровкой этого конспекта, а также при компьютерном наборе. На всех стадиях, конечно, вносились некие искажения, но все равно ответственность за допущенные ошибки лежит на мне, хотя я старался проверять рукопись перед печатью. Однако прошло ведь 40 лет со времени чтения этих лекций, а я тогда не вел их записей.

ДОПОЛНЕНИЕ

В части тиража к пособию прилагается компакт-диск с электронными версиями следующих книг автора по квантовой теории (файлы формата pdf).

1. Ульянов В.В. Задачи по квантовой механике и квантовой статистике. - Х.: Высш. шк., 1980. - 216 с.
2. Ульянов В.В. Интегральные методы в квантовой механике. - Х.: Высш. шк., 1982. - 160 с.
3. Ульянов В.В. Методы квантовой кинетики. - Х.: Высш.шк., 1987. - 144 с.
4. Ульянов В.В. Вводные лекции по квантовой механике. Часть 1-я. - Х.: ХНУ имени В.Н.Каразина, 2002. - 40 с.
5. Ульянов В.В. Вводные лекции по квантовой механике. Часть 2-я. - Х.: ХНУ имени В.Н.Каразина, 2002. - 28 с.
6. Ульянов В.В. Вступ до квантової кінетики. - Х.: ХНУ імені В.Н.Каразіна, 2004. - 164 с.
7. Василевская Ю.В., Ульянов В.В. Новые квазиточнорешаемые модели в квантовой теории спиновых систем. - Х.: ХНУ имени В.Н.Каразина, 2005. - 124 с.
8. Ульянов В.В. Конспект вводных лекций по квантовой механике. Часть 3-я. - Х.: ХНУ имени В.Н.Каразина, 2011. - 52 с.
9. Ульянов В.В. Конспект вводных лекций по квантовой механике. Часть 4-я. - Х.: ХНУ имени В.Н.Каразина, 2011. - 52 с.

СОДЕРЖАНИЕ

Навчальне видання

Володимир Володимирович Ульянов

КОНСПЕКТ ВСТУПНИХ ЛЕКЦІЙ

З КВАНТОВОЇ МЕХАНІКИ

Частина третя

Навчальний посібник

Відповідальний за випуск Г.І.Рашба

Підп. до друку 01.02.2011. Формат 60x84/16.
Папір офсетний. Друк ризографічний.
Умов. друк. арк. 2,7. Тираж 50 пр. Ціна договірна.

Надруковано з готових оригінал-макетів у друкарні ФОП "Азамаєв В.Р."
Свідоцтво про державну реєстрацію ВО2 № 229278 від 25.11.1998 р.
Свідоцтво про внесення суб'єкта визначеної справи до державного реєстру видавців, виготівників і розповсюджувачів видавничої продукції.
Серія ХК № 135 від 23.02.05 р.
м.Харків, вул.. Познанська 6, к. 84 тел. 8(057) 362-01-52

Издания кафедры теоретической физики имени академика И.М.Лифшица (вклад Ульяновых)

К 200-летию Харьковского университета

Серия монографий и учебных пособий

1. В.В.Ульянов. ВСТУП ДО КВАНТОВОЇ КІНЕТИКИ. – 2004.
2. Ю.В.Василевская, В.В.Ульянов
НОВЫЕ КВАЗИТОЧНОРЕШАЕМЫЕ МОДЕЛИ В КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ СПИНОВЫХ СИСТЕМ. – 2005.
3. Е.Н.Синельник, В.В.Ульянов
ФРАКТАЛЫ: ОТ МАТЕМАТИКИ К ФИЗИКЕ(+CD). – 2005.
4. А.В.Лымарь, В.В.Ульянов. ФРАКТАЛЫ: ОТ МАТЕМАТИКИ К ФИЗИКЕ. Ч. 2 (+CD). – 2010.
5. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА НА ФИЗИЧЕСКОМ ФАКУЛЬТЕТЕ ХАРЬКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА. Сост. В.В.Ульянов. – 2009.
6. В.В.Ульянов. О КВАЗИКЛАССИЧЕСКОМ ДВИЖЕНИИ ЧАСТИЦ В ПОЛЯХ С ОСОБЕННОСТЯМИ. – 2002.

7,8. В.В.Ульянов, Н.В.Ульянов. КОМПЬЮТЕРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ КВАНТОВЫХ ЯВЛЕНИЙ. Ч. 1, 2 (+CD). – 2011, 2012.

