

Семинар 4. Непрерывный спектр. Задача рассеяния

29 сентября 2018 года

Асимптотический вид состояний непрерывного спектра

Обсудим теперь некоторые свойства состояний непрерывного спектра для локализованных (т.е. спадающих достаточно быстро на бесконечности) потенциалов. Как обсуждалось ранее, на бесконечности общее решение уравнения Шрёдингера устроено следующим образом:

$$\psi(x) \approx \begin{cases} a_L e^{ikx} + b_L e^{-ikx}, & x \rightarrow -\infty \\ a_R e^{ikx} + b_R e^{-ikx}, & x \rightarrow +\infty \end{cases}, \quad E = \frac{k^2}{2m} \quad (1)$$

Напомним, при исследовании дискретного спектра мы фиксировали, скажем, при $x \rightarrow -\infty$ один из параметров (при растущей экспоненте $e^{-\kappa x}$) нулём, решали соответствующую краевую задачу — и в общем случае получали при $x \rightarrow +\infty$ пару коэффициентов $C_1 e^{\kappa x} + C_2 e^{-\kappa x}$. Дальнейшее требование $C_1(E) = 0$ задавало нам дискретный спектр уровней энергии связанных состояний.

Для непрерывного спектра требования зануления одного из коэффициентов нет, из-за чего состояния непрерывного спектра **двукратно вырождены**: фиксируя, например, $a_L = 0, b_L = 1$ и решая краевую задачу, мы будем получать какие-то значения a_R и b_R ; и фиксируя $a_L = 1$ и $b_L = 0$ мы будем получать другое решение. В общем же случае, на эти коэффициенты имеет место линейная связь.

Стандартный выбор пары линейно независимых решений для непрерывного спектра — это так называемые состояния **стационарной задачи рассеяния**, имеющие следующие асимптотики:

$$\psi_k^{(+)}(x) = \begin{cases} e^{ikx} + r e^{-ikx}, & x \rightarrow -\infty \\ t e^{ikx}, & x \rightarrow +\infty \end{cases}, \quad \psi_k^{(-)}(x) = \begin{cases} t' e^{-ikx}, & x \rightarrow -\infty \\ e^{-ikx} + r' e^{ikx}, & x \rightarrow +\infty \end{cases} \quad (2)$$

Первое решение описывает волну, падающую слева (e^{ikx}), которая с какой-то амплитудой отражается ($r e^{-ikx}$) и с какой-то амплитудой проходит ($t e^{ikx}$). Второе же решение описывает волну, падающую справа. Амплитуды r, t, r', t' , вообще говоря, зависят от энергии (или от параметра k) и от явного вида потенциала. **Решение** задачи рассеяния заключается в нахождении этих амплитуд.

Поток вероятности и унитарность рассеяния

Одно из основополагающих свойств квантовой механики — это унитарность эволюции: уравнение Шрёдингера сохраняет нормировку волновой функции $\langle \psi | \psi \rangle = \int |\psi(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} = \text{const}$. Ранее обсуждалось, что величина $\rho(\mathbf{x}) = |\psi(\mathbf{x})|^2$ несёт смысл плотности вероятности обнаружить частицу в точке \mathbf{x} ; это — наблюдаемая величина, и ей соответствует эрмитов оператор плотности числа частиц:

$$\hat{\rho}(\mathbf{x}_0) = \delta(\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}_0) \quad (3)$$

Как правило¹, если имеет место закон сохранения какой-то величины, то для *плотности* этой величины можно написать **уравнение непрерывности**:

$$\int \rho(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \text{const} \Leftrightarrow \partial_t \rho(\mathbf{x}) + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{x}) = 0. \quad (4)$$

Величина $\mathbf{j}(\mathbf{x})$ носит название **плотности потока** этой величины. Действительно, проинтегрировав это уравнение по произвольной области Ω , и воспользовавшись теоремой Лиувилля-Остроградского, мы получаем:

$$\partial_t \int_{\Omega} \rho(\mathbf{x}) d\mathbf{x} + \int_{\partial\Omega} \mathbf{j}(\mathbf{x}) \cdot d\mathbf{S} = 0 \quad (5)$$

(то есть изменение величины в области Ω определяется интегралом от потока через границу этой поверхности).

