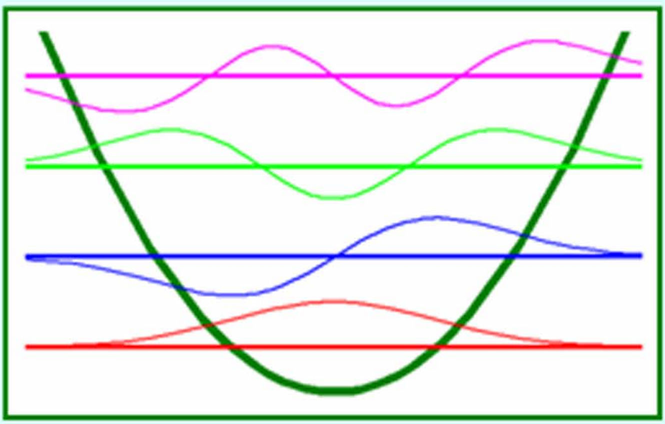
Министерство образования и науки,
молодежи и спорта Украины
Харьковский национальный университет
имени В.Н.Каразина

К 200-летию Харьковского университета

В.В.Ульянов

КОНСПЕКТ ВВОДНЫХ ЛЕКЦИЙ ПО КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

Часть четвертая



Харьков 2011

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

В.В.Ульянов

КОНСПЕКТ ВВОДНЫХ ЛЕКЦИЙ ПО КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

IV

Харьков 2011

УДК 530.145
ББК 22.314я73-1
У 51

У 51 **Ульянов В.В**. Конспект вводных лекций по квантовой механике. Ч.IV/ 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

Квантовая механика сегодня пронизывает всю физику. Она объясняет структуру и свойства твердых тел, излучение и поглощение света атомами, сверхтекучесть гелия и сверхпроводимость металлов. Квантовая механика пытается понять процессы, происходящие в недрах звезд, и вторгается в объяснение феномена жизни.

М.И.Каганов

ПРЕДИСЛОВИЕ

История создания этой части пособия, как и третьей части, 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, четвертая часть вводных лекций, как и третья, составлена по конспекту одного из студентов вечернего отделения физического факультета, 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.

Благодарю А.М.Ермолаева за внимательное отношение к рукописям автора и помощь советами и редкой литературой.

В.В.Ульянов

ОСЦИЛЛЯТОР

Элементарное колебание сложной системы, совершающей малые колебания, - главное колебание. Оно характеризуется в классической механике некоторой частотой ω_α - собственной частотой, происходит независимо от других нормальных колебаний и описывается нормальной координатой, представляющей собой линейную комбинацию смещений всех частиц системы. Функция Гамильтона такого колебания имеет вид

$$H = \frac{P^2}{2} + \frac{\omega^2 Q^2}{2}.$$

Однако возможна и другая нормировка координат, когда входит явно некоторый коэффициент, эквивалентный массе в обычных одномерных колебаниях. Поэтому рассматривается задача с гамильтонианом

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

возникающим в нулевом приближении в общем случае одномерного движения частицы массы m в потенциальном поле, имеющем минимум (второго порядка).

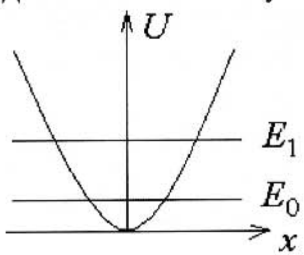
Еще одна важная задача сводится к одномерному гармоническому осциллятору - задача о движении заряда в постоянном однородном магнитном поле (в квантовой механике решена Ландау в 1930 году - уровни энергии Ландау).

Таким образом, рассматривается задача об энергетическом спектре и волновых функциях стационарных состояний осциллятора, т. е. системы с гамильтонианом

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

где $\left\{\hat{p}, \hat{x}\right\} = 1$, а ω имеет смысл частоты классических колебаний.

Движение в соответствующем потенциальном поле



будет финитным. Спектр энергии дискретен и начинается со значения энергии "нулевых" колебаний E_0. Решение задачи будем искать матричным методом в несколько этапов. Одновременно будет вводиться специальный аппарат, эквивалентный методам теории поля, и соответствующая терминология современной квантовой макрофизики: метод возбуждений-квазичастиц фононного типа.

1) Используются уравнения движения теорем Эренфеста, а также общий вид операторов производных

$$\widehat{\frac{df}{dt}} = \cancelto{0}{\frac{\partial \hat{f}}{\partial t}} + \{\hat{H}, \hat{f}\} .$$

В энергетическом представлении

$\left(\frac{df}{dt}\right)_{nk} = \frac{i}{\hbar}(Hf - fH)_{nk} = \frac{i}{\hbar}(E_n - E_k)f_{nk}$ в силу диагональности H в этом представлении (его собственном).

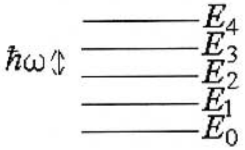
Краткая запись $\left(\dot{f}\right)_{nk} = i\omega_{nk} f_{nk}$.

В частности, для скорости $\dot{x}_{nk} = i\omega_{nk}x_{nk}$, импульса $p_{nk} = im\omega_{nk}x_{nk}$, ускорения $\ddot{x}_{nk} = -\omega_{nk}^2 f_{nk}$. Эти соотношения являются вспомогательными. Основой же послужит уравнение Ньютона

$$m\hat{\ddot{x}} = -\frac{\partial \hat{U}}{\partial x} = -m\omega^2\hat{x},$$

в рассматриваемом представлении $m\ddot{x}_{nk} = -m\omega^2 x_{nk}$ или, пользуясь связью $\ddot{x}_{nk}$ с x_{nk}, получаем

$$x_{nk}(\omega^2 - \omega_{nk}^2) = 0.$$



Любые изменения состояния связаны с операторами, полученными из координаты и импульса, которые фактически имеют связанные между собой матрицы, так что нас интересуют те матричные элементы координаты, которые отличны от нуля, т. е. те переходы в системе, которые фактически реализуются. Условию $x_{nk} \neq 0$ отвечают частоты перехода $\omega_{nk} = \pm\omega$, т. е. $E_n - E_k = \pm\hbar\omega$, или иначе - наблюдаемые значения энергии связаны между собой расстоянием $\hbar\omega$. Выбор нумерации уровней, указанный ранее и соответствующий нумерации числа узлов волновой функции, показывает, что спектр энергии эквидистантен, но не известно значение энергии E_0, т. е. относительное расположение уровней энергии установлено, но абсолютное положение на шкале энергии остается неясным.

Таким образом, следующим этапом является выяснение положения E_0. Это можно сделать разными методами. Выбирается комбинированный способ, использующий разные подходы и оценки с помощью приближенных методов.

2) Вариационная оценка основного уровня энергии:

$$E_0 \leq \langle E \rangle = (\Psi, \hat{H}\Psi).$$

Для гамильтониана обычного типа $\hat{H} = \dfrac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + \hat{U}(\vec{r})$

$$\langle E \rangle = \frac{1}{2m}(\vec{p}\Psi, \vec{p}\Psi) + (\Psi, U\Psi) = \frac{1}{2m}\int d\vec{r}\left|\hat{\vec{p}}\Psi\right|^2 + \int d\vec{r}\, U(\vec{r})\left|\Psi(\vec{r})\right|^2 =$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m}\int d\vec{r}\left|\nabla\Psi\right|^2 + \int d\vec{r}\, U(\vec{r})\left|\Psi(\vec{r})\right|^2.$$

В одномерном случае

$$\langle E \rangle = \frac{\hbar^2}{2m}\int dx\left|\Psi'(x)\right|^2 + \int dx\left|\Psi(x)\right|^2 U(x).$$

Для осциллятора подбираются волновые функции в виде

$\Psi(x) = A\mathrm{e}^{-\frac{\alpha}{2}x^2}$, где $|A|^2\sqrt{\pi / \alpha} = 1$ в силу нормировки.

$$\langle E \rangle = \frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} dx|A|^2(-\alpha x e^{-\frac{\alpha}{2}x^2})^2 + \frac{m\omega^2}{2}|A|^2\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha x^2}\,dx$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} = -\frac{\partial}{\partial\alpha}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2}dx = -\frac{\partial}{\partial\alpha}\sqrt{\pi/\alpha} = \frac{1}{2\alpha}\sqrt{\pi/\alpha}$$

$$\langle E\rangle = \frac{\hbar^2}{2m}\alpha^2\cdot\frac{1}{2\alpha}|A|^2\sqrt{\pi/\alpha} + \frac{m\omega^2}{2}\frac{1}{2\alpha}|A|^2\sqrt{\pi/\alpha}$$

$$\langle E\rangle(\alpha) = B\alpha + C/\alpha$$

$$\frac{\partial}{\partial\alpha}\langle E\rangle = B - C/\alpha_0^2$$

$$\alpha_0 = \sqrt{C/B} = \sqrt{m\omega^2 4m/4\cdot\hbar^2\alpha} = \frac{m\omega}{\hbar},$$

$$\langle E\rangle_{\min} = \sqrt{BC}+\sqrt{BC} = 2\sqrt{BC} = 2\sqrt{\frac{\hbar^2}{4m}\cdot\frac{m\omega^2}{4}} = \frac{\hbar\omega}{2},$$

$$\boxed{E_0 \le \frac{\hbar\omega}{2}}\quad,\quad \Psi(x) = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}.$$

3) Если вариационная оценка есть оценка сверху, то оценка снизу получается на основе соотношения неопределенностей:

$E_0 = \langle H\rangle_0 = \frac{1}{2m}\langle p^2\rangle_0 + \frac{m\omega^2}{2}\langle x^2\rangle_0 = \frac{D_p}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}D_x$ в силу $\langle p\rangle_0 = 0$ (как и во всех стационарных состояниях дискретного спектра), а $\langle x\rangle = \frac{(-1)}{m\omega^2}\langle F\rangle = -\frac{1}{m\omega^2}\frac{d}{dt}\langle p\rangle = 0$ в стационарном состоянии, так что $D_p = \langle p^2\rangle$, а $D_x = \langle x^2\rangle$, но $D_pD_x \ge \hbar^2/4$, так что

$$E_0 \ge \frac{\hbar^2}{8mD_x} + \frac{m\omega^2}{2}D_x \ge \left(\frac{C}{D_x} + BD_x\right)_{\min} = 2\sqrt{BC} = \hbar\omega/2.$$

Итак, оценка по соотношению неопределенностей дает $E_0 \ge \hbar\omega/2$.

Совместно с вариационным методом получаем $\boxed{E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}}$.

4) Квазиклассическое приближение.

