

Семинар 3. Непрерывный спектр.

Антоненко Даниил

24 сентября 2016

Поток вероятности

Как известно, квадрат модуля волновой функции $|\psi^2(\mathbf{r})|$ имеет смысл плотности вероятности обнаружения частицы в точке $\mathbf{r}$, что может быть понято путём усреднения оператора $\widehat{P(x_0)} = \delta(x_0 - \hat{x})$ плотности вероятности частицы в точке x по вектору состояния $|\psi\rangle$:

$$p(x_0) = \langle \psi | \delta(x_0 - \hat{x}) | \psi \rangle = \int dx \psi^*(x) \delta(x_0 - x) \psi(x) = |\psi(x_0)|^2.$$

Найдем выражение для *плотности потока вероятности* $\mathbf{j}(\mathbf{r})$. Должно выполняться условие непрерывности:

$$\partial_t (|\psi|^2) + \operatorname{div} \mathbf{j} = 0.$$

Воспользуемся уравнением Шредингера $i\hbar \partial_t \psi = -\hbar^2/(2m) \nabla^2 \psi + V\psi$:

$$\partial_t (\psi^* \psi) = \hbar \frac{-i\psi^* (-\nabla^2 \psi) + i(-\nabla^2 \psi^*) \psi}{2m} = \frac{i\hbar}{2m} \nabla [\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*].$$

Таким образом, должно выполняться

$$\operatorname{div} \mathbf{j} = -\frac{i\hbar}{2m} \operatorname{div} [\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*].$$

Согласно принципу бритвы Оккама, положим также $\operatorname{rot} \mathbf{j} = 0$, отказавшись от бессмысленных вихревых потоков вероятности. Тогда

$$\boxed{\mathbf{j} = -\frac{i\hbar}{2m} [\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*].}$$

Это выражение напоминает среднее от оператора импульса, что неудивительно. Отличие состоит в том, что для среднего оператора импульса необходимо вычислить интеграл $\int dr \psi^* (-i\hbar \nabla) \psi$, а плотность потока вероятности — величина *локальная*. Второй член восстанавливает вещественность $\mathbf{j}$.

Задача рассеяния

Рассмотрим одномерную задачу рассеяния. Квантовая частица с импульсом p налетает на потенциальный барьер $V(x)$ (будем считать, что $V(-\infty) \rightarrow 0$, $V(+\infty) \rightarrow V_0$) и с какой-то амплитудой проходит, с какой-то — отражается. Будем считать, что налетающая частица обладает хорошо определенным импульсом $p > 0$, тогда она движется слева направо. Так как энергия сохраняется, то решение временного уравнения Шредингера $\tilde{\psi}(x)$ можно представить в виде $\tilde{\psi}(x) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$, причём $\psi(x)$ удовлетворяет стационарному уравнению Шредингера с энергией $E = p^2/2m$. Пусть $E > V$ (иначе частица не может уйти на правую бесконечность и присутствует там лишь в виде экспоненциально малого хвоста). Будем искать решение в виде:

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ipx} + re^{-ipx}, & x < 0, \\ te^{ip'x}, & x > 0. \end{cases}$$

Здесь $p' = \sqrt{2m(E - V_0)}$. Поток вероятности в набегающей волне равен p/m , в прошедшей $|t|^2 p'/m$, в отражённой — $|r|^2 p/m$. Тогда коэффициенты прохождения и отражения равны, соответственно,

$$\boxed{T = \frac{p'}{p} |t|^2, \quad R = |r|^2.}$$

Рассеяние на δ -яме

Пусть $V = -\alpha\delta(x)$, $E = p^2/2m > 0$. Проинтегрировав УШ, имеем:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\psi'(+\epsilon) - \psi'(-\epsilon)) - \alpha\psi(0) = E \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \psi(x)dx \rightarrow 0, \quad \epsilon \rightarrow 0.$$

Дополняя условием непрерывности самой функции в 0, имеем систему

$$\begin{cases} 1 + r = t, \\ ipt - (ip - ipr) = -2\kappa t, \end{cases}$$

где $\kappa = m\alpha/\hbar$. Решая, получим:

$$\begin{cases} t = \frac{p}{p - i\kappa}, \\ r = \frac{i\kappa}{p - i\kappa}. \end{cases}$$

Амплитуды рассеяния имеют полюс при комплексном значении p соответствующему отрицательной энергии $-E^*$, отвечающей связанному состоянию δ -ямы. Таким образом, аналитическое продолжение амплитуды рассеяния содержит информацию о связанных состояниях. Поясним это подробнее. Решение можно переписать в виде:

$$\psi = e^{ipx} + re^{ip|x|}.$$

Рассмотрим аналитическое продолжение, как функцию энергии:

$$\psi(E) = a(E)e^{ip(E)x} + r(E)e^{ip(E)|x|}.$$

Вероятность рассеяния:

$$R(E) = \frac{|r(E)|^2}{|a(E)|^2}.$$

Переходом $E \rightarrow -E'$, $p \rightarrow ip'$ приходим к виду

$$\psi(-E') = a(-E')e^{-p'x} + r(E')e^{-p'|x|}.$$

Если энергия равна энергии связанного состояния $E = -E^*$, то мы можем получить¹ решение уравнение Шредингера, отвечающее связанному состоянию. При этом первый ненормируемый член должен занулиться: $a(-E^*) = 0$. Тогда $R(-E^*) = \infty$.

