Семинар 4. Непрерывный спектр.

Степанов Николай

30 сентября 2017

Поток вероятности

Как известно, квадрат модуля волновой функции $\rho(\boldsymbol{r}) = |\psi(\boldsymbol{r})|^2$ имеет смысл плотности вероятности обнаружения частицы в точке $\boldsymbol{r}$. Последняя является наблюдаемой величиной, и следуя общим принципам квантовой механики, ей может быть поставлен в соответствие некоторый эрмитов оператор. Можно легко убедиться, что этот оператор выглядит как $\hat{\rho}(\boldsymbol{r}_0) = \delta(\hat{\boldsymbol{r}} - \boldsymbol{r}_0)$. Действительно, проводя усреднение оператора по произвольному состоянию $|\psi\rangle$, мы получим:

$$\hat{\rho}(\boldsymbol{r}_0) = \langle\psi|\delta(\hat{\boldsymbol{r}} - \boldsymbol{r}_0)|\psi\rangle = \int d^d\boldsymbol{r}\psi^*(\boldsymbol{r})\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0)\psi(\boldsymbol{r}) = |\psi(\boldsymbol{r}_0)|^2 \tag{1}$$

При временной эволюции, удовлетворяющей уравнению Шрёдингера, плотность вероятности будет как-то меняться; более того, поскольку полная вероятность $\int d\boldsymbol{r}\rho(\boldsymbol{r})$ является сохраняющейся величиной, то уравнение это должно иметь вид уравнения непрерывности:

$$\partial_t\rho(\boldsymbol{r}, t) + \mathrm{div}\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}, t) = 0, \tag{2}$$

с некоторой векторной величиной $\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}, t)$, которая имеет смысл **плотности потока вероятности**. Действительно, если проинтегрировать это уравнение по некоторой конечной области пространства, и воспользовавшись формулой Лиувилля-Остроградского, мы получим:

$$\partial_t \int_\Omega \rho(\boldsymbol{r}, t)d\boldsymbol{r} = -\oint_{\partial\Omega} (\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}, t) \cdot \boldsymbol{n})dS \tag{3}$$

(что буквально интерпретируется как «изменение числа частиц в произвольном объёме равно интегралу от плотности потока вероятности по поверхности»). Первое слагаемое в уравнении непрерывности можно вычислить непосредственно, используя уравнение Шрёдингера (и комплексно-сопряжённое к нему) $i\hbar\partial_t\psi(\boldsymbol{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\boldsymbol{r}, t) + V(\boldsymbol{r}, t)\psi(\boldsymbol{r}, t)$:

$$\partial_t\rho = \frac{\hbar}{2m}(-i\psi^*(-\nabla^2\psi) + i(-\nabla^2\psi^*)\psi) = \frac{i\hbar}{2m}\nabla \cdot [\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*] \tag{4}$$

Из этого мы заключаем, что плотность потока вероятности равна[1]:

$$\boxed{\boldsymbol{j} = -\frac{i\hbar}{2m}\left[\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*\right] \equiv \frac{1}{2}\left[\psi^*\hat{\boldsymbol{v}}\psi + c.c\right]} \tag{5}$$

Последняя форма — лёгкий способ запомнить это выражение; тут мы ввели оператор групповой скорости $\hat{\boldsymbol{v}} = \frac{\hat{\boldsymbol{p}}}{m} = -\frac{i\hbar}{m}\nabla$. В таком виде плотность потока вероятности имеет смысл просто плотности частиц, умноженной на их скорость — ровно это было бы в классической механике. Не стоит, однако, забывать о том, что просто выражение $\psi^*\hat{\boldsymbol{v}}\psi$ не является вещественным и не может соответствовать физической величине; для этого нужна симметризация, которая и отражена в предыдущей формуле.

Наконец, приведём ещё одну полезную формулу для вычисления плотности потока вероятности. Если представить волновую функцию в виде $\psi(\boldsymbol{r}) = |\psi(\boldsymbol{r})|e^{i\varphi(\boldsymbol{r})}$ и подставить в выражение, то мы получим:

$$\boldsymbol{j} = \frac{\hbar}{m}|\psi(\boldsymbol{r})|^2\nabla\varphi \tag{6}$$

Это выражение показывает явно, что чтобы имелся некоторый *поток* частиц, необходимо пространственное изменение фазы волновой функции. При этом скорость частиц в этом потоке равна $v = \frac{\hbar}{m}\nabla\varphi$.

[1] Формально говоря, мы получили равенство $\mathrm{div}\boldsymbol{j} = \mathrm{div}\left[-\frac{i\hbar}{2m}\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*\right]$, из которого, вообще говоря, не следует равенство самих токов — ведь к $\boldsymbol{j}$ можно прибавить ротор произвольного векторного поля $\mathrm{rot}\boldsymbol{a}$, и дивергенция при этом не изменится. Непосредственно равенство для $\boldsymbol{j}$ будет следовать, если потребовать дополнительное условие $\mathrm{rot}\boldsymbol{j} = 0$ — ведь вихревые потоки вероятности не являются наблюдаемыми.