Хотя нас интересует задача об осцилляторе, фактически будут получены уровни энергии для любой степенной потенциальной ямы $U(x) = \alpha |x|^s$. Используем правила квантования Бора-Зоммерфельда

$$\oint p dx = h(n+1/2) \ , \ n = 0,1,2...,$$

$$2\int_{x_1}^{x_2} p dx = 4\sqrt{2m}\int_0^{x_2}\sqrt{E-\alpha x^s}\,dx = 4\sqrt{2mE}\,\frac{1}{s}(E/\alpha)^{1/s}\int_0^1 \sqrt{1-y}\,y^{\frac{1}{s}-1}dy = \frac{4\sqrt{2m}}{s\alpha^{\frac{1}{s}}}E^{\frac{s+2}{2s}}B$$

$$B \equiv B(\frac{3}{2},\frac{1}{s}) = \int_0^1 (1-y)^{\frac{3}{2}-1}y^{\frac{1}{s}-1}dy$$

$$E_n = \hbar^{\frac{2s}{s+2}}\alpha^{\frac{2}{s+2}}m^{-\frac{s}{s+2}}(n+1/2)^{\frac{2s}{s+2}}\left(\frac{\pi s}{2\sqrt{2}B}\right)^{\frac{2s}{s+2}}.$$

Для осциллятора $s = 2, \quad U(x) = m\omega^2 x^2/2,$

$$B = B(3/2,1/2) = \Gamma(3/2)\Gamma(1/2)/\Gamma(2) = \pi/2$$

$$E_n = \hbar(m\omega^2/2)^{1/2}m^{-1/2}(n+1/2)\left(\frac{\pi 2}{2\sqrt{2}\pi/2}\right) = \hbar\omega(n+1/2).$$

Таким образом, приближенный метод с “половинным” квантованием дает для осциллятора правильный результат. Вообще говоря, правила квантования Б.-З. дают хорошую точность при $n \gg 1$. Однако фактически уже для $n \sim 1$ (а иногда и для $n = 0$!) получаются хорошие приближения. Так, для рассмотренных степенных потенциалов, например, для $s = 1$ при $n = 0$ ошибка порядка 3%, а при $n = 1$ она порядка $0{,}6\%$. Для других $s > 2$ ошибка для основного уровня $\sim 10\%$, а для $n = 1$ на порядок меньше $\sim 1\%$. Имеются формулы, учитывающие последующие приближения, а также отклонение правила от чисто “половинного” $\oint p dx = h(n+\gamma)$, где γ зависит от вида граничных условий (а также от энергии и типа потенциала) - Зоммерфельдовская добавка в правилах квантования ($0 \le \gamma < 1$).

5) Теорема вириала.

В стационарном (вообще говоря, связанном) состоянии $\langle px \rangle = const$,

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{p}\hat{x}\rangle = \langle \dot{p}x\rangle + \langle p\dot{x}\rangle = \left\langle -\frac{\partial U}{\partial x}x\right\rangle + \left\langle p\frac{p}{m}\right\rangle = 2\langle T\rangle - \left\langle x\frac{\partial U}{\partial x}\right\rangle = 0,$$

так что

$$\boxed{\langle T\rangle=\frac{1}{2}\left\langle x\frac{\partial U}{\partial x}\right\rangle}.$$

Обобщение на случай трехмерный непосредственно: $\langle T\rangle=\dfrac{1}{2}\left\langle \vec r\,\dfrac{\partial U}{\partial \vec r}\right\rangle$,

а также для системы частиц $\langle T\rangle=\dfrac{1}{2}\sum\limits_{a=1}^{N}\left\langle \vec r_a\,\dfrac{\partial U}{\partial \vec r_a}\right\rangle$.

Чаще всего приводится ее частный случай для однородных функций $U(x)$, у которых по теореме Эйлера $\vec r\,\dfrac{\partial U}{\partial \vec r}=\beta U$, где β - степень (показатель) однородности. Так, в кулоновом поле с $\beta=-1$ $\langle T\rangle=-\dfrac{1}{2}\langle U\rangle$, а для осциллятора ($\beta=2$) $\langle T\rangle=\langle U\rangle$.

Работает обычно в сочетании с $E=\langle T\rangle+\langle U\rangle$, так что отсюда получаются явные выражения для $\langle T\rangle$ и $\langle U\rangle$. Например, для осциллятора $\langle T\rangle=\langle U\rangle=\dfrac{E}{2}=\dfrac{\hbar\omega}{2}(n+\dfrac{1}{2})$.

Таким образом, $\left\langle p^2\right\rangle=\hbar m\omega(n+1/2)$, а $\left\langle x^2\right\rangle=\dfrac{\hbar}{m\omega}(n+1/2)$.

Отсюда в силу $\underset{\text{стац. сост.}}{\langle p\rangle=0}$ и $\underset{\text{стац. сост. осциллятора}}{\langle x\rangle=0}$

$$\boxed{\begin{aligned}\Delta p&=\sqrt{\hbar m\omega(n+1/2)}\\ \Delta x&=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}(n+1/2)}\end{aligned}}\ .$$

Амплитуды колебаний в координатной и импульсной картинах.

$\Delta p\cdot\Delta x=\hbar(n+1/2)\ge\hbar/2$.

Наименьшее значение произведения неопределенности реализуется в основном состоянии осциллятора (при этом минимален и каждый из сомножителей, т. е. и Δp, и Δx).

Для "нулевых" колебаний с $n = 0$

$$\boxed{\begin{aligned}\Delta p_0 &= \sqrt{\hbar m\omega / 2} \\ \Delta x_0 &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\end{aligned}}\,.$$

6) Матричный метод расчета уровней энергии.

Вводится правило нумерации строк и столбцов:

$\hat{x} = \begin{pmatrix} x_{00} & x_{01} & x_{02} & \dots \\ x_{10} & x_{11} & x_{12} & \dots \\ x_{20} & x_{21} & x_{22} & \dots \\ . & . & . & . \end{pmatrix}$. Известно уже, что $x_{nn+1} \neq 0$, а также $x_{nn-1} \neq 0$.

Таким образом, матрица координаты недиагональна, а отличные от нуля величины стоят лишь по соседней с главной диагональю:

$\begin{pmatrix} 0 & x_{01} & 0 & 0 & 0. \\ x_{10} & 0 & x_{12} & 0 & 0. \\ 0 & x_{21} & 0 & x_{23} & 0. \\ . & . & . & & . \end{pmatrix}$. Для нахождения явного вида этих матричных элементов используем информацию, заключенную в соотношении коммутации p и x: $\hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p} = \hbar / i$. Берем диагональный элемент: $(px - xp)_{nn} = \hbar / i$. По правилу умножения матриц $\sum\limits_l (p_{nl}x_{ln} - x_{nl}p_{ln}) = \hbar / i$, а в силу $p_{nl} = im\omega_{nl}x_{nl}$ имеем $im\sum\limits_l (\omega_{nl}x_{nl}x_{ln} - x_{nl}\omega_{ln}x_{ln}) = \hbar / i$. Учитывая, что $\omega_{nl} = -\omega_{ln}$, получаем $2im\sum\limits_l x_{nl}x_{ln}\omega_{nl} = \hbar / i$ или явно расписывая сумму:

$$2im(\omega_{nn+1}x_{nn+1}x_{n+1n} + \omega_{nn-1}x_{nn-1}x_{n-1n}) = -2im\left(\left|x_{n+1n}\right|^2 - \left|x_{nn-1}\right|^2\right) = \hbar / i,$$

где использована эрмитовость x $x_{nl} = x^*_{ln}$. Итак,

$\left|x_{n+1n}\right|^2-\left|x_{nn-1}\right|^2=\dfrac{\hbar}{2m\omega}$. Если обозначить $\left|x_{nn-1}\right|^2\equiv A_n$, то в такой последовательности имеется свойство $A_{n+1}-A_n=\dfrac{\hbar}{2m\omega}$ при $A_0=0$. Это есть арифметическая прогрессия, и ее члены можно выразить непосредственно: $A_n=\dfrac{\hbar}{2m\omega}n$. Значит, с точностью до фазового множителя, который в приложениях роли не играет,

$$x_{nn-1}=\sqrt{\frac{\hbar n}{2m\omega}}=\Delta x_0\sqrt{n}\,.$$

Явный вид матрицы $$\hat{x}=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\begin{pmatrix}0&1&0&0&.\\1&0&\sqrt{2}&0&.\\0&\sqrt{2}&0&\sqrt{3}&.\\0&0&\sqrt{3}&0&.\\.&.&.&.&.\end{pmatrix}.$$

7) Операторы рождения и уничтожения возбуждений.

Вводится оператор $\hat{a}$ в виде линейной комбинации координаты и импульса $\hat{a}=\dfrac{1}{\sqrt{2}}(\sqrt{\dfrac{m\omega}{\hbar}}\hat{x}+i\dfrac{\hat{p}}{\sqrt{\hbar m\omega}})$. В силу связи матричных элементов $\hat{p}$ с матричными элементами $\hat{x}$ $p_{nl}=im\omega_{nl}x_{nl}$, отличны от нуля матричные элементы этого оператора в лучшем случае для переходов a_{nn-1} и a_{n-1n}. Если непосредственно посчитать a_{nn-1} и a_{n-1n}:

$$a_{nn-1}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x_{nn-1}+i\frac{p_{nn-1}}{\sqrt{\hbar m\omega}})=\frac{1}{\sqrt{2}}(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x_{nn-1}-\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x_{nn-1})=0,$$

$$a_{n-1n}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x_{n-1n}+i\frac{p_{n-1n}}{\sqrt{\hbar m\omega}})=\frac{1}{\sqrt{2}}(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x_{n-1n}+\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x_{n-1n})=\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}x_{n-1n}=$$

$$=\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\cdot\sqrt{\frac{\hbar n}{2m\omega}}=\sqrt{n}\,,$$

то приходим к выводу, что отличны от нуля лишь матричные элементы $\boxed{a_{n-1n}=\sqrt{n}}$. Это значит, что в силу $\hat{a}\psi_n=\sum\limits_{n'}a_{n'n}\psi_{n'}=a_{n-1n}\psi_{n-1}$

$$\boxed{\hat{a}\psi_n = \sqrt{n}\psi_{n-1}},$$

т. е. если было состояние осциллятора с некоторым значением энергии E_n, то получится после действия оператора $\hat{a}$ состояние с энергией E_{n-1} - на один квант $\hbar\omega$ меньше, на одно возбуждение меньше. Говорят, что оператор $\hat{a}$ уничтожает одно возбуждение (в данной задаче - квазичастицу фононного типа), или условно - $\hat{a}$ уничтожает один фонон.

Если рассмотреть сопряженный оператор $\hat{a}^+$, равный, в силу эрмитовости $\hat{x}$ и $\hat{p}$, $\hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x} - i\frac{\hat{p}}{\sqrt{\hbar m\omega}})$, то его матричные элементы можно снова не считать, а воспользоваться их прямой связью с матричными элементами $\hat{a}$: $a^+_{nn'} = a^*_{n'n}$, т. е. отличны от нуля лишь матричные элементы a^+_{nn-1}, или a^+_{n+1n}, которые равны $a^+_{n+1n} = a^*_{nn+1} = \sqrt{n+1}$.