¹Это относится, в частности, ко всем сохраняющимся величинам, которые связаны с теоремой Нётер

В частности, используя уравнение Шрёдингера, можно вывести выражение для плотности потока импульса:

$$\begin{aligned} \partial_t |\psi(\mathbf{x})|^2 &= \psi^*(\mathbf{x}) \partial_t \psi(\mathbf{x}) + \text{c.c.} = \psi^*(\mathbf{x}) \left[\frac{i\hbar}{2m} \nabla^2 - \frac{i}{\hbar} V(\mathbf{x}) \right] \psi(\mathbf{x}) + \text{c.c.} = \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \left[\nabla(\psi^* \nabla \psi) - |\nabla \psi|^2 \right] + \text{c.c.} = \nabla \frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \end{aligned} \quad (6)$$

(здесь мы воспользовались тождеством $\nabla(f \nabla g) = \nabla f \cdot \nabla g + f \nabla^2 g$, а также мнимостью члена с $V(\mathbf{x})$ и $|\nabla \psi|^2$ — поэтому они выпадают при комплексном сопряжении). Тем самым, с произвольной волновой функцией связан ток²:

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}) = -\frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) = \frac{1}{2} (\psi^* \hat{\mathbf{v}} \psi + \text{c.c.}) \quad (7)$$

Последняя форма — лёгкий способ запомнить это выражение; тут мы ввели оператор групповой скорости $\hat{\mathbf{v}} = \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m} = -\frac{i\hbar}{m} \nabla$. 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 $\psi^* \hat{\mathbf{v}} \psi$ 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 $\psi(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r})| e^{i\varphi(\mathbf{r})}$ и подставить в выражение, то мы получим:

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{m} |\psi(\mathbf{r})|^2 \nabla \varphi \quad (8)$$

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

Следствия для задачи рассеяния Обсудим теперь следствия условия унитарности для одномерной задачи рассеяния. Если мы попробуем вычислить токи числа частиц для состояний дискретного спектра, то мы немедленно получим ноль — ведь последние всегда можно выбрать чисто вещественными, и поэтому для них $\nabla \varphi = 0$.

Однако, несложно видеть, что для состояний задачи рассеяния с каждым из слагаемых — падающей (e^{ikx}), отражённой (re^{-ikx}) и прошедшей (te^{ikx}) связан конечный поток вероятности, и суммарный поток в каждой точке отличен от нуля:

$$j_{\text{пад}} = \frac{\hbar k}{m}, \quad j_{\text{отр}} = \frac{\hbar k}{m} |r|^2, \quad j_{\text{прош}} = \frac{\hbar k}{m} |t|^2 \quad (9)$$

С другой стороны, для стационарных состояний зависимость различных наблюдаемых от времени отсутствует; поэтому уравнение непрерывности устроено просто как $\nabla \cdot \mathbf{j}(x) = 0 \Rightarrow j(x) = \text{const}$. В частности, вычисляя потоки при $x \rightarrow -\infty$ и $x \rightarrow +\infty$, мы получаем³:

$$j_{\text{пад}} - j_{\text{отр}} = j(x \rightarrow -\infty) = j(x \rightarrow +\infty) = j_{\text{прош}} \Leftrightarrow |r|^2 + |t|^2 = 1, \quad (10)$$

и аналогичное соотношение можно выписать, рассматривая и «правую» задачу рассеяния: $|r'|^2 + |t'|^2 = 1$.