Внимательный читатель может обратить внимание, что вихревые потоки вероятности для *заряженных* частиц соответствуют вихревым электрическим токам, и согласно уравнению Максвелла могут порождать магнитное поле. В действительности же, выражение для электрического тока, хоть формально практически совпадает с выражением для $\boldsymbol{j}$, получается из немного других соображений — а именно, из варьирования *действия* по вектор-потенциалу $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, t)$.

Задача рассеяния

Нестационарная задача рассеяния Рассмотрим одномерную задачу рассеяния. Квантовая частица с импульсом p налетает на потенциальный барьер $V(x)$ (будем считать, что на бесконечности потенциал выходит на константу[2] $V(-\infty) \to 0$, $V(+\infty) \to V_0$; для определённости, будем считать $V_0 > 0$) и с какой-то амплитудой проходит, с какой-то — отражается. Такая постановка задачи, вообще говоря, нестационарна — а именно, чтобы её определить, нам необходимо:

1. Задать начальные условия при $t \to -\infty$, которые соответствуют волновому пакету, находящемся на $x \to -\infty$ и имеющий конечный импульс p, направленный на рассеиватель.

2. Решить *нестационарное* уравнение Шрёдингера, рассмотрев эволюцию этого волнового пакета.

3. Исследовать асимптотики полученного решения при $t \to +\infty$, которые представляли бы пару волновых пакетов — отражённый, который находится на $x \to -\infty$ и имеет импульс $-p$, и прошедший, который летит на $x \to +\infty$ и имеет импульс p' (этот импульс, вообще говоря, другой, поскольку мы предположили, что потенциальная энергия выходит на отличную от нуля константу).

4. Наконец, вычислить вероятность отражения $R = \int_{-\infty}^{0} |\psi(x)|^2 dx$ и $T = \int_0^\infty |\psi(x)|^2 dx$ (попросту число частиц слева и справа от рассеивателя при $t \to \infty$, когда соответствующие волновые пакеты достаточно далеко ушли от рассеивателя).

Стационарная задача рассеяния Решение такой задачи будет обсуждено в этом семинаре ниже, а пока мы приведём эквивалентную постановку задачи рассеяния, которая несоизмеримо проще. Оказывается, что вместо вышеперечисленной схемы достаточно решать *стационарное* уравнение Шрёдингера $\hat{H}\psi = E\psi$ (энергия E связана с импульсами p и p' тривиальным образом как $E = \frac{p^2}{2m} = \frac{p'^2}{2m} + V_0$), и искать решения со следующей асимптотикой (тут и дальше опять $\hbar = 1$):

$$\boxed{\psi_p^{(+)}(x) = \begin{cases} e^{ipx} + re^{-ipx}, & x \to -\infty, \\ te^{ip'x}, & x \to +\infty. \end{cases}} \tag{7}$$

Такая асимптотика также имеет смысл падающей (incident) с $x \to -\infty$ волны $\langle x|\psi_i\rangle = e^{ipx}$ (которая несёт поток частиц $j_i = \frac{p}{m}$), отражённой (reflected) волны $\langle x|\psi_r\rangle = re^{-ipx}$ (несёт поток частиц $j_r = -\frac{p}{m}|r|^2$) и прошедшей (transmitted) волны $\langle x|\psi_t\rangle = te^{ip'x}$ (несёт поток частиц $j_t = \frac{p'}{m}|t|^2$). С другой стороны, вероятности отражения и прохождения, по аналогии с классической механикой, можно определить как отношение прошедших и отражённых потоков к падающему:

$$\boxed{T = \frac{p'}{p}|t|^2, \quad R = |r|^2} \tag{8}$$

Сразу обратим внимание на следующие обстоятельства:

1. Определённые таким образом вероятности оказываются полностью эквивалентны им же, определённым из нестационарной задачи.

2. Условие сохранения нормировки волновой функции даёт $R + T = 1$. В задаче рассеяния это утверждение означает, что частицы никуда не пропадают — они либо отражаются, либо проходят. Это условие носит название **условие унитарности рассеяния**.

3. При $E < V_0$, решения с такой асимптотикой существовать не может (p' будет мнимым, и волна будет затухать при $x \to +\infty$; поток числа частиц в ней будет равен нулю), что соответствует $R = 1$ и $T = 0$ (полное отражение).

4. Величины t и r носят названия **амплитуд прохождения и отражения**, и несут они в себе гораздо больше информации, чем вероятности T и R. Это будет продемонстрировано ниже, на примере задачи о задержке волнового пакета.

Симметрия по отношению к обращению времени Задача рассеяния, будучи поставленной так, соответствует падению частиц на рассеиватель *слева*. Разумеется, можно поставить эквивалентную ей задачу о частицах, падающих *справа*, и искать волновые функции, имеющие иные асимптотики, которые пишутся по полной аналогии с (7):

$$\boxed{\psi_{p'}^{(-)}(x) = \begin{cases} t'e^{-ipx}, & x \to -\infty \\ e^{-ip'x} + r'e^{ip'x}, & x \to \infty \end{cases}} \tag{9}$$

[2] Разумеется, задачу рассеяния можно поставить и без этого требования; просто тогда асимптотики волновых функций на бесконечностях будут иные

Опять-таки, такие состояния существуют только при $p' > V_0$. Пара функций $\psi_L(x)$ и $\psi_R(x)$ линейно независимы, и они соответствуют тому, что непрерывный спектр в одномерье всегда двукратно вырожден (это соответствует тому, что классическая частица может улететь как на $-\infty$, так и на $+\infty$). Оказывается, что величины t' и r' непосредственно связаны с t и r; а для вероятностей вообще имеет место равенство $T' = \frac{p}{p'}|t'|^2 = T$ и $R' = |r'|^2 = R$, и связано это с так называемой симметрией квантовой механики по отношению к обращению времени.