Смысл этого результата устанавливается действием оператора $\hat{a}^+$ на волновую функцию стационарного состояния осциллятора

$$\hat{a}^+\psi_n = \sum_{n'} a^+_{n'n}\psi_{n'} = a^+_{n+1n}\psi_{n+1} = \sqrt{n+1}\psi_{n+1},$$

$$\boxed{\hat{a}^+\psi_n = \sqrt{n+1}\psi_{n+1}}.$$

Отсюда следует, что $\hat{a}^+$ - оператор рождения фонона.

В силу простых свойств $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$ и их наглядного смысла все величины в дальнейшем (и все вычисления) будут вестись в терминах этих операторов. Прежде всего, выразим старые канонически сопряженные операторы $\hat{p}$ и $\hat{x}$ через новые операторы (которые также обладают некоторым свойством сопряжения – канонического сопряжения для операторов рождения и уничтожения возбуждений, число которых в каждом состоянии не имеет ограничений, - бозонов).

Из явного вида $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$ следует, что

$$\hat{a} + \hat{a}^+ = \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\hat{x}, \text{ т.е.} \qquad \hat{a} - \hat{a}^+ = i\sqrt{\frac{2}{\hbar m\omega}}\hat{p}, \text{ т.е.} \qquad \boxed{\begin{aligned}\hat{x} &= \Delta x_0(\hat{a} + \hat{a}^+)\\ \hat{p} &= \Delta p_0\frac{\hat{a} - \hat{a}^+}{i}\end{aligned}}.$$

Выразим также через эти величины гамильтониан:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2 = \frac{1}{2m}(\Delta p_0)^2 \frac{\hat{a}^2 + \hat{a}^{+2} - \hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{a}}{-1} +$$

$$+\frac{m\omega^2}{2}(\Delta x_0)^2(\hat{a}^2 + \hat{a}^{+2} + \hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a}) = \frac{\hbar\omega}{4}(\hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a}) +$$

$$+\frac{\hbar\omega}{4}(\hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a}) = \frac{\hbar\omega}{2}(\hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a}).$$

Второй способ. Для функции Гамильтона осциллятора получаем:

$$H = \frac{1}{2}((\sqrt{m\omega^2 x^2})^2 + (\frac{p}{\sqrt{m}})^2) = \frac{1}{2}(\sqrt{m\omega^2}x - i\frac{p}{\sqrt{m}})(\sqrt{m\omega^2}x + i\frac{p}{\sqrt{m}}) =$$

$$= \frac{\hbar\omega}{2}(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x - i\frac{p}{\sqrt{\hbar m\omega}})(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x + i\frac{p}{\sqrt{\hbar m\omega}}).$$

Если ту же операцию выполнить для гамильтониана, то в силу некоммутативности операторов $\hat{p}$ и $\hat{x}$ возникает еще один член:

$$\hat{H} = \hbar\omega\frac{1}{\sqrt{2}}(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x} - i\frac{\hat{p}}{\sqrt{\hbar m\omega}})\frac{1}{\sqrt{2}}(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x} + i\frac{\hat{p}}{\sqrt{\hbar m\omega}}) + \frac{\hbar\omega}{2} =$$

$$= \hbar\omega(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2}),$$

что также и непосредственно получается при вычислении $\hat{a}^+\hat{a}$.

Таким образом,

$$\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2}) = \frac{\hbar\omega}{2}(\hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^+).$$

Отсюда следует:

1. в силу $E_n = \hbar\omega(n+\frac{1}{2})$ видно, что оператор $\hat{a}^+\hat{a}$ имеет собственное значение n , т. е. число возбуждений, число фононов. Поэтому этот оператор есть оператор числа фононов (квазичастиц)

$$\boxed{\hat{n} = \hat{a}^+\hat{a}} \ .$$

2. из этих двух выражений для $\hat{H}$ получаем соотношение коммутации $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$:

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

$$\boxed{[\hat{a},\hat{a}^+] = 1} \ .$$

Это условие эквивалентно условию $\{\hat{p},\hat{x}^+\} = 1$ для эрмитовых величин p и x и называется условием канонического сопряжения бозевских операторов рождения и уничтожения.

8) Далее операторы $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$ используются для фактического вычисления волновых функций стационарных состояний осциллятора (в первую очередь).

Для вакуумного состояния квазичастиц (нулевые колебания осциллятора)

$$\boxed{\hat{a}\psi_0 = 0},$$

а для получения состояний с 1 фононом можно подействовать на вакуум оператором $\hat{a}^+$:

$$\hat{a}^+\psi_0 = \psi_1 \text{, далее } (\hat{a}^+)^2\psi_0 = \sqrt{1\cdot 2}\psi_2 \text{ и т. д.}$$

$$(\hat{a}^+)^n\psi_0 = \sqrt{n!}\psi_n \text{, т. е.}$$

$$\boxed{\psi_n = \frac{(\hat{a}^+)^n}{\sqrt{n!}}\psi_0}.$$

Так решается вопрос о нахождении волновых функций.

Явный же вид этих функций в координатном представлении (а в энергетическом представлении это есть базисные векторы

$$\psi_0=\begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\\\vdots\end{pmatrix},\psi_1=\begin{pmatrix}0\\1\\0\\\vdots\end{pmatrix},\ldots\psi_n=\begin{pmatrix}0\\0\\\vdots\\0\\1\\0\\\vdots\end{pmatrix}\begin{array}{l}0\\1\\2\\\vdots\\n\\\vdots\\ \end{array}$$

) можно получить,

используя явное координатное действие $\hat{a}$ и $\hat{a}^{+}$:

$$\hat{a}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x+\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\frac{\partial}{\partial x}\right)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi+\frac{\partial}{\partial\xi}\right),$$

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

$$\boxed{\xi=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x}.$$

Уравнение для вакуума записываем явно:

$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi+\frac{\partial}{\partial\xi}\right)\psi_0(\xi)=0$, что дает

$\psi_0(\xi)=ce^{-\xi^2/2}$. С нормировкой $\int\limits_{-\infty}^{\infty}\left|\psi_0(\xi)\right|^2 d\xi=1$

получаем

$\boxed{\psi_0(\xi)=\frac{1}{\sqrt[4]{\pi}}e^{-\frac{\xi^2}{2}}}$, а нормируя на x, будем иметь

$$\boxed{\psi_0(x)=\sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}}.$$

Теперь переходим к n-фононному состоянию. Здесь удобно воспользоваться представлением для итерированного оператора $(\hat{a}^{+})^n$ в следующей мультипликативной форме:

в силу $\hat{a}^{+} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\xi - \frac{\partial}{\partial\xi}) = \frac{(-1)}{\sqrt{2}} e^{\xi^2/2} \frac{d}{d\xi} e^{-\frac{\xi^2}{2}}$

$$(\hat{a}^{+})^n = \frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n}}(e^{\frac{\xi^2}{2}} \frac{d}{d\xi} e^{-\frac{\xi^2}{2}})(e^{\frac{\xi^2}{2}} \frac{d}{d\xi} e^{-\frac{\xi^2}{2}})...(e^{\frac{\xi^2}{2}} \frac{d}{d\xi} e^{-\frac{\xi^2}{2}}) =$$

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

Тогда функции Эрмита

$$\psi_n(\xi) = \frac{(\hat{a}^{+})^n}{\sqrt{n!}} \psi_0(\xi) = \frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} e^{\frac{\xi^2}{2}} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} \quad ,$$

или $\psi_n(\xi) = e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi)$, где нормированные полиномы Эрмита

$$H_n(\xi) = \frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} .$$

При нормировке на координату x

$$\boxed{\psi_n(x) = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\hbar}} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} H_n(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x)} \; ,$$

$$H_0(\xi) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} \; ,$$

$$H_0(\xi) = \sqrt{2} \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} \xi \; , \; ...$$

В математической литературе можно встретить другую нормировку полиномов Эрмита.

Задача об осцилляторе имеет самостоятельный интерес. Её физические приложения будут обсуждаться позднее, как и другие свойства колебаний. Одновременно она служит пробным камнем различных методов – в курсе лекций методы иллюстрируются примерами, связанными с задачей о квантованных колебаниях.

Далее рассматриваются еще два фундаментальных метода квантовой теории – теория нестационарных (переменных) возмущений и теория стационарных (постоянных) возмущений.

Теория нестационарных возмущений

Ставится конкретная кинетическая задача:

в начальный момент времени t_0 система находится в стационарном состоянии с полным набором квантовых чисел n

$$\Psi(t_0) = \psi_n \ .$$

Гамильтониан системы $\hat{H}_0$ не зависит явно от времени и, начиная с момента времени t_0, получает добавку $\hat{H}_1(t)$. В момент времени t (в частности, когда возмущение $\hat{H}_1$ уже перестало тревожить систему) состояние системы $\Psi(t)$ не является стационарным (пакет стационарных состояний), и нас интересует вероятность обнаружить в таком конечном состоянии значения физических величин с набором n'. Эту вероятность называют условно вероятностью «перехода» (историческое название, сохранившееся из старой квантовой теории Бора):

$$W_{n \to n'} \ .$$

По общим правилам квантовой механики

$$W_{n \to n'} = \left| (\psi_{n'}, \Psi(t)) \right|^2 .$$

Если ввести оператор эволюции системы $\hat{U}$, то в силу

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

имеем

$$W_{n\to n'} = \left|(\psi_{n'}, \hat{U}\psi_n)\right|^2 = \left|U_{n'n}\right|^2 \ .$$

Таким образом, вероятности переходов определяются матричными элементами оператора эволюции:

$$\boxed{W_{n\to n'} = \left|U_{n'n}\right|^2} \ .$$

Однако фактически важна лишь часть оператора эволюции, связанная непосредственно с возмущением, так как при «естественной» эволюции системы, т. е. движении с H_0, никаких переходов в системе в силу сохранения энергии (стабильность стационарного состояния) не было бы. Поэтому вводится оператор, учитывающий отклонение эволюции от естественной – $\hat{S}$ -оператор:

$$\boxed{\hat{U}(t|t_0) = \hat{U}_0(t|t_0)\hat{S}(t|t_0)} \ .$$

В силу того, что $\hat{U}_0(t|t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}_0}$, получаем

$$U_{n'n} = (eS)_{n'n} = \sum_l e_{n'l} S_{ln} = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)E^0_{n'}} S_{n'n} \ ,$$

так как в рассматриваемом представлении матрица U_0 диагональна:

$$(e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}_0})_{n'l} = \delta_{n'l} e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)E^0_{n'}} \ .$$

Подставляя $U_{n'n}$ в $W_{n\to n'}$, получаем, что

$$\boxed{W_{n\to n'} = \left|S_{n'n}\right|^2} \ .$$

Здесь в явном виде показана роль S -оператора в эволюции системы – именно S -оператор вызывает «переходы» в системе. Таким образом, задача сводится к нахождению $\hat{S}$.