Мы можем ввести также классическую интерпретацию: определить **вероятность отражения** R и **вероятность прохождения** T следующим образом:

$$R \equiv \frac{j_{\text{отр}}}{j_{\text{пад}}} = |r|^2, \quad T \equiv \frac{j_{\text{прош}}}{j_{\text{пад}}} = |t|^2 \quad (11)$$

и в таком случае условие унитарности — это просто условие того, что частица либо отражается, либо проходит — третьего (поглощения) не дано.

²Формально говоря, мы получили равенство $\text{div} \mathbf{j} = -\frac{i\hbar}{2m} \text{div} [\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*]$, из которого, вообще говоря, не следует равенство самих токов — ведь к \mathbf{j} можно прибавить ротор произвольного векторного поля $\text{rot} \mathbf{a}$, и дивергенция при этом не изменится. Непосредственно равенство для \mathbf{j} будет следовать, если потребовать дополнительное условие $\text{rot} \mathbf{j} = 0$ — 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 \mathbf{j} , получается из немного других соображений — а именно, из варьирования *действий* по вектор-потенциалу $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$.

³Вообще говоря, мы не имеем права обходиться с различными слагаемыми в волновой функции независимо — плотность частиц или ток зависят от волновой функции квадратично. Однако, можно убедиться прямым вычислением, что все интерференционные члены сокращаются.

Симметрия по отношению к обращению времени

В классической механике имеет место симметрия по отношению к обращению времени, и формулируется она достаточно просто: если $(\mathbf{x}(t), \mathbf{p}(t))$ является решением классических уравнений движения, то $(\mathbf{x}(-t), -\mathbf{p}(-t))$ — тоже. Последняя, однако, соответствует частице, движущийся по траектории в обратном направлении.

В квантовой механике этой симметрии соответствует вещественность гамильтониана⁴ $\hat{H} = \hat{H}^*$. Действительно, если мы комплексно сопряжём УШ, то при наличии этой симметрии мы получим, что $\psi^*(\mathbf{r}, -t)$ тоже ему удовлетворяет.

Для стационарного УШ это означает, что если $\psi(\mathbf{r})$ — решение стационарного УШ, то $\psi^*(\mathbf{r})$ — тоже. Для связанных состояний это никакой информации не даёт, поскольку волновые функции всегда можно выбрать вещественными. Однако, это несёт полезную информацию для состояний непрерывного спектра: сопрягая, например, $\psi_k^{(L)}(x)$ из уравнения (2), мы получаем линейно-независимое с $\psi_k^{(L)}(x)$ решения. А это, в свою очередь, означает, что $\psi_k^{(R)}(x)$ должно линейно выражаться через них:

$$\psi_k^{(-)}(x) \equiv \alpha\psi_k^{(+)}(x) + \beta(\psi_k^{(+)}(x))^* = \begin{cases} \alpha(e^{ikx} + re^{-ikx}) + \beta(e^{-ikx} + r^*e^{ikx}) \equiv t'e^{-ikx}, & x \rightarrow -\infty \\ \alpha te^{ikx} + \beta t^*e^{-ikx} \equiv e^{-ikx} + r'e^{ikx} & x \rightarrow +\infty \end{cases} \quad (12)$$

откуда мы получаем следующую связь амплитуд:

$$\begin{cases} \alpha + \beta r^* & = 0 \\ \alpha r + \beta & = t' \\ \alpha t & = r' \\ \beta t^* & = 1 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \alpha & = -\frac{r^*}{t^*} \\ \beta & = \frac{1}{t^*} \end{cases}, \quad \boxed{\begin{cases} t' & = t \\ r' & = -r^*t/t^* \end{cases}} \quad (13)$$

В частности, отсюда следует, что вероятности прохождения слева направо и справа налево совпадают: $R = R'$, $T = T'$.