В классической механике эта симметрия звучит достаточно просто. Если $(\boldsymbol{x}(t), \boldsymbol{p}(t))$ является решением классических уравнений движения, то $(\boldsymbol{x}(-t), -\boldsymbol{p}(-t))$ — тоже. Последняя, однако, соответствует частице, движущийся по траектории в обратном направлении. В квантовой механике обращению времени соответствует комплексное сопряжение волновой функции[3]; действительно, если мы комплексно сопряжём уравнение Шрёдингера, то мы увидим, что $\psi^*(\boldsymbol{r}, -t)$ тоже ему удовлетворяет. Для стационарного уравнения Шрёдингера это означает, что если $\psi(\boldsymbol{r})$ — решение стационарного УШ, то $\psi^*(\boldsymbol{r})$ — тоже. Для связанного состояния это, как правило, ни к чему не приводит — волновые функции связанного состояния в одномерье всегда можно выбрать вещественными. Однако для непрерывного спектра оказывается, что $\psi^*(\boldsymbol{r})$ линейно-независимо[4] с $\psi(\boldsymbol{r})$, и благодаря чему и оказывается возможным связать t' и r' с t и r.

Поэтому, если мы комплексно сопряжём волновую функцию $\psi_L(x)$, то мы получим другое линейно-независимое решение, но которое не будет обладать нужными асимптотиками. Но можно взять произвольную линейную комбинацию $\alpha\psi_L(x) + \beta\psi_L^*(x)$ и потребовать, чтобы она дала $\psi_R(x)$. Приравнивая асиптотики на бесконечностях, мы получим:

$$\begin{cases} \alpha(e^{ipx} + re^{-ipx}) + \beta(e^{-ipx} + r^*e^{ipx}) \equiv t'e^{-ipx}, & x \to -\infty \\ \alpha t e^{ip'x} + \beta t^* e^{-ip'x} \equiv e^{-ip'x} + r'e^{ip'x} & x \to +\infty \end{cases} \tag{10}$$

Поскольку должно иметь место тождество (при всех x), то коэффициенты перед каждой из экспонент совпадают. Это даёт нам следующую систему линейных уравнений, которую оказывается возможным решить:

$$\begin{cases} \alpha + \beta r^* = 0 & \Rightarrow \alpha = -\beta r^* \\ \alpha r + \beta = t' & \Rightarrow t' = \beta(1 - r^* r) = \beta T \\ \alpha t = r' & \Rightarrow r' = -\beta r^* t \\ \beta t^* = 1 & \Rightarrow \beta = \frac{1}{t^*} \end{cases} \Rightarrow \boxed{\begin{cases} t' & = \frac{p'}{p} t \\ r' & = -r^* t / t^* \end{cases}} \tag{11}$$

1. Как и было анонсировано, вероятности прохождения и отражения слева и справа в точности совпадают: $R' = |r'|^2 = |r|^2 = R$ и $T' = \frac{p}{p'}|t'|^2 = \frac{p'}{p}|t|^2 = T$.

2. Для случая $V_0 = 0$ (потенциал затухает на обоих бесконечностях), $p' = p$. Тогда $t = \sqrt{T}e^{i\theta}$ и $r = \sqrt{R}e^{i\delta}$. В таком случае оказывается, что фазы прошедшей волны в точности совпадают $\theta' = \theta$, а вот фазы отражённой волны отличаются: $\delta' = 2\theta + \pi - \delta$.

Задача о задержке волнового пакета

Давайте теперь вернёмся к нестационарной задаче рассеяния и обсудим её связь со стационарной. Для простоты рассмотрим случай потенциала, спадающего на обоих бесконечностях $p' = p$. Задача ставится следующим образом:

1. Начальное условие: при $t = -T \to -\infty$, мы «приготовили» волновой пакет, соответствующий положительному импульсу p_0 и отрицательной координате $-L \to -\infty$:

$$\psi(x, -T) \equiv \psi_0(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}a^{1/2}} \exp\left(-\frac{(x+L)^2}{2a^2} + ip_0 x\right) \tag{12}$$

2. Будем решать нестационарное уравнение Шрёдингера. При $t = T \to +\infty$, будет иметься волновой пакет, соответствующий прошедшей волне. С другой стороны, если бы рассеивателя не было, то волновой пакет тоже имелся бы, но двигался бы он *правее*. Явление это носит название **задержки волнового пакета** — частица на небольшое время может «застрять» в рассеивателе[5]. Мы ставим своей целью найти время этой задержки.

[3]Если в задаче имеется магнитное поле, либо в неё входят какие-то спиновые переменные (волновая функция при этом многокомпонентная), то гамильтониан, вообще говоря, вещественным уже не будет. При этом иногда явный вид оператора обращения по времени по-прежнему можно записать (но он включает в себя что-то ещё, помимо комплексного сопряжения); а иногда это сделать невозможно. В таких случаях говорят о нарушении симметрии по отношению к обращению времени. Примером могут служить задачи с магнитным полем — как известно из квантовой электродинамики, оно тоже обязано поменять знак при обращении времени.