Если вместо ямы взять δ -пик, то полюсная особенность останется несмотря на отсутствие связанного состояния. Это пример особенности на *нефизическом листе* амплитуды рассеяния. На нем присутствуют *виртуальные состояния*.

Нормировка непрерывного спектра

Работа с состояниями непрерывного спектра в квантовой механике имеет определённые особенности, в частности, встаёт вопрос о их нормировке. Если волновые функции с экспоненциально растущими асимптотиками $\sim e^{\kappa x}$ не соответствуют физической реальности, то, скажем, плоские волны $e^{ipx/\hbar}$ встречаются сплошь и рядом. Они не нормируемы в обычном смысле (интеграл $\int |\psi|^2 d\mathbf{r}$ расходится), но крайне необходимы в работе физика-теоретика, что заставляет придумать другой способ их нормировки. Без состояний непрерывного спектра невозможно построить полный базис в задачах, в которых $V \rightarrow 0$ на бесконечности.

Периодические граничные условия

Вообще говоря, реальные системы имеют конечный размер, что решает проблему. Рассмотрим для удобства отрезок, квадрат, куб объема L^d . Удобнее всего² работать с периодическими граничными условиями Борна-Кармана:

$$\begin{aligned} \psi(L\mathbf{e}_i) &= \psi(0), \\ \nabla\psi(L\mathbf{e}_i) &= \nabla\psi(0). \end{aligned}$$

Для отрезка это соответствует замыканию его в кольцо (для квадрата — в тор). В этом случае плоские волны успешно нормируются:

¹для этого следует правильно выполнять аналитическое продолжение, чтобы оказаться на *физическом* листе (см. ЛЛ-3, §128 и Мигдал, гл. 4-2)

²как правило, выбор граничных условий не влияет на физические результаты в пределе $L \rightarrow \infty$.

$$\psi_{\mathbf{p}} = \frac{1}{\sqrt{L^d}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar}.$$

Обратите внимание на зависимость размерности волновой функции от размерности пространства. Волновые вектора должны удовлетворять условиям:

$$p_i = \frac{2\pi n_i}{L}.$$

В этом случае по импульсам необходимо выполнять суммирование $\sum_{\mathbf{p}}$, а не интегрирование. При больших размерах системы уровни идут очень густо, поэтому выполняют переход к непрерывному пределу (коэффициент определяется расстояниями между соседними $\delta p_i = 2\pi/L$, помним также про размерность):

$$\boxed{\sum_{\mathbf{p}} \leftrightarrow L^d \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^d}}. \quad (1)$$

Тогда условие полноты запишется в виде:

$$\sum_{\mathbf{p}} \psi_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r}_1) \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}_2) = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2).$$

В непрерывном пределе

$$L^d \int \psi_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r}_1) \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}_2) \frac{d^d p}{(2\pi\hbar)^d} = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad (2)$$

Периодические граничные условия часто используют в физике твёрдого тела.

Нормировка на δ -функцию

Вернёмся к бесконечному пространству. Как правило рассматриваемые функции непрерывного спектра являются собственными для некоторого оператора $\hat{f}$ и параметризуются собственными числами f . В этом случае эти функции $\psi_f(\mathbf{r})$ являются ортогональными для различных f согласно общеизвестной теореме:

$$\int d\mathbf{r} \psi_{f_1}^*(\mathbf{r}) \psi_{f_2}(\mathbf{r}) = 0, \quad f_1 \neq f_2.$$

В случае же $f_1 = f_2$ этот интеграл обращается в бесконечность. Это происходит таким образом, что в общем выражении возникает δ -функция с некоторым коэффициентом:

$$\int d\mathbf{r} \psi_{f_1}^*(\mathbf{r}) \psi_{f_2}(\mathbf{r}) = c(f_1) \delta(f_1 - f_2).$$

Функцию $c(f_1)$ выбирают как правило, константой. Если положить $c = 1$:

$$\int d\mathbf{r} \psi_{f_1}^*(\mathbf{r}) \psi_{f_2}(\mathbf{r}) = \delta(f_1 - f_2),$$

то будет верно соотношение полноты в виде:

$$\int df \psi_f^*(\mathbf{r}_1) \psi_f(\mathbf{r}_2) = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2).$$

Проверяется последнее утверждение интегрированием его с функцией $\psi_{f'}(\mathbf{r}_1)$.