Потенциальные ступени Вышесказанные утверждения необходимо модифицировать, если потенциал имеет характер «ступеньки» — т.е. имеет различные пределы при $x \rightarrow \pm\infty$. Для определённости, рассмотрим следующий потенциал:

$$U(x) \approx \begin{cases} 0, & x \rightarrow -\infty \\ U_0 > 0, & x \rightarrow +\infty \end{cases} \quad (14)$$

Перечислим основные отличия в таком случае:

1. При энергии $U_0 > E > 0$, волновые функции при $x \rightarrow +\infty$ имеют экспоненциальный характер, из-за чего требование зануления коэффициента при растущей экспоненте восстанавливается. В этой области спектр непрерывный, но однократно вырожденный. Вероятности отражения/прохождения в этом случае тривиальны: $R = 1$, $T = 0$, а вот фаза амплитуды рассеяния r содержит в себе нетривиальную информацию.
2. При энергии $E > U_0$, спектр по-прежнему двукратно вырожден; однако волновые вектора слева и справа от рассеивателя, вообще говоря, различны: $k = \sqrt{2mE}$ и $k' = \sqrt{2m(E - U_0)}$. Из-за этого модифицируются выражения для вероятностей отражения и прохождения, а поэтому и условие унитарности:

$$\boxed{R = |r|^2, \quad T = \frac{k'}{k}|t|^2, \quad R + T = 1} \quad (15)$$

3. Операция обращения времени также несколько модифицируется: $t' = \frac{k'}{k}t$. При этом соотношение на вероятности $R' = R$ и $T' = T$ остаётся верным.

Аналитические свойства амплитуд рассеяния

Решая *хорошие* уравнения с *хорошими* свойствами⁵, мы будем получать решения, которые являются как аналитическими функциями координаты, так и аналитическими функциями параметров (в частности, энергии E или параметра k).

Заметим, что если аналитически продолжить, скажем, состояние $\psi_k^{(+)}(x)$ по параметру k на верхнюю мнимую полуось $k \equiv ik$, $\kappa > 0$, то мы формально получим следующее решение уравнения Шрёдингера:

$$\psi_{i\kappa}^{(+)}(x) = \begin{cases} e^{-\kappa x} + r(i\kappa)e^{\kappa x}, & x \rightarrow -\infty \\ t(i\kappa)e^{-\kappa x}, & x \rightarrow +\infty \end{cases}, \quad E = -\frac{\kappa^2}{2m} \quad (16)$$

⁴Если гамильтониан описывает частицу со спином, и волновая функция — многокомпонентный спинор, то может оказаться необходимым добавить к комплексному сопряжению ещё какое-то унитарное преобразование (например, обращение времени изменяет направление магнитного момента, а значит — и спина; поэтому для задачи со спином, обращение времени включает в себя оператор переворота спина).

С другой стороны, даже в отсутствие спина, магнитное поле входит в гамильтониан явно комплексным образом — путём замены оператора импульса на $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A}$, из-за чего говорят, что магнитное поле в квантовой механике эту симметрию нарушает. Дело в том, что из теории поля известно, что вектор-потенциал \mathbf{A} тоже должен менять знак при обращении времени.

⁵Математический эквивалент *хорошести* мы опустим

В частности это означает, что если $t(i\kappa) \rightarrow \infty$ и $r(i\kappa) \rightarrow \infty$ так, чтобы $t/r = O(1)$, то такая волновая функция будет описывать настоящее связанное состояние. Таким образом: полюса амплитуд прохождения и отражения на верхней мнимой полуоси (как аналитических функций параметра k) соответствуют связанным состояниям.

Полюса на нижней комплексной полуоси $k = -i\kappa$, хотя тоже наивно соответствуют вещественной энергии $E = -\frac{\kappa^2}{2m}$, связанным состояниям не соответствуют — несложно видеть, что им соответствуют экспоненциально растущие решения. Если мы перейдем от параметра k к параметру $E = \frac{k^2}{2m}$ (для чего нам необходимо рассмотреть двулистую Риманову поверхность, например, с разрезом $[0, \infty)$), то процедура аналитического продолжения $k \mapsto i\kappa$ и $k \mapsto -i\kappa$ будут приводить нас попросту на различные листы этой Римановой поверхности. Полюса, соответствующие связанным состояниям, лежат на так называемом *физическом* листе.