Построим метод теории возмущений, пригодный при малых $\hat{H}_1(t)$.

Уравнение для $\hat{S}$ получается на основе уравнений для $\hat{U}$ и $\hat{U}_0$ (на первых этапах вывода предположения о $\dfrac{\partial \hat{H}_0}{\partial t}=0$ и о дебройлевской форме $\hat{U}_0$ не используются):

$$\begin{array}{l} \dfrac{\partial \hat{U}}{\partial t}=-\dfrac{i}{\hbar}\hat{H}\hat{U} \\ \dfrac{\partial \hat{U}_0}{\partial t}=-\dfrac{i}{\hbar}\hat{H}_0\hat{U}_0 \end{array} \Rightarrow \frac{\partial \cancel{\hat{U}_0}}{\partial t}\hat{S}+\hat{U}_0\frac{\partial \hat{S}}{\partial t}=-\frac{i}{\hbar}(\cancel{\hat{H}_0}+\hat{H}_1)\hat{U}_0\hat{S} \ ,$$

$$\frac{\partial \hat{S}}{\partial t}=-\frac{i}{\hbar}\hat{U}_0^{-1}\hat{H}_1\hat{U}_0\hat{S} \ .$$

Из определения $\hat{S}$ следует также, что $\hat{S}(t_0|t_0)=1$.

Итак,

$$\begin{cases} \dfrac{\partial S}{\partial t}=-\dfrac{i}{\hbar}\hat{H}_{1Д}(t)\hat{S} \\ \hat{S}(t_0|t_0)=1, \end{cases}$$

где оператор

$$\hat{H}_{1Д}(t)=\hat{U}_0^{-1}(t|t_0)\hat{H}_1(t)\hat{U}_0(t|t_0)$$

соответствует гейзенберговскому представлению с гамильтонианом H_0, т. е. представлению Дирака (или представлению взаимодействия), хотя это и не существенно для рассматриваемого случая.

Полученное дифференциальное уравнение совместно с начальным условием можно записать в форме интегрального уравнения, формально интегрируя дифференциальное уравнение:

$$\boxed{\hat{S}(t|t_0)=1-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}dt_1\hat{H}_{1Д}(t_1)\hat{S}(t_1|t_0)} \ .$$

В нулевом приближении (считая $\hat{H}_1$ малым), отбрасывая $\hat{H}_1$,

$$\hat{S}(t|t_0)=1 \, .$$

В первом приближении (оставляя $\hat{H}_1$, но для $\hat{S}$ беря под интегралом нулевое приближение)

$$\hat{S}(t|t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt_1 H_{1Д}(t_1) \ .$$

Во втором приближении

$$\hat{S}(t|t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt_1 H_{1Д}(t_1) + (-\frac{i}{\hbar})^2 \int_{t_0}^{t} dt_1 H_{1Д}(t_1)\int_{t_0}^{t_1} dt_2 H_{1Д}(t_2)$$

и т. д.

В интересующем нас случае первого приближения

$$\boxed{\hat{S}(t|t_0) \approx 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt_1 e^{\frac{i}{\hbar}(t_1 - t_0)\hat{H}_0}\hat{H}_1(t_1) e^{-\frac{i}{\hbar}(t_1 - t_0)\hat{H}_0}} \ .$$

Отсюда матричные элементы

$$S_{n'n} = \delta_{n'n} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt_1 (e^{+} H_1 \overline{e})_{n'n} =$$

$$= \delta_{n'n} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt_1 (H_1)_{n'n} e^{i\omega_{n'n}(t_1 - t_0)} \text{, где } \omega_{n'n} = \frac{E_{n'}^0 - E_n}{\hbar}.$$

Таким образом, рассматривая именно переходы, т. е. считая, что $n' \neq n$, получаем

$$\boxed{W_{\substack{n \to n' \\ n' \neq n}} \approx \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_{t_0}^{t} dt_1 \left\langle n' \middle| H_1(t_1) \middle| n \right\rangle e^{i\omega_{n'n}t_1}\right|^2} \ .$$

Здесь нет под интегралом множителя $e^{-i\omega_{n'n}t_0}$, так как он не дает вклада в $|\ \ |^2$.

Вероятность «неперехода»

$$W_{n \to n} = 1 - \sum_{n' \neq n} W_{n \to n'} \ .$$

Вероятности переходов квадратичны по возмущению.

При больших интервалах (n', n), когда $E_{n'} - E_n$ велико, т. е. велики частоты перехода $\omega_{n'n}$, осциллирующий множитель будет давать очень малый вклад.

Условие применимости результата заключается в малости величины $W_{n \to n'}$.

Вынужденные колебания осциллятора

Пусть при t_0 имеется n фононов, т. е. $E_n = \hbar\omega(n+\frac{1}{2})$, и начинает действовать произвольная переменная сила. Нужно найти вынужденные переходы $W_{n\to n'}$ и посчитать $<E>$ в окончательном состоянии.

1-е – построение гамильтониана возмущения $\hat{H}_1(t)$:

$$f(t) = -\frac{\partial U_{внеш}}{\partial x} ,$$

$$\hat{H}_1(t) = \hat{U}_{внеш} = -f(t)\hat{x} .$$

2-е – выражение $\hat{H}_1(t)$ через операторы $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$ (полевые операторы):

в силу $\hat{x} = \Delta x_0(\hat{a}+\hat{a}^+)$

$\hat{H}_1(t) = -f(t)\Delta x_0(\hat{a}+\hat{a}^+)$.

3-е – какие именно возможны переходы (в рассматриваемом приближении) – качественная сторона вопроса:

$$\langle n'|H_1(t)|n\rangle = -\Delta x_0 f(t)\langle n'|a+a^+|n\rangle ,$$

отличие от нуля в двух случаях:

если $n' = n+1$ (вклад от $\hat{a}^+$) и

если $n' = n-1$ (вклад от $\hat{a}$).

Таким образом, происходят только однофононные процессы. Первый случай соответствует появлению еще одного фонона в системе – процесс излучения, а второй – исчезновение фонона – процесс поглощения.

4-е - вычисление вероятностей установленных процессов (количественная сторона задачи):

для излучения $\langle n+1|H_1(t)|n\rangle = -f(t)\Delta x_0\sqrt{n+1}$,

$\omega_{n+1n} = \omega$, так что

$$W_{n\to n+1} = \frac{1}{\hbar^2}(\Delta x_0)^2(n+1)\left|\int_{t_0}^{t} dt_1 f(t_1)e^{i\omega t_1}\right|^2 ,$$

а для поглощения $\langle n-1|H_1(t)|n\rangle = -f(t)\Delta x_0\sqrt{n}$,

$\omega_{n-1n} = -\omega$, так что

$$W_{n\to n-1} = \frac{1}{\hbar^2}(\Delta x_0)^2 n\left|\int_{t_0}^{t} dt_1 f(t_1)e^{-i\omega t_1}\right|^2 .$$

Подставляя $(\Delta x_0)^2 = \dfrac{\hbar}{2m\omega}$ и учитывая вещественность $f(t)$, имеем окончательно

$$W_{n\to n+1} = \frac{\left|\int_{t_0}^{t} dt_1 f(t_1)e^{i\omega t_1}\right|^2}{\hbar\omega 2m}(n+1) ,$$

$$W_{n\to n-1} = \frac{\left|\int_{t_0}^{t} dt_1 f(t_1)e^{i\omega t_1}\right|^2}{\hbar\omega 2m} n ,$$

$$W_{n\to n} = 1 - W_{n\to n+1} - W_{n\to n-1} .$$

Сравнение показывает, что излучение является более вероятным процессом. Его вероятность можно разбить на две части: вклад, пропорциональный числу имевшихся фононов n , отвечает так называемому «индуцированному» излучению (чем больше есть фононов, тем более вероятно появление новых, характерно вообще для бозонов), а также вклад за счет 1, существующий и в случае полного отсутствия фононов в начальном состоянии, т. е. чисто вакуумное влияние – «спонтанное» излучение (физически это один из наиболее ярких эффектов проявления нулевых колебаний вакуума электромагнитного поля). До создания квантовой механики индуцированное излучение предсказано Эйнштейном. Процесс поглощения имеет вероятность, пропорциональную числу имевшихся фононов (в их отсутствии, естественно, нечего и поглощать).

Вся эта картина отвечает слабому влиянию $f(t)$. Задача допускает точное решение и в случае произвольной величины $f(t)$ (решена Шредингером еще в 1926 году, однако только в последнее время оценили всю важность этой простой задачи). В случае сильного воздействия переходы совершаются «многофононные» в соответствии с распределением вероятностей, имеющим весьма сложный вид (наиболее простой результат получится в случае вынужденных колебаний из состояния вакуума, когда распределение вероятностей переходов есть распределение Пуассона, которое при больших воздействиях сводится к Гауссовому).

Вторая часть рассматриваемой задачи состоит в нахождении $\langle E \rangle$.

В соответствии с общим правилом вычисления среднего значения на основании известных вероятностей отдельных собственных значений имеем

$$\langle E \rangle = \sum_{n'} E_{n'} W_{n\to n'} \approx E_n (1 - W_{n\to n+1} - W_{n\to n-1}) +$$
$$+ E_{n+1} W_{n\to n+1} + E_{n-1} W_{n\to n-1},$$

так что приращение средней энергии

$$\Delta\langle E \rangle = \langle E \rangle - E_n \approx (E_{n+1} - E_n) W_{n\to n+1} - (E_n - E_{n-1}) W_{n\to n-1} =$$
$$= \hbar\omega (W_{n\to n+1} - W_{n\to n-1}) =$$
$$= \frac{1}{2m} \left| \int_{t_0}^{t} dt_1 f(t_1) e^{i\omega t_1} \right|^2 .$$

Таким образом, окончательно

$$\boxed{\Delta\langle E \rangle = \frac{1}{2m} \left| \int_{t_0}^{t} dt_1 f(t_1) e^{i\omega t_1} \right|^2}.$$

1. Этот результат является точным, хотя получен с помощью приближенных формул теории нестационарных возмущений (при вычислении $\langle E \rangle$ в окончательном состоянии вклады от многофотонных переходов компенсируются добавками к вероятностям переходов $W_{n\to n+1}$, $W_{n\to n-1}$ - эти вероятности, рассчитанные приближенным способом, в действительности содержат члены более высокого порядка).

2. Результат совпадает с классическим.