9,10,11,12. В.В.Ульянов. ВВОДНЫЕ ЛЕКЦИИ ПО КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ. Ч. 1, 2, 3, 4. – 2002, 2011.

13,14. В.В.Ульянов. ЛЕКЦИИ ПО КВАНТОВОЙ СТАТИСТИКЕ. Ч. 1, 2. – 2011, 2012.

15. В.В.Ульянов. К ИСТОРИИ ФИЗИЧЕСКОГО ФАКУЛЬТЕТА И КАФЕДРЫ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ. Ч. 1. – 2003.
16. В.В.Ульянов. К ИСТОРИИ ФИЗИЧЕСКОГО ФАКУЛЬТЕТА И КАФЕДРЫ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ. Ч. 2. – 2003.
17. А.М.Ермолаев, В.В.Ульянов
К ИСТОРИИ ФИЗИЧЕСКОГО ФАКУЛЬТЕТА И КАФЕДРЫ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ. Ч. 3. – 2004.
18. А.М.Ермолаев, Н.В.Ульянов. СПИНОВЫЕ ВОЛНЫ В НЕФЕРРОМАГНИТНЫХ ПРОВОДНИКАХ С ПРИМЕСНЫМИ СОСТОЯНИЯМИ ЭЛЕКТРОНОВ. – 2006.
19. A.M.Ermolaev, N.V.Ulyanov. ELECTRON SPIN WAVES IN NONMAGNETIC CONDUCTORS WITH RESONANCE STATES OF ELECTRONS. – 2008.
20. О.М.Єрмолаєв, В.В.Ульянов. СТИСЛИЙ НАРИС ІСТОРІЇ КАФЕДРИ ТЕОРЕТИЧНОЇ ФІЗИКИ ІМЕНІ АКАДЕМІКА І.М.ЛІФШИЦЯ. – 2008.

Серия воспоминаний об ученых-физиках

1. В.В.Ульянов
ИЛЬЯ МИХАЙЛОВИЧ ЛИФШИЦ. – 2001, 2007(+DVD).
2. А.М.Ермолаев, В.В.Ульянов
МОИСЕЙ ИСААКОВИЧ КАГАНОВ. – 2001.
3. В.В.Ульянов. ЛЕВ ЭЛЕАЗАРОВИЧ ПАРГАМАНИК. – 2002.
4. В.Г.Песчанский, В.В.Ульянов
ЛЕОНИД СТЕПАНОВИЧ ГУЛИДА. – 2002.
5. В.В.Ульянов
БОРИС ИЕРЕМИЕВИЧ ВЕРКИН. – 2002.
6. А.М.Ермолаев, В.В.Ульянов
АРНОЛЬД МАРКОВИЧ КОСЕВИЧ. – 2002.
7. В.В.Ульянов
ВИКТОР МОИСЕЕВИЧ ЦУКЕРНИК. – 2002.
8. А.М.Ермолаев, В.В.Ульянов
ВАЛЕНТИН ГРИГОРЬЕВИЧ ПЕСЧАНСКИЙ. 2002.
9. А.М.Ермолаев, В.В.Ульянов
ЭМАНУИЛ АЙЗИКОВИЧ КАНЕР. – 2002.
10. А.М.Ермолаев, Ю.П.Степановский, В.В.Ульянов
АЛЕКСАНДР ИЛЬИЧ АХИЕЗЕР. – 2002.
11. В.В.Ульянов
АНДРЕЙ ВЛАДИМИРОВИЧ ЖЕЛЕХОВСКИЙ. – 2003.
12. В.Г.Песчанский, В.В.Ульянов
ВЛАДИМИР ПЕТРОВИЧ ГАЛАЙКО. – 2003.
13. А.М.Ермолаев, В.В.Ульянов
ИГОРЬ ИВАНОВИЧ ФАЛЬКО. – 2003.
14. Г.И.Рашба, В.В.Ульянов
АЛЕКСАНДР МИХАЙЛОВИЧ ЕРМОЛАЕВ. –2003.
15.
16. А.М.Ермолаев, В.В.Ульянов
ОЛЕГ ИВАНОВИЧ ЛЮБИМОВ. – 2005.
17. В.В.Ульянов. ЛАНДАУ В ХАРЬКОВЕ. – 2008.
18. В.В.Ульянов. ВОСПОМИНАНИЯ ФИЗИКА-ТЕОРЕТИКА. Ч.1. – 2008.
19. В.В.Ульянов. К 95-ЛЕТИЮ Л.Э.ПАРГАМАНИКА. – 2009 (CD).
20. В.В.Ульянов. ЛАНДАУ В ХАРЬКОВЕ (2-е изд., доп.). – 2010.
21. А.М.Ермолаев, В.В.Ульянов. М.И.КАГАНОВ В ХГУ. – 2011.
22. В.В.Ульянов. К 90-ЛЕТИЮ М.И.Каганова. – 2011 (CD).

