

Теоретическая физика. Квантовая Механика.

Тернов Алексей Игоревич

5 июля 2018 г.

Оглавление

1	Введение	5
1.1	Предпосылки возникновения квантовой механики	5
1.2	Основные этапы построения квантовой механики	6
1.3	Основные свойства, характерные для любого волнового движения	7
1.4	Линейный принцип суперпозиции состояний	8
2	Математический аппарат квантовой механики	13
2.1	Пространство состояний	13
2.2	Динамические переменные	15
2.3	Описание временной эволюции системы	18
2.4	Физическая интерпретация математического аппарата	19
2.5	Обобщение результатов на непрерывный спектр *	20
2.6	Одновременная (совместная) измеримость наблюдаемых	22
2.7	Некоммутирующие наблюдаемые. Соотношение неопределённостей	25
2.8	Элементы дираковской теории представлений	26
2.9	Квантовые скобки Пуассона	30
2.10	Координатное представление в квантовой механике	33
2.11	Импульсное представление в квантовой механике	40
3	Временная эволюция физических систем	43
3.1	Представление Шрёдингера	43
3.2	Представление Гейзенберга	46
3.3	Эволюция квантовомеханических средних	48
3.4	Сопоставление классической и квантовой механики. Теоремы Эренфеста	48
4	Одномерное движение	51

ОГЛАВЛЕНИЕ

4.1	Линейный гармонический осциллятор	51
5	Теория углового момента	57
5.1	Каноническое квантование	57
5.2	Орбитальный момент количества движения	61
5.3	Спин, или собственный механический момент частицы	64
6	Симметрия в квантовой механике и законы сохранения	69
6.1	Теория групп в квантовой механике	69
6.2	Группы Ли	73
6.3	Преобразования инвариантности в координатном представлении	76
6.4	Группа пространственных трансляций	78
6.5	Группа временных трансляций	80
6.6	Группа трёхмерных вращений	81
6.7	Неприводимые представления группы трёхмерных вращений	84
6.8	Спин и полный момент	87
6.9	Группа пространственной инверсии. Чётность.	88
8	Движение в центрально-симметричном поле	91
8.1	Уровни энергии	91
8.2	Общий подход к задаче о движении в центрально-симметричном поле.	91
8.3	Атом водорода	93
9	Симметрия в квантовой механике и законы сохранения	101
9.10	Задача о сложении угловых моментов	101
9.1	Теория возмущений	106
9.2	Стационарная теория возмущений	107
9.3	Нестационарная теория возмущений. Теория квантовых переходов	110
9.4	Это должен быть 5 параграф. Квазиклассический метод ВКБ	118
10	Введение в релятивистскую квантовую механику	125
10.1	Релятивистские уравнения	125
10.2	Уравнение Клейна-Фока-Гордона	127
10.3	Уравнение Дирака	130
10.4	Релятивистская ковариантность в уравнении Дирака	134

10.5	Операторы физических величин в теории Дирака	140
10.6	Квазирелятивистское приближение в теории Дирака	148
10.7	Тонкая структура уровней энергии атома водорода	152
10.8	Трудности в теории Дирака. Античастицы.	156
10.9	Эффект Зеемана	156
11	Тождественные частицы в квантовой механике	163
11.1	Принцип тождественности (неразличимости) частиц	163
11.2	Атом гелия	166
11.3	Квантование свободного электромагнитного поля	170
11.4	Взаимодействие квантовой системы с электромагнитным излучением	174

Глава 1

Введение

Замечание. Экзамен будет проходить следующим образом: можно посмотреть те билеты, которые лежат на сайте, они не менялись в течение двух лет. Три из вопросов являются обязательными. (По билету из каждого семестра плюс задача).

Четвёртый вопрос — для получения дополнительных зачётных единиц («повышенный уровень»). Эти темы будут помечены звёздочками.

1.1 Предпосылки возникновения квантовой механики

1900 г. – первые открытия Макса Планка в квантовой механике

$$a = \frac{\hbar^2}{m\epsilon^2} = 0,529 \cdot 10^{-8} \text{ см} - \text{характерный размер атома}$$

$\lambda = \frac{\hbar}{mc} = 3,9 \cdot 10^{-11} \text{ см}$ — комптоновская длина волны (граница применимости одночастичной квантовой механики)

Принципы классической физики:

- а) непрерывное изменение основных физических величин
- б) причинность

Не поддающиеся объяснению с точки зрения классической физики эффекты:

1. Излучение абсолютно черного тела

$$\rho = \int_0^{\infty} \rho_{\omega} d\omega \rightarrow \infty$$

2. Фотоэффект

3. Линейчатость спектров

$$\omega = R \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$$

4. Устойчивость атома

$$w = \frac{2e^2}{3c^2} |\dot{\vec{v}}|^2$$

1.2 Основные этапы построения квантовой механики

- Макс Планк, 1900 г. – идея квантования

$$E = n\varepsilon = n\hbar\omega$$

$\hbar = 1,05 \cdot 10^{-27}$ эрг·с – постоянная Планка (квант действия)

$$\hbar = 6,58 \cdot 10^{-22} \text{ МэВ} \cdot \text{с} = 1,05 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}$$

- Альберт Эйнштейн, 1905 г. – дуализм света

$$\varepsilon_{\text{ф}} = \hbar\omega, \quad \vec{p}_{\text{ф}} = \hbar \vec{k}$$

Это математические выражения корпускулярно-волнового дуализма (слева – корпускулярные величины, справа – волновые)

- Нильс Бор, 1913 г. – «старая» квантовая теория
Постулаты Бора:

1) постулат стационарного состояния

2) постулат частот

$$\omega = \frac{E_1 - E_2}{\hbar}$$

- Луи де Бройль, 1924 г. – волновые свойства частиц

$$E = \hbar\omega, \quad \vec{p} = \hbar \vec{k}, \quad \lambda_{\text{дБ}} = \frac{\hbar}{p}$$

- Эрвин Шрёдингер, Вернер Гайзенберг, 1926 г. – волновая, матричная механика

1.3 Основные свойства, характерные для любого волнового движения

Волновая функция

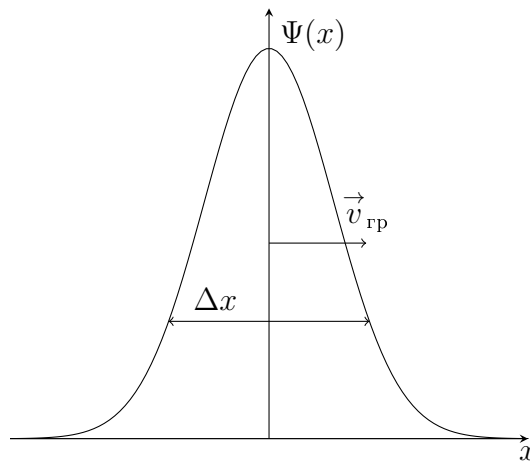
Например, волновая функция монохроматической волны, распространяющейся в положительном направлении оси X записывается так:

$$\psi(x, t) = Ae^{-i(\omega t - kx)}$$

Волновой пакет

Волновую функцию волнового пакета можно записать в виде:

$$\Psi(x, t) = \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} A(k) e^{-i(\omega(k)t - kx)} dk$$



$\vec{v}_{\text{гр}}$ – скорость центра масс волнового пакета

$$\Delta k \Delta x \geq 1$$

$$\Delta \omega \Delta t \geq 1$$

Соотношения неопределенностей Гайзенберга:

$$\Delta p \Delta x \geq \hbar, \quad \Delta E \Delta t \geq \hbar$$

Траекторий в квантовой механике нет в силу соотношения неопределенностей.

Макс Борн, 1926 г. – статистическое (вероятностное) значение (интерпретация) волновой функции.

$$\Psi^*(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) d^3x = w(t, \vec{r}) d^3x$$

$$|\Psi(\vec{r}, t)|^2 = w(t, \vec{r})$$

$$\int \Psi^*(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) d^3x = 1$$

Краткие итоги и систематизация результатов:

Классическая теория	Квантовая теория
Описание состояния	
$p_i(t), q_i(t)$ $\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$ $\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}$	$\Delta p \Delta x \geq \hbar, \Delta E \Delta t \geq \hbar$ 1) ограниченность классических методов 2) $\Psi(\vec{r}, t)$
Причинность	
$q_i(0), p_i(0)$	$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(\vec{r}) \right) \Psi(\vec{r}, t)$ –уравнение Шредингера; причинность носит не траекторный, а статистический характер
Наблюдаемые величины	
$q(t), p(t)$	постулат средних значений $F \rightarrow \hat{F}$ $\langle F \rangle = \langle \hat{F} \rangle = \frac{\int \Psi^* \hat{F} \Psi d^3x}{\int \Psi^* \Psi d^3x}$

1.4 Линейный принцип суперпозиции состояний

1.4.1 Краткие замечания

Будем очень долго идти к тому, чтобы определить понятие «состояния». Хотя бы потому, что состояние *не обязательно* описывается волновой функцией. Пойдём другим путём.

При помощи координатной волновой функции можно описать движение. У квантовых объектов есть также внутренние свойства (поляризация фотона, спин электрона). Даже если квантовая частица имеет классический аналог, нам мешает описать её движение соотношение неопределённостей.

Очень важна вероятностная трактовка.

1.4.2 Предварительное определение

Дадим предварительное определение линейного принципа суперпозиции состояний на языке волновых функций.

Формулировка.

1. Если квантовая система может находиться в состоянии ψ_1, ψ_2 , то она может находиться и в состоянии

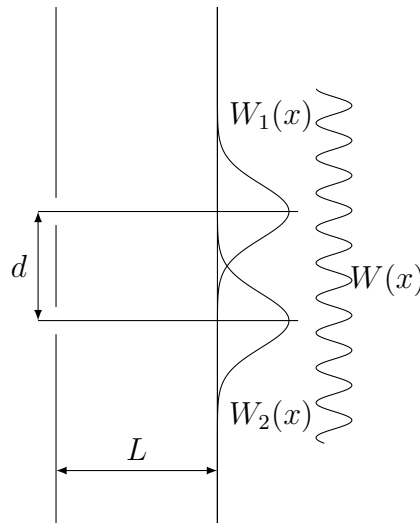
$$\Psi = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2, \quad c_1, c_2 \in \mathbb{C}$$

2. Умножение на число $c \neq 0$ не изменяет состояние

$$\psi \rightarrow c\psi$$

1.4.3 Два мысленных примера.

- Опыт 1. Интерференция электронов, опыт Юнга.



Реализация

1. Открыта щель 1, закрыта щель 2. $W_1(x)$
2. $W_2(x)$
3. Обе открыты, $W(x) \neq W_1(x) + W_2(x)$ (!)

Если длина волны Де-Бройля $\lambda_{\text{дБ}} \leq d < L$, то наблюдается весьма сложная интерференционная система минимумов, максимумов.

Возможно выпускать частицы строго по одной. В результате получим то же самое: по прошествии некоторого времени получим интерференционную картину (которая собирается из точек или пятен).

Значит, вероятностное поведение связано не с пучком электронов, а с каждым электроном в отдельности.

Интерпретируем этот результат на языке волновых функций. Складываются не вероятности, а волновые функции:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \left[\underbrace{\psi_1(\vec{r})}_{\text{hole 1}} + \underbrace{\psi_2(\vec{r})}_{\text{hole 2}} \right] \exp \left(-\frac{iEt}{\hbar} \right)$$

$$|\Psi(\vec{r}, t)|^2 = |\psi_1(\vec{r}) + \psi_2(\vec{r})|^2$$

Вопрос. С чем интерферирует электрон, если мы сопоставили волновую функцию каждому электрону в отдельности?

Ответ. Ответ немного странный: он интерферирует сам с собой, и он как бы проходит через две щели сразу. С другой стороны, можно поставить эксперимент, с помощью которого можно узнать, через какую именно щель он пройдёт. Но тут уже вступает в силу концепция измерения: из состояния суперпозиции мы перевели электрон в состояние $\psi_1(\vec{r})$. Измерение разрушает интерференционную картину и состояние суперпозиции.

• **Опыт 2. Поляризованные фотоны.**

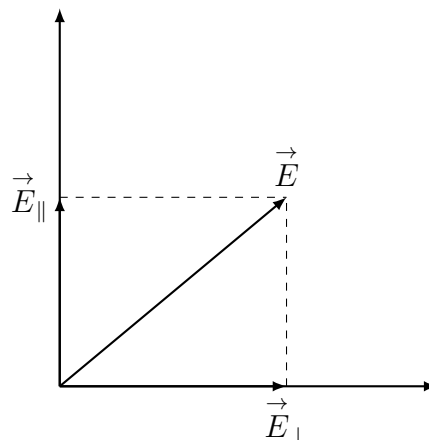
Рассмотрим классический пучок поляризованного света. Пусть поляризация линейная ($\vec{E} \perp \vec{H}$, \vec{E} колеблется строго в определённой плоскости).

На его пути стоит поляроид (поляризационный фильтр). Если направления поляризации совпадают, свет проходит, в противном случае — поглощается. Пусть свет поляризован под углом θ к оси поляроида.

$$\vec{E} = \vec{E}_{\parallel} + \vec{E}_{\perp}$$

- До поляроида: $\vec{E} \exp(-i\omega t)$
- После поляроида: $\vec{E}_{\parallel} \exp(-i\omega t)$
- $\frac{I_{pass}}{I_{fall}} = \frac{|\vec{E}_{\parallel}|^2}{|\vec{E}|^2} = \cos^2 \theta$

Ось поляроида



При этом интенсивность пропорциональна количеству падающих фотонов:

$$I_{fall} \sim N_{fall}, \quad I_{pass} \sim N_{pass}.$$

Отсюда

$$\frac{I_{pass}}{I_{fall}} = \frac{N_{pass}}{N_{fall}} = \cos^2 \theta$$

Будем считать, что фотон, поляризованный под углом θ , находится в особом состоянии:

$$|\text{Поляризованный под углом } \theta\rangle = c_1|\text{вдоль}\rangle + c_2|\text{перп.}\rangle$$

Вопрос. Что такое c_1, c_2 ?

Ответ. На квантовом языке это значит, что поляроид перевёл фотоны из состояния суперпозиции в состояние $c_1|\text{вдоль}\rangle$.

При этом говорят, что $\frac{|c_1|^2}{|c_1|^2 + |c_2|^2}$ — *вероятность прохождения фотона*.

По сути дела, поляроид можно трактовать как некий прибор, измеряющий состояние поляризации.

1.4.4 Окончательная формулировка принципа

1. Если квантовая система может находиться в состояниях $|1\rangle, |2\rangle$, то она может находиться в состоянии $|3\rangle = c_1|1\rangle + c_2|2\rangle$, при этом $\frac{|c_1|^2}{|c_1|^2 + |c_2|^2}$ — вероятность найти систему в состоянии 1.
2. Умножение на комплексное число, отличное от нуля, не меняет состояние.

$$|1\rangle \rightarrow c|1\rangle, (c \neq 0)$$

Состояние обозначается при помощи угловых скобок $|\dots\rangle$, внутри которых ставятся числа, которые эти состояния характеризуют (обозначение Дирака).

Глава 2

Математический аппарат квантовой механики и его физическая интерпретация

2.1 Пространство состояний

Физическое состояние системы описывается в квантовой механике при помощи векторов состояний, то есть физическому состоянию системы ставится в соответствие некоторый объект линейного пространства. Состояния обозначаются угловыми скобками $|\dots\rangle$, внутри которых ставятся числа, которые называют *квантовые числа*.

Примеры:

- $|\vec{p}\rangle$ — импульс
- $|\vec{r}\rangle$ — координата
- $|n\ell m\rangle$ — квантовые числа
- $|\varphi\rangle$
- $|\psi\rangle$

Аксиомы линейного пространства:

1. $|\psi\rangle + |\varphi\rangle = |\varphi\rangle + |\psi\rangle$
2. $(|\psi\rangle + |\varphi\rangle) + |\chi\rangle = |\psi\rangle + (|\varphi\rangle + |\chi\rangle)$
3. $c(|\psi\rangle + |\varphi\rangle) = c|\psi\rangle + c|\varphi\rangle$
4. $(c_1 + c_2)|\psi\rangle = c_1|\psi\rangle + c_2|\psi\rangle$

ГЛАВА 2. МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

5. $|\psi\rangle \rightarrow c|\psi\rangle$, ($c \neq 0$)
6. $0 \cdot |\psi\rangle = |0\rangle = 0$. Считается, что нулевой вектор не описывает никакого состояния (в противном случае, по предыдущему свойству, он бы описывал любое состояние). С другой стороны, если вероятность найти объект равна нулю, то считается, что его нет.
7. Пространство наделено *скалярным произведением*:

$$\langle \varphi | \psi \rangle :$$

$$(a) \quad \langle \psi | \varphi \rangle^* = \langle \varphi | \psi \rangle$$

$$(b) \quad \left. \begin{array}{l} |\tilde{\varphi}\rangle = \lambda_1 |\varphi\rangle \\ |\tilde{\psi}\rangle = \lambda_2 |\psi\rangle \end{array} \right\} \rightarrow \langle \tilde{\varphi} | \tilde{\psi} \rangle = \lambda_1^* \lambda_2 \langle \varphi | \psi \rangle$$

8. Пространство наделено нормой:

$$\| |\psi\rangle \| = \sqrt{\langle \psi | \psi \rangle}$$

При этом $\| |\psi\rangle \|^2 \geq 0$ и $\| |\psi\rangle \|^2 = 0$, если $|\psi\rangle = 0$.

9. В этом пространстве определён предельный переход по норме: любая фундаментальная последовательность сходится к элементу этого пространства.

Пространство, которое характеризуется этими свойствами, будем называть *гильбертовым*.

Постулат: в пространстве существует хотя бы один счётный базис (пространство сепарабельно).

Пример. Рассмотрим конечномерное пространство \mathcal{H} :

$$|\psi\rangle \rightarrow \vec{\psi} = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$$

Обозначим пространство линейных отображений (функционалов) на \mathcal{H} через \mathcal{H}^* . Данное пространство называется сопряженным (дуальным). Эти пространства изоморфны, и изоморфизм будем обозначать «плюсиком»:

$$\langle \psi | = |\psi\rangle^+$$

$$\text{Если } |\psi\rangle \in \mathcal{H}, \text{ тогда } \langle \psi | \in \mathcal{H}^*$$

При этом $\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}$: $\langle \varphi |$ — линейный функционал, такой, что на аргументе $|\psi\rangle$ он принимает значение $\langle \varphi | \psi \rangle$

Область определения функционала $L_2(\mathbb{R}^3)$.

$$\langle \varphi | \psi \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \int \varphi^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) d^3x$$

2.2 Динамические переменные

Каждой динамической переменной, относящейся к данной динамической системе, ставится в соответствие *линейный оператор*.

Символика: Динамической переменной A соответствует оператор \hat{A} .

Линейный оператор определяет в пространстве \mathcal{H} линейное отображение области

$$D_{\hat{A}}\{\mathcal{H}\} \rightarrow R_{\hat{A}}\{\mathcal{H}\},$$

то есть областью определения оператора может являться не всё пространство.

2.2.1 Свойства операторов

1. Линейность.

2. Умножение операторов: $\hat{A}_1\hat{A}_2|\psi\rangle \neq \hat{A}_2\hat{A}_1|\psi\rangle$.

Определение. Коммутатором \hat{A}_1, \hat{A}_2 называется величина $[\hat{A}_1, \hat{A}_2]$

$$[\hat{A}_1, \hat{A}_2] \stackrel{\text{def}}{=} \hat{A}_1\hat{A}_2 - \hat{A}_2\hat{A}_1.$$

Если операторы коммутируют, то $[\hat{A}_1, \hat{A}_2] = 0$.

3. Оператор, эрмитово сопряжённый данному. Пусть $\hat{A}|\psi\rangle = |\chi\rangle$. Тогда

$$\begin{aligned} |\chi\rangle^+ &= (\hat{A}|\psi\rangle)^+, \\ \langle\chi| &\stackrel{\text{def}}{=} \langle\psi|\hat{A}^+ \end{aligned}$$

(Обратите внимание, что оператор \hat{A}^+ действует на $\langle\psi|$ справа налево. До этого такое непривычное обозначение ни в одном предмете не встречалось. Существование такого оператора \hat{A}^+ в произвольном гильбертовом пространстве было строго доказано на последней лекции по функциональному анализу.)

4. $\langle\chi|\varphi\rangle = \langle\psi|\hat{A}^+|\varphi\rangle$

5. $\langle\chi|\varphi\rangle = \langle\varphi|\chi\rangle^* = \langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle^*$, откуда

$$\langle\psi|\hat{A}^+|\varphi\rangle = \langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle^*$$

6. **Определение.** Эрмитов (симметричный) оператор — это такой оператор \hat{A} , что $\hat{A}^+ = \hat{A}$, то есть

$$\langle\psi|\hat{A}|\varphi\rangle = \langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle^* \quad \forall |\varphi\rangle, |\psi\rangle \in D_{\hat{A}}$$

Определение. Оператор является *самосопряжённым*, если области определения, к тому же, совпадают.

2.2.2 Проблема собственных векторов и значений оператора

- **Теорема.** Если оператор эрмитов, то собственные значения соответствующей ему динамической переменной вещественны.

Доказательство. $\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle^* = \lambda^* \langle \psi | \psi \rangle^* = \lambda^* \langle \psi | \psi \rangle$

Таким образом, $\lambda = \lambda^*$.

- Проблема собственных значений линейного эрмитова оператора.

Будем считать, что спектр оператора \hat{A} дискретный, то есть

$$\hat{A}|\psi_n\rangle = \lambda_n|\psi_n\rangle.$$

Может оказаться так, что каждому собственному значению λ_k отвечает ровно один собственный вектор. В этом случае λ_k называется *простым*.

В случае, если собственному значению отвечает сразу несколько собственных векторов, например

$$\lambda_n \rightarrow \{|\psi_n^{(1)}\rangle, \dots, |\psi_n^{(\ell)}\rangle\}$$

В этом собственное значение называется вырожденным, число ℓ называется *кратностью вырождения*.

Определение. Максимальное количество линейно независимых собственных векторов, отвечающих данному собственному значению, называется *кратностью вырождения*. Она может изменяться от 2 до бесконечности (включительно).

- **Напоминание.** Собственные векторы эрмитова оператора, отвечающие различным собственным числам, являются ортогональными.

Доказательство. Пусть

$$\begin{cases} \hat{A}|\psi_n\rangle = \lambda_n|\psi_n\rangle, \\ \hat{A}|\psi_m\rangle = \lambda_m|\psi_m\rangle \end{cases}$$

Из первого уравнения:

$$\langle \psi_n | \hat{A}^+ = \lambda_n \langle \psi_n |$$

«Умножим справа» на $|\psi_m\rangle$:

$$\langle \psi_n | \hat{A}^+ |\psi_m\rangle = \lambda_n \langle \psi_n | \psi_m \rangle$$

Таким образом,

$$\langle \psi_n | \hat{A}^+ |\psi_m\rangle = \langle \psi_m | \hat{A} |\psi_n\rangle^* \underbrace{=}_{\text{т.к. } \hat{A} = \hat{A}^+} \langle \psi_n | \hat{A} |\psi_m\rangle = \lambda_m \langle \psi_n | \psi_m \rangle$$

Получили:

$$(\lambda_n - \lambda_m) \langle \psi_n | \psi_m \rangle = 0$$

Если $\lambda_n \neq \lambda_m$, то $\langle \psi_m | \psi_m \rangle = 0$, собственные векторы эрмитова оператора ортогональны. Договоримся о следующем обозначении:

$$\hat{A}|A_n\rangle = A_n|A_n\rangle, \quad \langle A_n | A_m \rangle = \delta_{nm}$$

Второе выражение – условие нормировки.