Есть еще аналогичный случай в квантовой теории: формула Резерфорда, описывающая дифференциальное сечение рассеяния в кулоновом поле, получается в приближении теории возмущений (борновском приближении) очень простым способом. Точный же квантовомеханический расчет дает тот же результат, что и теория возмущений. Причем он совпадает с классической формулой Резерфорда (следует отметить, что все это относится лишь к рассеянию частиц одного сорта на частице другого сорта, в случае рассеяния тождественных частиц формула Резерфорда заменяется формулой Мотта).

3. Приращение среднего значения энергии > 0, т. е. колебательная система является отсасывателем энергии (гармонические колебания не дают усиления – как усилители могут работать лишь негармонические колебания, например спектры атомов существенно неэквидистантны, что и используется при усилении – лазеры).

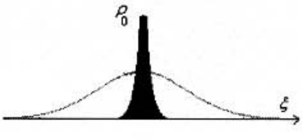
4. Сам результат по величине зависит от длительности действия силы и от величины силы. Например, если время действия силы τ намного больше классического периода колебаний T, т. е. $\omega\tau >> 1$, то влияние осциллирующего члена $e^{i\omega t}$ при интегрировании столь велико, что интеграл становится очень малой величиной – экспоненциально малая передача энергии (и соответствующие вероятности переходов) в этом «адиабатическом» случае, хотя сама величина силы может быть значительной. В связи с этим все воздействия на систему делят на 4 предельных класса: сильные, слабые, адиабатические, ударные (внезапные).

Колебания вакуума и колебания с 1фононом

$$\psi_0(x) = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-\xi^2/2} ,$$

$$\psi_1(x) = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-\xi^2/2} \sqrt{2}\xi , \qquad \xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x ,$$

$$\rho_0(x) = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-\xi^2} ,$$



$$\rho_1(x) = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-\xi^2} 2\xi^2 .$$

В классическом случае в состоянии с наименьшей энергией частицы покоятся, т. е. $\rho_0(x) = \delta(x)$, так что сравнение этих двух описаний соответствующих устойчивым состояниям, показывает, что квантовые нулевые колебания размывают $\delta(x)$ в гауссову кривую. Можно, однако, сравнивать квантовые колебания с соответствующими классическими с той же самой энергией. В этом случае классическому закону движения $x = A\sin(\omega t + \alpha)$ соответствует вероятность найти частицу в dx

$$dW = \frac{dt}{T/2} = \frac{2dt}{T} = \frac{2}{T|v|}dx \ ,$$

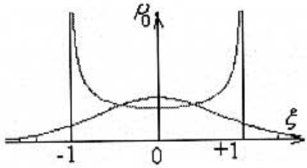
$$v = \dot{x} = \omega\cos(\omega t + \alpha) \ ,$$

$$|v| = \omega\sqrt{A - x^2} \ , \qquad E = \frac{m\omega^2 A^2}{2} \ ,$$

$$dW = \frac{dx}{\pi\sqrt{A^2 - x^2}} \quad , \quad A^2 = \frac{2E}{m\omega^2} = \frac{2\hbar}{m\omega}(n + 1/2) \ ,$$

$$\rho_n^{кл}(x) = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \frac{1}{\sqrt{\pi}\sqrt{2n+1-\xi^2}} \ ,$$

1. $E = E_0 = \dfrac{\hbar\omega}{2}$, $n = 0$,

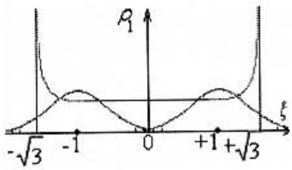


$$\rho_0(x) = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-\xi^2} \ ,$$

$$\rho_0^{кл}(x) = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\sqrt{1-\xi^2}} \ .$$

2. Состояние с одним фононом

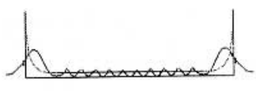
$$E = E_1 = \frac{3\hbar\omega}{2}, \quad n = 1 \ ,$$



$$\rho_1(x) = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-\xi^2} 2\xi^2 \ ,$$

$$\rho_1^{кл}(x) = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\sqrt{3-\xi^2}}$$

3. Для многофононного состояния
   (число фононов равно числу узлов)



На плавную среднюю кривую, соответствующую $\rho_n^{кл}(x)$,

накладываются квантовые осцилляции $\rho_n(x)$.

Нулевые колебания

Прежде всего, отметим еще раз те физические системы, в которых имеются малые колебания гармонического типа (возможны и случаи малых колебаний негармонических) и которые, тем самым, непосредственно описываются как идеальный газ квазичастиц фононного типа (в классической картине – газ осцилляторов).

1. Электромагнитное поле допускает разложение на элементарные колебания – главные колебания (моды), характеризуемые поляризацией, волновым вектором и соответствующей частотой.
Кванты колебаний мод с частотой ω - фотоны.

2. Кристаллическая решетка отвечает гармоническим колебаниям лишь для не очень больших энергий (мало фононов), когда же возбуждение (например, термическое) велико (много фононов), то существенны ангармонизмы (столкновения, взаимодействие фононов). Ангармонизмы определяют также и некоторые эффекты целиком (например, тепловое расширение решетки). Соответствующие главные колебания характеризуются поляризацией, волновым вектором и частотой и им соответствуют квантованные колебания (точнее, волны) – фононы. В однофононном состоянии для определенной частоты участвует в колебании вся решетка (локализованные колебания отвечают состояниям с неопределенным большим числом фононов).

3. Колебания атомов в молекуле.

4. Колебания нуклонов в ядре.

5. Колебания в плазме.

6. Заряд в постоянном однородном магнитном поле.

Отметим физические явления, обязанные своим существованием чисто квантовому эффекту нулевых колебаний.
В состоянии нулевых колебаний, когда нет фононов ($n = 0$) и энергия

$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$, амплитуда колебаний $\Delta x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$.

1. В электромагнитном поле колебание вакуума вызывает появление спонтанного излучения атомных систем. Другое явление – лэмбовский сдвиг атомных уровней энергии.
Например, уровни энергии атома водорода

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2 n^2} \; (n = 1,2,\ldots) \text{ являются}$$

приближенными (учитываем лишь кулоновское взаимодействие точечных зарядов, лишенных других свойств). Учет спина электрона, магн. момента ядра, релятивистских поправок и т. д. приводит к появлению более тонких структур уровней энергии. Однако, если учесть окружающий атом вакуум квантованных полей, то это дает дополнительное изменение спектра – лэмбовский сдвиг.

Наконец, теория Дирака предсказывает существование у электрона собственного магнитного момента, равного магнетону Бора $\mu_B = \frac{|e|\hbar}{2mc}$.

Учет же вакуума приводит к поправкам, которые хотя и малы, но экспериментально обнаружены.

2. Нулевые колебания кристаллической решетки обычно в чистом виде не проявляются в силу большого термического возмущения колебаний, но при очень низких температурах решетка совершает именно нулевые колебания. Если они окажутся большими ($\gtrsim$ расстояния между атомами в решетке), то решетка может быть разрушена, т. е. тело остается жидким и при T=0 . Именно это и имеет место в гелии. Нулевые колебания могут разрушить кристаллическую решетку.

Правда, все же гелий можно заставить затвердеть, применяя достаточно большое давление ($\gtrsim$ 25 атм). Пояснение этого факта качественно можно провести по оценке амплитуды нулевых колебаний

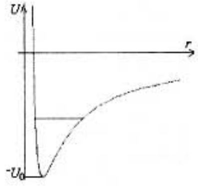
$$\Delta x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \text{, где}$$

частоту колебаний выразим через соотв. упругий коэффициент k

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \text{, тогда } \Delta x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{2\sqrt{mk}}} .$$

Значит, нулевые колебания тем больше, чем меньше масса и чем меньше k (слабое взаимодействие).

В самом благоприятном случае по массе (для водорода) взаимодействие слишком велико и Δx_0 очень малы, но уже для гелия мала и величина k (грубые качественные оценки: нужно иметь в виду, что все это касается лишь одного из главных колебаний системы с частотой собственной ω , а величина m лишь по порядку величины может сравниваться с массой атома), что дает большие Δx_0 для гелия.

3. 

Энергия диссоциации определяется не величиной U_0, а меньшей на энергию нулевых колебаний.

Теория стационарных возмущений

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 \ , \ \hat{H}_0\psi_n^0 = E_n^0\psi_n^0 \ ,$$

$\hat{H}\Psi_n = E_n\psi_n$ (без вырождения),

$$(E_n - \hat{H}^0)\Psi_n = \hat{H}_1\Psi_n \ .$$

Переходим в представление, где диагонален гамильтониан $\hat{H}^0$:

$$\Psi_n = \sum_\alpha c_\alpha \psi_\alpha^0 = \sum_\beta c_\beta \psi_\beta^0 \ ,$$

$$(E_n - \hat{H}^0)\sum_\alpha c_\alpha \psi_\alpha^0 = \hat{H}_1 \sum_\beta c_\beta \psi_\beta^0 \ ,$$

$$\sum_\alpha \psi_\alpha^0 c_\alpha (E_n - E_\alpha^0) = \sum_\alpha \psi_\alpha^0 \sum_\beta H_{1\alpha\beta} c_\beta \ ,$$

$$\boxed{c_\alpha (E_n - E_\alpha^0) = \sum_\beta H_{1\alpha\beta} c_\beta} \ .$$

1) $\alpha = n$

$$c_n (E_n - E_n^0) = \sum_\beta H_{1n\beta} c_\beta \ ,$$

$$E_n = E_n^0 + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \ldots \ ,$$

$$c_\alpha = c_\alpha^0 + c_\alpha^{(1)} + c_\alpha^{(2)} + \ldots \ ,$$

в первом приближении $c_n^0 (E_n^{(1)}) = \sum_\beta H_{1n\beta} c_\beta^0$, но

$c_\alpha^0 = \delta_{\alpha n}$, так что

$$\boxed{E_n^{(1)} = H_{1nn}} \ ,$$

т. е. поправка первого приближения равна среднему значению возмущения в невозмущенном состоянии.

Напомним явный вид $H_{1nn} = (\psi_n, \hat{H}_1 \psi_n)$.

2) Рассматриваем случай $\alpha \neq n$ в первом же приближении

$$c_\alpha^{(1)}(E_n^0 - E_\alpha^0) = H_{1\alpha n} \ ,$$

$$\boxed{c_\alpha^{(1)} = \frac{H_{1\alpha n}}{E_n^0 - E_\alpha^0}}$$

. Можно также показать, что

$\operatorname{Re} c_n^{(1)} = 0$ и положить $c_n^{(1)} = 0$ (вклад в фазовый множитель).