Пример. Дельта-яма

Всё вышесказанное можно продемонстрировать на простейшем примере рассеяния на потенциале дельта-ямы: $U(x) = \frac{\kappa}{m} \delta(x)$. При этом асимптотический вид (2) является точным, а дельта-яма всего лишь накладывает дополнительное граничное условие при $x = 0$, из которого мы можем найти амплитуды:

$$\Delta(\ln \psi)'_{x=0} = 2\kappa \Rightarrow \boxed{r = \frac{\kappa}{ik - \kappa}, \quad t = 1 + r = \frac{ik}{ik - \kappa}} \quad (17)$$

Мы видим, что $R = \frac{\kappa^2}{k^2 + \kappa^2} = \frac{E_0}{E + E_0}$, $T = \frac{k^2}{k^2 + \kappa^2} = \frac{E}{E + E_0}$ (где $E_0 = \frac{\kappa^2}{2m}$ — энергия связанного состояния в этой яме, если оно имеется), и поэтому $R + T = 1$. Кроме того, мы видим, что у этих выражений имеется полюс при $k = -i\kappa$; этот полюс соответствует связанным состояниям только при $\kappa < 0$, и энергия этого связанного состояния равна попросту $-E_0$. Что отражает наше знание про спектр дельта-ямы.

Нормировка состояний непрерывного спектра

Ранее мы обсуждали, что состояния непрерывного спектра невозможно нормировать на единицу, и вместо этого они нормируются на дельта-функцию:

$$\langle \psi_f | \psi_{f'} \rangle = c(f) \delta(f - f') \quad (18)$$

Если мы хотим работать с непрерывным спектром — раскладываться по состояниям, искать функцию распределения величины f , и т.п. — то нам очень полезно было бы научиться вычислять величину $c(f)$. С другой стороны, если $\psi_f(x)$ является каким-то сложным состоянием непрерывного спектра какого-то сложного потенциала, то прямолинейное вычисление интеграла перекрытия с дальнейшим сведением его к известному интегральному представлению дельта-функции, как правило, связано с большими трудностями. К счастью, часто это не требуется — оказывается, для определения нормировочного множителя достаточно знать только асимптотический вид волновых функций.

Трюк заключается в следующем. Введём произвольный масштаб Λ и запишем перекрытие следующим образом:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_{f'}^*(x) \psi_f(x) = \int_{-\infty}^{-\Lambda} dx \psi_{f'}^*(x) \psi_f(x) + \int_{\Lambda}^{\infty} dx \psi_{f'}^*(x) \psi_f(x) + \int_{-\Lambda}^{\Lambda} \psi_{f'}^*(x) \psi_f(x) dx. \quad (19)$$

Дальше мы можем заметить, что при произвольном значении Λ , последний член — конечен при $f = f'$, а вообще он представляет собой *регулярную функцию* от f и f' . Как мы знаем, напротив, ответ — сингулярен, представляет собой дельта-функцию от $f - f'$. Поэтому если мы стремимся «отловить» дельта-функциональный вклад, то возникнуть он может только с бесконечности, с первых двух членов. Проводя эти рассуждения для достаточно больших Λ , мы понимаем, что для нормировки мы действительно можем пользоваться только асимптотическим представлением волновых функций.