- Пусть есть вырождение:

$$\lambda_n \rightarrow \{|\psi_n^{(1)}\rangle, \dots, |\psi_n^{(\ell)}\rangle\}$$

При этом довольно очевидно, что если взять их линейную комбинацию

$$|\psi_n^{(s)}\rangle = \sum_{i=1}^{\ell} C_i^{(s)} |\psi_n^{(i)}\rangle,$$

то она тоже будет являться собственным вектором. Говорят, что собственному значению отвечает собственное пространство размерности ℓ .

Коэффициенты $C_i^{(s)}$ удобно выбирать так, чтобы векторы были ортонормированными.

- **Ядерная спектральная теорема¹:** Система собственных векторов линейного эрмитова оператора, а точнее говоря самосопряжённого, является *полной*.

Определение. Система называется *полной*, если она образует базис² в пространстве состояний, то есть

$$\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H} \quad \exists! C_i: |\psi\rangle = \sum_n C_n |A_n\rangle$$

Чтобы определить коэффициенты разложения, скалярно домножим равенство на любой из базисных векторов:

$$\langle A_m | \psi \rangle = \sum_n C_n \langle A_m | A_n \rangle = \sum_n C_n \delta_{mn} = C_m$$

$$C_n = \langle A_n | \psi \rangle$$

- **Условие полноты системы собственных векторов оператора \hat{A}**

Напоминание. В двумерной модели скалярное произведение моделировалось следующим образом:

$$\langle \varphi | \psi \rangle \rightarrow (\varphi_1^* \varphi_2^*) \begin{vmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{vmatrix}$$

Давайте определим матрицу

$$\begin{vmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{vmatrix} (\varphi_1^* \varphi_2^*) = \begin{bmatrix} \psi_1 \varphi_1^* & \psi_1 \varphi_2^* \\ \psi_2 \varphi_1^* & \psi_2 \varphi_2^* \end{bmatrix}$$

В более короткой форме:

$$|\psi\rangle \langle \varphi| = \sum_n C_n |A_n\rangle \langle \varphi| = \sum_n |A_n\rangle \langle A_n | \psi \rangle = \underbrace{\left(\sum_n |A_n\rangle \langle A_n| \right)}_{\text{оператор}} |\psi\rangle$$

¹Для простых конечномерных систем это утверждение мы доказывали во втором семестре линейной алгебры. Для бесконечномерных систем, да ещё и с неограниченными операторами всё гораздо сложнее. Поэтому в курсе теорема приводится без доказательства.

²На лекции разгорелись холивары, на тему того, что можно называть базисом, а что просто полной системой. Написанное определение действительно задаёт базис, но полная система в функциональном анализе определяется по-другому. В квантовой механике оно без надобности.

ГЛАВА 2. МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Выходит, в больших скобках выписан тождественный, или единичный оператор:

$$\sum_n |A_n\rangle\langle A_n| = \hat{1}$$

Рассмотрим одно из слагаемых, подействуем им на произвольный вектор $\psi \in \mathcal{H}$:

$$|A_n\rangle \underbrace{\langle A_n|\psi\rangle}_{C_n} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{\mathcal{P}}_n|\psi\rangle = C_n|A_n\rangle$$

Определение. $\hat{\mathcal{P}}_n = |A_n\rangle\langle A_n|$ — *проектор* на одномерное подпространство, натянутое на собственный вектор, отвечающий собственному значению A_n .

Сумма всех этих проекторов является (в силу полноты) проектором на всё \mathcal{H} :

$$\sum_n |A_n\rangle\langle A_n| = \hat{1}$$

Замечание.

- Во многих книгах для сокращения такие операторы называют *наблюдаемыми*. Под этим подразумевается то, что результаты измерений соответствующей физической величины^[какой?] являются наблюдаемыми.
- Мы предполагали, что спектр является дискретным и невырожденным. Можно обойтись без этого предположения. Для начала поправим невырожденность: умножение, которое описывается выше, должно идти не по собственным векторам, а по собственным подпространствам. Непрерывный случай будет рассмотрен позже.

2.3 Описание временной эволюции системы

В квантовой механике постулируется, что квантовый оператор зависит от времени как от параметра. **Времени не сопоставляется никакой оператор, и оно не является динамической переменной.** Уравнение, описывающее динамику системы (независимый постулат квантовой механики) — уравнение Шрёдингера. В этом уравнении \hat{H} — оператор Гамильтона (гамильтониан)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle$$

Вопрос. Откуда брать гамильтониан?

Ответ. Пусть мы рассматриваем квантовую систему, которая имеет классический аналог, тогда есть принцип соответствия, откуда $H(q, p) \rightarrow H(\hat{q}, \hat{p})$. Если классического аналога нет, то тут всё не так просто³.

³Мы положили в основу принцип квантовой суперпозиции, и линейное уравнение Шрёдингера. Возможен и нелинейный вариант (это лежит за пределами нашего курса). Нелинейное уравнение Шрёдингера могло иметь следующий вид:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t, x) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \underbrace{G}_{\text{const}} |\psi|^2 \right\} \Psi$$

2.4 Физическая интерпретация математического аппарата

- **Вопрос.** Какие значения может принимать динамическая переменная A ?

Ответ. Только те значения, которые принадлежат множеству собственных значений, которые сопоставляются оператору \hat{A} .

- **Вопрос.** Что можно сказать о состоянии, в котором достоверно (с вероятностью 1) известно, что динамическая переменная A имеет значение A_n ?

Ответ. Это состояние описывается собственным вектором $|A_n\rangle$ оператора \hat{A} , отвечающим собственному значению A_n :

$$\hat{A}|A_n\rangle = A_n|A_n\rangle \rightarrow |A_n\rangle$$

- **Вопрос.** Система находится в состоянии ψ , которое не является собственным вектором оператора \hat{A} . Что можно сказать о значении динамической переменной A в этом состоянии?

Ответ. Разложим состояние по собственным векторам:

$$|\psi\rangle = \sum_n |A_n\rangle \langle A_n|\psi\rangle$$

Вероятность того, что при измерении состояния $|\psi\rangle$ мы обнаружим динамическое состояние переменной A , равное A_n , равно квадрату модуля разложения вектора $|\psi\rangle$ по системе собственных векторов оператора \hat{A} .

$$W_{|\psi\rangle}(A = A_n) = |\langle A_n|\psi\rangle|^2$$

Иными словами, частота выпадения такого состояния равна $|\langle A_n|\psi\rangle|^2$.

Замечание. Состояние $|\psi\rangle$, $c|\psi\rangle$ одно и то же, поэтому нормировка не обязательна, а формулу можно обобщить и на этот случай:

$$W_{|\psi\rangle}(A = A_n) = \frac{|\langle A_n|\psi\rangle|^2}{\langle \psi|\psi\rangle}$$

Пример: вычисление квантово-механического среднего.

Вопрос. Чему равно среднее значение динамической переменной A в состоянии $|\psi\rangle$?

Обозначим его $\langle A \rangle_{|\psi\rangle}$

$$\begin{aligned} \langle A \rangle_{|\psi\rangle} &\stackrel{\text{Формула Байеса}}{=} \sum_i A_i W_{|\psi\rangle}(A = A_i) = \sum_i A_i |\langle A_i|\psi\rangle|^2 = \\ &= \sum_i A_i \langle A_i|\psi\rangle^* \langle A_i|\psi\rangle = \sum_i \underbrace{A_i}_{\in \mathbb{C}} \langle \psi|A_i\rangle \langle A_i|\psi\rangle = \sum_i \langle \psi|A_i|A_i\rangle \langle A_i|\psi\rangle = \end{aligned}$$

ГЛАВА 2. МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Воспользуемся тождеством $\hat{A}|A_i\rangle = A_i|A_i\rangle$

$$= \sum_i \langle \psi | \hat{A} | A_i \rangle \langle A_i | \psi \rangle =$$

В силу линейности дираковских обозначений:

$$= \langle \psi | \hat{A} \underbrace{\sum_i |A_i\rangle \langle A_i|}_{=\hat{1}} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$$

Таким образом,

$$\langle A \rangle_{|\psi\rangle} = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$$

или, без условия нормировки:

$$\langle A \rangle_{|\psi\rangle} = \frac{\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$$

Упражнение:

$$\sum_i |\langle A_i | \psi \rangle|^2 = 1$$

Замечание. $W_{|\psi\rangle}(A = A_i) = |\langle A_i | \psi \rangle|^2 = \langle \psi | \underbrace{|A_i\rangle \langle A_i|}_{\hat{\mathcal{P}}_i} | \psi \rangle = \langle \hat{\mathcal{P}}_i \rangle_{|\psi\rangle}$

2.5 Обобщение результатов на непрерывный спектр *

Можно показать что, пространство \mathcal{H} может быть разбито на прямую сумму подпространств

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}(1) \oplus \mathcal{H}(2),$$

при этом в $\mathcal{H}(1)$ спектр дискретный, а в $\mathcal{H}(2)$ нет ни одного собственного вектора.

Пример: действуем на функцию Шрёдингера операторами координаты и импульса:

$$\begin{cases} -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi_p(x) = p \psi_p(x) \\ x \psi_{x_0}(x) = x_0 \psi(x_0) \end{cases} \rightarrow \begin{cases} \psi_p(x) = A \exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right) \\ \psi_{x_0}(x) = B \delta(x - x_0) \end{cases}$$

Они не принадлежат пространству $\mathcal{H}(1)$.

Определение. Резольвента оператора \hat{A} :

$$\hat{R} = (\hat{A} - \lambda \hat{1})^{-1}$$

Определение.

- Те значения λ , при которых резольвента существует и является ограниченным оператором, называются **регулярными точками** этого оператора.

- Те значения λ , при которых резольвента не существует, или является неограниченным оператором называются *точками спектра*. При этом возможны два случая:

1. $\hat{A}|A_i\rangle = \lambda|A_i\rangle \rightarrow$ решение в \mathcal{H} существует $\rightarrow \lambda = A_i$
2. $\hat{A}|A_i\rangle = \lambda|A_i\rangle \rightarrow$ не имеет решения в \mathcal{H} . Тогда резольвента существует и является неограниченным оператором. Это есть точки непрерывности.
3. Важно понимать, что два написанных выше свойства являются *формальными определениями*, а не свойствами, которые нужно доказывать.

2.5.1 Формальный рецепт

Рецепт состоит из нескольких шагов:

1. Обобщённое условие полноты.

$$\sum_A |A\rangle\langle A| = \hat{1},$$

где

$$\sum_A = \begin{cases} \sum, & \text{дискретный спектр;} \\ \int^n \dots dA, & \text{непрерывный спектр.} \end{cases}$$

2. Обобщённое условие нормировки.

$$|\psi\rangle = \int |A''\rangle\langle A''|\psi\rangle dA''$$

«Спроектируем» на A' :

$$\langle A'|\psi\rangle = \int \underbrace{\langle A'|A''\rangle}_{\delta(A'-A'')} \langle A''|\psi\rangle dA''$$

При этом

$$\langle A'|A''\rangle = \Delta_{A'A''} = \begin{cases} \delta_{A'A''}, & \text{дискретный спектр;} \\ \delta(A' - A''), & \text{непрерывный спектр.} \end{cases}$$

3. Вероятность обнаружить динамическую переменную в состоянии $A = A_i$:

$$W_{|\psi\rangle}(A = A_i) \rightarrow W(a)da: a \in [a, a + da]$$

Главная сложность: наличие состояния с бесконечной нормой. Вести конкретные вычисления неудобно. Для этого был придуман ряд способов, чтобы этот момент обойти (например нормировка на элемент периодичности). В этом случае спектр назывался *квазидискретным*, и т.д. В целом: эти состояния не являются нормируемыми в обычном смысле, выпадают из теории, потому что исходному пространству они не принадлежат.

Физически нереализуемые состояния. Такие состояния нельзя получить в реальном эксперименте (например, идеальную плоскую монохроматическую волну).

2.5.2 Краткие основы математического метода

Метод состоит в том, чтобы несколько пересмотреть основы и сформулировать понятие *оснащённого гильбертова пространства*. В нём, наряду с обычными векторами, присутствуют также ненормируемые векторы.

Пусть \mathcal{H} — гильбертово пространство («обычное» пространство, к которому мы привыкли). Для определённости берём $L_2(\mathbb{R}^3)$. В этом пространстве выделяется $\Omega\{\mathcal{H}\}$ — подпространство «хороших» векторов⁴ — пространство Шварца \mathbb{S} бесконечно дифференцируемых функций, убывающих на бесконечности.

Напоминание. Есть взаимно однозначное соответствие между линейными функционалами \mathcal{H}^* и элементами \mathcal{H} :

$$\mathcal{H} \cong \mathcal{H}^*$$

Введём множество Ω^* — сопряжённое к Ω . Пространств функционалов уже может содержать «всякие пакости». Это множество называют *пространством распределений* Шварца. В этом пространстве присутствуют обобщённые функции умеренного роста (например, дельта-функции и плоские волны).

Определение. Тройка пространств $(\Omega, \mathcal{H}, \Omega^*)$ называется *триплетом Гельфанда*, или *оснащённым гильбертовым пространством*. При этом

$$\Omega\{\mathcal{H}\} = \mathcal{H}^*\{\Omega\}^*$$

Идея: искать собственные векторы линейного самосопряжённого оператора не в пространстве \mathcal{H} , а в пространстве Ω^* .

Теорема. Самосопряжённый оператор в оснащённом гильбертовом пространстве обладает полной системой обобщённых собственных векторов, отвечающих вещественным собственным значениям.

2.6 Одновременная (совместная) измеримость наблюдаемых

Замечание. Ранее мы занимались изучением статистических результатов измерения одной физической величины. В жизни мы не ограничиваемся одной физической величиной. Для начала предположим, что имеется две физические величины A и B .

$$\begin{aligned} A &\rightarrow \hat{A} \rightarrow A_i & (i = 1, 2, 3, \dots) \\ B &\rightarrow \hat{B} \rightarrow B_j & (j = 1, 2, 3, \dots) \end{aligned}$$

Пусть существует вектор $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, такой, что

$$\begin{aligned} \hat{A}|\psi\rangle &= A_i|\psi\rangle \\ \hat{B}|\psi\rangle &= B_j|\psi\rangle \end{aligned}$$

⁴Аналогия: перед тем, как вводить обобщённые функции, нам необходимо было ввести пространство функций с ограниченным носителем. При этом пространство линейных операторов на этом более узком множестве оказалось более широким множеством.

Это означает, что $|\psi\rangle$ — это состояние, в котором достоверно известно, что физическая величина A имеет значение A_i , а величина B имеет значение B_j .

Введём обозначение:

$$|\psi\rangle = |A_i B_j\rangle$$

Затем предположим, что у этой [какой?] системы уравнений имеется такое множество решений, что $|\psi\rangle$ образуют полную систему векторов в пространстве \mathcal{H} . Тогда любой вектор $|\varphi\rangle$ может быть разложен по этой системе:

$$|\varphi\rangle = \underbrace{\sum_{ij} |A_i B_j\rangle \langle A_i B_j| \varphi\rangle}_{=\hat{1}}$$

Это даёт выражение для совместной вероятности:

$$W_{|\varphi\rangle}(A = A_i, B = B_j) = \left| \langle A_i B_j | \varphi \rangle \right|^2.$$

Замечание. В этом случае оказывается, что две физические величины являются совместно (независимо) измеримыми. Ещё говорят, что в этом случае у экспериментатора имеется возможность построить универсальный прибор, который измерит обе физические величины, причём измерение одной физической величины никак не повлияет на измерение другой.

Другими словами, если мы *сначала* измерим A , то состояние $|A_i B_j\rangle$ может измениться, и состояние B измерить уже не получится.

Теорема. Для того, чтобы наблюдаемые A, B были совместно измеримы, необходимо и достаточно, чтобы операторы \hat{A}, \hat{B} коммутировали, то есть

$$\text{коммутатор}[\hat{A}, \hat{B}] \stackrel{\text{def}}{=} \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$$

Доказательство.

• \Rightarrow

Возьмём произвольный вектор $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$. Сформируем для него выражение

$$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})|\psi\rangle =$$

разложим его по полной системе собственных векторов:

$$\begin{aligned} & \sum_{ij} (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) |A_i B_j\rangle \langle A_i B_j | \psi \rangle = \\ & = \sum_{ij} \underbrace{(A_i B_j - B_j A_i)}_{=0} |A_i B_j\rangle \langle A_i B_j | \psi \rangle = 0 \end{aligned}$$

• \Leftarrow

Замечание. При определённых оговорках на их область определения операторы будут самосопряжёнными.

ГЛАВА 2. МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

1. Предположим, что $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, причём спектр оператора \hat{A} — простой. Это означает, что уравнение

$$\hat{A}|A_i\rangle = A_i|A_i\rangle$$

имеет одномерное собственное подпространство из векторов $|A_i\rangle$.

$$\hat{B}\hat{A}|A_i\rangle = \hat{A}\hat{B}|A_i\rangle = A_i\hat{B}|A_i\rangle$$

Обратим внимание, что оба вектора $\hat{B}|A_i\rangle$, и $|A_i\rangle$ являются *собственными векторами* оператора \hat{A} , причём, как было упомянуто выше, это собственное подпространство является одномерным.

Это означает, что векторы $|\hat{A}_i\rangle$, $|A_i\rangle$ коллинеарны, то есть

$$\hat{B}|A_i\rangle = B_j|A_i\rangle, \quad B_j \neq 0$$

Поэтому система собственных векторов оператора \hat{A} (к тому же, полная), оказывается системой собственных векторов для оператора \hat{B} , то есть они имеют общую полную систему векторов.

2. Будем считать, что оператор \hat{A} имеет *вырожденный* спектр, то есть собственному значению A_i отвечает набор

$$A_i \rightarrow \{|A_i^{(1)}\rangle, \dots, |A_i^{(\ell)}\rangle\}$$

Аналогично, $\hat{B}|A_i^{(k)}\rangle$ является линейной комбинацией собственных векторов \hat{A} : $|A_i^{(\ell)}\rangle$:

$$\hat{B}|A_i^{(k)}\rangle = \sum_{m=1}^{\ell} C_m^{(k)} |A_i^{(m)}\rangle$$

Так как \hat{B} — наблюдаемый, то он обладает полной системой собственных векторов в пространстве \mathcal{H} . Этим свойством он обладает в любом подпространстве, в частности, и в собственном подпространстве оператора \hat{A} , которое мы обозначим \mathcal{H}_ℓ .

Обозначим:

$$|\widetilde{A}_i\rangle = \sum_{m=1}^{\ell} C_m |A_i^{(m)}\rangle$$

В силу того, что у \hat{B} найдётся полная система собственных векторов,

$$\hat{B}|\widetilde{A}_i\rangle = B_j|\widetilde{A}_i\rangle$$

Таким образом,

$$|\widetilde{A}_i\rangle = |A_i B_j\rangle$$

3. Если пространство имеет бесконечную размерность $\ell = \infty$, то утверждение тоже верно, но доказательство выходит за рамки курса лекций.

Замечание. (интерпретация теоремы).

1. Предположим, что есть наблюдаемая физическая величина, и соответствующий ей оператор \hat{A} с вырожденным спектром. Тогда нужно определить совместную с ней наблюдаемую \hat{B} , имеющую различные собственные значения в этих состояниях.

Может оказаться так, что хотя бы два состояния имеют одинаковый набор собственных значений в этих состояниях. Тогда нужно ввести третью наблюдаемую величину.

Так делается до тех пор, пока каждый общий собственный вектор не будет иметь индивидуальный набор собственных значений

Вопрос. Почему так может получиться?

Ответ. Это является физическим предположением.

Определение. Система совместных наблюдаемых называется *полной*, если никакие два общих собственных вектора не характеризуются одним и тем же набором собственных значений для всех наблюдаемых.

2. Таким образом, мы приблизились к новому пониманию понятия *состояния*.

Определение. *Состояние системы* — это совокупность собственных значений какой-либо полной системы совместных наблюдаемых.

Вопрос. А как же принцип суперпозиции?

Ответ. Его нужно держать в голове, суперпозиции таких состояний тоже должны являться состояниями.

3. **Замечание.** Условие теоремы не запрещает двум некоммутирующим операторам иметь общий собственный вектор. Главное, чтобы их не было «много» — не может быть полной системы таких векторов.

2.7 Некоммутирующие наблюдаемые. Соотношение неопределённости

Пусть имеется две физические величины, которым сопоставлены операторы \hat{A}, \hat{B} , причём $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$.

Замечание. \hat{A}, \hat{B} должны быть самосопряжёнными, потому что они наблюдаемые.

$$\begin{aligned}\langle \hat{A} \rangle &= \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \\ \langle \hat{B} \rangle &= \langle \psi | \hat{B} | \psi \rangle\end{aligned}$$

- Обозначим

$$\begin{aligned}\Delta \hat{A} &= \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle \cdot \hat{1} \\ \Delta \hat{B} &= \hat{B} - \langle \hat{B} \rangle \cdot \hat{1}\end{aligned}$$

Упражнение.

$$[\Delta \hat{A}, \Delta \hat{B}] = i\hat{C}$$

- Пусть $\gamma = \gamma^*$

$$\begin{aligned} |\varphi\rangle &= (\Delta\hat{A} - i\gamma\Delta\hat{B})|\psi\rangle \\ \langle\varphi| &= \langle\psi|(\Delta\hat{A} + i\gamma\Delta\hat{B}) \end{aligned}$$

Учитываем: $\hat{A}^+ = \hat{A}$, $\hat{B}^+ = \hat{B}$.

$$\langle\hat{A}\rangle^* = \langle A\rangle, \quad \langle\hat{B}\rangle^* = \langle B\rangle$$

$$\begin{aligned} \|\varphi\|^2 &= \langle\varphi|\varphi\rangle = \\ &= \langle\psi|(\Delta\hat{A} + i\gamma\Delta\hat{B})(\Delta\hat{A} - i\gamma\Delta\hat{B})|\psi\rangle = \\ &= \langle\Delta\hat{A}^2\rangle + \gamma^2\langle\Delta\hat{B}^2\rangle + \gamma\langle\hat{C}\rangle \geq 0 \end{aligned}$$

Это выражение является квадратным трёхчленом относительно переменной γ . Дискриминант должен быть неположительным:

$$\langle\hat{C}^2\rangle - 4\langle\Delta\hat{A}^2\rangle\langle\Delta\hat{B}^2\rangle \leq 0$$

Отсюда получается *общее соотношение неопределённостей*:

$$\langle\Delta\hat{A}^2\rangle\langle\Delta\hat{B}^2\rangle \geq \frac{1}{4}\langle\hat{C}^2\rangle$$

Замечание.

- Если $\hat{A} = \hat{x}$ и $\hat{B} = \hat{p}$, тогда

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \cdot \hat{1} \rightarrow \langle\Delta\hat{p}^2\rangle\langle\Delta\hat{x}^2\rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

- «Анонс»:

$$\langle\Delta\hat{A}^2\rangle = \langle(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle)^2\rangle = \langle\hat{A}^2\rangle - \langle\hat{A}\rangle^2$$

Например, для собственного вектора дисперсия равна нулю. Действительно, в этом состоянии достоверно известно, чему равно значение действия оператора.

2.8 Элементы дираковской теории представлений

2.8.1 α -представление

Замечание. Идея следует из конечномерной теории: любой вектор из трёхмерного пространства задаётся своими координатами.

Выберем базис как множество собственных векторов оператора $\hat{\alpha}$.

$$\hat{\alpha}|\alpha_i\rangle = \alpha_i|\alpha_i\rangle$$

1. $\langle \alpha_i | \alpha_j \rangle = \delta_{ij}$
2. $\sum_i |\alpha_i\rangle \langle \alpha_i| = \hat{1}$

При этом

$$\begin{aligned} \forall |\psi\rangle \in \mathcal{H} \\ |\psi\rangle = \sum_i |\alpha_i\rangle \langle \alpha_i | \psi \rangle, \quad C_i = \langle \alpha_i | \psi \rangle \end{aligned}$$

Определение. Набор чисел C_i называется вектор ψ в α -представлении.