3) Второе приближение при $\alpha = n$

$$(c_n^{(0)} + \cancel{c}_n^{(1)} + \cancel{c}_n^{(2)})(E_n^{(1)} + E_n^{(2)}) = \sum_\beta H_{1n\beta}(c_\beta^0 + c_\beta^{(1)}),$$

дают ↑ члены 3-го порядка

$$E_n^{(2)} = \sum_\beta H_{1n\beta} c_\beta^{(1)} \ ,$$

$$E_n^{(2)} = \sum_{\beta \neq n} H_{1n\beta} \frac{H_{1\beta n}}{E_n^0 - E_\beta^0} .$$

Окончательно результаты для E и Ψ можно записать так:

$$\boxed{E_n = E_n^0 + H_{1nn} + \sum_{n' \neq n} \frac{\left| H_{1nn'} \right|^2}{E_n^0 - E_{n'}^0}} \ ,$$

$$\boxed{\Psi_n = \psi_n^0 + \sum_{n' \neq n} \frac{H_{1n'n}}{E_n^0 - E_{n'}^0} \psi_{n'}^0} \ .$$

1. Условие применимости можно записать в виде малости недиагональных элементов оператора возмущения по сравнению с соответствующим расстоянием между невозмущенными уровнями энергии:

(*) $\left| H_{1nn'} \right| << \left| E_n^0 - E_{n'}^0 \right|$.

2. Предполагалось, что каждому значению энергии соответствует только одно состояние, т. е. вырождение отсутствует (для тех уровней, которые исследуются). Если же вырождение есть (или не выполнено условие (*)), то теория строится более сложным образом и здесь рассматриваться не будет.

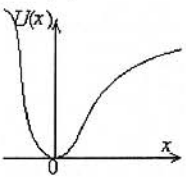
3. Поправка второго порядка к основному уровню энергии (заметим, что этот уровень не вырожден, вообще говоря) всегда отрицательна $E_0^{(2)} < 0$, что особенно важно, когда $H_{100} = 0$.

Ангармонизмы

В качестве примера применения теории стационарных возмущений рассмотрим учет ангармонизмов в системе, совершающей в нулевом приближении чисто гармонические колебания. Пояснить возникновение такой ситуации можно на примере движения частицы в потенциальном одномерном поле, имеющем минимум второго порядка (простой). Отсчитывая энергию от $U_{\min}$, а координату от соответствующей этому $\min$, имеем при разложении в ряд Тейлора

$$U(x) = \underset{\text{отсчет}}{\cancel{U}\overset{0}{(0)}} + x\underset{\min}{\cancel{U}'\overset{0}{(0)}} + \frac{x^2}{2}U''(0) + \frac{x^3}{6}U'''(0) + \frac{x^4}{24}U^{IV}(0)$$

$U''(0) > 0$



$$m\omega^2 = U''(0) \ ,$$

$$\alpha = \frac{1}{6}U'''(0) \ ,$$

$$\beta = \frac{1}{24}U^{IV}(0) \ ,$$

$$U(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2} + \alpha x^3 + \beta x^4 \ ,$$

ω имеет смысл классической частоты соответствующих гармонических колебаний, а члены порядка x^3 и x^4 нужно рассматривать совместно Если функция $U(x)$ четная, то все ее нечетные производные при $x = 0$ равны нулю, т. е. $\alpha = 0$. Именно для такого случая получим поправки к чисто гармоническим уровням энергии нулевого колебания.

Имеем, $\hat{H}_0 = \hbar\omega(\hat{n} + \frac{1}{2})$, $E_n^0 = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$,

$$\hat{H}_1 = \beta\hat{x}^4 = \beta(\Delta x_0)^4(\hat{a} + \hat{a}^+)^4 .$$

Необходимо найти поправки к уровням энергии гармонического осциллятора в первом приближении. На основе общей теории

$$E_n^{(1)} = H_{1nn} = \beta(\Delta x_0)^4 \left\langle n \middle| (a + a^+)^4 \middle| n \right\rangle \ ,$$

$$(\hat{a} + \hat{a}^+)^4 = a^4 + a^3a^+ + a^2a^+a + aa^+a^2 + a^+a^3 +$$

$$+ a^2a^{+2} + a^{+2}a^2 + aa^+aa^+ + a^+aa^+a + a^+a^2a^+ + aa^{+2}a +$$

$$+ aa^{+3} + a^+aa^{+2} + a^{+2}aa^+ + a^{+3}a + a^{+4} .$$

Средние значения вида $\left\langle n\middle|a^s a^{+t}\middle|n\right\rangle$ с разными перестановками a и a^+ отличны от нуля лишь в случае $s=t$, так что вклад в искомое среднее дают шесть средних слагаемых, содержащих равное число операторов рождения и уничтожения:

$$\left\langle n\middle|a^2 a^{+2}\middle|n\right\rangle = \sqrt{(n+1)(n+2)(n+2)(n+1)}\cdot\left\langle n\middle|n\right\rangle = (n+1)(n+2)\ ,$$

$$\left\langle n\middle|a^{+2} a^2\middle|n\right\rangle = \sqrt{n(n-1)(n-1)n} = n(n-1)\ ,$$

$$\left\langle n\middle|aa^+ aa^+\middle|n\right\rangle = \left\langle n\middle|(\hat{n}+1)(\hat{n}+1)\middle|n\right\rangle = (n+1)^2\ ,$$

$$\left\langle n\middle|a^+ aa^+ a\middle|n\right\rangle = \left\langle n\middle|\hat{n}\hat{n}\middle|n\right\rangle = n^2\ ,$$

$$\left\langle n\middle|a^+ a^2 a^+\middle|n\right\rangle = \left\langle n\middle|\hat{n}(\hat{n}+1)\middle|n\right\rangle = n(n+1)\ ,$$

$$\left\langle n\middle|aa^{+2} a\middle|n\right\rangle = \left\langle n\middle|(\hat{n}+1)\hat{n}\middle|n\right\rangle = n(n+1),\quad \text{так что}$$

$$\left\langle n\middle|(a+a^+)^2\middle|n\right\rangle = (n+1)(n+2)+n(n-1)+(n+1)^2+n^2+2n(n+1) =$$
$$= n^2+3n+2+n^2-n+(2n+1)^2 = 6n^2+6n+3\,,$$

а

$$(\Delta x_0)^4 = \frac{\hbar^2}{4m^2\omega^2}\,.$$

Окончательно

$$\boxed{E_n^{(1)} = \frac{3}{2}\beta\frac{\hbar^2}{m^2\omega^2}(n^2+n+\frac{1}{2})}\text{, где}$$

$$\beta = \frac{U^{IV}(0)}{24}\ .$$

Исследование показывает, что условием применимости является малость поправки по сравнению со значением энергии нулевого колебания.

Момент

Вначале рассматриваем момент импульса отдельной частицы (орбитальный механический момент частицы)

$\hat{\vec{M}} = [\hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}]$. (С некоторыми его свойствами уже знакомились при

$\hat{M}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y$, рассмотрении связи законов сохранения со свойствами

$\hat{M}_y = \hat{z}p_x - \hat{x}\hat{p}_z$, симметрии, а также при нахождении преобразования

$\hat{M}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$, вращения.)

$$\hat{\vec{M}}^2 = \hat{M}_x^2 + \hat{M}_y^2 + \hat{M}_z^2 ,$$

$$[\hat{M}_x, \hat{M}_z] = [yp_z - zp_y, zp_x - xp_z] = yp_x[p_z z] + p_y x[z, p_z] =$$

$$= \frac{\hbar}{i}(yp_x - xp_y) = i\hbar(xp_y - yp_x) = i\hbar M_z ,$$

$\boxed{[\hat{M}_x \hat{M}_y] = i\hbar \hat{M}_z}$. Отсутствуют состояния с определенным $\vec{M}$ или

$\boxed{[\hat{M}_y \hat{M}_z] = i\hbar \hat{M}_x}$. даже с парой проекций (кроме случая, когда все

$\boxed{[\hat{M}_z \hat{M}_x] = i\hbar \hat{M}_y}$. они равны нулю).

В то же время $\hat{\vec{M}}^2$ коммутирует со всеми проекциями:

$$[\hat{\vec{M}}^2, \hat{M}_x] = [M_y^2 + M_z^2, M_x] = M_y[M_y M_x] + [M_y M_x]M_y +$$
$$+ M_z[M_z M_x] + [M_z M_x]M_z =$$
$$= -i\hbar M_y M_z - i\hbar M_z M_y + i\hbar M_z M_y + i\hbar M_y M_z = 0 .$$

Только на основании этих правил коммутации можно построить строгую теорию момента, которая дает следующие результаты квантования проекций и квадрата момента.

Каждая проекция принимает значения (пример - M_z)

$$\boxed{M_z = \hbar m} , \; m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm l .$$

Магнитное квантовое число m (название связано с его проявлением в магнитном моменте – связь механического и магнитного момента – квантуется соответствующий магнитный момент).

Максимальное значение проекции момента в единицах $\hbar$ называют моментом (в узком, численном смысле слова): говорят, что момент равен l.
Квантовое число l - орбитальное число принимает значения $l = 0,1,2,...$ (старое название азимутальное квантовое число), характеризует интенсивность вращения и квантует квадрат момента:

$$\boxed{\vec{M}^2 = \hbar^2 l(l+1)} \ .$$

Следует сделать некоторые замечания.
1. Вообще говоря, наряду с рассмотренным состоянием, где заданы величины $\vec{M}^2$ и M_z, что приводит к естественному ограничению на магнитное квантовое число m ($|m| \le l$), возможно и состояние, где определенное значение имеет только проекция M_z (квадрат момента может и не сохраняться, например, в поле аксиальной симметрии), когда $m = 0,\pm1,\pm2,...$ без ограничения (в этом случае $|m|$ характеризует интенсивность вращения).

2. В общей теории момента получается нечто большее, а именно: возможные значения l не ограничены целыми числами, а допустимы и полуцелые числа l (соответственно и значения m будут целыми и полуцелыми), но в орбитальном движении реализуются не все возможности, как будет непосредственно показано ниже. В случае же внутреннего момента (спинового) возможны все случаи, что и будет оговорено далее.

Квантование проекций момента
Переходя к сферической системе координат

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

и замечая, что
$$\frac{\partial\Psi}{\partial\varphi} = \frac{\partial\Psi}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial\varphi} + \frac{\partial\Psi}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial\varphi} + \frac{\partial\Psi}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial\varphi} =$$

$$= x\frac{\partial\Psi}{\partial y} - y\frac{\partial\Psi}{\partial x} \text{ в силу } \frac{\partial y}{\partial\varphi} = x, \ \frac{\partial x}{\partial\varphi} = -y ,$$

имеем $$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}=x\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}=\hat{M}_z\ .$$

Таким образом, в координатном представлении для отдельной проекции момента (в сферической системе M_z наиболее удобна) задача о с. зн. и с. ф. решается просто:

$$\hat{M}_z\psi=M_z\psi\ ,\quad \frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}=M_z\psi\ ,\quad \psi_{M_z}(\varphi)=ce^{\frac{i}{\hbar}M_z\varphi}\quad .$$

Нормировка $\int\limits_0^{2\pi}d\varphi\left|\psi_{M_z}(\varphi)\right|^2=1$ дает

$\psi_{M_z}(\varphi)=\dfrac{e^{i\frac{M_z\varphi}{\hbar}}}{\sqrt{2\pi}}$, а

условие однозначности функции $\psi(\varphi)$ в каждой точке, которой соответствует как φ, так и $\varphi+2\pi$,

$\psi_{M_z}(\varphi)=\psi_{M_z}(\varphi+2\pi)$, дает

$e^{\frac{i}{\hbar}M_z 2\pi}=1$, так что $M_z=\hbar m$, где

$m=0,\pm1,\pm2,\ldots$.