Продемонстрируем, как это работает для задачи рассеяния — для этого вычислим их нормировку (поверим, что $\langle \psi_k^{(L)} | \psi_k^{(R)} \rangle = 0$ и будем работать только с «левыми» состояниями):

$$\langle \psi_k | \psi_{k'} \rangle = \text{reg.} + \int_{-\infty}^{-\Lambda} (e^{-ikx} + r_k^* e^{ikx})(e^{ik'x} + r_{k'} e^{-ik'x}) dx + \int_{\Lambda}^{\infty} t_k^* e^{-ikx} t_{k'} e^{ik'x} dx$$

Дальше заметим, что если уже в этом выражении мы заменим пределы интегрирования на ноль, мы опять добавим всего лишь регулярный вклад, и характер сингулярности не изменится; однако вычисление будет проще. Кроме того, отметим, что сингулярные при $k \rightarrow k'$ члены могут возникать только если осцилляции в экспонентах будут гасить друг друга; интерференционные члены несингулярны. Наконец, поскольку амплитуды являются в каком-то смысле «медленными огибающими», то в них мы можем положить $k = k'$. Поэтому мы получаем:

$$\langle \psi_k | \psi_{k'} \rangle = \text{reg.} + \int_{-\infty}^0 (e^{-i(k-k')x} + |r_k|^2 e^{i(k-k')x}) dx + \int_0^{\infty} |t_k|^2 e^{-i(k-k')x} dx \quad (20)$$

Заменяя во втором члене первого интеграла $x \mapsto -x$ и пользуясь условием унитарности $|r_k|^2 + |t_k|^2 = 1$, мы получаем стандартное представление дельта-функции; из чего мы заключаем, что состояния задачи рассеяния нормированы точно так же, как и обыкновенные плоские волны:

$$\langle \psi_k | \psi_{k'} \rangle = \text{reg.} + \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i(k-k')x} dx = 2\pi\delta(k-k') \quad (21)$$

(отметим, что регулярная часть после всех этих процедур обязана сократиться — как мы знаем, в ответе её нет, состояния с различными $k \neq k'$ обязаны быть ортогональными).

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, дискретизирует задачу⁶. При этом отличие качественное отличие дискретного и непрерывного спектра останется — скажем, в энергетическом представлении расстояние между соседними уровнями энергиями $\propto \frac{1}{V} \rightarrow 0$, 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, усложняя вычисления — хотя, разумеется, физические ответы от него зависеть не могут. Более того, всегда требуется явно разграничить явления, для которых конечный, 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 $\psi(\mathbf{r} + L_i \hat{e}_i) \equiv \psi(\mathbf{r})$ (тут L_i — размер ящика в пространственном измерении $i = x, y, z$, а \hat{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:

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}} \quad (22)$$

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 $\Delta p = 2\pi/L_i \rightarrow 0$ при $V \rightarrow \infty$. В таком случае, суммирование по всем состояниям непрерывного спектра (которое возникает, скажем, при разложении по такому базису), как правило, можно заменять на интегрирование

$$\sum_{\mathbf{p}} f(\mathbf{p}) \equiv \sum_{\{n_i \in \mathbb{Z}\}} f \left[\mathbf{p} = \sum_i \frac{2\pi n_i}{L_i} \hat{e}_i \right] \approx \int_{-\infty}^{\infty} \prod_i dn_i f(\mathbf{p}) = \int_{-\infty}^{\infty} \prod_i \frac{dp_i}{(2\pi/L_i)} f(\mathbf{p}), \quad (23)$$

или, символически:

$$\boxed{\sum_{\mathbf{p}} \leftrightarrow \int \frac{V d^d \mathbf{p}}{(2\pi)^d}} \quad (24)$$

К примеру, разложение единицы:

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \equiv \sum_{\mathbf{p}} \psi_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) \approx \int \frac{V d^d \mathbf{p}}{(2\pi)^d} \frac{1}{V} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r} - i\mathbf{p}\mathbf{r}'} = \int \frac{d^d \mathbf{p}}{(2\pi)^d} e^{i\mathbf{p}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (25)$$

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

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. Если же искусственно уширить каждую

⁶Во 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.