Серия воспоминаний о Детях физмата

1. В.В.Ульянов. АНАТОЛИЙ ИВАНОВИЧ ШАРАПОВ. – 2002, 2007.
2. В.В.Ульянов. Н А   У Н И В Е Р С И Т Е Т С К О Й. – 2002, 2007.
3. В.В.Ульянов. А Н А Т О Л И Й   Г А В Р И Л О В И Ч К Л А Д К О В О Й (М о й д р у г Т о л ь к а). – 2002, 2007(CD).
4. ЛЕГЕНДЫ И БЫЛИ СТАРОГО ФИЗМАТА
   Ч.I. Сборник рассказов. Агафонова Н.Ф., Дзюба А.С., Перваков В.А., Сизова З.И., Ульянов В.В., Шарапов А.И. - 2002.
   Ч. I I. Сборник рассказов. Агафонова Н.Ф., Бляшенко Г.С., Гапон Э.В, Иванов И.Г., Кондратьев Б.В., Мерисов Б.А., Ульянов В.В., Хижковый В.П., Шарапов А.И. - 2002.
   Ч.I I I. Сборник рассказов. Агафонова Н.Ф., Бляшенко Г.С., Козинец В.В., Кондратьев Б.В., Николаев Г.Т., Ульянов В.В.,Шарапов А.И.- 2002.
   Ч.IV. Сборник рассказов. Бляшенко Г.С., Гребенник И.П., Мерисов Б.А., Ульянов В.В., Чебанова Т.С. - 2002.
   Ч.V. Сборник рассказов. Бляшенко Г.С., Валиев Б.М., Гребенник И.П., Мерисов Б.А., Сизова З.И., Ульянов В.В. - 2002.
   Ч.VI. Сборник рассказов. Барьяхтар В.Г., Гребенник И.П., Креснин А.А., Манжелий В.Г., Пустовалов В.В., Рофе-Бекетов Ф.С., Ульянов В.В., Яцук К.П. - 2003.
   Ч.VII. Сборник стихов. Николаев Г.Т., Рогинкина Н.А., Рофе-Бекетов Ф.С., Сизова З.И., Степановский Ю.П., Ульянов В.В., Шарапов А.И. - 2003.
   Ч.VIII. Сборник рассказов. Гребенник И.П., Тартаковский В.К., Ульянов В.В., Яцук К.П. - 2003.
   Ч.IX. Сборник рассказов. Бляшенко Г.С., Гребенник И.П., Пустовалов В.В., Ульянов В.В., Яцук К.П. - 2003..
   Ч.X. Сборник рассказов. Гребенник И.П., Ульянов В.В., Хижковый В.П., Яцук К.П. - 2003.
   Ч.XI. Сборник стихов. Бирюков В.Я., Кан Я.С., Николаев Г.Т., Рофе-Бекетов Ф.С., Ульянов В.В., Шарапов А.И., Яцук К.П., Яцук Л.П. - 2003.
   Ч.XII. Сборник рассказов. Боярский Л.А., Гребенник И.П., Малеев В.Я., Пустовалов В.В., Ульянов В.В., Чебанова Т.С. - 2004.
   Ч.XIII. Сборник рассказов. Ковинько Н.М., Мазель Е.З., Ривкина Э.М., Розенберг В.Я., Тартаковский В.К., Ульянов В.В., Шарапов А.И. - 2008.
   Ч.XIV. Сборник стихов. Бирюков В.Я., Евланов М.В., Кан Я.С., Николаев Г.Т., Рогинкина Н.А., Рофе-Бекетов Ф.С., Сизова З.И., Степановский Ю.П., Таранова Г.М., Ульянов В.В., Шарапов А.И., Яцук К.П., Яцук Л.П. - 2009.
   Ч.XV. Сборник рассказов. Креснин А.А., Ульянов В.В., Федченко Л.Ю., Хайтман Е.Н., Яровая Р.Г. - 2009.
   Ч.XVI. Сборник рассказов. Рофе-Бекетов Ф.С., Татарченко Л.П., Ульянов В.В. – 2009.
5. В.В.Ульянов. КАК МЫ ПРАЗДНОВАЛИ 50-ЛЕТИЕ ОКОНЧАНИЯ УНИВЕРСИТЕТА (+CD). – 2007.