Базис может оказаться и непрерывным. В этом случае разложение имеет вид:

$$|\psi\rangle = \int |\alpha\rangle \underbrace{\langle \alpha | \psi \rangle}_{=\psi(\alpha)} d\alpha$$

Тогда $\psi(\alpha)$ называется *волновой функцией в ψ -представлении*.

$$|\hat{x}\rangle = x|x\rangle \rightarrow \langle x | \psi \rangle = \psi(x)$$

2.8.2 Основные формулы и операции в α -представлении

1. Вектор в α -представлении: $\mathbb{C}_i = \langle \alpha_i | \psi \rangle$ или $\langle x | \psi \rangle = \psi(x)$
2. Оператор: $\hat{A}|\psi\rangle = |\varphi\rangle$

$$\langle \alpha_i | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \alpha_i | \varphi \rangle$$

Вставляя единичный оператор $\hat{1} = \sum_j |\alpha_j\rangle \langle \alpha_j|$, получаем:

$$\langle \alpha_i | \hat{A} | \psi \rangle = \sum_j \underbrace{\langle \alpha_i | \hat{A} | \alpha_j \rangle}_{A_{ij}} \langle \alpha_j | \psi \rangle$$

A_{ij} — матричные элементы оператора \hat{A} . Также называется \hat{A} в α -представлении. В непрерывном случае это ядро интегрального оператора.

3. $\hat{\alpha}|\alpha_i\rangle = \alpha_i|\alpha_i\rangle$

$$\langle \alpha_i | \hat{\alpha} | \alpha_j \rangle = \alpha_i \delta_{ij}$$

4. Все действия с операторами переходят в действия над матрицами.

2.8.3 Смена представления. Переход от одного представления к другому

•

$$\{|\alpha_n\rangle\} \rightarrow \{|\beta_n\rangle\}$$

Пусть вектор в β -представлении имеет вид:

$$\langle \beta_m | \psi \rangle$$

ГЛАВА 2. МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Тогда, вставляя единичный оператор, получаем:

$$= \sum_n \underbrace{\langle \beta_m | \alpha_n \rangle}_{\text{«матрица» перехода}} \langle \alpha_n | \psi \rangle = \sum_n \langle \alpha_n | \beta_m \rangle^* \langle \alpha_n | \psi \rangle = \sum_n \psi_{\beta_m}^*(\alpha_n) \psi(\alpha_n)$$

Рассмотрим оператор F в β -представлении:

•

$$\begin{aligned} F_{\beta\beta'} &= \langle \beta | \hat{1} \hat{F} \hat{1} | \beta' \rangle = \\ &= \sum_{\alpha\alpha'} \langle \beta | \alpha \rangle \langle \alpha | \hat{F} | \alpha' \rangle \langle \alpha' | \beta' \rangle \\ &= \sum_{\alpha\alpha'} \langle \alpha | \beta \rangle^* \langle \alpha | \hat{F} | \alpha' \rangle \langle \alpha' | \beta' \rangle = \\ &= \sum_{\alpha\alpha'} \psi_{\beta}^*(\alpha) F_{\alpha\alpha'} \psi_{\beta'}(\alpha') \end{aligned}$$

Таким образом,

$$\psi_{\beta}(\alpha) = \langle \alpha | \beta \rangle$$

Пример. Переход от координатного представления к импульсному представлению Пусть вектор ψ имеет p -представление,

$$\langle p | \psi \rangle = \varphi(p)$$

Вставляем в скалярное произведение единичный оператор в виде

$$\hat{1} = \int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle \langle x| dx$$

Получаем:

$$\begin{aligned} \varphi(p) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \langle p | x \rangle \langle x | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \underbrace{\langle x | p \rangle^*}_{\psi_p^*(x)} \langle x | \psi \rangle = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{-ipx}{\hbar}} \psi(x) dx \end{aligned}$$

Резюме: для того, чтобы осуществить переход, необходимо знать матрицу перехода $\langle \beta | \alpha \rangle$. Такая матрица может быть и квадратной (только в том случае, если есть взаимно однозначное соответствие между элементами базиса, если они связаны линейным оператором). Такого может и не быть, например, если осуществляется переход от дискретного базиса к непрерывному.

• Общие свойства матрицы перехода

1.

$$\langle \beta_m | \psi \rangle = \sum_n \underbrace{\langle \beta_m | \alpha_n \rangle}_{S_{mn} \leftarrow S} \langle \alpha_n | \psi \rangle$$

$$\langle \alpha_n | \psi \rangle = \sum_m \underbrace{\langle \alpha_n | \beta_m \rangle}_{T_{nm}} \langle \beta_m | \psi \rangle$$

Утверждение 1: $T = S^+$

2.

$$\langle \alpha_n | \alpha_k \rangle = \sum_m \langle \alpha_n | \beta_m \rangle \langle \beta_m | \alpha_k \rangle = \delta_{nk}$$

$$S^+ S = 1$$

Аналогично, $T^+ T = 1$

Объединяя эти утверждения, получаем **утверждение 2:**

$$S^+ S = 1; \quad S S^+ = 1$$

Замечание. Эти «единички» могут иметь разную размерность. Если же между элементами базиса имеется взаимно однозначное соответствие, то

$$|\beta_m\rangle = \hat{U}^+ |\alpha_m\rangle$$

$$\langle \beta_m | \alpha_n \rangle = \langle \alpha_m | \hat{U} | \alpha_n \rangle$$

Условия, которые накладываются на \hat{U}^+ , имеют вид:

$$\hat{U}^+ \hat{U} = \hat{U} \hat{U}^+ = \hat{1}, \quad \hat{U}^+ = \hat{U}^{-1}$$

Определение. Такие операторы называются *унитарными*.

2.8.4 Свойства унитарного оператора

1. Уравнения на собственные значения и собственные векторы

$$\begin{cases} \hat{U} |f\rangle = \lambda |f\rangle \\ \langle f | \hat{U}^+ = \lambda^* \langle f | \end{cases} \rightarrow \langle f | \hat{U}^+ \hat{U} |f\rangle = \lambda^* \lambda \langle f | f \rangle$$

$$|\lambda|^2 = 1 \rightarrow \lambda = e^{\pm i\alpha}, \quad \text{Im } \alpha = 0$$

2. Если \hat{U}_1, \hat{U}_2 — унитарные операторы, то оператор

$$\hat{U}_3 = \hat{U}_1 \hat{U}_2$$

тоже является унитарным оператором

ГЛАВА 2. МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

3. Унитарные преобразования не изменяют собственных значений наблюдаемых.

Пусть есть уравнение

$$\hat{A}|A\rangle = A|A\rangle$$

Записываем выражение

$$\hat{U}\hat{A}\hat{U}^+\hat{U}|A\rangle = A\hat{U}|A\rangle$$

Обозначим преобразованный вектор $\hat{U}|A\rangle = |A'\rangle$. Исходя из $\hat{U}\hat{A}\hat{U}^+ = \hat{A}'$, можно написать:

$$\hat{A}'|A'\rangle = A|A'\rangle$$

4. Унитарные преобразования не меняют эрмитовости

$$\hat{A}^+ = \hat{A} \rightarrow \hat{A}'^+ = \hat{A}'$$

5. Унитарные преобразования не изменяют коммутационные соотношения

Если

$$\hat{A}, \hat{B} \rightarrow [\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C},$$

то

$$[\hat{A}', \hat{B}'] = i\hat{C}'$$

6. Значения матричных элементов и средние значения наблюдаемых не изменяются при унитарных преобразованиях.

$$\langle A | \underbrace{\hat{F}}_{\hat{F}} | B \rangle = \langle A | \underbrace{\hat{U}^+}_{\hat{U}^+} \underbrace{\hat{U}\hat{F}\hat{U}^+}_{\hat{F}} \underbrace{\hat{U}}_{\hat{U}} | B \rangle$$

Вывод: ни одно из наблюдаемых квантовой механикой чисел не меняется при унитарных преобразованиях. Поэтому с точки зрения наблюдаемых на эксперименте величин, физическое содержание теории остаётся неизменным.

Кроме того, окажется, что это всё связано со скобками Пуассона. В классической механике унитарные преобразования принято называть *каноническими*.

2.9 Квантовые скобки Пуассона

Как известно, одна из особенностей квантовой механики заключается в том, что физическим величинам сопоставляются операторы. В общем случае они могут не коммутировать друг с другом:

$$\left\{ \begin{array}{l} A \rightarrow \hat{A} \\ B \rightarrow \hat{B} \end{array} \right. \rightarrow [\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$$

Вопрос. Как физическим величинам сопоставить операторы?

Пусть классические величины q_i, p_i — обобщённые координаты и импульс, $q_i = \{x, y, z\}$.

План:

1. Разработать закон, по которому q_i сопоставляется оператор \hat{q}_i , $p_i \rightarrow \hat{p}_i$, и чтобы между ними воспроизводились правильные коммутационные соотношения
2. Физические величины не исчерпываются координатами и импульсами, можно строить сложные функции от этих величин: $f(\hat{p})$, $f(\hat{q})$.

Начнём со второго вопроса.

2.9.1 Функции наблюдаемых

$$\hat{\alpha} \rightarrow f(\hat{\alpha}) = ?$$

Определение. Пусть имеется некоторая числовая функция $f(\xi)$, что на всей вещественной прямой справедливо разложение в ряд Тейлора:

$$f(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} \xi^n$$

На основании этого, сопоставим функции от оператора α степенной ряд с теми же коэффициентами:

$$f(\hat{\alpha}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} \hat{\alpha}^n$$

Замечание. У этого определения есть недостаток: не все функции являются аналитическими. В связи с этим дадим более общее определение. Как известно, оператор α определяет базис состояний:

$$\hat{\alpha}|\alpha_i\rangle = \alpha_i|\alpha_i\rangle$$

Достоверно известно, что значение динамической переменной α равно α_i с вероятностью 1. Для того, чтобы определить действие оператора $f(\alpha)$ в полном пространстве состояний, достаточно определить его действие на векторы базиса.

Определение. Пусть оператор $f(\hat{\alpha})$ действует на элементы базиса следующим образом:

$$f(\hat{\alpha})|\alpha_i\rangle = f(\alpha_i)|\alpha_i\rangle$$

Тогда действие на произвольный вектор $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ определяется следующим образом:

$$f(\hat{\alpha}) \underbrace{|\psi\rangle}_{\hat{1} \cdot |\psi\rangle} = \sum_i f(\hat{\alpha})|\alpha_i\rangle \langle \alpha_i | \psi \rangle = \sum_i f(\alpha_i) |\alpha_i\rangle \langle \alpha_i | \psi \rangle$$

$$f(\hat{\alpha}) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_i f(\alpha_i) |\alpha_i\rangle \langle \alpha_i|$$

Это ещё называется спектральное разложение оператора $f(\hat{\alpha})$. Два определения эквивалентны, если функция разложима в ряд Тейлора.

2.9.2 Классические скобки Пуассона

Надо ввести коммутационные соотношения. Для этой цели мы будем использовать принцип соответствия, и будем строить наше квантово-механическое описание так, чтобы оно примыкало к классическому насколько тесно, настолько это возможно.

$$\{u, v\} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{i=1}^{\ell} \left(\frac{\partial u}{\partial q_i} \frac{\partial v}{\partial p_i} - \frac{\partial u}{\partial p_i} \frac{\partial v}{\partial q_i} \right)$$

Свойства:

1. $\{u_1 + u_2, v\} = \{u_1, v\} + \{u_2, v\}$
2. $\{u, v\} = -\{v, u\}$
3. $\{u, c\} = 0, \quad C = \text{const}$
4. **Дифференцирование:**

$$\{u, v_1 v_2\} = \{u, v_1\} v_2 + \{u, v_2\} v_1$$

5. **Тождество Якоби:**

$$\{u, \{v, w\}\} + \{w, \{u, v\}\} + \{v, \{w, u\}\} = 0$$

2.9.3 Квантовые скобки Пуассона

Произведём сопоставление:

$$\{u, v\} \rightarrow \{u, v\}_{qu}$$

Пусть квантовые скобки Пуассона удовлетворяют пяти свойствам, плюс возможная некоммутативность операторов $u, v, \{u, v\}$.⁵

$$\begin{aligned} \{u, v_1 v_2\}_{qu} &= v_1 \{u, v_2\}_{qu} + \{u, v_1\}_{qu} v_2 \\ \{u_1 u_2, v\}_{qu} &= u_1 \{u_2, v\}_{qu} + \{u_1, v\}_{qu} u_2 \\ \{u_1 u_2, v_1 v_2\}_{qu} &= v_1 \{u_1 u_2, v_1\}_{qu} + \{u_1 u_2, v_1\}_{qu} v_2 = \\ &= v_1 u_1 \{u_2, v_2\}_{qu} + \underbrace{v_1 \{u_1, v_2\}_{qu} u_2}_{\text{}} + \underbrace{u_1 \{u_2, v_1\}_{qu} v_2}_{\text{}} + \{u_1, v_1\}_{qu} u_2 v_2 \end{aligned}$$

Раскроем скобки другим способом:

$$\{u_1 u_2, v_1 v_2\}_{qu} = u_1 v_1 \{u_2, v_2\}_{qu} + \underbrace{u_1 \{u_2, v_1\}_{qu} v_2}_{\text{}} + \underbrace{v_1 \{u_1, v_2\}_{qu} u_2}_{\text{}} + \{u_1, v_1\}_{qu} v_2 u_2$$

⁵Имеется в виду, скажем, что $\{u, v_1\} v_2 \neq v_2 \{u, v_1\}$, и в свойстве 4 надо сохранять порядок следования сомножителей:

После приведения подобных, получаем условие, которое нужно наложить на скобку, чтобы операторы совпадали:

$$(u_1 v_1 - v_1 u_1) \{u_2, v_2\}_{\text{qu}} = \{u_1, v_1\}_{\text{qu}} (u_2 v_2 - v_2 u_2)$$

Производя «формальное деление»:

$$\frac{\{u_1, v_1\}}{(u_1 v_1 - v_1 u_1)} = \frac{\{u_2, v_2\}}{(u_2 v_2 - v_2 u_2)} = \text{const.}$$

Получаем:

$$\{u, v\}_{\text{qu}} = \alpha(uv - vu) = \alpha[u, v]$$

Это означает, что α — это какая-то фундаментальная константа. Ответ на её значение даёт эксперимент. В последующих лекциях будет показано, что $\alpha = -\frac{i}{\hbar}$.

Определение.

$$\{u, v\}_{\text{qu}} \stackrel{\text{def}}{=} -\frac{i}{\hbar}[u, v]$$

2.9.4 Фундаментальная скобка Пуассона

Речь идёт о координатах и импульсах.

В классической механике

$$[p_i, q_j] = [p_i, p_j] = [q_i, q_j] = 0$$

Но классические скобки Пуассона отличны от нуля:

$$\begin{cases} \{q_i, p_j\} = \delta_{ij} \\ \{q_i, q_j\} = \{p_i, p_j\} = 0 \end{cases} \rightarrow$$

Предположение:

$$\begin{cases} \{q_i, p_j\}_{\text{qu}} = \delta_{ij} \\ \{q_i, q_j\}_{\text{qu}} = \{p_i, p_j\}_{\text{qu}} = 0 \end{cases}$$

Фундаментальные коммутационные соотношения (условия квантования):

$$\begin{cases} [q_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij} \\ [p_i, p_j] = [q_i, q_j] = 0 \end{cases}$$

В классической механике принято называть q_i, p_i *дополнительными* в смысле соотношения неопределённостей. Дополнительные не коммутируют, из них нельзя составить полный набор.

2.10 Координатное представление в квантовой механике

Координатное представление ещё иногда называют X -представлением.

2.10.1 Базис

Базис в пространстве \mathcal{H} — это обобщённые собственные векторы оператора координат:

$$\hat{x}|x'\rangle = x'|x'\rangle$$

Замечание. Декартова система имеет преобладающее значение, хотя иногда встречается и сферическая система координат и другие.

Когда речь идёт об абстрактном гильбертовом пространстве, то элементы p_i, q_j являются элементами каких-то абстрактных алгебр с операцией $[p_i, q_j], [p_i, p_j], [q_i, q_j]$. Представление канонических коммутационных соотношений: переход к эрмитовым операторам.

Надо предположить, что у оператора \hat{x} есть хотя бы один собственный вектор, отвечающий вещественному собственному значению.

Теорема. Оператор \hat{x} сам по себе образует полный набор⁶.

Замечание. Если

$$\exists \hat{F}: [\hat{F}, \hat{x}] = 0,$$

то

$$\hat{F} = F(\hat{x})$$

2.10.2 Спектр оператора \hat{x}

Дальнейшие утверждения будут доказаны на семинарах.

Спектр оператора \hat{x} непрерывен и заполняет всю вещественную ось.

Доказательство. Введём оператор $\hat{T}_a \stackrel{\text{def}}{=} \exp\left(\frac{i}{\hbar} a \hat{p}\right)$, $\text{Im } a = 0$

Можно заметить, что

$$\hat{T}_a^+ = \hat{T}_a^{-1} = \hat{T}_{-a} \text{ — оператор трансляции на } a$$

Для дальнейших рассуждений понадобится коммутатор

$$[\hat{T}_a, \hat{x}] = a\hat{T}_a \Leftrightarrow \hat{x}\hat{T}_a = \hat{T}_a(\hat{x} - a \cdot \hat{1})$$

Подействуем на $|x'\rangle$ слева двумя операторами:

$$\hat{x}\hat{T}_a|x'\rangle = \hat{T}_a(\hat{x} - a)|x'\rangle = (x' - a)\hat{T}_a|x'\rangle$$

Получили новый собственный вектор (ненулевой в силу существования обратного оператора), соответствующий собственному значению $(x' - a)$.

Норма вектора:

$$\hat{T}_a^+ \cdot \hat{T}_a = \hat{1}$$

⁶Полный набор взаимно коммутирующих наблюдаемых. Это означает, что не требуется вводить дополнительных коммутирующих операторов.

Таким образом, $\|\hat{T}_a|x'\rangle\| = \| |x'\rangle \|$

Итак, можно получить любой его собственный вектор, соответствующий любому вещественному собственному значению. Отсюда следует непрерывность спектра вещественных собственных значений.

Замечание. Из сказанного выше следует неограниченность оператора \hat{x}

2.10.3 Эрмитовость оператора \hat{x}

$$\begin{aligned}\hat{x}|x'\rangle &= x'|x'\rangle \\ \langle x'|\hat{x} &= \langle x'|x' \\ \hat{x}^+ &= \hat{x}\end{aligned}$$

Полное доказательство ждёт в задании.

2.10.4 Ортонормированность и полнота

$$\begin{aligned}\langle x|x'\rangle &= \delta(x - x') \\ \int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle\langle x|dx &= \hat{1}\end{aligned}$$

2.10.5 Волновая функция

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle \underline{\langle x|\psi\rangle} dx$$

Координатами этого вектора является совокупность чисел $\langle x|\psi\rangle$, и континуум компонент вектора ψ в базисе собственных векторов оператора \hat{x} образует функцию

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$$

Иногда она называется *матричной реализацией*

2.10.6 Скалярное произведение

Перейдём к координатному представлению скалярного произведения $\langle\psi|\varphi\rangle$.

$$\begin{aligned}\langle\psi|\varphi\rangle &= \langle\psi|\hat{1}|\varphi\rangle \\ \langle\psi|\varphi\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \langle\psi|x\rangle\langle x|\varphi\rangle dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x|\psi\rangle^* \langle x|\varphi\rangle dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)\varphi(x)dx\end{aligned}$$

Аналогично,

$$\begin{aligned} & \| |\psi\rangle \|^2 \\ &= \langle \psi | \psi \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx \end{aligned}$$

Таким образом, пространство \mathcal{H} реализовано в виде пространства $L_2(\mathbb{R})$

2.10.7 Собственные функции оператора \hat{x} в координатном представлении

Собственные вектор $|x'\rangle$, по определению, имеет вид

$$\hat{x}|x'\rangle = x'|x'\rangle$$

$$\underline{\psi_{x'}(x) = \langle x|x'\rangle = \delta(x - x')}$$

2.10.8 Оператор координаты в x -представлении

Для произвольного вектора $|\psi\rangle$

$$\hat{x}|\psi\rangle = |\varphi\rangle$$

Проектируем это равенство на x -базис, то есть скалярно умножаем на $\langle x|$:

$$\langle x|\hat{x}|\psi\rangle = \langle x|\varphi\rangle = \varphi(x)$$

$$\begin{aligned} \varphi(x) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x|\hat{x}|x'\rangle \langle x'|\psi\rangle dx' \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \underbrace{x'\delta(x - x')}_{\text{ядро интегрального оператора}} \psi(x') dx' \\ &= x\psi(x) \end{aligned}$$

При переходе к координатному базису действие сводится к умножению на вещественное число x , то есть

$$\varphi(x) = x\psi(x)$$

Замечание. Запись вида $\hat{x}\psi(x) = x\psi(x)$ математически некорректна, так как объекты слева и справа от равенства записаны в разных пространствах.

2.10.9 $U(\hat{x})$ в x -представлении

$$U(\hat{x}) = \int_{-\infty}^{+\infty} U(x')|x'\rangle\langle x'|dx'$$

$$U(\hat{x})|\psi\rangle = |\varphi\rangle$$

Упражнение.

$$U(x)\psi(x) = \varphi(x)$$

Правила работы с δ -функциями.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(x-x_0)dx = f(x_0) \quad (2.1)$$

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx}dk = \delta(x) \quad (\text{Фурье}) \quad (2.2)$$

$$x\delta(x) = 0, \quad x\delta'(x) = -\delta(x) \quad (2.3)$$

2.10.10 Оператор \hat{p}_x в x -представлении

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \langle x|\hat{p}_x|x'\rangle\langle x'|\psi\rangle dx' = \langle x|\varphi\rangle$$

При этом

$$\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x} = i\hbar\hat{1}$$

$$\langle x|(\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x})|x'\rangle = i\hbar\langle x|x'\rangle$$

Поддействовав первым оператором \hat{x} налево, вторым оператором \hat{x} направо, получаем:

$$(x-x')\langle x|\hat{p}_x|x'\rangle = i\hbar\delta(x-x')$$

Получили функциональное уравнение на функцию $f(x, x') = \langle x|\hat{p}_x|x'\rangle$ (для класса обобщённых функций):

$$(x-x')\langle x|\hat{p}_x|x'\rangle = i\hbar\delta(x-x')$$

Пользуясь правилом (3), получаем:

$$\underline{\langle x|\hat{p}_x|x'\rangle = i\hbar\delta(x-x')}$$

ГЛАВА 2. МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Теперь можно получить *матричную реализацию* этого оператора:

$$\begin{aligned}\varphi(x) &= \int_{-\infty}^{+\infty} i\hbar\delta'(x' - x)\psi(x')dx' \\ &= -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x' - x) \frac{\partial}{\partial x'} \psi(x') dx' \\ &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x)\end{aligned}$$

Замечание. Функция $\varphi(x)$ задана неоднозначно:

$$\begin{aligned}\langle x|\hat{p}_x|x'\rangle &= i\hbar\delta'(x' - x) \\ \varphi(x) &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) + f(x)\psi(x)\end{aligned}$$

Объяснение:

Этот вид решений даёт унитарно эквивалентное представление коммутационных соотношений. Как известно, унитарные преобразования не изменяют наблюдаемых величин, физическое содержание теории остаётся неизменным. Поэтому среди всех таких представлений можно выбрать наиболее простое ($f(x) = 0$)

Резюме:

1. От произвольного гильбертова пространства \mathcal{H} мы перешли к конкретному пространству $L_2(\mathbb{R})$. Тогда операторам соответствуют их конкретные реализации:

- $\hat{x} \rightarrow x$
- $\hat{p}_x \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$
- $\hat{\vec{p}} \rightarrow -i\hbar \vec{\nabla}$
- $\hat{U}(x) \rightarrow U(x)$

2. Основные динамические переменные p, x . Остальные величины (в классике) выражаются через них.