[4]Для частиц со спином-$\frac{1}{2}$ оператор обращения времени, как было отмечено в предыдущей сноске, содержит не только комплексное сопряжение. Из-за этого оказывается возможным доказать, что $T\psi(\boldsymbol{r})$ *всегда* будет линейно-независимо с $\psi(\boldsymbol{r})$, из чего следует, что в системе с полуцелым спином и наличием T-инвариантности уровни энергии всегда двукратно вырождены. Это утверждение носит название **теоремы Крамерса**.

[5]В классической физике, разумеется, такой эффект тоже имеет место

Для решения нестационарного УШ, как обычно, на необходимо разложиться по базису стационарных решений (7) и (9). Для этого, вообще говоря, необходимо знать, как устроено разложение единицы по этому базису. Примем пока без доказательства, что устроено оно почти так же, как и для базиса плоских волн (в отсутствии рассеивателя) — это утверждение мы обсудим ниже[6]: $\mathbb{I} = \int_0^\infty \frac{dp}{2\pi} \left|\psi_p^{(+)}\right\rangle \left\langle\psi_p^{(+)}\right| + \int_{V_0}^\infty \frac{dp'}{2\pi} \left|\psi_{p'}^{(-)}\right\rangle \left\langle\psi_{p'}^{(-)}\right|$. Разложимся по базису, используя асимптотики при $x \to -\infty$:

$$\psi_+(p) = \left\langle\psi_p^{(+)}|\psi_0\right\rangle = 2^{1/2}\pi^{1/4}a^{1/2}\left[\exp\left(-\frac{1}{2}(p-p_0)^2a^2 + i(p-p_0)L\right) + \cancelto{0}{r^*\exp\left(-\frac{1}{2}(p+p_0)^2a^2 - i(p+p_0)L\right)}\right] \tag{13}$$

Из физической интуиции понятно, что нас интересует именно первый член, ведь он возник из асимптотики падающей волны в задаче рассеяния. Математически же это соответствует тому, что интегрируем мы по импульсам $p > 0$, а p_0 — большой положительный импульс, поэтому второй вклад оказывается экспоненциально малым. Ровно по этой же причине, коэффициенты разложения по $\left|\psi_p^{(-)}\right\rangle$, как и следует из нашей физической интуиции (ведь это — решение задачи рассеяния «справа-налево»!) тоже будут экспоненциально малы и нас интересовать не будут.

Дальше должны решать нестационарное уравнение Шрёдингера. Поскольку $\left|\psi_p^{(+)}\right\rangle$ эволюционируют тривиальным образом, накручивая фазу $e^{-i\varepsilon_{\boldsymbol{p}}t}$, то $\psi_+(p,t) = e^{-i\varepsilon_p t}\psi_+(p)$. Наконец, мы должны взять обратное «преобразование Фурье» и записать:

$$\psi(x,t) = \int \frac{dp}{2\pi}\psi_+(p,t)\cdot\psi_p^{(+)}(x) = 2^{1/2}\pi^{1/4}a^{1/2}\int\frac{dp}{2\pi}\psi_p^{(+)}(x)\exp\left(-\frac{1}{2}(p-p_0)^2a^2 + i(p-p_0)L\right)e^{-i\varepsilon_{\boldsymbol{p}}(t+T)} \tag{14}$$

Мы не знаем явный вид функции $\psi_p^{(+)}(x)$, но знаем асимптотики при $x \to \pm\infty$, поэтому давайте посмотрим на асимптотики $\psi(x,t)$ при $x \to \pm\infty$. При этом интеграл имеет пик вблизи $p = p_0$, поэтому все величины мы разложим вблизи этой точки и возьмём интеграл методом перевала. При этом учтём, что амплитуды прохождения, вообще говоря, тоже зависят от импульсов, и их тоже стоит раскладывать: $t \equiv t(k) = \sqrt{T(k)}e^{i\theta(k)}$. Именно из-за зависимости фазы от импульса и произойдёт в конечном итоге эффект задержки. Полученный Гауссов интеграл берётся:

$$\begin{aligned}\psi(x\to+\infty,t) \approx 2^{1/2}\pi^{1/4}a^{1/2}\int\frac{dp}{2\pi}\sqrt{T(k)}\exp\left(i\left[\theta_{p_0} + \theta'_{p_0}(p-p_0) + \frac{1}{2}\theta''_{p_0}(p-p_0)^2\right]\right)\cdot e^{ipx}\cdot\\ \cdot\exp\left(-\frac{1}{2}(p-p_0)^2a^2 + i(p-p_0)L\right)\cdot\exp\left(-i\left[\varepsilon_{p_0} + \varepsilon'_{p_0}(p-p_0) + \frac{1}{2}\varepsilon''_{p_0}(p-p_0)^2\right](t+T)\right) =\\ = \frac{a^{1/2}}{\pi^{1/4}\widetilde{a}(t)}\sqrt{T(p_0)}\exp\left[-\frac{[(x+L)+\theta'(p_0)-\varepsilon'(p_0)(t+T)]^2}{2\widetilde{a}^2(t)} + i\cdot\text{phase}\right]\end{aligned} \tag{15}$$