Таким образом,

$$\boxed{\psi_m(\varphi)=\frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}},$$

$$\boxed{M_z=\hbar m, m=0,\pm1,\pm2,\ldots}\ .$$

Сам же результат квантования относится, разумеется, к любой оси.

Квантование квадрата момента

Если выразить в сферических координатах $\hat{M}_x$ и $\hat{M}_y$, а затем подставить совместно с $\hat{M}_z=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}$ в $\vec{M}^2=\hat{M}_x^2+\hat{M}_y^2+\hat{M}_z^2$, то получается простая связь с угловой частью оператора Лапласа

$$\boxed{\hat{\vec{M}}^2=-\hbar^2\Delta_{\theta,\varphi}}\ .$$

Выражения для $\hat{M}_x$ и $\hat{M}_y$ не очень громоздки, но приводиться не будут, как и сам вывод формулы для $\hat{\vec{M}}^2$.

Напомним, что $\Delta_{\theta,\varphi} = \dfrac{1}{\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\dfrac{\partial}{\partial\theta} + \dfrac{1}{\sin^2\theta}\dfrac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$.

Таким образом, решение задачи о с. зн. и с. ф. $\hat{\vec{M}}^2$

$$\hat{\vec{M}}^2\Psi = \vec{M}^2\Psi$$

сводится к решению уравнения для шаровых функций самого общего вида

$$\Delta_{\theta,\varphi}\Psi + \frac{\vec{M}^2}{\hbar^2}\Psi = 0 \ .$$

Решение удовлетворяет условию конечности (особые точки $\theta = 0, \pi$) лишь при

$\vec{M}^2 = \hbar^2 l(l+1)$, где $l = 0,1,2,\ldots$.

Если же рассматривать задачу о совместных определенных значениях $\vec{M}^2$ и M_z, то из всех с. ф. $\vec{M}^2$ отбираются те, которые принадлежат и M_z - это сферические функции

$$Y_{lm}(\theta,\varphi) = c_{ml}P_l^m(\cos\theta)\frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}},$$

содержащие присоединенные функции Лежандра

$P_l^m(\cos\theta)$, связанные с полиномами

Лежандра $P_l(z) = P_l^0(z)$.

При этом возникает ограничение $|m| \le l$, указанное выше. Сама же задача о совместных состояниях $\vec{M}^2$ и M_z важна для теории стационарных состояний в поле сферической симметрии, в частности кулоновом поле.

Еще раз подчеркнем, что когда говорят о «моменте», то в широком смысле имеется в виду (для одной частицы, например) $\hat{\vec{M}}$ или ($\hat{M}_x, \hat{M}_y, \hat{M}_z$ и $\hat{\vec{M}}^2$), а в узком смысле имеется в виду $\boxed{l}$. Момент равен 4, т. е.

$\vec{M}^2 = \hbar^2 4\cdot 5 = 20\hbar^2$, а $M_z^{\max} = 4\hbar$.

Механические моменты системы

Все рассматриваемые ниже меры вращательного движения системы, как внутренние – спиновые, так и внешние – орбитальные, обладают общими свойствами, заключающимися в единых для всех случаев правилах коммутации, которые для орбитальных величин получаются непосредственно, а для внутренних – на основе теории групп.

Реализуются же разные возможности. Так, орб. момент частицы, как было показано, реализуют целые l, а для системы частиц этот же факт следует из правила сложения моментов, которое также приводиться не будет ($|l_1 - l_2| \le l \le l_1 + l_2$).

Итак, в системе частиц вводятся следующие механические моменты.

1. Момент импульса частицы (орб. момент частицы):

$$\hat{\vec{M}} = [\hat{\vec{r}}\hat{\vec{p}}],\ \vec{M}^2 = \hbar^2 l(l+1), l = 0,1,2,\ldots,$$

$$M_z = \hbar m, m = 0,\pm1,\pm2,\ldots(\pm l).$$

2. Момент системы (аддитивная величина):

$$\hat{\vec{M}} = \sum_a [\hat{\vec{r}}_a \hat{\vec{p}}_a],\ \vec{M}^2 = \hbar^2 L(L+1), L = 0,1,\ldots,$$

$$M_z = \hbar M, M = 0,\pm1,\pm2,\ldots(\pm L).$$

3. Внутренний момент частицы (спин):

$$\hat{\vec{M}}_{cn} = \hbar\hat{\vec{s}},\ \vec{s}^2 = s(s+1),$$

$s_z = 0,\pm1,\pm2,\pm3,\ldots,\pm s$ для s целых,

$s_z = -s,-s+1,\ldots,s-1,s$ в общем случае

(в частности, для $s = \dfrac{1}{2}$ $\quad \vec{s}^2 = \dfrac{3}{4}$,

$s_z = \pm\dfrac{1}{2}$).

4. Внутренний момент системы (спин):

$$\hat{\vec{M}}_{cn} = \hbar\sum_{a=1}^{N}\hat{\vec{s}}_a,\ \vec{s}^2 = s(s+1),$$

$$s_z = -s,\ldots,+s.$$

5. Полный момент частицы:

$$\hat{\vec{M}}_{пол} = \hbar\hat{\vec{j}}\ ,\ \vec{j}^2 = j(j+1),$$

$$|l-s| \le j \le (l+s)\ .$$

6. Полный момент системы:

$$\hat{\vec{M}}_{пол} = \hbar\hat{\vec{J}}\ ,\ \vec{J}^2 = J(J+1),$$

$$|L-S| \le J \le (L+S)\ .$$

Следует отметить, что между спином и орбитальным моментом имеется существенное различие (помимо уже отмеченного: орбитальный момент реализуют целые значения, а спиновый – и целые, и полуцелые): орбитальный момент может у одной и той же частицы в зависимости от начальных условий (или текущих) движения быть различным, может возбуждаться, а спин является внутренним свойством частицы, фиксируется, принадлежит к числу ее характеристик (по крайней мере, с современной точки зрения, хотя есть основания полагать, что разные элементарные частицы, в частности, с разным спином, представляют собой лишь различным образом возбужденные, в частности, по вращению, состояния единого, или некоторого сорта, поля).

Среди всех частиц особую роль играют частицы со спином $\frac{1}{2}$ (к ним, в частности, относятся электрон, протон и нейтрон с их античастицами). Для этих частиц удобно ввести операторы момента в единицах естественного для них кванта $\frac{\hbar}{2}$:

$$\hat{\vec{M}}_{сп} = \frac{\hbar}{2}\hat{\vec{\sigma}},\ \text{где}\ \vec{\sigma}^2 = 2, \sigma_z = \pm 1\ .$$

Матрицы $\vec{\sigma}$ были введены Паули. Наиболее простой вид они имеют в представлении, где диагональна σ_z:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},\ \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix},\ \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Последовательная теория движения частицы со спином $\frac{1}{2}$ была создана (в рамках механики, т. е. квазирелятивистская теория) Дираком. Можно сказать, что его теория относится к некоторым частицам со спином $\frac{1}{2}$ (электронам и позитронам).
Достижением теории Дирака было предсказание правильной величины <u>магнитного момента электрона</u>

$$\hat{\vec{\mathfrak{m}}} = -\mu_B \hat{\vec{\sigma}},$$

где магнетон Бора $\mu_B = \dfrac{|e|\hbar}{2mc}$.

В дальнейшем, с развитием последовательной теории – квантовой электродинамики – было уточнено это значение.
Однако для других частиц более сложной природы (протона, нейтрона) теория Дирака оказалась неверной. Правда, она предсказывает порядки величин. Так, для протона можно ввести по аналогии с электроном квант собственного магнитного момента – ядерный магнетон

$$\mu_Я = \frac{|e|\hbar}{2m_p c},$$

который в $\sim 10^3$ раз меньше μ_B.

Фактически же протон имеет с. м. м. в 2,8 раза больший:

$$\hat{\vec{\mathfrak{m}}}_p = 2{,}8\mu_Я \hat{\vec{\sigma}},$$

а у нейтрона (хотя формально у него заряд = 0, но в силу нестабильности основной вклад вносит примесь электрона с зарядом е < 0)

$$\hat{\vec{\mathfrak{m}}}_n = -1{,}9\mu_Я \hat{\vec{\sigma}} .$$

(Нужно отметить, что $\mu_Я$ имеет и самостоятельный смысл кванта орбитального магнитного момента протона.)
Современная кварковая гипотеза объясняет такие значения момента протона и нейтрона на основе сложения моментов соответствующих кварков.

Принцип тождественности одинаковых частиц

Одна из возможностей состоит в том, что все частицы одного сорта можно считать тождественными.

$\Psi(\xi_1 ... \xi_N)$, $\xi \equiv \vec{r}, s_z$ или другой одночастичный полный набор.

Если поменять в в. ф. аргументы местами, что соответствует перемене местами частиц, то в. ф. не должна существенно измениться, т. е. в крайнем случае появится фазовый множитель. Найдем его.

Вводится оператор перестановки некоторой пары частиц $\hat{P}_{\alpha\beta}$:

$$\hat{P}_{\alpha\beta}\Psi(\xi_1\xi_\alpha\xi_\beta\xi_N) \equiv \Psi(\xi_1...\xi_\beta\xi_\alpha...\xi_N)$$

Его с. зн. и с. ф. из $\hat{P}_{\alpha\beta}\Psi = \lambda\Psi$, в силу $\hat{P}^2_{\alpha\beta} = 1$,

$\lambda^2 = 1$, т. е.

1) $\lambda = +1$,

$$\hat{P}_{\alpha\beta}\Psi(\xi_\alpha\xi_\beta) = \Psi(\xi_\beta\xi_\alpha) = \Psi(\xi_\alpha\xi_\beta)$$

симметрия относительно перестановки аргументов;

2) $\lambda = -1$,

$$\hat{P}_{\alpha\beta}\Psi(\xi_\alpha\xi_\beta) = \Psi(\xi_\beta\xi_\alpha) = -\Psi(\xi_\alpha\xi_\beta)$$

антисимметрия относительно перестановки аргументов.