Вопрос. Есть ли другие такие операторы в квантовой механике?

Ответ. Операторы \hat{x}, \hat{p} образуют неприводимый набор (в \mathcal{H} нет нетривиального замкнутого инвариантного по отношению к этому набору подпространства). ^[и что?]

Пример: дифференциальный оператор:

$$\langle x|\hat{F}|x'\rangle = \hat{\mathcal{F}}\delta(x - x')$$

$$\begin{aligned}
 \langle \psi | \hat{F} | \varphi \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx dx' \langle \psi | x \rangle \langle x | \hat{F} | x' \rangle \langle x' | \varphi \rangle dx' \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx dx' \psi^*(x) \hat{\mathcal{F}} \delta(x - x') \varphi(x') \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x) \hat{\mathcal{F}} \varphi(x)
 \end{aligned}$$

3. Соотношение неопределённостей.

$$\left[-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, x \right] = \dots = -i\hbar \hat{1}$$

Можно поступить наоборот: ввести операторы, и из их конкретного вида получить коммутационные соотношения.

4. Уравнение Шрёдингера в координатном представлении:

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle &= \hat{H} |\psi(t)\rangle, \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \hat{U}(x) \\
 i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^2 + U(x) \right) \Psi(x, t)
 \end{aligned}$$

2.10.11 Собственные функции оператора \hat{p}_x в x -представлении.

$$\hat{p}_x |p'\rangle = p' |p'\rangle \quad \rightarrow \quad \langle x | p \rangle = \psi_p(x)$$

Замечание. индекс p означает, что это собственная функция оператора импульса

Из условия нормировки:

$$\begin{aligned}
 -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi_p(x) &= p \psi_p(x), \\
 \psi_p(x) &= C \exp \left(\frac{ipx}{\hbar} \right), \quad |\psi_p(\pm\infty)| < \infty
 \end{aligned}$$

Доказательство.

$$\underbrace{\langle p | p' \rangle}_{\langle p | \hat{1} | p' \rangle} = \delta(p - p')$$

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{+\infty} dx \langle p|x \rangle \langle x|p' \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_p^*(x) \psi_{p'}(x) dx \\ &= C^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(\frac{-i\hbar(p-p')}{\hbar}\right) dx \\ &= C^2 2\pi\hbar \delta(p-p') = \delta(p-p') \end{aligned}$$

2.11 Импульсное представление в квантовой механике

По-другому импульсное представление иногда называется p -представлением.

Будут описаны только основные моменты, потому что идея похожа на x -представление.

2.11.1 Базис

$$\hat{p}|p'\rangle = p'|p'\rangle$$

2.11.2 Спектр

Спектр является непрерывным и заполняет всю вещественную ось,

$$-\infty < p < +\infty$$

2.11.3 Ортонормированность и полнота системы собственных векторов

$$\langle p|p'\rangle = \delta(p-p')$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |p\rangle \langle p| dp = \hat{1}$$

2.11.4 Волновая функция

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |p\rangle \langle p|\psi\rangle dp \rightarrow$$

$$\Phi(p) = \langle p|\psi\rangle, \quad |\Phi(p)|^2 dp = W(p) dp$$

2.11.5 Конкретные реализации

$$\begin{aligned}\hat{p} &\rightarrow p, \\ \hat{x} &\rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial p}\end{aligned}$$

Чтобы проследить перемену знака, надо подставить \hat{p} , \hat{x} в их коммутатор.

Глава 3

Временная эволюция физических систем

В этой главе не будет идти речи о выборе базиса. Это представление зависимости во времени, то есть разные способы введения времени в квантовой механике.

Терминология: в квантовой механике принято говорить об уравнениях временной эволюции. Это более общее понятие, чем просто уравнение движения.

Кроме слова «представление» также употребляют слово «картина».

3.1 Представление Шрёдингера

3.1.1 Оператор эволюции

Определение. Предположим, что имеется состояние, которое в начальный момент времени t_0 имеет вид $|\psi(t_0)\rangle$.

В результате эволюции состояние описывается волновым вектором $|\psi(t)\rangle$.

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle$$

Определение. Оператор \hat{U} называется *оператором эволюции*.

Свойства:

1. Представим, что есть промежуточный момент времени, $t_0 < t' < t$.

Тогда эволюцию можно представлять, как «происходящую в два этапа»:

$$\hat{U}(t, t')\hat{U}(t', t_0) = \hat{U}(t, t_0)$$

При совпадающих моментах времени:

$$\hat{U}(t_0, t_0) = \hat{1}$$

2. Если внешние условия стационарны, то оператор эволюции не может зависеть индивидуально от одного момента времени и от другого момента времени. Он зависит от их разности, то есть определяется промежутком времени:

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{U}(t - t_0) \stackrel{\text{def}}{=} \hat{U}(\tau)$$

Преобразуем это равенство:

$$\begin{cases} \hat{U}(\tau_1)\hat{U}(\tau_2) = \hat{U}(\tau_1 + \tau_2), \\ \hat{U}(0) = \hat{1} \end{cases}$$

3. Если время обратимо:

$$\begin{cases} |\psi(t_0)\rangle \rightarrow |\psi(t)\rangle, \\ |\psi(t)\rangle \rightarrow |\psi(t_0)\rangle \end{cases} \Rightarrow \hat{U}^{-1}(t, t_0) = \hat{U}^{-1}(\tau) = \hat{U}(-\tau)$$

$$\hat{U}^{-1}(\tau)\hat{U}(\tau) = \hat{U}(\tau)\hat{U}^{-1}(\tau) = \hat{1}$$

Вывод: семейство операторов $\hat{U}(\tau)$ образует однопараметрическую группу преобразований.

4. (Чисто физическое требование). При этих преобразованиях не должно изменяться физическое содержание теории.

Условие неизменности содержится в вероятности. Поставим условие неизменности скалярного произведения.

$$\begin{aligned} \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle &= \langle \psi(t_0) | \hat{U}^\dagger(t - t_0) \hat{U}(t - t_0) | \psi(t_0) \rangle \\ &= \langle \psi(t_0) | \psi(t_0) \rangle \end{aligned}$$

Явный вид оператора $\hat{U}(\tau)$ получается из уравнения Шрёдингера (которое постулируется квантовой механикой).

$$\begin{aligned} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} \right) |\psi(t)\rangle &= 0 \\ \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} \right) \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle &= 0 \end{aligned}$$

Если гамильтониан явно не зависит от времени, то

$$\hat{U}(t, t_0) = \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t - t_0) \right)$$

Гамильтониан должен быть эрмитовым оператором, как главная наблюдаемая нашей системы:

$$\hat{H}^\dagger = \hat{H}$$

Значит, оператор \hat{U} унитарный:

$$\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$$

Определение. Описание эволюции системы, когда эволюция во времени заключается в том, что векторы состояний, или волновые функции зависят от времени, а операторы не зависят от времени, называется *представлением Шрёдингера*.

3.1.2 Стационарные состояния

Пусть задана система:

$$\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0$$

Найдём решение уравнения Шрёдингера:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle$$

методом разделения переменных.

Представим волновую функцию в виде произведения:

$$|\psi(t)\rangle = f(t) \cdot |\psi\rangle,$$

где $f(t)$ зависит от t , и $|\psi\rangle$ не зависит от времени.

Производим «формальное деление»:

$$\frac{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} f(t)}{f(t)} = \frac{\hat{H} |\psi\rangle}{|\psi\rangle} = \underbrace{E}_{\text{const}}$$

$$\begin{cases} \hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle, \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} f(t) = E f(t) \end{cases}$$

Это уравнение на собственные векторы и значения гамильтониана, стационарное уравнение Шрёдингера. Физически собственные значения гамильтониана — полная энергия системы.

Решение этого уравнения даёт:

$$f(t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}}, \quad f(0) = 1$$

Вывод: в стационарном случае уравнение Шрёдингера имеет следующую систему частных решений:

$$\begin{cases} |\psi_E(t)\rangle = \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) |\psi_E\rangle, \\ \hat{H} |\psi_E\rangle = E |\psi_E\rangle \end{cases}$$

Это состояния называются *стационарными*. Ещё раз подчеркнём, что **стационарные состояния — это те состояния, в которых энергия имеет вполне определённые значения, и более того, сохраняется во времени.**

Общее решение записывается разложением по системе частных решений как по базису¹.

$$|\psi(t)\rangle = \sum_E C_E |\psi_E(t)\rangle = \sum_E C_E e^{-\frac{iEt}{\hbar}} |\psi_E\rangle = \sum_n C_n e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} |\psi_n\rangle + \int dE C(E) e^{-\frac{iEt}{\hbar}} |\psi_E\rangle$$

¹ $\sum_A \stackrel{\text{def}}{=} \begin{cases} \sum_n, & \text{дискретный спектр;} \\ \int \dots dA, & \text{непрерывный спектр.} \end{cases}$

Общее решение раскладывается по полной системе собственных векторов гамильтониана единственным образом.

$$|C_E|^2 = W_{|\psi\rangle}(E): |\psi(0)\rangle = |\psi_0\rangle \rightarrow C_E$$

Обычно, решая уравнение Шрёдингера, ограничиваются стационарным случаем. Общее решение ищут как линейную комбинацию частных решений.

3.1.3 Квантовый аналог уравнения непрерывности

Замечание. Есть аналогия между квантовой механикой и классической теорией несжимаемой жидкости, которые, впрочем, не распространяются очень далеко.

Уравнение Шрёдингера:	$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \Psi(\vec{r}, t) + U(\vec{r}) \Psi(\vec{r}, t)$	$\cdot \Psi^*$
Координатное представление:	$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi^*(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \Psi^*(\vec{r}, t) + U(\vec{r}) \Psi^*(\vec{r}, t)$	$\cdot \Psi$
Представление Шрёдингера:	$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\Psi^* \Psi) = \frac{\hbar^2}{2m} \left((\vec{\nabla}^2 \Psi^*) \Psi - \Psi^* (\vec{\nabla}^2 \Psi) \right)$	

Отсюда получается известный результат (уравнение непрерывности):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j} = 0,$$

где

$$\rho = \Psi^* \Psi, \quad \vec{j} = \frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi (\vec{\nabla} \Psi^*) - \Psi^* (\vec{\nabla} \Psi) \right)$$

Если $\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$, то $\operatorname{div} \vec{j} = 0$

3.2 Представление Гейзенберга

Представление Гейзенберга — это другой способ введения времени в квантовой механике.

Замечание. Представления Шрёдингера и Гейзенберга образуют как бы «крайние» варианты, а вообще существует очень много «промежуточных» представлений.

В предыдущем параграфе мы пришли к заключению: при $\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0$, имеем

$$\begin{cases} |\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle, \\ \hat{U}(t, t_0) = \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t - t_0) \right) \end{cases}$$

Положим $t_0 = 0$, и будем для описания эволюции использовать только начальный вектор состояния. Оказывается, что в этом случае возможно получить полное описание эволюции системы:

$$|\psi(t_0)\rangle = |\psi(0)\rangle = |\psi_0\rangle$$

Совершим над векторами состояния и над операторами в представлении Шрёдингера унитарное преобразование при помощи оператора, обратного к оператору \hat{U} , чтобы перейти к векторам в момент времени t_0 .

Пусть вектор в представлении Гейзенберга имеет вид $|\psi_H\rangle$, а в представлении Шрёдингера $|\psi_S\rangle$

$$\begin{aligned} |\psi_H\rangle &= |\psi_S(t_0)\rangle = |\psi_S(0)\rangle = \hat{U}^{-1}(t, t_0)|\psi_S(t)\rangle = e^{i/\hbar \hat{H}_S(t-t_0)}|\psi_S(t)\rangle \\ \hat{F}_H &= \hat{U}^{-1}(t, t_0)\hat{F}_S\hat{U}(t, t_0) = e^{i/\hbar \hat{H}_S(t-t_0)}\hat{F}_S e^{-i/\hbar \hat{H}_S(t-t_0)} \\ \underline{\hat{H}_H = \hat{H}_S = \hat{H}} \end{aligned}$$

3.2.1 Векторы состояний

Оператор $e^{i/\hbar \hat{H}_S(t-t_0)}$ как бы «поворачивает назад» вектор состояния в представлении Шрёдингера. При $t = t_0$ они совпадают.

Вектор $|\varphi_H\rangle$ не зависит от t .

Вектор $|\psi_S\rangle$ зависит от t , зависимость определяется уравнением Шрёдингера.

3.2.2 Операторы

При $t = t_0$ операторы \hat{F}_H , \hat{F}_S совпадают. В произвольный момент времени оператор будет зависеть от времени.

Замечание. Окажется, что в нестационарном случае полученное ниже уравнение Гейзенберга тоже выполняется, но об этом будет сказано позже.

Положим $\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0$.

$$\hat{F}_H = e^{i/\hbar \hat{H}t} \hat{F}_S e^{-i/\hbar \hat{H}t}$$

Каждый из трёх сомножителей может зависеть от времени, надо это учитывать при дифференцировании. Дифференцировать необходимо методом внимательного взглядывания в выражение для \hat{F}_H .

$$\frac{d\hat{F}_H}{dt} = e^{i/\hbar \hat{H}t} \frac{\partial \hat{F}_S}{\partial t} e^{-i/\hbar \hat{H}t} + \frac{i}{\hbar} \left(\hat{H} \hat{F}_H - \hat{F}_H \hat{H} \right)$$

Уравнение Гейзенберга в краткой форме:

$$\underline{\frac{d\hat{F}_H}{dt} = \left(\frac{\partial \hat{F}_S}{\partial t} \right)_H + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}_H]}$$

Индекс H обозначает представления Гейзенберга.

Определение. Представление, в котором эволюция во времени переносится на операторы, а некоторые состояния от времени не зависят, называется *представлением Гейзенберга*.

Замечание.

- Напомним, что это же уравнение можно получить без предположения о стационарности системы
- Переход от представления Шрёдингера к представлению Гейзенберга, производится при помощи унитарного преобразования. Это значит, что эти представления *унитарно эквивалентны*.

3.3 Эволюция квантовомеханических средних

Как нас учит принцип соответствия, средние значения должны вести себя так же, как их классические аналоги. Проверим это предположение.

Усредним уравнение Гейзенберга по состоянию в представлении Гейзенберга $|\psi_H\rangle = |\psi_S(0)\rangle$:

Рассмотрим

$$\langle \varphi_H | \left(\frac{d\hat{F}_H}{dt} = \left(\frac{\partial \hat{F}_S}{\partial t} \right)_H + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}_H] \right) | \varphi_H \rangle$$

При этом

$$\frac{d}{dt} \langle \psi_H | \underset{\substack{\uparrow \\ \hat{U} + \hat{U}}}{\hat{F}_H}} | \underset{\substack{\uparrow \\ \hat{U} + \hat{U}}}{\psi_H} \rangle = \langle \psi_H | \hat{U}^{-1}(t, t_0) \frac{\partial \hat{F}_S}{\partial t} \hat{U}(t, t_0) | \psi_H \rangle + \frac{i}{\hbar} \langle \psi_H | \underset{\substack{\uparrow \\ \hat{U} + \hat{U}}}{[\hat{H}, \hat{F}_H]}} | \underset{\substack{\uparrow \\ \hat{U} + \hat{U}}}{\varphi_H} \rangle$$

Окончательный результат:

$$\frac{d}{dt} \langle \psi_S(t) | \hat{F}_S | \psi_S(t) \rangle = \langle \psi_S(t) | \frac{\partial \hat{F}_S}{\partial t} | \psi_S(t) \rangle + \frac{i}{\hbar} \langle \psi_S(t) | [\hat{H}, \hat{F}_S] | \psi_S(t) \rangle$$

3.4 Сопоставление классической и квантовой механики. Теоремы Эренфеста

3.4.1 Сопоставление классических и квантовых уравнений

В основе этого сопоставления лежит принцип соответствия. Хотим, чтобы уравнения квантовой механики имели вид классических.

Классика:

$$\frac{dF_{\text{classical}}}{dt} = \frac{\partial F_{\text{classical}}}{\partial t} + \left\{ F_{\text{classical}}, H \right\}$$

Выражения для скобки Пуассона

$$\{u, v\} = \alpha[u, v] \rightarrow \alpha = -\frac{i}{\hbar}$$

3.4.2 Интегралы движения

Под интегралами движения имеются в виду величины, сохраняющиеся во времени. Ввести их можно двумя способами:

1.

$$\frac{d\hat{F}_H}{dt} = 0$$

Для того, чтобы это выполнялось, достаточно двух условий:

$$\begin{cases} [\hat{H}, \hat{F}] = 0, \\ \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} = 0 \end{cases} \quad (3.1)$$

2. Вместо уравнения Гейзенберга можно положить в основу уравнение эволюции во времени квантово-механической системы.

$$\frac{d\langle \hat{F} \rangle}{dt} = 0, \quad \forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}$$

Если среднее значение наблюдаемой, вычисленное в любом состоянии, не зависит от времени, то сама величина $\langle \hat{F} \rangle$ является интегралом движения. Для того, чтобы это выполнялось, достаточно (часто необходимо), чтобы выполнялись те же условия (3.1).

3.4.3 Теоремы Эренфеста

Представления Шредингера и Гейзенберга эквивалентны с точки зрения наблюдаемых следствий, потому что векторы и операторы в обоих представлениях связаны унитарным преобразованием. Однако работать в представлении Шредингера часто удобнее, поскольку решение уравнения Шредингера в координатном представлении сводится к решению дифференциального уравнения. Уравнения Гейзенберга решать сложнее – они операторные. Тем не менее, есть "плюсы" и в представлении Гейзенберга. В представлении Гейзенберга наиболее ярко прослеживается связь между квантовой и классической механикой (принцип соответствия). Дело в том, что уравнения, являющиеся аналогами классических, записываются в этом представлении не для средних значений, а для самих операторов физических величин.

Действительно, в представлении Гейзенберга выполнено:

$$\frac{d\hat{r}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{r}] = \frac{i}{\hbar} \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\hat{r}), \hat{r} \right] = \frac{\hat{p}}{m} \quad (3.2)$$

$$\frac{d\hat{p}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{p}] = \frac{i}{\hbar} [U(\hat{r}), \hat{p}] = -\text{grad } U(\hat{r}) \quad (3.3)$$

Теоремы Эренфеста – это обобщение уравнений Ньютона в квантовой теории. В квантовой теории классические уравнения обобщаются путем замены классических физических величин на средние значения операторов.

Действительно, усредним при помощи процедуры $\langle \psi_H | \dots | \psi_H \rangle$ данные уравнения по состоянию, взятому в представлении Гайзенберга, и получим теоремы Эренфеста:

$$\begin{cases} \frac{d \langle \hat{\vec{r}} \rangle}{dt} = \frac{\langle \hat{\vec{p}} \rangle}{m} \\ \frac{d \langle \hat{\vec{p}} \rangle}{dt} = - \langle \text{grad } U(\hat{\vec{r}}) \rangle \end{cases}$$

Теорема. Уравнения эволюции во времени средних значений координат и импульсов формально тождественны уравнениям Гамильтона классической механики, если все физические величины в классических уравнениях (в обеих частях) заменить на средние значения квантовых операторов.

Замечание. Полученные уравнения *не являются классическими*. В этих уравнениях в правых частях стоят некоторые средние значения, для вычисления которых, вообще говоря, требуется знание волновой функции. Это были бы классические уравнения, если бы можно было сделать замену

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial x} U(\hat{x}) \right\rangle = \frac{\partial}{\partial x} U(\langle \hat{x} \rangle),$$

и аналогичные замены для других величин. Это выполнено, например, если \hat{H} — многочлен 2 степени по \hat{p} , \hat{x} . Например, гамильтониан свободной частицы, или гармонического осциллятора, или заряженной частицы в однородном магнитном (электрическом) поле.

Глава 4

Одномерное движение

Будем отталкиваться от одномерного уравнения Шрёдингера

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (4.1)$$

Гамильтониан определяется из принципа соответствия

4.1 Линейный гармонический осциллятор

Будем решать (4.1) в абстрактном гильбертовом пространстве, без конкретного представления.

Задача: найти собственные векторы и спектр оператора \hat{H} ,

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2} \\ \hat{H} |\psi_E\rangle &= E |\psi_E\rangle \end{aligned}$$

4.1.1 Обезразмеривание

Гамильтониан приводится к виду

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

где

$$\begin{aligned} \hat{P} &= \frac{\hat{p}}{p_0}, & \hat{X} &= \frac{\hat{x}}{x_0}, \\ x_0 &= \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, & p_0 &= \sqrt{\hbar m\omega} \end{aligned}$$

x_0, p_0 — осцилляторные единицы координаты и импульса.

Новое значение коммутатора имеет вид:

$$[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar \frac{1}{\hbar} \hat{1} = i$$

4.1.2 «Разложение на множители»

Обозначим

$$\begin{cases} \hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{X} + i\hat{P}) \\ \hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{X} - i\hat{P}) \end{cases}$$

Эти операторы всего лишь сопряжены друг другу ^[Почему?], они не являются эрмитовыми или унитарными. *ЛЕКТОР* : $\hat{X}^+ = \hat{X}$, а также $\hat{P}^+ = \hat{P}$, остальное очевидно, исходя из явного вида операторов \hat{a} и \hat{a}^+ .

$$\begin{aligned} \hat{a}^+ \hat{a} &= \frac{1}{2} (\hat{X} - i\hat{P})(\hat{X} + i\hat{P}) \\ &= \frac{1}{2} (\hat{X}^2 + \hat{P}^2 - i[\hat{P}, \hat{X}]) \\ &= \frac{\hat{H}}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} \hat{1} \end{aligned}$$

Окончательное выражение для гамильтониана¹:

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

4.1.3 Алгебра операторов \hat{a}^+ , \hat{a} и функций от них

$$\hat{N} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{a}^+ \hat{a}$$

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

Доказательство.

$$\begin{aligned} [\hat{a}, \hat{a}^+] &= \frac{1}{2} [\hat{X} + i\hat{P}, \hat{X} - i\hat{P}] \\ &= \frac{1}{2} (-i[\hat{X}, \hat{P}] + i[\hat{P}, \hat{X}]) = \hat{1} \end{aligned}$$

Оператор

$$\hat{N} = \hat{a}^+ \hat{a}$$

является эрмитовым, и его собственные векторы — собственные векторы гамильтониана (он *линейно связан* с гамильтонианом)

$$\begin{cases} [\hat{N}, \hat{a}] = [\hat{a}^+ \hat{a}, \hat{a}] = [\hat{a}^+, \hat{a}] \hat{a} = -\hat{a}, \\ [\hat{N}, \hat{a}^+] = \hat{a}^+ \end{cases}$$

¹Единичный оператор обычно опускают

4.1.4 Собственные векторы и значения гамильтониана (оператора \hat{N})

1. Предполагаем, что найдётся хотя бы одно решение уравнения

$$\hat{N}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle, \quad |\lambda\rangle \in \mathcal{H},$$

причём $\langle\lambda|\lambda\rangle = 1$, то есть λ лежит в дискретном спектре.