дельта-функцию, то при достаточно больших конечных объёмах получится вполне регулярная функция⁷. Более того, поскольку расстояние между соседними уровнями, как правило, обратно пропорционально объёму системы, то в пределе $V \rightarrow \infty$ 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 состояний⁸.

Нестационарная задача рассеяния и задержка волнового пакета

Вообще говоря, до сих пор мы обсуждали стационарные задачи. С другой стороны, с точки зрения задачи рассеяния более логичной кажется задача нестационарная, для определения которой нам необходимо:

1. Задать начальные условия, которые соответствуют волновому пакету, находящемуся на $x \rightarrow -\infty$ при времени $\tau \rightarrow -\infty$ и имеющему конечный импульс p_0 , направленный на рассеиватель. Примером такого волнового пакета может служить следующая волновая функция:

$$\psi(x, -\tau_0) \equiv \psi_0(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}a^{1/2}} \exp\left(-\frac{(x+L)^2}{2a^2} + ip_0x\right). \quad (26)$$

В координатном представлении она представляет собой волновой пакет ширины a вокруг точки $x = -L$, а в импульсном — волновой пакет ширины $\sim 1/a$ вокруг среднего значения k_0 .

2. Решить *нестационарное* уравнение Шрёдингера, рассмотрев эволюцию этого волнового пакета.
3. Исследовать асимптотики полученного решения при $\tau \rightarrow +\infty$, которые представляли бы пару волновых пакетов — отражённый, который находится на $x \rightarrow -\infty$ и имеет импульс $-p$, и прошедший, который летит на $x \rightarrow +\infty$ и имеет импульс p .
4. Наконец, вычислить вероятность отражения $R = \int_{-\infty}^0 |\psi(x, \tau \rightarrow +\infty)|^2 dx$ и $T = \int_0^{\infty} |\psi(x, \tau \rightarrow +\infty)|^2 dx$.

Априори утверждение о том, что эти вероятности совпадают с вероятностями, которые мы определили в стационарной задаче рассеяния, не является очевидным. Тем не менее, это действительно так, что мы попробуем продемонстрировать ниже, для чего мы попробуем решить нестационарное уравнение Шрёдингера в общем виде.

При $\tau \rightarrow +\infty$ 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 может на некоторое время «застрять» в рассеивателе⁹. Мы ставим своей целью найти время этой задержки.

Для решения нестационарного УШ, как обычно, необходимо разложиться по базису стационарных решений (2), для чего мы можем воспользоваться выведенной выше нормировкой состояний непрерывного спектра¹⁰:

$$\hat{\mathbb{I}} = \int_0^{\infty} \frac{dp}{2\pi} \left(|\psi_p^{(+)}\rangle \langle \psi_p^{(+)}| + |\psi_p^{(-)}\rangle \langle \psi_p^{(-)}| \right) \quad (27)$$

Разложимся по базису, используя асимптотики при $x \rightarrow -\infty$:

$$\psi_+(p) = \langle \psi_p^{(+)} | \psi_0 \rangle = 2^{1/2} \pi^{1/4} a^{1/2} \left[\exp\left(-\frac{1}{2}(p-p_0)^2 a^2 + i(p-p_0)L\right) + r^* \exp\left(-\frac{1}{2}(p+p_0)^2 a^2 - i(p+p_0)L\right) \right] \quad (28)$$

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 $|\psi_p^{(-)}\rangle$, как и следует из нашей физической интуиции (ведь это — решение задачи рассеяния «справа-налево»!) тоже будут экспоненциально малы и нас интересовать не будут.

⁷В 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.

⁸Хотя, разумеется, более корректно её называть плотностью (в смысле объёмной плотности) плотности состояний. Но такое название довольно нелепо.

⁹В классической физике такой эффект тоже имеет место быть.

¹⁰Разумеется, 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.