(Фактически при выводе можно явно и не вводить $\hat{P}_{\alpha\beta}$, <u>иначе нужно оговаривать, что фактически в. ф. должна быть его с. ф.</u>)

Другая сторона вопроса заключается в инвариантности гамильтониана относительно перестановки частиц, что приводит к сохранению свойств симметрии в. ф.

Кроме того, невозможна смешанная симметрия одного сорта частиц.

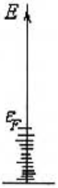
Итак, предположение о тождественности частиц одного сорта приводит к двум возможным типам симметрии в. ф. системы таких частиц относительно их всевозможных перестановок.

Остается вопрос о том, связана ли эта симметрия с природой частиц или с начальными условиями движения.

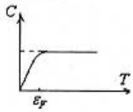
<u>Паули в 1939 году</u> в рамках квантовой теории поля установил теорему о связи «спина со статистикой», т. е. связи между свойствами симметрии в. ф. и спином частиц.

Оказалось, что для частиц со спином, равным нулю или целому числу, т. е. $s = 0,1,2,\ldots$, волновые функции обладают симметрией относительно перестановок аргументов.
Эти частицы называют бозонами (бозе-частицами, частицами Бозе).
Их коллективы описываются статистикой Бозе-Эйнштейна (в каждом одночастичном квантовом состоянии может находиться любое число частиц).
К числу бозонов относятся среди элементарных (и квази-) частиц: мезоны (например, π - и k -мезоны имеют $s = 0$), фотон (условно говорят об $s = 1$, хотя фактически нет системы координат, где можно было бы в чистом виде, остановив фотон, рассмотреть его спин – рассматривают общий (полный) его момент, который оказывается целочисленным, фактически его внутреннее свойство характеризуется двумя направлениями поляризации), фононы (три направления поляризации) и другие квазичастицы фононного типа, экситоны, гравитон (спин $s = 2$). О более сложных частицах – далее.
Для частиц же с полуцелым спином $s = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \ldots$ волновые функции антисимметричны.
Это фермионы (ферми-частицы, частицы Ферми).
Их коллектив описывается статистикой Ферми-Дирака.
Здесь основную роль играет принцип Паули (запрета): нельзя обнаружить два фермиона (и более) в одном состоянии:
$\Psi(\ldots\xi_\alpha\ldots\xi_\alpha\ldots) = -\Psi(\ldots\xi_\alpha\ldots\xi_\alpha\ldots)$ для $\beta = \alpha$,
так что $\Psi(\ldots\xi_\alpha\ldots\xi_\alpha\ldots) = 0$, а значит, и вероятность обнаружить такие одинаковые полные наборы равна нулю. С физической точки зрения этот факт означает некоторое отталкивание (проявление обменного в широком смысле слова взаимодействия). Этому факту нет формально полной аналогии в статистике Бозе-Эйнштейна, но фактически существует и в бозе-системе эффективное взаимодействие (несиловое) в форме притяжения (если частицам разрешено скапливаться в низком состоянии, то уж они этим стараются воспользоваться: как зеваки собираются в толпу. Примерами фермионов являются среди элементарных (и квази-) частиц: лептоны (два вида нейтрино, мюон, электрон и их античастицы), барионы (в частности, нуклоны), причем если все перечисленные частицы имеют $s = \frac{1}{2}$, то среди барионов (гиперонов) есть частицы с большим полуцелым спином ($\frac{3}{2}$), но они нестабильны, дырки и электроны проводимости в полупроводниках и металлах, поляроны.

Соответствующие газы частиц обладают весьма интересными свойствами при низких температурах. В ферми-газе при понижении т-ры заполняются все состояния вплоть до некоторых граничных с энергией Ферми ε_F :

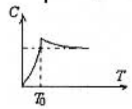


Газ очень стабилен (плотная толпа людей).



В возбуждениях механических и термических участвуют лишь фермионы в окрестности энергии Ферми.
Теплоемкость, например, очень мала.

В бозе-газе при понижении температуры частицы начинают скапливаться в основном состоянии. Причем при некоторой т-ре T_0 их там уже скапливается макроскопическое число, сравнимое с полным числом частиц в газе, возникает явление бозе-конденсации в основное состояние, связанное в идеальном газе с фазовым переходом 3-го рода (излом теплоемкости) (в общем случае).



В жидкостях (^4He) – фазовый переход 2-го рода (бесконечный скачок теплоемкости).

Статистику сложных частиц (ядер, атомов, ионов, молекул) можно определить по числу входящих в них фермионов в связи с перестановкой частиц, эквивалентной некоторому числу перестановок фермионов: если их полное число четное – бозон, а если нечетное – фермион. Так, изотоп водорода протий – бозон, дейтерий – фермион, тритий – бозон, ^4He бозон, а ^3He - фермион, α -частица – бозон и т. д.
У ферми-поля нет классического аналога, так как в каждом состоянии не может быть много частиц. Таким образом, квантование классических систем (полей) не может привести к ферми-полю, а дает лишь примеры бозе-полей (модель осцилляторов).

Две стадии квантования. Вторичное квантование поля вероятности и переход к полевым операторам рождения и уничтожения. Введение неопределенного числа частиц. Сравнение квантования осциллятора с квантованием вторичным.

ПРИЛОЖЕНИЕ
О квантовой механике и ее творцах

Возникновение соотношения неопределенностей – одна из лучших страниц в истории квантовой революции. Она, как притча, навечно годная впрок.

Д.С.Данин

Мир можно созерцать p-глазом или q-глазом, если же открыть оба, то запутаешься.

Вольфганг Паули

Странность грамматики микромира в том и заключается, что классически несовместимым образам или понятиям природа предоставила право дополнять друг друга – не исключать, а дополнять. Доведено до крайности, до полной несовместимости, зло противоречивости превращается в благо **дополнительности**.

Д.С.Данин

Замечательная математическая формула для связи неопределенностей ясно показала, что совместное знание несовместимого возможно с ограничениями, которых не устранить. И для полноты описания изменчивой, вероятностной микрореальности надо выводить на сцену взаимоисключающие картины явления как **дополнительные**. Без этого охватить пониманием целое не удается.

Д.С.Данин

До конца своих дней Нильс Бор постоянно убеждал ученых коллег из других областей знания – биологов, психологов, языковедов, историков культуры, – что принцип дополнительности может и для них служить путеводной нитью. Короче: он придавал этому принципу общефилософское значение. И с течением времени все больше исследователей приходило к признанию его правоты.

Д.С.Данин

В атомной физике слово «дополнительность» употребляют, чтобы характеризовать связь между данными, которые получены при разных условиях опыта и могут быть наглядно истолкованы лишь на основе взаимно исключающих друг друга представлений.

Нильс Бор

Бор ввел понятие дополнительности. Он был настолько заворожен этим новым методом рассуждений, что пытался приложить его к некоторым другим аспектам человеческого мышления, например к проблеме свободного волеизъявления. Чувство личной свободы в процессе принятия решения есть опытный факт, такой же ясный и реальный, как любой другой. Однако, когда этот процесс анализируется прослеживанием каждой ступени возникновения решения и причинных связей, явление свободного решения перестает быть очевидным. Похожую дополнительность Бор видел в хорошо известном парадоксе размышления о процессе мышления, а также в сопоставлении рассуждения и действия. Мы не можем анализировать реальный мыслительный процесс, совершающий этот самый анализ; мы не можем действовать, если постоянно думаем о возможных следствиях наших действий; у нас нет времени рассуждать в процессе действия.

В.Вайскопф

Для теоретической физики это было замечательное время. Создавалась квантовая механика, и сейчас очень трудно представить, насколько быстро все произошло – фактически за два года.

Рудольф Пайерлс

Самая совершенная теория, теория, описывающая огромный круг явлений природы, не совершенна в том смысле, что сама она не содержит границ своей применимости. Границы применимости теории становятся ясны только тогда, когда создана более общая теория…
Построение новой теории приводит не к отмене старой, а к тому, что старая теория оказывается частным (предельным) случаем новой.

М.И.Каганов

Поиски сообща – великий стимулятор. И нигде не ценили этого так высоко, как в копенгагенской школе Бора или московской школе Ландау. Но надо уметь разлучаться – отправляться в умственное одиночество.

Д.С.Данин

Без способности к умственному одиночеству культура была бы невозможна.

Бертран Рассел

Вся история науки доказывает на каждом шагу, что в конце концов постоянно бывает прав одинокий ученый, видящий то, что другие своевременно осознать и оценить были не в состоянии.

В.И.Вернадский

П.Дирак был великим человеком, но малополезным для любого студента. Беседовать с ним было нельзя, а если вы и разговаривали с ним, он только слушал и говорил: «Да». С точки зрения студента, разговоры с П.Дираком были потерянным временем.

В.Вайскопф

Квантовая лестница позволяет раскрывать структуру Вселенной шаг за шагом. При исследовании явления на уровне энергии атомов нас не должна беспокоить внутренняя структура ядер; когда же мы изучаем механику газов, для нас не имеет значения внутреннее строение атомов. В первом случае можно рассматривать ядра как идентичные неизменяемые объекты, т е. как элементарные частицы; во втором случае так же можно рассматривать каждый атом. Таким образом, наблюдаемые явления становятся проще, они понятные без знания внутренней структуры отдельных частей системы, пока энергия, играющая основную роль, настолько мала, что эти части можно рассматривать как инертные объекты.

В.Вайскопф

Студенты могут воспринять дух науки лишь при условии, что будут сталкиваться с нерешенными проблемами, участвовать в анализе фактов, отбирать доказательства, строить и проверять новые подходы и идеи. Даже на более низких уровнях обучения научная активность должна играть возрастающую роль. Интеллектуальная игра, связанная с простыми явлениями природы, благоприятствует более глубокому пониманию окружающего мира и приносит радость открытия.

В.Вайскопф

Одно несомненно: в ультрамикромире нас будут ждать не старые радости возвращенной классики, а новые неслыханные удивления. И новые великие огорчения, из которых вырастет радость нового непредвиденного знания.
Д.С.Данин

ПОСЛЕСЛОВИЕ

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

Так появились третья и четвертая части конспекта этих лекций.

Нужно иметь в виду, что эти две части лекций читались 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, раскрыл некоторые сокращения и 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 четверта

Навчальний посібник

Відповідальний за випуск Г.І.Рашба

Підп. до друку 11.02.2011. 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)

<u>К 200-летию Харьковского университета</u>

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. НА УНИВЕРСИТЕТСКОЙ. – 2002, 2007.
3. В.В.Ульянов. АНАТОЛИЙ ГАВРИЛОВИЧ КЛАДКОВОЙ (Мой друг Толька). – 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. II. 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.III. 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.

Никогда еще ни одно фантастическое открытие в чистой и бескорыстной теории не отзывалось так скоро и таким громким эхом, как возникновение дважды непонятной механики микромира в середине 20-х годов.

Д.С.Данин