- В частности, для $\hat{f} = \hat{H}$, получаем так называемую *энергетическую нормировку*:

$$\int d\mathbf{r} \psi_{E_1}^*(\mathbf{r}) \psi_{E_2}(\mathbf{r}) = \delta(E_1 - E_2).$$

- В случае же оператора импульса, константу обычно выбирают в виде $(2\pi\hbar)^d$:

$$\int d\mathbf{r} \psi_{\mathbf{p}_1}^*(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{p}_2}(\mathbf{r}) = (2\pi\hbar)^d \delta^{(d)}(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2).$$

Тогда несложно видеть, что $\psi_{\mathbf{p}} = e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar}$.

Условие полноты запишутся в виде:

$$\int \psi_p^*(\mathbf{r}_1) \psi_p(\mathbf{r}_2) \frac{d^d p}{(2\pi)^d} = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad (3)$$

Сравните (2) и (3). Как видно, разница только в множителе L^d в двух местах. А вот писать множители $2\pi\hbar$ в интеграле по импульсам нужно привыкнуть. Это также следует понимать, как выбор коэффициентов в прямом и обратном преобразовании Фурье. В интеграле по энергиям такой множитель также часто встречается: $\int dE/(2\pi\hbar)$. В расчетах для сокращения записи удобно обозначать множители $1/(2\pi\hbar)$ с помощью скобок: $\int (d^d p) := \int d^d p / (2\pi\hbar)^d$.

Нормировка по асимптотикам

Как отнормировать состояния непрерывного спектра в случае, менее тривиальном чем плоские волны? Вообще говоря, нам следует вычислить интеграл $\int dx \psi_{f_1}^*(x) \psi_{f_2}(x)$ на близких f_1 и f_2 . Для сложных функций это проблематично. Однако, мы можем вычислить этот интеграл, воспользовавшись асимптотическим видом этих функций. Такая замена может привести к конечной ошибке, но коэффициент перед δ -функцией останется верным.

- Рассмотрим движение, инфинитное, в одну сторону. Пусть волновая функция экспоненциально спадает при $x \rightarrow -\infty$: $\psi \sim e^{-\kappa|x|}$ и осциллирует при $x \rightarrow +\infty$. Будем также считать, что потенциал $V(+\infty) = 0$. Тогда асимптотику волновой функции можно выбрать в виде $\psi_p = A \cos[p x / \hbar + \delta(p)]$ (Стационарную волновую функцию всегда можно выбрать вещественной, подумайте почему). Имеем $\int dx \psi_{p_1}^*(x) \psi_{p_2}(x) = c \delta(p_1 - p_2)$. Если мы будем рассматривать вместо этого интеграл $\int_{\Lambda}^{\infty} dx \psi_{p_1}^*(x) \psi_{p_2}(x)$, то получим выражение, отличающееся на конечную функцию, коэффициент же перед δ -функцией останется таким же (так как интеграл $\int_{-\infty}^{\Lambda} dx \psi_{p_1}^*(x) \psi_{p_2}(x)$ сходится). Тогда возьмём Λ достаточно большим, чтобы можно было заменить функции на их асимптотики, вычислим (при p близких к p' , $\delta(p) \approx \delta(p') = \delta$)

$$\begin{aligned} \langle p|p' \rangle &\simeq \frac{A^2}{4} \int_{\Lambda}^{\infty} dx \left(e^{ipx/\hbar + \delta} + e^{-ipx/\hbar - \delta} \right) \left(e^{ip'x/\hbar + \delta} + e^{-ip'x/\hbar - \delta} \right) = \\ &= \frac{A^2}{4} \int_{\Lambda}^{\infty} dx \left(e^{\frac{i}{\hbar}(p+p'+2\delta)x} + e^{\frac{i}{\hbar}(p-p')x} + e^{-\frac{i}{\hbar}(p+p'+2\delta)x} + e^{-\frac{i}{\hbar}(p-p')x} \right). \end{aligned}$$

Быстро осциллирующие множители следует выбросить, так как они дадут нуль или константу при правильной регуляризации (например, можно добавить $i0$ к импульсам).

$$\langle p|p' \rangle \simeq \frac{A^2}{4} \int_{\Lambda}^{\infty} dx \left(e^{\frac{i}{\hbar}(p-p')x} + e^{\frac{i}{\hbar}(p-p')x} \right) = \frac{A^2}{4} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{\frac{i}{\hbar}(p-p')x} - \frac{A^2}{4} \int_{-\Lambda}^{\Lambda} dx e^{\frac{i}{\hbar}(p-p')x} = \text{reg.} + \frac{A^2}{4} 2\pi\hbar \delta(p - p').$$

Таким образом, при нормировке на $2\pi\hbar\delta(p-p')$ следует взять $A = 2$, а для нормировки на $\delta(E-E')$ следует домножить на $\sqrt{\partial(p/2\pi\hbar)/\partial E} = \sqrt{1/(2\pi\hbar v)}$. При этом плотность потока вероятности в бегущей к началу координат и бегущей от начала координат волнах равна $1/(2\pi\hbar)$ по отдельности.