где $\widetilde{a}^2(t) = a^2 - i\theta''(p_0) + i\varepsilon''(p_0)(t+T)$. Исследуем теперь полученное выражение:

1. Это — гауссов волновой пакет, центр которого расположен при $x_0(t) = -L-\theta'(p_0)+\varepsilon'(p_0)(t+T) = -L+\varepsilon'(p_0)(t+T-\frac{\theta'}{\varepsilon'})$. Это соответствует пакету, который движется с групповой скоростью $v = \frac{\partial\varepsilon}{\partial p} = \frac{p}{m}$. Однако выражение это устроено так, будто он стартовал из точки $-L$ не в момент времени $t = -T$ (как было бы со свободным движением), а чуть позже, в момент времени $t = -T + \frac{\theta'}{\varepsilon'}$. Это и есть явление задержки волнового пакета; время же задержки равно $\boxed{\tau = \frac{\theta'}{\varepsilon'} = \frac{\partial\theta}{\partial\varepsilon}}$. Тут сразу же возникает важнейшее свойство фазы — ведь в силу причинности, $\tau > 0$ (частица не может прилететь к детектору раньше, чем если бы она летела баллистически!) — а значит, фаза рассеяния является монотонной функцией энергии.

2. Ширина этого пакета определяется из условия $\frac{1}{a^2(t)} = \mathrm{Re}\frac{1}{\widetilde{a}^2(t)} \Rightarrow a^2(t) = a^2 + \frac{\left[\varepsilon''(p_0)(t+T)-\theta''(p_0)\right]^2}{a^2}$. Этот эффект называется «расплыванием волнового пакета», и связан он с наличием у спектра кривизны [7] $\varepsilon''(p_0)$; из-за соотношения неопределённостей, в пакет всегда будут входить частицы со слегка разными импульсами, а значит — и с разными скоростями. Поэтому со временем ширина пакета будет меняться.

3. Наконец, полное число частиц в этом пакете равно $\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(x\to+\infty,t)|^2dx = T(p_0)$ — что и завершает связь стационарной и нестационарной задачи рассеяния.

[6] Разумеется, в потенциале также могут быть связанные состояния $|\psi_n\rangle$, и к этому выражению нужно добавить сумму проекторов на них. Для задачи рассеяния это несущественно — перекрытия исходного волнового пакета со связанными состояниями будет экспоненциально малым.

[7] Скажем, для фотонов или для электронов в графене с линейным спектром это явление отсутствует

Исследование асимптотики $\psi(x \to -\infty, t)$ проходит абсолютно аналогично — вклад при этом будет приходить от «отражённой волны» re^{-ipx}, а вклад от «падающей» e^{ipx} будет экспоненциально маленьким.

Нормировка состояний непрерывного спектра

Работа с состояниями непрерывного спектра в квантовой механике имеет определённые особенности, в частности, встаёт вопрос о их нормировке. Состояния дискретного спектра — к примеру, связанные состояния какого-либо потенциала — нормируются известным образом, а именно, условием $\int |\psi(\boldsymbol{r})|^2 d\boldsymbol{r} = 1$. С непрерывным спектром так поступить невозможно — скажем, если взять плоскую волну $\psi_p(x) = e^{ipx}$, то интеграл $\int |\psi_p(x)|^2 dx$ попросту разойдётся[8]. Тем не менее, непрерывный спектр крайне важен в приложениях — крайне полезно работать в различных представлениях и раскладываться по таким состояниям. Сейчас мы обсудим, как работать с непрерывным спектром.

Нормировка «в ящике»

Вообще говоря, не самый плохой способ работать с непрерывным спектром — это полностью избавиться от него. Скажем, для квантомеханической частицы мы всегда можем поместить всю систему в ящик конечного, но большого объёма V — такая процедура, очевидным образом, дискретизует задачу[9]. При этом отличие качественное отличие дискретного и непрерывного спектра останется — скажем, в энергетическом представлении расстояние между соседними уровнями энергиями $\propto \frac{1}{V} \to 0$, а между состояниями дискретного спектра — $\sim \text{const}$. Трудности этого способа заключаются в том, что очень много величин оказываются зависящими от этого объёма, и его приходится «таскать» до самого конца — хотя, разумеется, физические ответы от него зависеть не могут. Более того, всегда требуется явно разграничить явления, для которых конечный объём но большой объём важен (например, квантование энергии и импульса), и для которых он совершенно несущественен (к примеру, вид волновых функций связанных состояний). Наконец, конкретная техника вычислений может зависеть от того, какого вида граничные условия выбраны — нулевые, периодические, и т.п. — хотя, разумеется, ни одна разумная физическая величина от этого зависеть никак не может.