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

$$\psi(x, \tau) = \int \frac{dp}{2\pi} \psi_+(p, \tau) \cdot \psi_p^{(+)}(x) = 2^{1/2} \pi^{1/4} a^{1/2} \int \frac{dp}{2\pi} \psi_p^{(+)}(x) \exp\left(-\frac{1}{2}(p-p_0)^2 a^2 + i(p-p_0)L\right) e^{-i\varepsilon_p(\tau+\tau_0)} \quad (29)$$

Мы не знаем явный вид функции $\psi_p^{(+)}(x)$, но знаем асимптотики при $x \rightarrow \pm\infty$, поэтому давайте посмотрим на асимптотики $\psi(x, \tau)$ при $x \rightarrow \pm\infty$. 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: $t \equiv t(p) = \sqrt{T(p)}e^{i\theta_p}$. Именно из-за зависимости фазы от импульса и произойдёт в конечном итоге эффект задержки. Итак, раскладываем ε_p и θ_p до второго порядка и берём Гауссов интеграл:

$$\begin{aligned} \psi(x \rightarrow +\infty, \tau) &\approx 2^{1/2} \pi^{1/4} a^{1/2} \int \frac{dp}{2\pi} \sqrt{T(k)} \exp\left(i\left[\theta_{p_0} + \theta'_{p_0}(p-p_0) + \frac{1}{2}\theta''_{p_0}(p-p_0)^2\right]\right) \cdot e^{ipx} \cdot \\ &\cdot \exp\left(-\frac{1}{2}(p-p_0)^2 a^2 + i(p-p_0)L\right) \cdot \exp\left(-i\left[\varepsilon_{p_0} + \varepsilon'_{p_0}(p-p_0) + \frac{1}{2}\varepsilon''_{p_0}(p-p_0)^2\right](\tau+\tau_0)\right) = \\ &= \frac{a^{1/2}}{\pi^{1/4} \tilde{a}(t)} \sqrt{T(p_0)} \exp\left[-\frac{[(x+L) + \theta'(p_0) - \varepsilon'(p_0)(\tau+\tau_0)]^2}{2\tilde{a}^2(t)} + i \cdot \text{phase}\right] \quad (30) \end{aligned}$$

где $\tilde{a}^2(t) = a^2 - i\theta''(p_0) + i\varepsilon''(p_0)(\tau+\tau_0)$. Исследуем теперь полученное выражение:

1. Это — гауссов волновой пакет, центр которого расположен при $x_0(\tau) = -L - \theta'(p_0) + \varepsilon'(p_0)(\tau+\tau_0) = -L + \varepsilon'(p_0)(\tau+\tau_0 - \theta'/\varepsilon')$. Это соответствует пакету, который движется с групповой скоростью $v = \partial\varepsilon/\partial p = p/m$. Однако выражение это устроено так, будто он стартовал из точки $-L$ не в момент времени $\tau = -\tau_0$ (как было бы со свободным движением), а чуть позже, в момент времени $\tau = -\tau_0 + \theta'/\varepsilon'$. Это и есть явление задержки волнового пакета; время же задержки равно $\Delta\tau = \theta'/\varepsilon' = \partial\theta/\partial\varepsilon$. Тут сразу же возникает важнейшее свойство фазы — ведь в силу причинности, $\Delta\tau > 0$ (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 $\frac{1}{a^2(t)} = \text{Re}\frac{1}{\tilde{a}^2(t)} \Rightarrow a^2(t) = a^2 + \frac{[\varepsilon''(p_0)(\tau+\tau_0) - \theta''(p_0)]^2}{a^2}$. Этот эффект называется «расплыванием волнового пакета», и связан он с наличием у спектра кривизны¹¹ $\varepsilon''(p_0)$; 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 $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x \rightarrow +\infty, \tau)|^2 dx = T(p_0)$ — что и завершает связь стационарной и нестационарной задачи рассеяния.

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

¹¹Для фотонов или для электронов в графене с приближении линейного спектра это явление отсутствует.