- Для движения, инфинитного в обе стороны и потенциала $V(\pm\infty) = 0$ интеграл для $\langle p|p' \rangle$ получится в 4 раза больше, а значит, нужно взять множитель в 2 раза меньше
- Этот способ легко обобщить и на случай асимптотики более общего вида $a e^{ipx} + b e^{-ipx}$.
- Если V не стремится к 0 на бесконечности, то этот способ все равно работает. Разберите этот случай самостоятельно на примере функции Эйри.

Плотность состояний

В физике часто оказывается важной плотность состояний $\nu(E)$ непрерывного спектра.

$$\nu(E) = \frac{\Delta N}{\Delta E},$$

где N — количество состояний с энергией ниже E .

Если вспомнить о конечном объёме, то уровни будут дискретными, хоть и очень густыми при большом объёме. Плотность состояний ν , как правило, пропорциональна объёму системы L^d .

Формально говоря,

$$N(E) = \sum_i \theta(E - E_i),$$

$$\nu(E) = \sum_i \delta(E - E_i).$$

(θ — функция Хевисайда). Обычно подразумевается, что эти функции нужно усреднить. Это происходит либо естественным путём³, либо искусственным, при котором мы сглаживаем ступенчатую функцию $N(E)$ или, эквивалентно размазываем δ -функции на ширину $\Gamma \gg \Delta E$, что приводит к гладкой зависимости.

$$\boxed{\nu(E) = \overline{\sum_i \delta(E - E_i)}}.$$

Суммирование по состояниям часто можно с великолепной точностью приближать интегралом:

$$\boxed{\sum_E \rightarrow \int \nu(E) dE}$$

Плотность состояний в пустом 1D

$$\psi = e^{ikx}.$$

Накладываем периодические граничные условия:

$$\begin{aligned} \psi(L) &= \psi(0), \\ \psi'(L) &= \psi'(0). \end{aligned}$$

Имеем:

$$k = \frac{2\pi n}{L}.$$

Энергия:

$$E = \frac{\hbar^2 4\pi^2 n^2}{2mL^2},$$

$$n = \frac{L\sqrt{2mE}}{2\pi\hbar}.$$

$$\nu_{1D} = L \frac{\sqrt{m}}{2\sqrt{2}\pi\hbar} \frac{1}{\sqrt{E}}.$$

Наблюдаем наличие интегрируемой особенности при $E \rightarrow 0$.

Плотность состояний в пустом 3D

Аналогично имеем

$$k_i = \frac{2\pi L}{n_i}, \quad i = x, y, z.$$

Воспользуемся выражением через δ -функции и правилом (1):

$$\begin{aligned} \nu &= \sum_k \delta(E - \hbar^2 k^2 / 2m) = \frac{L^3}{(2\pi)^3} \int d^3k \delta(E - \hbar^2 k^2 / 2m) = \frac{L^3}{(2\pi)^3} 4\pi \int k^2 dk \delta(E - \hbar^2 k^2 / 2m) = \\ &= \frac{L^3}{(2\pi)^3} 4\pi k^2 \left. \frac{1}{|\partial[E - \hbar^2 k^2 / 2m] / \partial k|} \right|_{k=\sqrt{2mE}/\hbar} = \\ &= \frac{L^3}{(2\pi)^3} 4\pi k^2 \left. \frac{m}{\hbar^2 k} \right|_{k=\sqrt{2mE}/\hbar} = L^3 \frac{4\pi m \sqrt{2mE}}{\hbar^3 8\pi^3} = L^3 \frac{m^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E}. \end{aligned}$$

Итак,

³Например при усреднении по реализациям потенциала, который может иметь случайную составляющую. Другой пример — конечное время жизни частиц τ , которое приводит к ширине уровня $\Gamma \sim 1/\tau$.

$$\nu = L^3 \frac{m^{3/2}}{\sqrt{2\pi}\hbar^3} \sqrt{E} = L^3 \frac{mp}{2\pi^2\hbar^3}.$$

Видимо, что корневая особенность присутствует, но стала менее сингулярной. Это пример общей закономерности — чем больше размерность, тем мягче особенность, чем меньше размерность — тем сильнее квантовые эффекты.

Плотность состояний при наличии потенциала

В этом случае потенциал влияет на фазы асимптотик на бесконечности, что приводит к модификации граничных условий в терминах асимптотического k и изменению плотности состояний. Эти изменения могут давать вклад в физические величины.