- 2.

$$\begin{aligned}\hat{N}\hat{a}^+|\lambda\rangle &= (\hat{a}^+\hat{N} + [\hat{N}, \hat{a}^+])|\lambda\rangle \\ &= (\hat{a}^+\hat{N} + \hat{a}^+)|\lambda\rangle \\ &= (\lambda + 1)\hat{a}^+|\lambda\rangle\end{aligned}$$

Если предположить, что у оператора \hat{N} существует хотя бы один собственный вектор, то действие на собственный вектор оператора \hat{a}^+ даёт собственный вектор, отвечающий собственному значению $(\lambda + 1)$.

3. Аналогично,

$$\hat{N}\hat{a}|\lambda\rangle = (\lambda - 1)\hat{a}|\lambda\rangle$$

Вывод: действуя операторами \hat{a} , \hat{a}^+ на какой-нибудь собственный вектор $|\lambda\rangle$, можно построить цепочку собственных векторов с собственными значениями $\lambda \pm 1, \lambda \pm 2, \dots$

$$\begin{cases} \hat{a}^+|\lambda\rangle = C|\lambda + 1\rangle \\ \hat{a}|\lambda\rangle = D|\lambda - 1\rangle \end{cases}$$

\hat{a}^+, \hat{a} — «лестничные» операторы.

4.1.5 Лестничные операторы

Покажем, что спектр собственных значений \hat{N} ограничен снизу.

$$\lambda = \langle\lambda|\hat{N}|\lambda\rangle = \langle\lambda|\hat{a}^+\hat{a}|\lambda\rangle = \|\hat{a}|\lambda\rangle\|^2 \geq 0$$

Утверждение: должен быть собственный вектор, отвечающий собственному значению 0. [Почему?]

Квадрат нормы вектора всегда неотрицателен: $\|\psi\|^2 = \langle\psi|\psi\rangle \geq 0$, причем равенство в данной формуле достигается тогда и только тогда, когда $|\psi\rangle = 0$, поэтому и должен существовать собственный вектор оператора \hat{N} , отвечающий собственному значению $\lambda = 0$, т.е. должно выполняться условие $\hat{a}|0\rangle = 0$. Это — очень важное условие, потому что оно препятствует неограниченному "спуску по лестнице вниз", т.е. именно оно ограничивает спектр оператора \hat{N} снизу значением $\lambda = 0$.

$$\hat{a}|0\rangle = 0$$

Таким образом, собственные значения имеют вид $n = 0, 1, 2, \dots$,

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

Других собственных значений нет.

Вопрос. А все ли собственные значения λ мы нашли?

Ответ. Все! Любое собственное значение оператора \hat{N} , например, λ' порождает цепочку собственных значений $\lambda' \pm 1, \dots$. А если это – не целые неотрицательные числа, – то мы получаем спектр, не ограниченный снизу. Этого быть не может.

Интерпретация.

1. Традиционный подход.

\hat{H} описывает систему с одной частицей (одночастичную систему),

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

При этом $|0\rangle$ — основное состояние, $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$, $|n\rangle$ — возбужденные состояния.

2. Другой подход.

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

Гамильтониан \hat{H} описывает *не одночастичную систему*, а систему из n тождественных (неразличимых в квантовом смысле²) частиц. Каждая частица имеет энергию $\hbar\omega$. Число частиц при этом *не фиксировано*, оно может изменяться, но собственные векторы оператора \hat{H} (или \hat{N}) отвечают определенным значениям "числа частиц", т.е. n .

- \hat{N} — оператор числа частиц, n — его собственное значение — число частиц.
- $|0\rangle$ — основное состояние или состояние без частиц (вакуум).
- $|n\rangle$ — состояние, в котором возбуждено n частиц (возбуждённое).

Эти частицы называют *квантами*, или *квазичастицами* (пример³: фотоны, фононы).

- \hat{a}^+ — оператор рождения частиц.
- \hat{a} — оператор уничтожения частиц.

Действие операторов рождения и уничтожения частиц:

$$\begin{cases} \hat{a}^+ |n\rangle = C |n+1\rangle, \\ \hat{a} |n\rangle = D |n-1\rangle \end{cases}$$

²Об этом подробнее – в следующем семестре!

³Род частиц зависит от значения ω

Наша задача — найти C, D .

$$\begin{aligned} \begin{cases} \hat{a}^+|n\rangle = C|n+1\rangle \\ \langle n|\hat{a} = C^*\langle n+1| \end{cases} \\ \langle n|\hat{a}\hat{a}^+|n\rangle = |C|^2\langle n+1|n+1\rangle = |C|^2 \\ \langle n|\hat{a}^+\hat{a} + \hat{1}|n\rangle = \langle n|\hat{N} + \hat{1}|n\rangle = n+1 \end{aligned}$$

С точностью до общей фазы (в любом случае, мы её не можем наблюдать),

$$C = \sqrt{n+1}$$

Отсюда получаем:

$$\begin{cases} \hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \\ \hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \end{cases}$$

Вопрос. Как получить $|n\rangle$?

Ответ. Найдём $|0\rangle$, для этого нужно решить операторное уравнение $\hat{a}|0\rangle = 0$, затем

$$\begin{aligned} |1\rangle &= \frac{\hat{a}^+}{\sqrt{1!}}|0\rangle \\ |2\rangle &= \frac{(\hat{a}^+)^2}{\sqrt{2!}}|0\rangle \\ &\dots \\ |n\rangle &= \frac{(\hat{a}^+)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle \end{aligned}$$

Упражнение. Проверить, что $\langle n|n'\rangle = \delta_{nn'}$

4.1.6 Замечания математического характера

- Можно доказать, что \hat{N} образует сам по себе полный набор совместных наблюдаемых, то есть его собственные значения однозначно характеризует собственные векторы (ни одно собственное значение оператора \hat{N} не является вырожденным).

Это означает, что не требуется вводить дополнительных операторов, коммутирующих с \hat{N} для различения собственных векторов (по набору собственных значений), с оператором \hat{N} коммутируют только $f(\hat{N})$:

$$[\hat{A}, \hat{N}] = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \hat{A} = f(\hat{N})$$

- Система собственных векторов $\{|n\rangle\}$ оператора \hat{N} полна. С одной стороны, мы нашли все его собственные векторы (см. выше), а с другой стороны, мы знаем, что система собственных векторов эрмитова (самосопряженного) оператора полна. Отсюда следует полнота системы собственных векторов оператора \hat{N} . Это значит, что если "натянуть" на базис $\{|n\rangle\}$ пространство \mathcal{H} , то это будет именно гильбертово пространство⁴.

⁴Детали можно найти в книге А. Мессиа «Квантовая механика» 2 тома, М: Наука, 1978

4.1.7 Координатное представление

Оно строится при помощи функций

$$\langle \xi | n \rangle = \left\langle \frac{x}{x_0} | n \right\rangle = \psi_n(\xi)$$

Перейдем в координатное представление. Тогда будет:

$$\begin{cases} \hat{a} \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi + \frac{\partial}{\partial \xi} \right) \\ \hat{a}^+ \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi - \frac{\partial}{\partial \xi} \right) \end{cases}$$

Подставляя явный вид оператора \hat{a} в уравнение $\hat{a}|0\rangle = 0$, получаем дифференциальное уравнение для волновой функции основного состояния $\psi_0(\xi) = \langle \xi | 0 \rangle$:

$$\left(\xi + \frac{\partial}{\partial \xi} \right) \langle \xi | 0 \rangle = 0$$

$$\frac{d\langle \xi | 0 \rangle}{\langle \xi | 0 \rangle} = -\xi d\xi$$

Основное состояние:

$$\langle \xi | 0 \rangle = c_0 e^{-\xi^2/2} \quad \text{где} \quad c_0 = 1/\sqrt[4]{\pi}.$$

В координатном представлении:

$$\begin{aligned} \langle \xi | n \rangle = \psi_n(\xi) &= \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\xi - \frac{\partial}{\partial \xi} \right)^n \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} e^{-\xi^2/2} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2^n n!} \sqrt[4]{\pi}} e^{-\xi^2/2} H_n(\xi) \end{aligned}$$

$H_n(\xi)$ — полином Эрмита.

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

Известный из математики факт: система функций $\psi_n(\xi)$ (см. выше) полна в пространстве $L_2(\mathbb{R})$. Значит, найдены действительно все стационарные состояния осциллятора.

Глава 5

Теория углового момента

5.1 Каноническое квантование

Каноническое квантование — это квантование при помощи коммутационных соотношений.

5.1.1 Коммутационные соотношения

Напоминание. В классической механике есть *орбитальный момент*, или *момент количества движения*

$$\vec{L} = [\vec{r} \times \vec{p}] = (L_x, L_y, L_z)^\top$$

Вопрос. Как поставить этой величине в соответствие квантовый оператор?

Заметим, что:

$$\{L_i, L_j\} = e_{ijk} L_k$$

Имеется две возможности для применения принципа соответствия:

1. Заменить p_i, q_j на соответствующие им квантовые операторы \hat{p}_i, \hat{q}_j
2. Заменить классические скобки Пуассона на квантовые.

При втором подходе оказывается возможным описать вектор $\hat{\vec{S}}$ — *спиновый, или собственный момент*, для которого нет классического аналога.

Под угловым моментом понимается более общее понятие (в частном случае он может являться как спиновым, так и орбитальным)

Определение.

$$\hat{\vec{J}} = \{\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z\}$$

является оператором углового момента, если выполняется 2 условия:

1. Все компоненты являются *наблюдаемыми*

2. Для них выполняется классическое коммутационное соотношение

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar e_{ijk} \hat{J}_k$$

Замечание. В квантовой механике мы не имеем возможности измерить две координаты углового момента, ибо они попарно не коммутируют.

Обозначения:

- 1.

$$\begin{aligned} \vec{\hat{J}} &= \hbar \vec{\hat{j}} \\ [\hat{j}_i, \hat{j}_j] &= i e_{ijk} \hat{j}_k \end{aligned}$$

2. Оператор квадратного углового момента

$$\begin{aligned} \vec{\hat{j}}^2 &= \hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2 + \hat{j}_z^2 \\ [\vec{\hat{j}}^2, \hat{j}_\ell] &= 0, \quad \forall \ell = 1, 2, 3 \end{aligned}$$

- 3.

$$\begin{aligned} \hat{j}_\pm &= \hat{j}_x \pm i\hat{j}_y \\ [\hat{j}_z, \hat{j}_\pm] &= \pm \hat{j}_\pm \end{aligned}$$

Они не являются эрмитовыми. Роль этих операторов напоминает роль операторов \hat{a}, \hat{a}^+ в одномерном движении.

Следствие. $[\vec{\hat{j}}^2, \hat{j}_\pm] = 0$

5.1.2 TODO!!!

1. Для дальнейшего исследования надо предположить, что имеется хотя бы один собственный вектор.

$$\begin{cases} \vec{\hat{j}}^2 |\lambda, \mu\rangle = \lambda |\lambda, \mu\rangle, \\ \hat{j}_z |\lambda, \mu\rangle = \mu |\lambda, \mu\rangle \end{cases}$$

Предполагаем, что векторы нормированы на 1:

$$\langle \lambda, \mu | \lambda, \mu \rangle = 1$$

2. Поскольку оператор \hat{j}_\pm коммутирует с оператором $\vec{\hat{j}}^2$,

$$\hat{j}_z \hat{j}_\pm |\lambda, \mu\rangle = (\hat{j}_\pm \hat{j}_z + \underbrace{[\hat{j}_z, \hat{j}_\pm]}_{=\pm \hat{j}_\pm}) |\lambda, \mu\rangle = (\mu \pm 1) \hat{j}_\pm |\lambda, \mu\rangle$$

Можно построить собственные векторы, отвечающие собственным значениям $\mu \pm 1$, и так далее.

Вывод:

$$\hat{j}_{\pm}|\lambda, \mu\rangle = N_{\pm}|\lambda, \mu \pm 1\rangle \quad (5.1)$$

Хотим показать, что спектр оператора \hat{j}_z является ограниченным (см. главу 4)

3.

$$\begin{aligned} \lambda &= \langle \lambda, \mu | \hat{j}^2 | \lambda, \mu \rangle \\ &= \langle \lambda, \mu | \hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2 + \hat{j}_z^2 | \lambda, \mu \rangle \\ &= \langle \lambda, \mu | \hat{j}_x^+ \hat{j}_x | \lambda, \mu \rangle + \langle \lambda, \mu | \hat{j}_y^+ \hat{j}_y | \lambda, \mu \rangle + \langle \lambda, \mu | \hat{j}_z^+ \hat{j}_z | \lambda, \mu \rangle \geq 0 \end{aligned}$$

Каждое слагаемое может быть записано в виде квадрата нормы некоторого вектора.

$$\lambda = \underbrace{\langle \lambda, \mu | \hat{j}_x^2 | \lambda, \mu \rangle + \langle \lambda, \mu | \hat{j}_y^2 | \lambda, \mu \rangle}_{\geq 0} + \mu^2 \geq 0$$

Отсюда следует, что если при фиксированном λ число μ^2 ограничено сверху. А это означает, что

$$\mu_{\min} \leq \mu \leq \mu_{\max}$$

Обозначим $\mu_{\max} = j$

Должны выполняться два условия:

$$\begin{cases} \hat{j}_+|\lambda, j\rangle = 0 \\ \hat{j}_-|\lambda, \mu_{\min}\rangle = 0 \end{cases}$$

Для того, чтобы реализовать эти условия, надо найти N_{\pm} . Воспользуемся (5.1).

4.

$$\begin{aligned} N_{\pm}^2 &= \langle \lambda, \mu | \hat{j}_{\pm}^+ \hat{j}_{\pm} | \lambda, \mu \rangle \\ &= \langle \lambda, \mu | \hat{j}_{\mp} \hat{j}_{\pm} | \lambda, \mu \rangle \\ &= \langle \lambda, \mu | (\hat{j}_x \mp i\hat{j}_y)(\hat{j}_x \pm i\hat{j}_y) | \lambda, \mu \rangle \\ &= \langle \lambda, \mu | \hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2 \pm i[\hat{j}_x, \hat{j}_y] | \lambda, \mu \rangle \\ &= \langle \lambda, \mu | \hat{j}^2 - \hat{j}_z^2 \mp \hat{j}_z | \lambda, \mu \rangle \\ &= \lambda - \mu^2 \mp \mu \end{aligned}$$

$$\hat{j}_{\pm}|\lambda, \mu\rangle = \sqrt{\lambda - \mu^2 \mp \mu}|\lambda, \mu \pm 1\rangle$$

5.

$$\begin{cases} \hat{j}_+ |\lambda, j\rangle = 0 \\ \hat{j}_- |\lambda, \mu_{\min}\rangle = 0 \end{cases} \rightarrow \begin{cases} \lambda - j^2 - j = 0 \\ \lambda - \mu_{\min}^2 + \mu_{\min} = 0 \end{cases}$$

Приравняв λ , получим уравнения, которые связывают j , μ_{\min} :

$$\begin{aligned} j^2 + j &= \mu_{\min}^2 - \mu_{\min} \\ (j + \mu_{\min}) \underbrace{(j - \mu_{\min} + 1)}_{\neq 0} &= 0 \end{aligned}$$

Окончательно:

$$\underline{\mu_{\min} = -j}$$

6.

$$\hat{j}^2 |\lambda, \mu\rangle = \lambda, \mu |\lambda, \mu\rangle$$

Воспользуемся тем, что

$$\begin{aligned} \hat{j}_- \hat{j}_+ |\lambda, j\rangle &= 0 \\ (\hat{j}^2 - \hat{j}_z^2 - \hat{j}_z) |\lambda, j\rangle &= 0 \end{aligned}$$

Откуда

$$\underline{\hat{j}^2 |\lambda, j\rangle = j(j+1) |\lambda, j\rangle}$$

Так как $\lambda = j(j+1)$, то в векторе $|\lambda, \mu\rangle$ составляющую λ не пишут.

Но μ пробегает все значения от $-j$ до $+j$. Вся система общих собственных векторов может быть найдена из одного любого вектора с помощью наших операторов. Двигаясь с целым шагом, можно получать значения от $-j$ до j , откуда

$$2j = n \in \mathbb{Z} \Rightarrow j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}$$

7.

$$\mu = m = -j, -j+1, \dots, j$$

Если μ полуцелое, то j полуцелое. Если μ целое, то j целое.

$$\begin{cases} \hat{j}^2 |j, m\rangle = j(j+1) |j, m\rangle \\ \hat{j}_z |j, m\rangle = m |j, m\rangle \end{cases}$$

Для фиксированного числа m (*магнитного квантового числа*) число j пробегает значения от (?)

Замечание. В этом пространстве размерности $2j+1$ все векторы линейно независимы. Если действовать на векторы этого пространства операторами $\hat{j}^2, \hat{j}_x, \hat{j}_y, \hat{j}_z, \hat{j}_{\pm}$, мы не будем выходить за пределы этого пространства (то есть оно инвариантно). Несколько позже мы выясним, что пространство также инвариантно относительно вращений.

\hat{j}^2 , \hat{j}_z как правило не образуют полный набор.

Для всех этих операторов построим матричное представление:

$$\hat{j}_{\pm}|jm\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)}|j, m \pm 1\rangle, \quad \langle j_{m'}|j_m\rangle = \delta_{m'm}$$

$$\langle j_{m'}|\hat{j}_{\pm}|j_m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)}\delta_{m', m \pm 1}$$

Берём полусумму и полуразность из формулы $\hat{j}_{\pm} = \hat{j}_x \pm i\hat{j}_y$

- $\langle j, m'|\hat{j}_x|j, m\rangle = \frac{1}{2}\sqrt{j(j+1) - m(m+1)}\delta_{m', m+1} + \frac{1}{2}\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}\delta_{m', m-1}$
- $\langle j, m'|\hat{j}_y|j, m\rangle = -\frac{i}{2}\sqrt{j(j+1) - m(m+1)}\delta_{m', m+1} + \frac{i}{2}\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}\delta_{m', m-1}$
- $\langle j, m'|\hat{j}^2|j, m\rangle = j(j+1)\delta_{m'm}$
- $\langle j, m'|\hat{j}_z|j, m\rangle = m\delta_{m'm}$

Вопрос. Как в этом представлении выглядит вектор состояния?

$$\langle j_{m'}|j_m\rangle = \underbrace{(1, 0, \dots, 0)}_{2j+1}^T$$

5.2 Орбитальный момент количества движения

5.2.1

Были написаны две возможности для того, чтобы реализовать принцип соответствия. Вернёмся к первому способу. Заменим \vec{p} , \vec{r} на операторы.

$$\vec{L} = [\vec{r} \times \vec{p}] \rightarrow \hat{L} = [\hat{r} \times \hat{p}] \rightarrow -i\hbar[\vec{r} \times \vec{\nabla}], \quad \hat{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$$

Наиболее удобная для этих описаний система координат — сферическая.

$$\begin{cases} x = r \cos \varphi \sin \theta \\ y = r \sin \varphi \sin \theta \\ z = r \cos \varphi \end{cases}, \text{ где } \begin{cases} 0 \leq \varphi \leq 2\pi \\ 0 \leq \theta \leq \pi \end{cases}$$

$$\hat{L}_z \rightarrow -i\hbar[\vec{r} \times \vec{\nabla}]_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$$\frac{\partial}{\partial \varphi} = \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \varphi} + \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \varphi} + \frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial \varphi}$$

Поставим вопрос о собственных функциях оператора L_z .

5.2.2

В дираковских обозначениях:

$$\langle \varphi | m \rangle = \Phi_m(\varphi), \quad -i \frac{\partial}{\partial \varphi} = m \Phi_m(\varphi)$$

$$\Phi_m(\varphi) = C e^{im\varphi}$$

Вопрос. Чему равно m ?

Ответ. Нужно найти граничные условия, которые бы определяли значения этого числа. Ставится граничное циклическое условие:

$$\Phi_m(\varphi + 2\pi) = \Phi_m(\varphi)$$

Циклическое условие означает *однозначность* волновой функции при повороте на 2π .

Система будет нормирована:

$$\int_0^{2\pi} \Phi_m^*(\varphi) \Phi_{m'}(\varphi) d\varphi = \delta_{mm'}$$

Отсюда

$$C = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

На самом деле, целочисленное квантование появляется и без требования однозначности волновой функции (почему это требование есть? Ведь наблюдаем только квадрат волновой функции).

В случае полуцелого квантования оператор \hat{L} теряет свойство эрмитовости. В случае целочисленного квантования всё хорошо.

5.2.3

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} \right)^2 \right) = -\hbar^2 \Delta_{\theta, \varphi}$$

$$\Delta = \Delta_r + \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta, \varphi}$$

$$\begin{cases} \hat{L}^2 |\ell, m\rangle = \ell(\ell+1) |\ell, m\rangle \\ \hat{L}_z |\ell, m\rangle = m |\ell, m\rangle \end{cases}$$

Как было показано выше, в сферических координатах справедлива запись:

$$\begin{cases} \hat{L}^2 & \rightarrow -\hbar^2 \Delta_{\theta, \varphi} \\ \hat{L}_z & \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{cases}$$

Уравнение

$$\begin{cases} -\Delta_{\theta,\varphi} Y(\theta, \varphi) = \ell(\ell+1)Y(\theta, \varphi) \\ -i\frac{\partial}{\partial\varphi} Y(\theta, \varphi) = mY(\theta, \varphi) \end{cases}$$

решается методом разделения переменных:

$$Y(\theta, \varphi) = Y_\ell^{(m)}(\theta, \varphi), \quad 0 \leq \theta \leq \pi, \quad 0 \leq \varphi \leq 2\pi$$

Если поставить условие ограниченности, получаем решение в виде сферических функций.

$$Y_\ell^{(m)}(\theta, \varphi) = C_\ell^{(m)} e^{im\varphi} P_\ell^{(m)}(\cos \theta), \quad \ell = 0, 1, 2, \dots, \quad m = 0, \pm 1, \dots, \pm \ell$$

$P_\ell^{(m)}$ — присоединённый полином Лежандра.

$$P_\ell^{(m)} = (1-x^2)^{m/2} \frac{d^{\ell+m}}{dx^{\ell+m}} (x^2-1)^\ell \frac{1}{2^\ell \ell!}$$

Известный факт: $\mathcal{L}_2(\mathbb{R}^3)$ на сфере ($r = \text{const}$) образует ортогональную систему функций:

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta Y_\ell^{(m)*} Y_{\ell'}^{(m')} = \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'}$$

Значит, любую функцию на единичной сфере можно разложить по единичному базису:

$$\psi(\theta, \varphi) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} A_\ell^m Y_\ell^{(m)}(\theta, \varphi)$$

Напоминание. Состояния со значениями квантового числа $\ell = 0, 1, 2, \dots$ носят соответственно названия s, p, d, \dots

5.2.4 Чётность состояния

В сферических координатах при замене $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$:

$$\begin{cases} r & \rightarrow r \\ \theta & \rightarrow \pi - \theta \\ \varphi & \rightarrow \varphi + \pi \end{cases}$$

При этом $\cos \theta \rightarrow -\cos \theta$

Преобразование волновых функций:

$$\begin{cases} \Phi_m(\varphi + \pi) = (-1)^m \Phi_m(\varphi) \\ \Theta_\ell^m(\pi - \theta) = (-1)^{\ell+m} \Theta_\ell^{(m)}(\theta) \\ \hat{I} Y_\ell^{(m)}(\theta, \varphi) = (-1)^{\ell+2m} Y(\theta, \varphi), \end{cases}$$

откуда

$$\lambda = (-1)^\ell$$

5.3 Спин, или собственный механический момент частицы

5.3.1 Гипотеза Уленбека и Гаудсмита

Некоторые эксперименты в атомах потребовали модификации теории (гипотеза спина, не имеет классического аналога, постулат тождественности в система со многими частицами).