Серия воспоминаний о жизни в XX веке

1. В.В.Ульянов. Д О В О Й Н Ы (1934-1941). – 2002.
2. В.В.Ульянов. В О Е Н Н Ы Е Г О Д Ы (1941-1945). – 2002.
3. В.В.Ульянов. В Ш К О Л Е (1945-1952). – 2002.
4. В.В.Ульянов
   Р А С С К А З Ы О ЛЕТНЕМ ОТДЫХЕ (1934-1950). – 2003.
5. В.В.Ульянов
   Р А С С К А З Ы О ЛЕТНЕМ ОТДЫХЕ (1951-1954). – 2003.
6. В.В.Ульянов, И.П.Ульянова
   Р А С С К А З Ы О ЛЕТНЕМ ОТДЫХЕ (1955-1957). – 2003.
7. В.В.Ульянов, И.П.Ульянова
   Р А С С К А З Ы О ЛЕТНЕМ ОТДЫХЕ (1958-1961). – 2003.
8. В.В.Ульянов. Д В А Д Н Я В А Л У Ш Т Е. – 2003.
   (Волейбольные грёзы)
9. В.В.Ульянов. Д В А Д Ц А Т Ы Й Д О М. – 2003.
10. В.В.Ульянов. 5 0 Л Е Т С П У С Т Я. – 2003.
11. В.А.Ульянов
    ВОСПОМИНАНИЯ ДЕТСТВА И ЮНОСТИ. – 2003.
12. В.А.Ульянов. МОЯ ПОЕЗДКА В США И ОБРАТНО. – 2003.
13. В.А.Ульянов. С Т Р А Н И Ч К И Ж И З Н И. – 2003.
14. В.В.Ульянов
    Р О Д О С Л О В Н А Я Н А Ш Е Й С Е М Ь И. – 2004.
15. В.В.Ульянов. П О Л В Е К А В У Н И В Е Р С И Т Е Т Е. – 2004.
16. В.В.Ульянов, И.П.Ульянова
    Р А С С К А З Ы О ЛЕТНЕМ ОТДЫХЕ (1962-1967)+CD. – 2006.
17. В.В.Ульянов.ПОЛВЕКА В УНИВЕРСИТЕТЕ(2-е изд., доп.).– 2007.
18. В.В.Ульянов. ВИКТОР ЕВГЕНЬЕВИЧ РУБАНОВИЧ(+CD). – 2008.
19. В.В.Ульянов. НОВОЕ О ПУШКИНЕ И ГОГОЛЕ. – 2009 (CD).
20. В.В.Ульянов. ИЗДАНИЯ. ВЫСТАВКА КНИГ. – 2009 (CD).
21. Н.В. и И.П.Ульяновы. ЧЕРНОГОРИЯ. ИЮЛЬ 2009. – 2009 (CD).
22. Н.В.Ульянов, И.П.Ульянова. ПО ЮГУ ЕВРОПЫ. – 2009 (CD).
23. В.В.Ульянов. К 150-ЛЕТИЮ А.П.ЧЕХОВА. – 2010 (CD).
24. В.В.Ульянов. К 170-ЛЕТИЮ П.И.ЧАЙКОВСКОГО. – 2010 (CD).
25. Н.В. и И.П.Ульяновы. БОЛГАРИЯ И РУМЫНИЯ. – 2010 (CD).
26. В.В. и Н.В.Ульяновы. МИСХОР – АВГУСТ 2010. – 2010 (CD).
27. В.В.Ульянов. К 110-летию В.А.Ульянова.Рисунки отца.–2011(CD).
28. В.В.Ульянов
    М О Я М У З Ы К А Л Ь Н А Я И С Т О Р И Я (+DVD).– 2011.
29. В.В.Ульянов, И.П.Ульянова
    Р А С С К А З Ы О ЛЕТНЕМ ОТДЫХЕ (1968-1973)+DVD. – 2011.

Квантовая механика – это бесконечно сложная как методически, так и по заложенным в ней физическим понятиям область теории физики, и она характеризуется тем, что многие из используемых ею понятий очень плохо доступны нашему восприятию. Объясняется это тем, что наше восприятие воспитано не столько на мощи нашего интеллекта, сколько на нашем повседневном опыте. Мы легко воспринимаем те вещи, которые мы видели, и очень плохо воспринимаем те вещи, которые не видели.

Л.Д.Ландау