Продемонстрируем, как это работает, на примере свободного движения. Удобнее всего использовать периодические граничные условия Борна-Кармана $\psi(\boldsymbol{r} + L_i \hat{\boldsymbol{e}}_i) \equiv \psi(\boldsymbol{r})$ (тут L_i — размер ящика в пространственном измерении $i = x, y, z$, а $\hat{\boldsymbol{e}}_i$ — единичный вектор вдоль этого измерения) — потому что при этом остаётся условие трансляционной инвариантности, и собственные функции оператора импульса устроены точно так же, как и без ящика:

$$\psi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\boldsymbol{p}\boldsymbol{r}} \tag{16}$$

Периодические граничные условия теперь накладывают условия на допустимые компоненты импульса: $p_i L_i = 2\pi n_i$ и $n_i \in \mathbb{Z}$. Это — проявление того, что импульс, в действительности, обладает непрерывным спектром — расстояние между соседними импульсами $\Delta p = \frac{2\pi}{L_i} \to 0$ при $V \to \infty$. В таком случае, суммирование по всем состояниям непрерывного спектра (которое возникает, скажем, при разложении по такому базису), как правило, можно заменять на интегрирование

$$\sum_{\boldsymbol{p}} f(\boldsymbol{p}) \equiv \sum_{\{n_i \in \mathbb{Z}\}} f\left[\boldsymbol{p} = \sum_i \frac{2\pi n_i}{L_i} \hat{\boldsymbol{e}}_i\right] \approx \int_{-\infty}^{\infty} \prod_i dn_i f(\boldsymbol{p}) = \int_{-\infty}^{\infty} \prod_i \frac{dp_i}{(2\pi/L_i)} f(\boldsymbol{p}), \tag{17}$$

или, символически:

$$\boxed{\sum_{\boldsymbol{p}} \approx \int \frac{V d^d\boldsymbol{p}}{(2\pi)^d}} \tag{18}$$

К примеру, разложение единицы:

$$\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') \equiv \sum_{\boldsymbol{p}} \psi^*_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r}') \psi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r}) \approx \int \frac{V d^d\boldsymbol{p}}{(2\pi)^d} \frac{1}{V} e^{i\boldsymbol{p}\boldsymbol{r} - i\boldsymbol{p}\boldsymbol{r}'} = \int \frac{d^d\boldsymbol{p}}{(2\pi)^d} e^{i\boldsymbol{p}(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')} = \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') \tag{19}$$

Таким образом, используя этот способ мы получим явную зависимость от объёма некоторых величин, но, на примере разложения единицы — из конечных ответов объём должен исчезнуть.

[8] Формально это означает, что такие состояния попросту не лежат в нашем гильбертовом пространстве — они не могут описывать состояние частицы

[9] Во всяком случае, у импульсного и энергетического представления непрерывного спектра не станет. Однако, разумеется, координатное представление останется непрерывным; для того, чтобы справиться и с ним, необходимо также «посадить» систему на решётку.

Плотность состояний Если система находится в ящике, то можно ввести следующую величину — плотность состояний $\mathcal{N}(f_0) = \sum_f \delta(f - f_0)$ (по аналогии с «плотностью числа частиц), что мы обсуждали в самом начале семинара). Такая величина буквально позволяет ответить на вопрос, сколько собственных состояний оператора $\hat{f}$ находятся в произвольном отрезке собственных значений от f_1 до f_2 как $N = \int_{f_1}^{f_2} \mathcal{N}(f)df$. Будучи так определённой, эта функция не является регулярной функцией, а скорее какой-то плотной гребёнкой из дельта-функций (если мы имеем дело с дискретным спектром). Однако, по мере увеличения объёма, расстояние между соседними пиками будет уменьшаться. Тем не менее, если искусственно уширить каждую дельта-функцию, то при достаточно больших конечных объёмах получится вполне регулярная функция[10]. Более того, поскольку расстояние между соседними уровнями, как правило, обратно пропорционально объёму системы, то в пределе $V \to \infty$ оказывается хорошо определённой величина $\nu(f_0) = \frac{1}{V}\mathcal{N}(f_0) = \frac{1}{V}\sum_f \delta(f - f_0)$. Эту величину также часто называют плотностью состояний[11].

Нормировка на δ-функцию

Однако, как мы видели ранее, можно работать с непрерывным спектром и не прибегая к его дискретизации. Рассмотрим для конкретности волновые функции, которые представляют собой спектр некоторого эрмитового оператора $\hat{f}$, и которые мы будем параметризовать собственными числами f, так что $\hat{f}\,|f\rangle = f\,|f\rangle$ (оператором может быть импульс, энергия, координата, и т.п.; мы сейчас для простоты предположим, что спектр невырожден — случай наличия вырождения задачу сильно не изменит). Как обычно, мы знаем, что волновые функции, соответствующие различным f, ортогональны; но само состояние не нормируемо:

$$\langle \psi_{f'} | \psi_f \rangle = \int d\boldsymbol{r} \psi^*_{f'}(\boldsymbol{r}) \psi_f(\boldsymbol{r}) = \begin{cases} 0, & f \neq f' \\ \infty, & f = f' \end{cases} \tag{20}$$

В действительности же оказывается так, что такое перекрытие пропорционально дельта-функции $\delta(f - f')$; и различные способы нормировки соответствуют выбору различных коэффициентов $c(f)$ перед этой дельта-функцией:

$$\boxed{\langle \psi_{f'} | \psi_f \rangle = c(f)\delta(f - f')} \tag{21}$$

Соответственно, если необходимо «отнормировать» состояние непрерывного спектра — значит, необходимо указать, на дельта-функцию *от чего именно* нужно отнормировать. Нормированные на энергию и на импульс волновые функции различаются.