- Опыт Эйнштейна-де Гааза (1921). Гиромагнитное отношение:

$$\gamma = \frac{\mu_z}{L_z} = \frac{\ell}{2mc}g$$

где g — фактор Ланде. Для орбитального движения $g = 1$. В опыте получилось $g = 2$.

- Опыт Штерна-Герлаха. Требование полуцелого квантования:

$$2s + 1 = 2n$$

Гипотеза

- Электрону, наряду с орбитальным, нужно приписать также и собственный (спиновый) механический момент, не связанный с перемещением в пространстве. Его проекция на любое направление может принимать два значения

$$\pm \frac{\hbar}{2} \quad (m_s = \pm \frac{1}{2})$$

- Электрон должен обладать и собственным магнитным моментом:

$$\pm \mu_0 = \pm \frac{e\hbar}{2mc},$$

где μ_0 — магнетон Бора.

Замечание.

$$- \frac{\mu_z}{L_z} = \frac{e\hbar}{2mc} \cdot \frac{2}{\hbar} = \frac{2}{2mc} \cdot g, \quad g = 2$$

—

$$L = \hbar^2 \ell(\ell + 1), \quad s^2 = \hbar^2 s(s + 1)$$

При $\hbar \rightarrow 0, s \rightarrow 0$:

$$L^2 = \text{const}$$

- Первая теория спина Паули

5.3.2 Теория спина Паули

Координатное представление в этой части невозможно, так как нарушается эрмитовость операторов.

Оператор спина имеет вид:

$$\vec{S} = \{\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z\}$$

Требования к оператору спина:

1. Эрмитовость
2. $[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\hbar e_{ijk} \hat{S}_k$
3. Операторы компонент спина коммутируют со всеми операторами, которые зависят от координат и импульса. Это происходит потому, что спин — внутреннее свойство. Оно должно быть измеримо *независимо* по отношению к возможным перемещениями в пространстве.

Отсюда следует, что оператор спина действует *не в пространстве координат*, а в другом пространстве, *пространстве внутренних переменных*.

Вопрос. Как это пространство можно построить?

Вспомним свойство оператора спина:

$$\begin{cases} \hat{S}^2 |s, m_s\rangle = \hbar^2 s(s+1) |s, m_s\rangle \\ \hat{S}_z |s, m_s\rangle = \hbar m_s |s, m_s\rangle \end{cases}$$

Мы знаем, что общая система собственных векторов оператора спина и оператора проекции образует базис некоторого пространства размерности $2s+1$. В этом базисе матрицы, которые соответствуют этим операторам \hat{S}^2, \hat{S}_z , имеют диагональный вид.

Нас интересует *спиновая функция* $\langle \sigma | s, m_s \rangle$, где s, m_s — квантовые числа, характеристики состояний, σ — индекс представления.

Если $\sigma = m'_s$, то $\mathcal{X}_{s, m_s} \stackrel{\text{def}}{=} \langle m'_s | s, m_s \rangle$.

Эту функцию принято представлять в виде столбца:

$$\mathcal{X}_{s, m_s=s} = [1 \quad 0 \quad \dots \quad 0]^\top$$

Такие столбцы называются *спиноры*. Всё пространство натянуто на эти два спинора, поэтому спиновое пространство реализуется как \mathbb{C}_2 .

Свойства спиновых функций

1. $\langle m'_2 | s, m_s \rangle = \delta_{m'_2 m_s}$,

$$\sum_{\sigma} \mathcal{X}_{m_s}^*(\sigma) \mathcal{X}_{m'_s}(\sigma) = \delta_{m_s m'_s}$$

2. Полнота

$$\sum_{m_s} |m_s\rangle \langle m_s| = \hat{1}$$

Норма. Как было сказано на прошлой лекции,

$$\begin{aligned} \|\hat{S}\|_{m'_s m_s} &= \langle \frac{1}{2}, m'_s | \hat{S}_x | \frac{1}{2}, m_s \rangle = \\ &= \hbar/2 \left(\sqrt{s(s+1) - m_s(m_s+1)} \delta_{m'_s m_s+1} + \sqrt{s(s+1) - m_s(m_s-1)} \delta_{m'_s m_s-1} \right) = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Таким образом,

•

$$\hat{\vec{S}} = \frac{\hbar}{2} \hat{\vec{\sigma}}$$

•

$$\hat{\sigma}_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

Вопрос. Почему матрица спина двухрядная? Почему σ_z диагональная?

Ответ.

Ещё есть орбитальное пространство. При этом справедливо представление

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(orbital)} \otimes \mathcal{H}^{(spinal)} \cong L_2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^2$$

5.3.3 Волновая функция

$$\Psi(\vec{r}, \sigma) \rightarrow \Psi(\vec{r}, m_s)$$

Рассмотрим функцию $\Psi(\vec{r}, t)$, в которой нет определённого значения проекции спина на ось z .

Так как всего этих проекций может быть всего две, то в каждой пространственно-временной точке можно функцию разложить по функциям, имеющим определённое значение проекции спина.

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{r}, t) &= \sum_{m_s} \Psi(\vec{r}, t, m_s) \mathcal{X}_{m_s} \\ &= \underbrace{\Psi(\vec{r}, t, m_s = +\frac{1}{2}) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}}_{\psi_1(\vec{r}, t)} + \underbrace{\Psi(\vec{r}, t, m_s = -\frac{1}{2}) \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}}_{\psi_2(\vec{r}, t)} \\ &= \begin{bmatrix} \psi_1(\vec{r}, t) \\ \psi_2(\vec{r}, t) \end{bmatrix} \end{aligned}$$

ψ_{12} тоже называются *спинорами*.

$$1 = \sum_{m_s} \int d^3x |\Psi(\vec{r}, t, m_s)|^2 = \int d^3x (|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2) = 1$$

Из вида нормировочного условия следует смысл верхней и нижней компоненты.

$$\begin{cases} \psi_1^*(\vec{r}, t) \psi_1(\vec{r}, t) = W(\vec{r}, t, \uparrow) d^3x \\ \psi_2^*(\vec{r}, t) \psi_2(\vec{r}, t) = W(\vec{r}, t, \downarrow) d^3x \end{cases}$$

- $\psi_1^* \psi_1$ — вероятность обнаружить частицу в момент времени t в объёме $\vec{r}, \vec{r} + d\vec{r}$ на ось z , равной $\hbar/2$.
- $\psi_2^* \psi_2$ — вероятность обнаружить частицу в момент времени t в объёме $\vec{r}, \vec{r} + d\vec{r}$ на ось z , равной $-\hbar/2$.

Альтернативный способ записи нормировочного условия. Сопряжённый вектор:

$$\Psi^+(\vec{r}, t) = (\psi_1^*, \psi_2^*)$$

$$\int d^3x \Psi^+ \Psi = \int d^3x (w(\vec{r}, t, \uparrow) + w(\vec{r}, t, \downarrow)) = 1$$

С помощью этого аппарата можно пользоваться матричным представлением.

Берём единичные операторы из полного пространств состояний (орбитального и спинового)

$$\langle \Psi_A | \hat{F} | \Psi_B \rangle = \sum_{m_s m'_s} \int d^2x d^3x' \langle \Psi_A | \vec{r}, m_s \rangle \underbrace{\langle \vec{r}, m_s | \hat{F} | \vec{r}', m'_s \rangle}_{\text{матрица } 2s+1 \times 2s+1} \langle \vec{r}' m'_s | \Psi_B \rangle$$

В координатном базисе \hat{F} сводится к некоторому оператору $\mathcal{F} \delta(\vec{r} - \vec{r}')$ (дельта-функция трёх-мерная). Эта функция помогает снять один из интегралов:

$$\begin{aligned} &= \sum_{m_s m'_s} \int d^3x \underbrace{\langle \Psi_A | \vec{r}, m_s \rangle}_{\text{спинор}} \underbrace{\langle m_s | \mathcal{F} | m'_s \rangle}_{\text{матрица } 2 \times 2} \underbrace{\langle \vec{r}, m_s | \Psi_B \rangle}_{\text{спинор}} \\ &= \int d^3x \Psi_A^+ \hat{\mathcal{F}} \Psi_B \\ &= \langle \Psi_A | \hat{F} | \Psi_B \rangle \end{aligned}$$

Оператор магнитного момента:

$$\hat{\vec{\mu}} = \mu_0 \hat{\vec{\sigma}} = \frac{e\hbar}{2mc} \hat{\vec{\sigma}} = \gamma \hat{\vec{S}}$$

Глава 6

Симметрия в квантовой механике и законы сохранения

Замечание. Конкретно речь пойдёт о разработке симметрий, связанных с теорией групп и представлений. Поэтому на лекции будут рассказываться части общей теории. Важность симметрий для квантовой механики была установлена в работах классиков:

- Вейль, 1928
- Вигнер, 1931
- Ван-дер-Варден, 1931

6.1 Общее введение в теоретико-групповые методы в квантовой механике

6.1.1 Определение группы

Определение. *Группой* G называется множество элементов любой природы, конечное или бесконечное, такое что на этом множестве задана *групповая операция* $*$, такая что

- Если $a, b \in G$, то $a * b \in G$
- $a * (b * c) = (a * b) * c$, если $a, b, c \in G$
- $\exists! e \in G: \forall g \in G \quad e * g = g * e = g$
- $\forall g \in G \exists g^{-1}: g * g^{-1} = g^{-1} * g = e$

6.1.2 Преобразование инвариантности в квантовой механике

Преобразование системы отсчёта

Переходим из системы S в систему S' .

Тогда в новой системе координат координаты преобразовываются следующим образом:

$$X = \{t, \vec{r}\} \rightarrow X' = \hat{G}X$$

Оператор G действует в пространстве координат, и принадлежит *группе линейных преобразований координат*.

- **Пространственные трансляции.** Это преобразования вида

$$\begin{cases} \vec{r} \rightarrow \vec{r}' = \vec{r} - \vec{a}, \\ t \rightarrow t' = t \end{cases}$$

- **Временные трансляции:**

$$\begin{cases} t \rightarrow t' = t - \tau, \\ \vec{r} \rightarrow \vec{r}' = \vec{r} \end{cases}$$

- **Пространственный поворот**

$$\begin{cases} t \rightarrow t' = \hat{R}\vec{r}, \\ t \rightarrow t' = t \end{cases}$$

Матрица \hat{R} есть ортогональная матрица поворота

- Отражение координатной оси $\vec{r}' = -\vec{r}$
- Обращение времени $t' = -t$

Замечание. Переход к новой системе отсчёта может изменить *математическое описание физического явления*. Другими словами, уравнения изменяются. Но при этом ни при каких обстоятельствах этот переход не должен изменять физического содержания теории. Под этим понимаются числа, которые можно из этой теории получить и проверить экспериментом.

Определение. *Преобразования инвариантности* — это такие преобразования, при которых *уравнения и граничные условия* остаются неизменными.

Преобразования векторов состояний

Если подействовать на пространство преобразованием $S \rightarrow S'$, то

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle = \hat{U}(S, S')|\psi\rangle$$

Операторы преобразования векторов состояния действуют в пространстве векторов состояний.

Замечание.

1. Из-за равноправности систем отсчёта, оператор определяется не каждой из систем отсчёта в отдельности, а только элементом группы G : $GS = S'$:

$$\hat{U}(S, S') = \hat{U}(\hat{G})$$

2. Исходя из вероятностной интерпретации квантовой механики, основные величины, которые можно вычислить, и которые составляют физическое содержание теории, суть вероятности. Значит, они не должны изменяться при преобразованиях координат.

Значит, не должны меняться модули скалярных произведений:

$$|\langle \varphi' | \psi' \rangle| = |\langle \varphi | \psi \rangle|$$

Когда мы говорили, что состояния описываются с помощью векторов состояний, это было не совсем правда. На самом деле, состояния описываются с помощью *нормированных гильбертовых лучей*.

Определение. Нормированным лучом называется множество

$$|\Psi\rangle = \{e^{i\alpha}|\psi\rangle, \quad |\psi\rangle \in \mathcal{H}, \quad \text{Im } \alpha = 0, \quad \| |\psi\rangle \| = 1\}$$

Вопрос. Что практически означает, что $|\psi\rangle \in |\Psi\rangle$, $|\varphi\rangle \in |\Phi\rangle$

Теорема. (Вигнер). Можно всегда выбрать систему базисных векторов, такую что скалярное произведение либо сохраняется, либо сопрягается:

- Унитарные преобразования

$$\langle \psi' | \varphi' \rangle = \langle \psi | \varphi \rangle$$

- Антиунитарные преобразования

$$\langle \psi' | \varphi' \rangle = \langle \psi | \varphi \rangle^*$$

В рамках нашего курса можно рассмотреть только унитарные преобразования, ибо антиунитарные преобразования затрагивают обращение времени.

Замечание. Оказывается, что во всех физически интересных случаях для операторов $\hat{U}(G)$ выполняется

$$\hat{U}(\hat{G}_1)\hat{U}(\hat{G}_2) = \hat{U}(\hat{G}_1\hat{G}_2), \quad \hat{U}(e) = \hat{1}$$

Таким образом, для оператора \hat{U} групповая операция сохраняется. Говорят, что операторы \hat{U} осуществляют некоторое *представление* группы преобразований координат. Полученное определение можно записать короче:

Определение. Представление группы есть *гомоморфизм* группы G на группу линейных преобразований некоторого линейного пространства.

ГЛАВА 6. СИММЕТРИЯ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ И ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ

6.1.3 Трансформационные свойства гамильтониана

Цель: понять, при каких преобразованиях Уравнение Шрёдингера сохраняет свой вид.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle$$

Применим к обеим частям уравнения оператор \hat{U} :

$$\begin{aligned} i\hbar \hat{U} \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\hat{U} |\psi\rangle) - i\hbar \left(\frac{\partial \hat{U}}{\partial t} \right)_{\hat{U}^{-1} \hat{U}} |\psi(t)\rangle \\ &= \hat{U} \hat{H} \hat{U}^{-1} \underbrace{\hat{U} |\psi\rangle}_{|\psi'\rangle} \end{aligned}$$

Уравнение должно сохранять свой вид:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi'\rangle = \hat{H} |\psi'\rangle$$

Таким образом:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi'\rangle &= i\hbar \left(\frac{\partial \hat{U}}{\partial t} \right) \hat{U}^{-1} |\psi'\rangle + \hat{U} \hat{H} \hat{U}^{-1} |\psi'\rangle \\ i\hbar \left(\frac{\partial \hat{U}}{\partial t} \right) \hat{U}^{-1} + \hat{U} \hat{H} \hat{U}^{-1} &= \hat{H}, \end{aligned}$$

откуда получается условие, которому должен удовлетворять оператор преобразования \hat{U} :

$$\frac{\partial \hat{U}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{U}] = 0$$

Если оператор \hat{U} не зависит от времени, то требование сводится к требованию коммутации с гамильтонианом:

$$[\hat{U}, \hat{H}] = 0$$

Резюме:

1. Если *унитарный оператор* коммутирует с гамильтонианом, то он описывает некоторое преобразование векторов состояний, которое оставляет систему неизменной.
2. Если *эрмитов оператор* коммутирует с гамильтонианом, то он описывает интеграл движения (физическую величину, которая остаётся неизменной).

6.2 Группы Ли

Главное свойство таких групп: «непрерывность». Это группы, на множестве элементов которых можно ввести понятия «близости» и сходимости. Другими словами, на множестве элементов группы можно ввести *топологию*, на основе которой можно ввести понятие сходимости.

Выше были определены *топологические группы*. Они обладают, например, свойствами:

1. $a * b$ непрерывно зависит от a, b
2. a^{-1} непрерывно зависит от a

Параметризация элементов группы Ли

Будем предполагать, что любой элемент группы $\hat{G} \in G$ может быть охарактеризован при помощи n вещественных параметров, то есть

$$\hat{G} = G(a_1, \dots, a_n)$$

Существенность означает то, что меньшим числом параметров охарактеризовать систему нельзя.

При этом групповая операция принимает вид:

$$G(a_1, \dots, a_n)G(b_1, \dots, b_n) = G(c_1, \dots, c_n),$$

где параметры c_i есть функции

$$c_i = c_i(a_1, \dots, a_n; b_1, \dots, b_n)$$

Выше были описаны *параметрические группы*.

Чтобы превратить их в группы Ли, надо наложить некоторое требование на эти функции.

Предположение. Функции $c_i(\dots)$ должны быть *бесконечно дифференцируемыми функциями своих аргументов*.

Определение. Если группа удовлетворяет описанным выше свойствам, она называется *группой Ли*.

6.2.1 Канонические параметризации

Однопараметрическая группа

1. $G(0, \dots, 0) = e$
2. $G(0, \dots, \underset{\substack{\uparrow \\ k}}{a_k}, \dots, 0) = G(a_k)$
3. $G(a_k)G(b_k) = G(a_k + b_k)$

6.2.2 Инфинитезимальное преобразование

Окрестность единичного элемента определяет всё. Исследовать её принято при помощи бесконечно малых (инфинитезимальных) преобразований.

Генераторы группы Ли

Определение. Генераторы группы Ли f_k — это такие операторы, что

$$\begin{aligned} G(a_1, \dots, a_n) &\simeq G(0, \dots, 0) + \sum_{k=1}^n a_k \frac{\partial G(a_1, \dots, a_n)}{\partial a_k} \Big|_{a_1=a_2=\dots=a_n=0} \\ &= e + i \sum_{k=1}^n a_k f_k, \end{aligned}$$

где

$$f_k = -i \frac{\partial G(a_1, \dots, a_n)}{\partial a_k} \Big|_{a_1=\dots=a_n=0}$$

Чтобы обосновать корректность данного определения, воспользуемся теоремой.

Теорема. (Адо) Для любой группы Ли имеется изоморфная ей группа линейных преобразований некоторого линейного пространства.

Представление группы Ли

На представления накладывается дополнительное требование *непрерывности*.

Выпишем инфинитезимальные преобразование для элементов группы Ли:

$$\hat{U}(a_1, \dots, a_n) \simeq \hat{1} + i \sum_{k=1}^n a_k \hat{F}_k,$$

где

$$\hat{F}_k = -i \frac{\partial \hat{U}(a_1, \dots, a_n)}{\partial a_k}$$

\hat{F}_k — генераторы представлений группы.

Основные свойства генераторов

Вопрос. Почему у упомянутых генераторов самой группы и генераторов представлений должны быть одинаковые свойства?

1. Представление в целом гомоморфизм.
2. Есть взаимно однозначное соответствие в некоторой окрестности (то есть имеется локальный изоморфизм окрестности единицы).

Будем рассматривать *только те* свойства, которые едины и для тех, и для других генераторов.

Свойства.

1. Генераторы образуют n -мерное вещественное пространство с базисом

$$\hat{F}_1, \dots, \hat{F}_n$$

- 2.

$$[\hat{F}_i, \hat{F}_j] = C_{ijk} \hat{F}_k$$

Они называются *структурные константы* группы. По этим числам можно определить структуру группы вблизи единичного элемента.

3. Пространство, образованное генераторами группы, называется *Алгеброй Ли*. Групповая операция определяется через коммутатор.

6.2.3 Восстановление конечных элементов группы Ли по её генераторам

Теорема. (Софус Ли, Норвегия, 1842-1899). Знания явного вида генераторов и алгебры Ли достаточно для однозначного восстановления конечного элемента группы.

Доказательство. Пусть дана каноническая параметризация, причём $\hat{U}(a_1)\hat{U}(a_2) = \hat{U}(a_1a_2)$

Проиллюстрируем утверждение для однопараметрической подгруппы, оставив без доказательства общий случай.

Схематичная последовательность действий:

$$\frac{\partial}{\partial a_1}, \quad a_1 \rightarrow 0, \quad a_2 \rightarrow a$$

В результате применения получаем:

$$\left. \frac{\partial \hat{U}(a)}{\partial a} \right|_{a_1=0}, \quad \hat{U}(a) = \frac{\partial \hat{U}(a)}{\partial a} \\ -i \frac{\partial \hat{U}(a)}{\partial a}$$

Получили дифференциальное уравнение, которое решается с данным начальным условием

$$\begin{cases} -i\hat{F}_k\hat{U}(a) = \frac{\partial \hat{U}}{\partial a} \\ \hat{U}(0) = \hat{1} \end{cases}$$

$$\hat{U}(a) = e^{ia\hat{F}_a}, \quad \hat{U}(a_k) = e^{ia_k\hat{F}_k}$$

ГЛАВА 6. СИММЕТРИЯ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ И ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ

Если в группе выделяются однопараметрические подгруппы, то так будет для любой однопараметрической подгруппы.

Без доказательства:

$$\hat{U}(a_1, \dots, a_n) = e^{i \sum_{k=1}^n a_k \hat{F}_k}$$

Вывод.

1. Мы хотели, чтобы преобразования векторов состояний происходили при помощи унитарных операторов. Для того чтобы $\hat{U}(a_k)$ был унитарным, достаточно потребовать, чтобы \hat{F}_k был эрмитовым, то есть

$$\hat{F}_k^+ = \hat{F}_k$$

2. При отсутствии явной зависимости от времени, из $[\hat{U}(a_k), \hat{H}] = 0$ следует инвариантность. Для этого достаточно потребовать, чтобы гамильтониан коммутировал с генератором:

$$[\hat{H}, \hat{F}_k] = 0$$

Это есть квантовый аналог теоремы Нётер. Инвариантности теории отвечает величина \hat{F}_k , которая описывает физическую величину, которая описывает интеграл движения.

6.3 Преобразования инвариантности в координатном представлении

Пусть имеется переход из новой системы координат в старую ^[?] при помощи преобразования \hat{G} :

$$S \rightarrow S'$$

Это вызывает преобразование векторов состояния:

$$|\varphi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle = \hat{U}(\hat{G})|\psi\rangle$$

В качестве модели выбираем простую систему: *частица без внутренних степеней свободы*.

Эта система описывается при помощи координатной волновой функции из L_2 :

$$\psi(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \psi \rangle \in L_2(\mathbb{R}^3)$$

Вопрос. Что будет происходить с описанной волновой функцией при преобразовании координат?

Ответ. Несколько раньше было сказано, что все операторы в системе без внутренних степеней свободы, есть функции от \hat{p}, \hat{x} . В этом случае в координатном представлении все матричные операторы либо дельта-функции, либо их производные (которые тоже выражаются через дельта-функции¹).

¹ $\delta'(x) = -\frac{1}{x}\delta(x)$

Пусть \hat{u} — какой-то дифференциальный оператор,

$$\langle \vec{r} | \hat{U}(\hat{G}) | \vec{r}' \rangle = \hat{u}(\hat{G}) \delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{r}')$$

$$\begin{aligned} \langle \vec{r} | \psi' \rangle &= \psi'(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \hat{u}(\hat{G}) | \psi \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \vec{r} | \hat{u}(\hat{G}) | \vec{r}' \rangle \langle \vec{r}' | \psi \rangle d^3x' \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{u}(\hat{G}) \delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{r}') \psi'(\vec{r}') d^3x' \\ &= \hat{u}(\hat{G}) \psi(\vec{r}) \end{aligned}$$

При этом не указан характер действия этих операторов. Заполним этот пробел.

Зафиксируем точку пространства \vec{r} . При изменении системы координат координаты \vec{r} стали \vec{r}' , точка осталась неподвижна: $|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle$.

При этом волновая функция преобразовывается по правилу:

$$\langle \vec{r} | \psi \rangle \rightarrow \langle \vec{r}' | \psi' \rangle$$

Так как *состояние* не изменилось (это следствие общего квантово-механического принципа об инвариантности физических законов в разных системах координат), то

$$\psi(\vec{r}) = \psi'(\vec{r}')$$

Заметим, что

$$\psi'(\vec{r}) = \psi'(\hat{G}(\hat{G}^{-1}\vec{r})) = \psi'((\hat{G}^{-1}\vec{r})') = \psi(\hat{G}^{-1}\vec{r})$$

Замечание. Приведенные рассуждения верны для *однокомпонентных систем*.