Допустим, мы зафиксировали нормировку, соответствующую какой-то $c(f)$. Тогда нам необходимо научиться раскладываться по такому спектру — а для этого нам необходимо знать, как устроено разложение единицы — найти $\mathbb{I} = \int df \nu(f)\,|\psi_f\rangle\,\langle\psi_f|$. Найти это просто, если записать условие

$$c(f)\delta(f' - f) \equiv \langle \psi_{f'} | \hat{\mathbb{I}} | \psi_f \rangle \equiv \int df'' \cdot a(f)\,\langle \psi_{f'} | \psi_{f''} \rangle\,\langle \psi_{f''} | \psi_f \rangle = \int df'' a(f) \cdot c(f')\delta(f'' - f') \cdot c(f)\delta(f'' - f) = a(f)c(f)c(f')\delta(f - f') \tag{22}$$

из чего мы сразу заключаем, что разложение единицы в таком случае имеет следующий вид:

$$\boxed{\mathbb{I} = \int \nu(f)df\,|\psi_f\rangle\,\langle\psi_f|\,, \quad \nu(f) = \frac{1}{c(f)}} \tag{23}$$

Плотность состояний Именно в связи с такой записью — сравнивая её с дискретной задачей, где было бы $\sum_f |\psi_f\rangle\,\langle\psi_f|$ — величину $d\nu = \nu(f)df$ называют **плотностью состояний** $|\psi_f\rangle$. Подчеркнём, что она явно зависит от выбора нормировки состояний $|\psi_f\rangle$!

Предположим, что мы перешли к f-представлению волновой функции — то есть разложились по базису $\psi(f) = \langle \psi_f | \psi \rangle = \int d\boldsymbol{r}\psi^*_f(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})$. Нормировка такой волновой функции будет иметь вид:

$$\int \nu(f)df|\psi(f)|^2 = 1; \tag{24}$$

соответственно, плотность вероятности обнаружить какое-то значение наблюдаемой f будет равно $\nu(f)|\psi(f)|^2$. Не стоит забывать о плотности состояний, если вы работаете в нетривиальном представлении!

При нормировке состояний в объёме, мы уже сталкивались с понятием плотности состояний, которую мы даже обозначили аналогично как $\nu(f)$, хоть и слегка в ином контексте. Величина, что мы обсуждали выше, была базисно-независимой,

[10] В действительности же такое уширение действительно возникает, и оно вполне даже конечно — для открытых систем, взаимодействующих с окружающей средой.

Альтернативно, получить регулярную функцию можно если по какой-то причине (например, наличии в системе случайных примесей), собственные значения являются случайными — в таком случае усреднение по беспорядку приведёт к вполне регулярной функции.

[11] Хотя, разумеется, более корректно её называть плотностью (в смысле объёмной плотности) плотности состояний. Но такое название довольно нелепо.

в то время как эта явно зависит от нормировки. Тем не менее, как правило состояния непрерывного спектра нормируют на равенство $\int_V |\psi|^2 d\boldsymbol{r} = V$ при интегрировании по конечному большому объёму. В таком случае эти два определения плотности состояний попросту совпадут (несложно убедиться, что это так, скажем, для импульса или энергии свободной задачи).

В соответствии с тем, что обсуждалось уже на первом семинаре, приведём некоторые частные случаи: как правило, для импульсного представления выбирают $\psi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r}) = e^{i\boldsymbol{p}\boldsymbol{r}}$, что соответствует $d\nu = \frac{d^d \boldsymbol{p}}{(2\pi)^d}$. Для координатного — $\psi_{\boldsymbol{r}_0}(\boldsymbol{r}) = \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0)$, что соответствует $d\nu = d^d\boldsymbol{r}$.

Нормировка по асимптотикам

Типичная задача — следующая. Допустим, мы нашли *какое-то* состояние непрерывного спектра $\psi_f(\boldsymbol{r})$, и мы хотим его нормировать а именно— найти $c(f)$ или $\nu(f)$. В принципе, эта задача прямолинейная, но сложная — это требовало бы явного вычисления нетривиального интеграла перекрытия $\int d\boldsymbol{r} \psi^*_{f'}(\boldsymbol{r})\psi_f(\boldsymbol{r})$ (на различных значениях f!), явной демонстрации, что интеграл пропорционален дельта-функции, и нахождения коэффициента пропорциональности.

Всё значительно усложняется тем, что явный вид волновой функции $\psi_f(\boldsymbol{r})$ известен далеко не во всякой задаче (а там где он известен — как правило, даётся какой-то нетривиальной спец.функцией, считать интеграл с которой — крайне нетривиальная задача) — чаще известны лишь какие-то её асимптотики. А раскладываться по базису нам нужно регулярно. Как же быть?