Утверждение. Совокупность операторов $\hat{u}(\hat{G})$ реализует некоторое унитарное представление группы преобразований систем координат.

1. Линейность очевидна.
2. Выполнение группового закона $\hat{U}(\hat{G})$ проверяется простым упражнением.
3. Унитарность (сохранение скалярного произведения). При линейных заменах модуль якобиана под интегралом остаётся неизменным.
4. Преобразование инвариантно, поэтому сохраняет вид уравнения Шрёдингера.

В координатном представлении оно имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \hat{H} \psi(\vec{r}, t)$$

ГЛАВА 6. СИММЕТРИЯ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ И ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ

Действуя слева оператором \hat{u} , не зависящим от времени, получаем:

$$\hat{H}(\vec{r}, \vec{\nabla}) \rightarrow \hat{H}'(\vec{r}, \vec{\nabla}) = \hat{u}(\hat{G})\hat{H}\hat{u}^{-1}(\hat{G}) = \hat{H}(\vec{r}, \vec{\nabla})$$

Отсюда получается дополнительное условие на гамильтониан:

$$\hat{H}(\vec{r}, \vec{\nabla}) = \hat{H}(\vec{r}', \vec{\nabla}')$$

То есть функциональная зависимость в старых переменных и в новых переменных должна быть одинаковой.

6.4 Группа пространственных трансляций

Будем обращать внимание на связь между свойствами:

- симметрии пространства-времени
- наличия интегралов движения

В классической механике эта связь была установлена теоремой Нётер.

6.4.1 Преобразование координат

Пусть $O' = O + \vec{a}$. Тогда

$$\vec{r}' = \vec{r} - \vec{a} = \hat{T}_{-\vec{a}}\vec{r}$$

Данная группа является *трёхпараметрической группой Ли*.

6.4.2 Представление группы в пространстве векторов состояний

Рассмотрим инфинитезимальное преобразование, отвечающее переносу на бесконечно малый вектор $\delta\vec{a}$.

$$\hat{U}(\delta\vec{a}) \approx \hat{1} + i \sum_{k=1}^3 \delta a_k \hat{F}_k = \hat{1} + i(\delta\vec{a} \hat{\vec{F}}) = \hat{1} + \frac{i}{\hbar}(\delta\vec{a} \hat{\vec{p}})$$

Уточним действие этого оператора в пространстве волновых функций. Функции преобразуются вот так:

$$\psi'(\vec{r}) = \hat{u}(\delta\vec{a})\psi(\vec{r}) = \psi(\hat{T}_{\delta\vec{a}}^{-1}\vec{r}) = \psi(\vec{r} + \delta\vec{a})$$

Раскладывая по Тейлору:

$$\psi'(\vec{r}) \approx (\hat{1} + (\delta\vec{a} \hat{\vec{\nabla}}))\psi(\vec{r}) = (\hat{1} + \frac{i}{\hbar}(\delta\vec{a} \hat{\vec{p}}))\psi(\vec{r})$$

Здесь \hbar это не постоянная Планка, а \vec{p} — не импульс.

Но на самом деле с точностью до константы \hbar ,

$$\hat{\vec{p}} = \hbar \vec{F} = -i\hbar \vec{\nabla}$$

Это равенство верно для всех представлений группы.

Итак, $\hat{\vec{p}}$ — генераторы бесконечно малых трансляций.

Воспользуемся теоремой Ли, и получим унитарный оператор, дающий конечные трансляции:

$$\hat{u}(\vec{a}) = e^{\frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \hat{\vec{p}}}$$

Лирическое отступление: средние значения. Как говорилось ранее, с физической точки зрения, систему характеризуют вероятности и её средние значения (которые вычисляются в текущем состоянии, в том состоянии, в котором сейчас находится система).

У нас есть преобразование координат $\vec{r} \rightarrow \vec{r}' = \hat{G}\vec{r}$, и семейство операторов $\hat{u}(\hat{G})$.

При помощи этих операторов можно осуществить преобразования *трёх разных типов*.

$$1. |\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle = \hat{U}(\hat{G})|\psi\rangle$$

$$\begin{aligned} \langle\psi| &\rightarrow \langle\psi'| = \langle\psi|\hat{U}^{-1} \\ \hat{F} &\rightarrow \hat{F} \end{aligned}$$

По типу 1 преобразуются только векторы состояний, но не операторы!

$$\langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle \rightarrow \langle\psi'|\hat{F}|\psi'\rangle = \langle\psi|\hat{U}^{-1}\hat{F}\hat{U}|\psi\rangle$$

При этом среднее значение оператора \hat{F} , вообще говоря, меняется. Изменился физический способ описания системы, произошёл сдвиг среднего значения (например, координата поменялась). В некоторых обстоятельствах сдвига может не быть (трансляционные инварианты). Вероятности (скалярные произведения) не изменяются.

2. Преобразовываются операторы, но не векторы состояний!

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &\rightarrow |\psi\rangle, & \langle\psi| &\rightarrow \langle\psi| \\ \hat{F} &\rightarrow \hat{F}' = \hat{U}^{-1}\hat{F}\hat{U} \end{aligned}$$

Действительно,

$$\langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle \rightarrow \langle\psi|\hat{F}'|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{U}^{-1}\hat{F}\hat{U}|\psi\rangle$$

При преобразованиях типа 1 и 2 одинаковым образом преобразуются средние значения.

Замечание. Если $[\hat{F}, \hat{U}] = 0$, то средние значения не меняются.

3. Преобразуются и вектора состояний и операторы.

$$\begin{cases} |\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle = \hat{U}|\psi\rangle \\ \langle\psi| \rightarrow \langle\psi'| = \langle\psi|\hat{U}^{-1} \\ \hat{F} \rightarrow \hat{F}' = \hat{U}\hat{F}\hat{U}^{-1} \end{cases}$$

ГЛАВА 6. СИММЕТРИЯ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ И ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ

При этом

$$\langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle = \langle \psi' | \hat{F}' | \psi' \rangle$$

Это преобразование устроено совсем по-другому, чем первые два типа. При этом ни одно из наблюдений не меняется. Это аналог канонических преобразований в классической механике.

Вернёмся к группе трёхмерных трансляций.

6.4.3 Остальные выводы

Если преобразовывать операторы (то есть тип 2), то посмотрим на оператор координаты и импульса:

$$\hat{\vec{p}} \rightarrow \hat{\vec{p}}' = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \hat{\vec{p}}} \hat{\vec{p}} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \hat{\vec{p}}} = \hat{\vec{p}}$$

Это пример *трансляционно-инвариантной* величины.

$$\hat{\vec{r}} \rightarrow \hat{\vec{r}}' = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \hat{\vec{p}}} \hat{\vec{r}} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \hat{\vec{p}}} = \hat{\vec{r}} + e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \hat{\vec{p}}} [\hat{\vec{r}}, e^{\frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \hat{\vec{p}}}] = \hat{\vec{r}} - \vec{a} \cdot \hat{1}$$

Однородность пространства

Это физическое свойство пространства, такое, что свободные частицы не должны зависеть от выбора начала системы координат.

Из теоремы Нётер следовало бы, что тут должна быть какая-нибудь симметрия.

Под a_k подразумевается x, y, z :

$$[\hat{H}, \hat{U}(a_k)] = 0, \quad \rightarrow \quad [\hat{H}, \hat{p}_k] = 0$$

Вывод. Импульс свободной частицы сохраняется и измерим вместе с энергией. Это квантовомеханический аналог закона инерции Ньютона.

Из жёстких требований на Гамильтониан:

$$\hat{H}(\hat{\vec{r}}, \hat{\vec{p}}) = \hat{H}(\hat{\vec{r}}', \hat{\vec{p}}') = \hat{H}(\hat{\vec{r}} - \vec{a}, \hat{\vec{p}})$$

Гамильтониан *не должен* зависеть от координат.

6.5 Группа временных трансляций

Свойства физической системы не должны зависеть от положения начала отсчёта времени.

6.5.1 Преобразования времени

$$t \rightarrow t' = t - \tau$$

6.5.2 Преобразование векторов состояний

$$|\psi'(t)\rangle = \hat{U}(\tau)|\psi(t)\rangle$$

По сути семейство этих операторов есть семейство операторов *эволюции*.

6.5.3 Преобразование волновой функции

Из физических соображений $\psi'(t') = \psi(t)$, откуда

$$\psi'(t) = \hat{u}(\tau)\psi(t) = \psi(t + \tau)$$

Рассмотрим оператор инфинитезимальных сдвигов во времени.

$$\begin{aligned} \psi'(t) &= \hat{u}(\delta\tau)\psi(t) = \psi(t + \delta\tau) \\ &\approx (1 + \delta\tau \frac{\partial}{\partial t})\psi(t) \\ &\approx (1 + i\delta\tau \hat{F}_t)\psi(t) \end{aligned}$$

Поэтому

$$\hat{F}_t = -i \frac{\partial}{\partial t}, \quad \hat{F}_t = -\frac{1}{\hbar} \hat{H}$$

Получили условие стационарности:

$$[\hat{F}_t, \hat{H}] = 0, \quad \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0$$

Однородности времени отвечает закон сохранения энергии.

6.6 Группа трёхмерных вращений

Эта группа обычно называется $O(3)$, а если рассматривается группа без отражений, то $SO(3)$ (special orthogonal 3-parametric).

Вопрос. Как задать поворот в 3-мерном пространстве?

Ответ. Обозначим общий элемент группы $\vec{\varphi}$, который сонаправлен с вектором \vec{n} , задающим ось вращения (поворот по часовой стрелке). Величина вектора равна по определению величине угла поворота, $\|\vec{\varphi}\| < \pi$. Если нужен поворот на больший угол, меняем направление вектора.

$$\hat{R}_{\vec{\varphi}} = \hat{R}_{\varphi \vec{n}}$$

ГЛАВА 6. СИММЕТРИЯ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ И ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ

Однопараметричность группы:

$$\vec{\varphi} = \{\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3\}$$

Обратим внимание на то, что пространство параметров топологически устроено довольно сложно.

Это многообразие называется $\mathbb{R}P^3$. Двумерный аналог это проективная плоскость.

6.6.1 Повороты вокруг оси Ox

$$\begin{cases} x' &= x \\ y' &= y \cos \varphi_1 + z \sin \varphi_1 \\ z' &= z \cos \varphi_1 - y \sin \varphi_1 \end{cases}$$

В матричном виде:

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \varphi_1 & \sin \varphi_1 \\ 0 & -\sin \varphi_1 & \cos \varphi_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \hat{R}_{(\varphi_1)} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}$$

Ищем инфинитезимальный оператор:

$$\hat{f}_1 = -i \frac{\partial}{\partial \varphi_1} \hat{R}(\varphi_1) \Big|_{\varphi_1=0} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{bmatrix}$$

$$\hat{f}_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{f}_3 = \begin{bmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Перемножением находим важные соотношения:

$$[\hat{f}_1, \hat{f}_2] = i\hat{f}_3, \quad [\hat{f}_i, \hat{f}_j] = ie_{ijk}\hat{f}_k$$

Эта алгебра Ли изоморфна алгебре матриц Паули.

6.6.2

Ищем инфинитезимальные операторы для бесконечно малых поворотов.

Формула Эйлера:

$$\vec{r}' \approx \vec{r} - \delta\varphi[\vec{n} \times \vec{r}]$$

Введём обозначение \hat{L} , такое, что

$$\hat{u}(\delta\vec{\varphi}) \approx \hat{1} + i\delta\varphi(\vec{n}\hat{F}) = \hat{1} + \frac{i}{\hbar}\delta\varphi(\vec{n}\hat{L})$$

Передвигая члены смешанного произведения, получим:

$$\begin{aligned}
 \varphi'(\vec{r}) &\approx \hat{U}(\delta\vec{\varphi})\psi(\vec{r}) \\
 &= \psi(\vec{r} + \delta\varphi[\vec{n} \times \vec{r}]) \\
 &\approx (\hat{1} + \delta\varphi[\vec{n} \times \vec{r}]\vec{\nabla}) \\
 &= (\hat{1} + \delta\varphi(\vec{n}[\vec{r} \times \vec{\nabla}]))\psi(\vec{r})
 \end{aligned}$$

Представление группы трёхмерных вращений реализовано с точностью до множителя постоянной Планка с компонентами орбитального момента. Обратим внимания на то, что у системы не было никаких своих степеней свободы. Итак, мы выяснили, что

$$\hat{L} = -i\hbar[\vec{r} \times \vec{\nabla}]$$

Чтобы найти всевозможные представления какой-то группы Ли (в нашем случае группы трёхмерных вращений), нужно знать коммутационные соотношения для компонент момента:

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar e_{ijk} \hat{J}_k$$

Коммутационное соотношение, выписанное выше, совместимо и с целым, и с полуцелым квантованием.

6.6.3

1. $\vec{r} \rightarrow \vec{r}' = \hat{T}(\vec{\varphi})\vec{r}$
2. $|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle = \hat{U}(\vec{\varphi})|\psi\rangle$
3. $\hat{U}(\delta\vec{\varphi}) \approx \hat{1} + \frac{i}{\hbar}\delta\varphi(\vec{n}\hat{J})$
4. В соответствии с теоремой Ли, оператор бесконечно малого поворота (генератор представления):

$$\hat{U}(\vec{\varphi}) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\varphi(\vec{n}\hat{J})\right)$$

Коммутационные соотношения для \hat{J} и для компонент углового момента одни и те же.

Основные свойства генераторов, справедливые для любого представления

1. $[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar e_{ijk} \hat{J}_k$
2. $[\hat{J}^2, \hat{J}_k] = 0$. Оператор квадрата углового момента коммутирует с любой компонентой углового момента.

В теории групп Ли оператор квадрата углового момента коммутирует с любым оператором представления (потому что последний выражается через \mathbf{J}_\bullet).

ГЛАВА 6. СИММЕТРИЯ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ И ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ

Определение. *Инвариантным оператором представления* называется оператор, коммутирующий со всеми операторами данного представления.

Но, с другой стороны, оператор \hat{J}^2 тоже построен из операторов представления. Оператор \hat{J}^2 называется *оператором Казимира*.

3. Как говорилось ранее, законы сохранения связаны с какими-то симметриями пространства и времени.

Если задано поле центрально-симметричного потенциала, то система должна быть инвариантна относительно поворота. Достаточно потребовать, чтобы

$$[\hat{H}, \hat{J}^2] = [\hat{H}, \hat{J}_k] = 0$$

6.7 Неприводимые представления группы трёхмерных вращений

Определение. Если в пространстве представления группы есть нетривиальное инвариантное [относительно чего?] подпространство (обычно на таком пространстве реализуется представление меньшей размерности), то это представление *приводимое*. Если же такого подпространства нет, то оно является *неприводимым*.

Пример. Для $SO(3)$ можно написать

$$\mathcal{H} = \bigoplus_{i=1}^N \mathcal{H}(i)$$

Такое представление позволяет реализовать (блочно-)диагональный вид

$$\hat{U}(\vec{\varphi}) = \bigoplus_{i=1}^N \hat{U}_i(\vec{\varphi})$$
$$\hat{U}(\vec{\varphi}) = \begin{bmatrix} \hat{U}_1(\vec{\varphi}) & 0 & 0 \\ 0 & \hat{U}_2(\vec{\varphi}) & 0 \\ 0 & 0 & \ddots \end{bmatrix}$$

6.7.1 Лемма Шура, критерий неприводимости

Лемма. Если \hat{F} таков, что

$$[\hat{F}, \hat{U}(\hat{G})] = 0 \quad \forall G,$$

то

$$\hat{F} = f\hat{1}$$

Доказательство. Пусть у оператора есть хотя бы один собственный вектор.

1.

$$\hat{F}|f\rangle = f|f\rangle$$

Тогда натянем на этот собственный вектор пространство H_f :

$$\mathcal{H}_f \subseteq \mathcal{H}$$

Затем возьмём из этого подпространства вектор $|\psi_f\rangle \in \mathcal{H}_f$, действуем слева оператором \hat{U} , \hat{F} (они коммутируют):

$$\hat{U}\hat{F}|\psi_f\rangle = \hat{F}\hat{U}|\psi_f\rangle = f\hat{U}|\psi_f\rangle$$

Итак, оператор \hat{U} , действуя на операторы этого пространства, даёт векторы, принадлежащие этому же пространству.

2. Пусть в пространстве представления нет инвариантных подпространств.

$$\mathcal{H}_f = \mathcal{H}$$

Отсюда следует, что

$$\begin{aligned}\hat{F}|\psi\rangle &= f|\psi\rangle, \\ \hat{F} &= f\hat{1}\end{aligned}$$

Если представление является приводимым, и пространство этого представления разбито в прямую сумму, матрица имеет блочно-диагональный вид, то **всегда** можно найти оператор, коммутирующий со всеми операторами данного представления и не кратный единичной матрице.

$$\hat{F} = \begin{bmatrix} f_1\hat{1} & 0 & 0 \\ 0 & f_2\hat{1} & 0 \\ 0 & 0 & \ddots \end{bmatrix}$$

Если единственный такой оператор кратен единичному оператору, то представление неприводимо.

Общая задача построения неприводимого представления группы $SO(3)$

Задача сводится к построению неприводимого представления Алгебры Ли. Напомним, что эта задача уже решена. Нужно всего лишь согласовать терминологию.

В квантовой механике решалась задача о нахождении общих собственных векторов из спектра

$$\begin{cases} \hat{J}^2 |jm\rangle = \hbar^2 j(j+1) |jm\rangle, \\ \hat{J}_z |jm\rangle = \hbar m |jm\rangle \end{cases}$$

Отсюда получалась система векторов для $j = \text{const}$, состоящая из $2j+1$ линейно-независимых векторов.

Операторы \hat{J}_k изображаются при помощи матриц 2×2 .

Заключаем, что представление алгебры Ли группы $SO(3)$, реализованное в пространстве E_{2j+1} , является неприводимым представлением.

ГЛАВА 6. СИММЕТРИЯ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ И ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ

Если вспомнить решение задачи квантования углового момента, алгебра Ли группы $SO(3)$ должна иметь неприводимое представление размерностей $(2j + 1)$, где $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots$

Определение. *Весом* неприводимого представления называется число j , при этом само неприводимое представление обозначается $D(j) = D^{(j)}$

6.7.2 Простейшее неприводимое представление алгебры Ли группы $SO(3)$

1. Рассмотрим случай $j = 0$. Это называется *скалярным представлением* (оно же тривиальное, оно же единичное).

Все генераторы нули. Есть единственный вектор $|0, 0\rangle$. Единственный оператор единичный.

2. *Спинорное представление* $D(\frac{1}{2})$. $j = \frac{1}{2}$, $m = \pm\frac{1}{2}$

Было введено обозначение

$$|\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle = \chi_{\pm\frac{1}{2}}$$

Матрицы Паули:

$$\hat{F}_k = \frac{1}{\hbar} \hat{S}_k = \frac{1}{2} \hat{\sigma}_k$$

Замечание. (Матрицы Паули и группа $SU(2)$) унитарные (унитарные) матрицы 2×2 , $\det \hat{U} = 1$.

Матрицы Паули являются генераторами также и этой группы.

Вопрос. Каково соотношение между этой группой и $SO(3)$?

Ответ. Имеется локальный изоморфизм.

Рассмотрим глобальные соотношения между группами. Взаимно однозначного соответствия нет, имеется только гомоморфизм

$$SU(2) \rightarrow SO(3)$$

Каждому повороту отвечает *ровно две матрицы* из $SU(2)$.

Пример. Рассмотрим поворот на φ_3 вокруг оси Oz

$$e^{\frac{i}{2}\varphi_3\hat{\sigma}_z} = \left[\begin{array}{cc} e^{\frac{i}{2}\varphi_3} & 0 \\ 0 & e^{-\frac{i}{2}\varphi_3} \end{array} \right] \Bigg|_{\varphi_3=2\pi} = -1$$

Повороту на 0 отвечает 1, повороту на 2π минус единица.

Спин описывается именно таким представлением. Обратное соотношение является однозначным. Нужно превратить такое многозначное представление в однозначное, увеличив число элементов в исходной группе. Конструкция называется *универсальная накрывающая группа* для группы трёхмерных вращений.

Аналог: комплексная функция \sqrt{z} является однозначной на многолистной Римановой поверхности.

Когда говорят о спинорном представлении, имеют в виду универсальную накрывающую $SU(2)$.

3. $D(1)$. Векторное представление. $j = 1, , = 0, \pm 1$.

$$\hat{j}_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{j}_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{j}_z = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix},$$

Матрицы подобны, существует \hat{L} , такое, что

$$\hat{f}_k = \hat{L} \hat{j}_k \hat{L}^{-1}$$

6.8 Спин и полный момент

Будем считать, что у частицы есть внутренняя степень свободы — *спин*.

$$\psi(\vec{r}) \in L_2(\mathbb{R}^3)$$

Если функция является однокомпонентной, то на выходе получается только орбитальный момент с целочисленным квантованием. Для полуцелого квантования этого недостаточно.

Рассмотрим многокомпонентную функцию, принадлежащую пространству L_2 .

$$\psi_\mu(\vec{r}) \in L_2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^{(2s+1)},$$

число s описывает квадрат спина, $\mu = 2s + 1$.

При поворотах эта функция преобразуется *двояким* образом:

$$\varphi'_\mu(\vec{r}) = \hat{U}(\vec{\varphi}) \psi_\mu(\vec{r}) = \hat{Q}_{\mu\nu}(\vec{\varphi}) \psi_\nu(\hat{T}^{-1}(\vec{\varphi}) \vec{r}),$$

где $\hat{Q}_{\mu\nu}(\vec{\varphi})$ — матрица неприводимого представления $SO(3)$

6.8.1 Инфинитезимальное преобразование

Формула Эйлера:

$$\hat{T}^{-1}(\delta\vec{\varphi}) \approx \vec{r} + \delta\varphi[\vec{n} \times \vec{r}]$$

$$\hat{Q}_{\mu\nu}(\delta\vec{\varphi}) \approx \delta_{\mu\nu} + i\delta\varphi(\vec{n}\hat{\vec{F}})_{\mu\nu}$$

$$\begin{aligned} \psi'_\mu(\vec{r}) &\approx \left[\hat{1} + \delta\varphi(\vec{n}[\vec{r} \times \vec{\nabla}]) \right] \cdot \left[\delta_{\mu\nu} + i\delta\varphi(\vec{n}\hat{\vec{F}})_{\mu\nu} \right] \psi_\nu(\vec{r}) \\ &\approx \left(\hat{1} + i\delta\varphi(\vec{n} \left\{ -i[\vec{r} \times \vec{\nabla}] \delta_{\mu\nu} + \hat{1}(\hat{\vec{F}})_{\mu\nu} \right\}) \right) \psi_\nu(\vec{r}) \end{aligned}$$

ГЛАВА 6. СИММЕТРИЯ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ И ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ

$$\hbar \hat{F}_k = \hat{L}_k \delta_{\mu\nu} + 1 \cdot \hat{S}_k$$

$$\begin{cases} \hat{L}_k = -i\hbar[\vec{r} \times \vec{\nabla}], \\ \hat{S}_k = \hbar \hat{F}_k \end{cases}$$

Записываем то же самое в операторном виде:

$$\hbar \vec{\hat{F}}_k = \vec{\hat{J}} = \vec{\hat{L}} \otimes \hat{1} + \hat{1} \otimes \vec{\hat{S}}$$

Итак, компоненты орбитального спина аддитивны.

Это представление называется *прямым произведением представлений*, более подробно пойдёт речь об этом в следующем семестре. Закон сохранения приобретает вид закона сохранения полного момента $\vec{\hat{J}}, \hat{J}^2$

6.9 Группа пространственной инверсии. Чётность.