Оказывается, что для нормировки состояний непрерывного спектра достаточно лишь знать асимптотики при $x \to \pm\infty$. Дело в том, что в интегралах перекрытия можно можно явно выделить вклад от интегрирования на больших $|x| > \Lambda \to \infty$, при котором уже можно использовать асимптотическое выражение:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*_{f'}(x)\psi_f(x) = \int_{-\infty}^{-\Lambda} dx \psi^*_{f'}(x)\psi_f(x) + \int_{\Lambda}^{\infty} dx \psi^*_{f'}(x)\psi_f(x) + \int_{-\Lambda}^{\Lambda} \psi^*_{f'}(x)\psi_f(x) dx, \tag{25}$$

Третий же интеграл — конечен, в том смысле что он предствляет собой *регулярную функцию* от f и f'. Ответ же, как мы знаем — сингулярен, представляет собой дельта-функцию от $f - f'$. Поэтому третий вклад вообще можно выбросить[12].

Дальше — ещё проще, ведь ровно по той-же логике, в первом интеграле мы можем выбрать Λ совершенно произвольной. В частности, если мы вернём $\Lambda = 0$, сингулярное поведение не изменится! Конечный вывод такой — для определения нормировки состояний непрерывного спектра, достаточно интегрировать лишь асимптотики состояний *откуда угодно* до бесконечности; а в полученном интеграле нужно выделить дельта-функциональный вклад, выбрасывая остальные. Такой рецепт реализуется гораздо проще, чем решение точной задачи.

Более того, он позволяет сразу отнормировать широкий класс задач. В качестве примера и демонстрации самого метода, выберем задачу рассеяния, в которой в общем случае от волновых функций известны только лишь асимптотики (7) и (9) (имеется усложнение, связанное с тем, что там-то непрерывный спектр вырожден, поэтому дополнительно нам нужно убедиться, что $\left|\psi_p^{(+)}\right\rangle$ и $\left|\psi_p^{(-)}\right\rangle$ ортогональны. Однако, это тоже можно сделать по асимптотикам — ведь их перекрытие не может быть конечным, оно может *либо* быть бесконечным, *либо* строго нулём; нам лишь достаточно доказать, что там не будет дельта-функции). Рассмотрим для простоты случай спадающего на обоих бесконечностях потенциала, так что $p = p'$. Тогда:

$$\boxed{\psi_p^{(+)}(x) = \begin{cases} e^{ipx} + re^{-ipx}, & x \to -\infty, \\ te^{ip'x}, & x \to +\infty. \end{cases}}$$

$$\left\langle \psi_{p_0}^{(+)} | \psi_p^{(+)} \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} (\psi_{p_0}^{(+)}(x))^* \psi_p^{(+)}(x) dx \approx \int_{-\infty}^{0} dx (e^{-ip_0 x} + r^*(p_0) e^{ip_0 x})(e^{ipx} + r(p)e^{-ipx}) + \int_0^{\infty} dx \cdot t(p_0) e^{-ip_0 x} t(p) e^{ipx} \underset{p \approx p_0}{\approx}$$
$$\approx \int_{-\infty}^{0} e^{i(p-p_0)x} dx + r(p_0) \int_{-\infty}^{0} dx e^{-ip_0 x - ipx} + r^*(p_0) \int_{-\infty}^{0} dx e^{ip_0 x + ipx} + |r(p_0)|^2 \int_{-\infty}^{0} e^{-ip(x-x_0)} + |t(p_0)|^2 \int_0^{\infty} e^{ip(x-x_0)} \tag{26}$$

Пока мы лишь применили обсуждённую выше схему и положили $p = p_0$ тем, где от этого интеграл не станет расходиться (ведь мы знаем, что в конечном итоге ответ пропорционален дельта-функции — поэтому достаточно считать p и p_0 сколь угодно близкими!). Второй и третий члены регулярны при $p = p_0 > 0$ (разумеется, для этого их нужно регуляризовать: $\lim_{\alpha\to 0} \int_0^{\infty} e^{2ipx - \alpha x} dx = \lim_{\alpha \to 0} \frac{1}{\alpha - 2ip} = \frac{i}{2p}$), поэтому мы их выбрасываем. В четвёртом члене делаем замену $x \to -x$ и получаем:

$$\left\langle \psi_{p_0}^{(+)} | \psi_p^{(+)} \right\rangle = \int_{-\infty}^{0} e^{i(p-p_0)x} dx + (|r(p_0)|^2 + |t(p_0)|^2) \int_0^{\infty} e^{ip(x-x_0)} dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(p-p_0)x} dx = 2\pi\delta(p - p_0) \tag{27}$$

[12] Разумеется, таким образом мы потеряем условие ортогональности — первый интеграл при $f \neq f'$ будет теперь отличен от нуля. Но какая разница? Ведь мы умеем его доказывать независимо

В конечном итоге нам удалось привести наш интеграл к известному представлению дельта-функции. Тот факт, что ответ оказался пропорционален дельта-функции, существенно связан с соотношением унитарности $R + T = 1$ — ведь если бы его не было, то имелся бы ещё один сингулярный при $p = p_0$ вклад вида $\frac{i}{p-p_0}$ — а это не что-то, чего нам хотелось бы видеть.

Таким образом, мы получили, что наличие рассеивателя не повлиял на плотность состояний — ведь она получилась такой-же, как и для плоских волн. Несложно убедиться, что ровно точно так-же получается и для $\left\langle\psi^{(-)}_{p_0'}|\psi^{(-)}_{p'}\right\rangle$. Этим мы воспользовались ранее, при обсуждении нестационарной задачи рассеяния — а теперь мы это продемонстрировали явным вычислением.