6.9.1 Определение группы

Группа состоит из двух элементов: инверсии и тождественного элемента.

$$\vec{r} \rightarrow \vec{r}' = -\vec{r}, \quad t' = t$$

6.9.2 Вектора состояния

$$\hat{U}(\hat{G}) = \hat{I}, \quad |\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle = \hat{I}|\psi\rangle$$

6.9.3 Унитарность

$$\hat{I}^+ \hat{I} = \hat{I} \hat{I}^+ = \hat{1}, \quad \hat{I}^2 = \hat{1}$$

Отсюда следует, что оператор эрмитов. Таким образом, оператору сопоставляется некая физическая величина, называемая *чётностью*.

6.9.4 Собственные значения

$$\begin{aligned} \hat{I}^2 &= \hat{1}, \\ \hat{I}|\psi\rangle &= \lambda|\psi\rangle, \quad \lambda^2 = 1 \\ \left[\begin{array}{l} \lambda = +1 \\ \lambda = -1 \end{array} \right. \end{aligned}$$

Значения λ называется *чётностью*.

6.9.5 Средние значения

Среднее значение должно перейти так

$$\langle \psi | \hat{x}_k | \psi \rangle \rightarrow \langle \psi | x'_k | \psi \rangle, \quad \hat{x}_k \rightarrow \hat{x}'_k = \hat{I}^{-1} \hat{x}_k \hat{I}$$

Должен меняться знак:

$$\langle \psi | x'_k | \psi \rangle = -\langle \psi | \hat{x}_k | \psi \rangle$$

Значит, имеет место антикоммутация

$$\{\hat{x}_k, \hat{I}\} = 0, \quad \{\hat{p}_k, \hat{I}\} = 0$$

Аналогично можно показать, что для момента коммутация есть:

$$[\hat{J}_k, \hat{I}] = 0$$

Этим состояниям уже можно приписать определённую чётность, в отличие от предыдущего случая

6.9.6 Теорема Нётер

Оператор инверсии одновременно является унитарным и эрмитовым. Система инвариантна относительно инверсии. Получается некоторый интеграл движения.

$$[\hat{H}, \hat{I}] = 0$$

Таким образом, чётность является физической величиной.

Глава 8

Движение в центрально-симметричном поле

8.1 Уровни энергии

Запишем снова уравнение Шрёдингера

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = \hat{H} \Psi(\vec{r}, t)$$

Напомним, что если $\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0$, то уравнение решается методом разделения переменных,

$$\begin{cases} \Psi(\vec{r}, t) = \exp(-\frac{iEt}{\hbar}) \psi(\vec{r}), \\ \hat{H} \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \end{cases}$$

Свободному движению соответствует плоская волна. В декартовых координатах вместо $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$ пишем $-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$

В импульсном представлении:

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}$$

Соответствующий уровень энергии вырожден.

$$E_p = \frac{\vec{p}^2}{2m}$$

8.2 Общий подход к задаче о движении в центрально-симметричном поле.

Для центрально-симметричного поля:

$$U(\vec{r}) = U(|\vec{r}|) = U(r), \quad r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

ГЛАВА 8. ДВИЖЕНИЕ В ЦЕНТРАЛЬНО-СИММЕТРИЧНОМ ПОЛЕ

8.2.1 Гамильтониан

$$H_{\text{classical}} = \frac{\vec{p}^2}{2m} + U(r) = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{\vec{L}^2}{2m_r} + U(r)$$

Переход к квантовым величинам происходит с помощью расстановки «крышечек».

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + U(r) = \frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{\hat{\vec{L}}^2}{2m_r} + \hat{U}(r)$$

Выбираем сферическую систему координат:

$$\begin{cases} x = r \cos \varphi \sin \theta \\ y = r \sin \varphi \sin \theta \\ z = r \cos \theta \end{cases}, \quad \begin{matrix} 0 \leq \theta \leq \pi \\ 0 \leq \varphi \leq 2\pi \end{matrix}$$

При этом

$$\begin{cases} \hat{p}_r^2 \rightarrow -\hbar^2 \Delta_r = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) \\ \hat{\vec{L}}^2 \rightarrow -\hbar^2 \Delta_{\theta, \varphi} = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} \right)^2 \right) \end{cases}$$

8.2.2 Полный набор взаимно коммутирующих наблюдаемых

Из написанного выше можно сделать вывод, что

$$[\hat{H}, \hat{\vec{L}}^2] = [\hat{H}, \hat{L}_z] = 0$$

Значит, операторы имеют полную общую систему собственных векторов, можно составить систему

$$\begin{cases} \hat{H} \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \\ \hat{\vec{L}}^2 \psi(\vec{r}) = \hbar^2 \ell(\ell+1) \psi(\vec{r}) \\ \hat{L}_z \psi(\vec{r}) = \hbar m \psi(\vec{r}) \end{cases}$$

Общее решение должно иметь вид

$$\psi(\vec{r}) = \underbrace{R(r)}_{\text{радиальная часть}} \underbrace{Y(r)}_{\text{угловая часть}}$$

$$Y(\theta, \varphi) = Y_\ell^{(m)}(\theta, \varphi)$$

С учётом того, что Y — сферическая функция, получаем *радиальное уравнение Шрёдингера*:

$$\left\{ \frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} + U(r) \right\} R(r) = ER(r)$$

Надо принять к сведению, что если записать функцию в таком виде, то каждая из этих частей (угловая и радиальная) нормируется отдельно на единицу. Нормировочный интеграл записывается в виде произведения нормировочных интегралов.

$$\underbrace{\int_0^\infty \underbrace{r^2 dr}_{\text{якобиан}}}_{=1} \underbrace{R^* R \oint d\Omega Y^* Y}_{=1} = 1$$

Итак, получено уравнение

$$\begin{cases} R(r) = \frac{\chi(r)}{r} \\ \chi(0) = 0 \end{cases}$$

Выписанные решения очень похожи на решения одномерного уравнения Шрёдингера.

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U^{eff}) \right\} \chi(r) = 0$$

Укороченное уравнение Шрёдингера:

$$U^{eff} = U(r) + \underbrace{\frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2}}_{\text{потенциал отталкивания}}$$

8.3 Атом водорода

Эта задача является точно решаемой задачей.

Кулоновский потенциал притяжения:

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{r}$$

Z — заряд ядра. Если $Z > 1$, то атом *ионизованный*.

Уравнение Шрёдингера принимает вид

$$\left\{ \frac{d}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right\} R(r) + \left\{ -\frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \frac{Ze^2}{r^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \right\} R(r) = 0$$

Мы увидим, что эффективный потенциал имеет вид:

8.3.1 Атомная система единиц

1. Характерная единица длины: размер атома.

$$a = \frac{\hbar^2}{me^2} \approx 0.529 \cdot 10^{-8} \text{ см}$$

На основании этой длины строятся все остальные величины.

ГЛАВА 8. ДВИЖЕНИЕ В ЦЕНТРАЛЬНО-СИММЕТРИЧНОМ ПОЛЕ

2. Из соотношения неопределённостей получаем *атомную единицу импульса*

$$p_a = \frac{\hbar}{a} = \frac{me^2}{\hbar}$$

3. $E_a = \frac{e^2}{a} = \frac{pa^2}{m} = 27.21 \text{ Эв, атомная единица энергии (Хартри)}$

4. $V_a = \frac{p_a}{m} = \frac{e^2}{\hbar}$

Отсюда

$$\frac{v_a}{c} = \frac{e^2}{\hbar c} = \alpha \approx \frac{1}{137}$$

α — *постоянная тонкой структуры*.

Переход к атомной систем единиц заключается в следующем.

$$\begin{cases} r \rightarrow \rho = \frac{r}{a}; \\ E \rightarrow \varepsilon = \frac{E}{E_a} \end{cases}$$

$$\hbar = m = e = 1$$

При такой замене (обезразмеривании) уравнение Шрёдингера в атомных единицах принимает вид

$$\left\{ \frac{d}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right\} R(\rho) + \left\{ -\frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} + \frac{2Z}{\rho} - \kappa^2 \right\} R(\rho) = 0$$

8.3.2 Ход решения уравнения

Полностью проводить выкладки не будем, это вроде как очевидно, а хотелось бы посмотреть на то, что менее очевидно.

Посмотрим на асимптотическое поведение уравнения при $\rho \rightarrow \infty$.

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} - \kappa^2 \right) R_\infty(\rho) = 0, \quad R_\infty(\rho) = C_1 e^{-\kappa\rho} + C_2 e^{\kappa\rho}, \quad C_2 = 0$$

При $\rho \rightarrow 0$:

$$\begin{aligned} \left(\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} \right) R_0(\rho) &= 0 \\ R_0(\rho) &= \rho^q, \quad q(q-1) + 2q - \ell(\ell+1) = 0 \end{aligned}$$

Получаем систему на коэффициенты:

$$\begin{cases} q_1 = \ell \\ q_2 = -(\ell+1) \end{cases} \rightarrow R_0(\rho) = C_1 \rho^\ell + C_2 \rho^{-(\ell+1)}, \quad C_2 = 0$$

Рассмотрим ещё один случай, подставляя функцию следующего вида, где u — произвольная функция

$$R(\rho) = e^{-\kappa\rho} \rho^\ell u(\rho)$$

$$\rho u'' + u'(2(\ell + 1) - 2\kappa\rho + u(2z - 2\kappa(\ell + 1))) = 0$$

Ищем решение в виде бесконечных рядов.

$$u(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k, \quad (8.1)$$

$$u'(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_{k+1} (k+1) \rho^k, \quad (8.2)$$

$$u''(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_{k+1} (k+1) k \rho^{k-1} \quad (8.3)$$

Все эти функции нужно подставить в это уравнение.

$$\sum_{k=0}^{\infty} \rho^k [a_{k+1} (k(k+1) + 2(\ell+1)(k+1)) + a_k (2Z - 2\kappa(\ell+1) - 2\kappa k)] = 0$$

Чтобы эта сумма была равна нулю, необходимо и достаточно, чтобы все коэффициенты были равны нулю.

Получается рекуррентное соотношение

$$a_{k+1} = a_k \frac{2(\kappa(\ell + k + 1) - Z)}{(k+1)(k+2(\ell+1))}$$

Анализ.

Надо потребовать ограниченность функции $U(\rho)$ при $\rho \rightarrow \infty$.

В соответствии с рекуррентными соотношениями при достаточно больших k эти слагаемые одно знака. Основной вклад в эту сумму дают слагаемые с большим значением k .

$$\left| \frac{a_{k+1}}{a_k} \right| \approx \frac{2\kappa}{k}$$

Сравним это выражение с функцией $e^{2\kappa\rho}$. Её разложение имеет вид

$$e^{\kappa\rho} = 1 + \frac{2\kappa\rho}{1!} + \dots + \frac{(2\kappa\rho)^k}{k!} + \dots$$

При больших значениях ρ функция ведёт себя как $e^{2\kappa\rho}$.

$$R(\rho) \sim e^{\kappa\rho}, \quad \rho \rightarrow \infty$$

Обрыв ряда.

ГЛАВА 8. ДВИЖЕНИЕ В ЦЕНТРАЛЬНО-СИММЕТРИЧНОМ ПОЛЕ

Если при каком-то k множитель при a_k будет равен нулю, то бесконечный ряд превратится в многочлен.

Пусть $k = n_r$ (радиальное квантовое число).

$$a_{n_r} \neq 0, \quad \forall k > n_r \quad a_k = 0$$

Условие обрыва ряда:

$$\frac{z}{\kappa} - \ell - 1 = n_r$$

Удобно ввести обозначение.

- Главное квантовое число. $n = n_r + \ell + 1 = 1, 2, 3, \dots$

Вспоминая, как выражается энергия через квантовое число, получаем энергетический спектр водорода.

$$\mathcal{E}_n = -\frac{Z^2}{2n^2} = \frac{E_n}{E_a}$$
$$-\kappa^2 = \frac{2E}{E_a} = 2\mathcal{E} < 0$$

Уравнение на собственные функции.

$$\psi_{n\ell m}(\vec{r}) = E_{n,\ell}(\rho) Y_{\ell}^{(m)}(\theta, \varphi)$$
$$R_{n,\ell}(\rho) = C_{n,\ell} e^{-\kappa\rho} \rho^{\ell} U_{n,\ell}(\rho)$$

Определение. Присоединённый полином Лаггера

$$U_{n,\ell}(\rho) = L_{n_r}^{(2\ell+1)}(2\kappa\rho)$$

$$L_k^s(x) = e^x x^{-s} \frac{d^k}{dx^k} (e^{-x} x^{s+k})$$

Вопрос. Какой физический смысл радиального квантового числа?

Ответ. Это просто степень полинома. Кроме того, это число узлов в радиальной волновой функции.

Это частный случай так называемой *осцилляционной теоремы*.

Теорема. (Одномерный случай). Число нулей волновой функции совпадает с номером энергии связанного состояния, если их нумеровать начиная с нулевого.

Нормировка.

$$1 = \int_0^{\infty} \rho^2 d\rho R_{n,\ell}(\rho) R_{n,\ell}(\rho)$$
$$C_{n_r\ell} = \kappa^{3/2} \sqrt{\frac{4}{n(n-\ell-1)!(n+2)!}}$$

Решение:

$$\varphi_{n\ell m}(\vec{r}) = \left(\underbrace{\frac{z}{na}}_{\kappa} \right)^{3/2} \sqrt{\frac{4}{n(n-\ell-1)!(n+\ell)!}} e^{-(rz/na)} \left(\frac{2Z}{na} r \right)^\ell L_{n-\ell-1}^{(2\ell+1)} \left(\frac{2Z}{na} r \right) \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} e^{im\varphi} P_\ell^{(m)}(\cos\theta)$$

8.3.3 Вырождение

Квантовые числа пробегают следующие значения.

- Главное квантовое число $n = 1, 2, 3, \dots$
- Орбитальное квантовое число $\ell = 0, 1, 2, \dots, n-1$
- Магнитное квантовое число $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Кратность вырождения уровней энергии равна

$$\sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell+1) = n^2$$

Теорема. Предположим что наблюдаемые \hat{A}, \hat{B} коммутируют с \hat{F} , но не коммутируют между собой. Тогда спектр оператора \hat{F} вырожден.

Доказательство. Допустим, что у оператора \hat{F} есть хотя бы один собственный вектор.

$$\hat{F}|F_i\rangle = F_i|F_i\rangle$$

Действуем оператором \hat{A} слева,

$$\hat{A}\hat{F}|F_i\rangle = \hat{F}\hat{A}|F_i\rangle = F_i\hat{A}|F_i\rangle$$

В силу невырожденности, каждому значению отвечает только один собственный вектор, поэтому

$$\hat{A}|F_i\rangle = A_i|F_i\rangle$$

Аналогично, для оператора \hat{B} :

$$\hat{B}|F_i\rangle = B_i|F_i\rangle$$

Строя коммутатор, получаем

$$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})|F_i\rangle = (A_iB_i - B_iA_i)|F_i\rangle = 0$$

Противоречие.

Вырождение по магнитному числу.

ГЛАВА 8. ДВИЖЕНИЕ В ЦЕНТРАЛЬНО-СИММЕТРИЧНОМ ПОЛЕ

Это происходит с любой центрально-симметричной системой, в силу того, что

$$[\hat{H}, L_z] = 0, \quad [\hat{H}, \hat{L}_\pm] = 0, \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_\pm] \neq 0$$

Действуем оператором \hat{L}_\pm на собственные векторы гамильтониана,

$$\hat{H}\psi_{n\ell m \pm 1}(\vec{r}) = E\psi_{n\ell m \pm 1}(\vec{r})$$

Кратность вырождения $2\ell + 1$.

Гамильтониан должен коммутировать с оператором конечных поворотов:

$$[\hat{H}, \hat{U}(\varphi)] = 0$$

Для этого необходимо и достаточно предположить (см. выше) коммутируемость с \hat{L}^2 , \hat{L}_i .

В пространстве E размерности $2\ell + 1$ реализовано представление

$$E_{(2\ell+1)} \rightarrow P(\ell) \rightarrow E_n$$

Кратность вырождения гамильтониана равна размерности пространства неприводимого представления.

Физическая причина явления: *изотропия пространства*.

Вырождение по орбитальному квантовому числу.

Это вырождение очень нетипично (см. также изотропный одномерный осциллятор). Также называется «случайное», или *кулоновское* вырождение.

Для кулоновского поля есть инвариант, который называется вектором *Лапласа-Рунге-Ленца* (эксцентриситет).

В классике:

$$\vec{\varepsilon} = \frac{1}{z}[\vec{L} \times \vec{p}] + \frac{\vec{r}}{r}$$

Пояснение: если умножить на \vec{r} скалярно, получим

$$\vec{\varepsilon} = -\frac{\vec{L}^2}{z} + r$$

$$r = \frac{\vec{L}^2 / z}{1 - \varepsilon^2 \cos \varphi}$$

Получили уравнение эллипса.

Квантовый случай Оператор эксцентриситета выглядит следующим образом:

$$\hat{\varepsilon}^2 = \frac{1}{2z} \left([\hat{L} \times \hat{p}] - [\hat{p} \times \hat{L}] \right) + \frac{\vec{r}}{r}$$

Уровни энергии вырождаются по ℓ :

$$[\hat{H}, \hat{\varepsilon}_i] = 0, \quad [\hat{H}, \hat{\vec{L}}^2] = 0,$$

$$[\hat{\vec{L}}^2, \hat{\varepsilon}_i] \neq 0$$

Получается так, что одному и тому же уровню энергии отвечают различные значения ℓ . Преобразовываться надо по неприводимым представлениям. Истинная группа симметрии атома водорода: $SO(4)$ — четырёхмерные вращения обычного Евклидова пространства. Алгебра Ли состоит из шести генераторов.

Глава 9

Симметрия в квантовой механике и законы сохранения

9.10 Задача о сложении угловых моментов

9.10.1 Прямое произведение пространств

Квантовую систему можно рассматривать как совокупность некоторых подсистем. При этом можно считать, что они

- либо не взаимодействуют совсем
- взаимодействие настолько мало, что может быть учтено методом последовательных приближений

Вопрос. Как строить векторы состояния *всей системы*, если известны векторы состояния подсистем?

Вопрос. Как строить наблюдаемые величины в такой системе?

Определение. Пусть имеется две кинематически независимые подсистемы. Пусть пространство состояний первой системы \mathcal{H}_1 , второй системы — \mathcal{H}_2 . Тогда пространство состояний всей системы обозначается

$$\mathcal{H}(1, 2) = \mathcal{H}(1) \otimes \mathcal{H}(2)$$

и называется *прямым произведением* пространств состояний первой и второй системы.

Пусть имеется некоторое отображение f , которое ставит каждой паре $\begin{cases} |\psi_1\rangle \in \mathcal{H}(1) \\ |\psi_2\rangle \in \mathcal{H}(2) \end{cases}$ некоторый новый вектор

$$|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \in \mathcal{H}(1) \otimes \mathcal{H}(2)$$

Это отображение должно обладать следующими свойствами:

ГЛАВА 9. СИММЕТРИЯ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ И ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ

1. Линейность по первому и второму сомножителю:

$$|\psi_1\rangle \otimes |\psi_3\rangle + |\psi_2\rangle \otimes |\psi_3\rangle = (|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle) \otimes |\psi_3\rangle$$

2. Множеству пар линейно независимых векторов $\{|\psi_1\rangle_i, |\psi_2\rangle_j\}$ ставятся тоже *линейно независимые векторы* $|\psi_1\rangle_i \otimes |\psi_2\rangle_j$ в пространстве $\mathcal{H}(1, 2)$

Тогда множество линейных комбинаций

$$\sum_{ij} a_{ij} |\psi_1\rangle_i \otimes |\psi_2\rangle_j$$

образует линейное пространство, которое обозначается $\mathcal{H}(1) \otimes \mathcal{H}(2)$ и является подпространством $\mathcal{H}(1, 2)$.

Замечание. Определим *скалярное произведение* в новом пространстве.

Будем пользоваться обозначением $|\psi_1\psi_2\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle$.

Положим по определению

$$\langle \psi_1\psi_2 | \psi'_1\psi'_2 \rangle = \langle \psi_1 | \psi'_1 \rangle \langle \psi_2 | \psi'_2 \rangle$$

Как следует из физического смысла, вероятности независимых событий перемножаются. Квадраты модулей скалярных произведений есть ни что иное как вероятности.

Произведение размерностей $\dim(\mathcal{H}(1)) \cdot \dim(\mathcal{H}(2)) = \dim(\mathcal{H}(1) \otimes \mathcal{H}(2))$.

9.10.2 Система двух угловых моментов

В системе есть две частицы, обладающие соответственно угловыми моментами (это не квантовые операторы!)

$$\mathbf{J}(1), \quad \mathbf{J}(2)$$

Напоминание. Для любого углового момента очень важно помнить, как устроена общая система собственных векторов $\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_z$:

$$\begin{cases} \hat{\mathbf{J}}^2 |jm\rangle = \hbar^2 j(j+1) |jm\rangle, \\ \hat{J}_z |jm\rangle = \hbar m |jm\rangle. \end{cases} \quad (9.1)$$

Пространство размерности $j+1$ и есть пространство состояний углового момента.

Для частицы 1 есть операторы $\hat{\mathbf{J}}^2(1), \hat{J}_z(1)$. Их собственные векторы образуют систему из $2j_1+1$ собственных векторов. Пространство состояний первой частицы есть $E_{(2j_1+1)}$ (евклидово пространство).

Для частицы 2 есть аналогичное пространство $E_{(2j_2+1)}$.

Так как частицы *не взаимодействуют*, то компоненты угловых моментов должны быть независимо измеримы:

$$[\hat{J}_i(1), \hat{J}_j(2)] = 0$$

Пространство состояний для этих двух частиц:

$$E_{(2j_1+1)} \otimes E_{(2j_2+1)} = E_{(2j_1+1)(2j_2+1)}$$

Полная система совместных наблюдаемых (операторов):

$$\hat{\mathbf{J}}^2(1), \hat{J}_z(1), \hat{\mathbf{J}}^2(2), \hat{J}_z(2)$$

Физическая интерпретация сложения моментов

Определим оператор сложения моментов $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{J}}(1) + \hat{\mathbf{J}}(2)$.

Проблема! Записывая правую часть в таком виде, сложение операторов, действующих в *разных пространствах*, некорректно. Сумму надо будет записать немного по-другому.

Теоретико-групповой подход

Вопрос. Что говорилось про группу трёхмерных вращений?

Для любого углового момента $\hat{\mathbf{J}}$ верна система уравнений (9.1). Построенное пространство *не содержит* внутри себя инвариантных подпространств относительно действия операторов \hat{J}_i .

В соответствии с леммой Шура, в этом пространстве реализовано неприводимое представление группы вращений $D(j)$.

Для частицы 1 в пространстве состояний реализовано неприводимое представление $D(j_1)$, аналогично для частицы 2.

9.10.3 Прямое произведение представлений

Напоминание. Представление — это конструкция, которая предполагает, что любому элементу группы ставится в соответствие преобразование пространства, при этом должна сохраняться групповая операция.

Группа трёхмерных вращений — это группа преобразования координат. Исходная координата \mathbf{r} при этом переходит в \mathbf{r}' .

$$\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}' = \hat{G}\mathbf{r} = \hat{T}_{\vec{\varphi}}\mathbf{r}$$

Генераторы представления:

$$\hat{U}(\vec{\varphi}) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\varphi(\mathbf{n}, \hat{\mathbf{J}}(1))\right)$$

в $E_{(2j_1+1)} \equiv E_1$,

$$\hat{U}(\vec{\varphi}) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\varphi(\mathbf{n}, \hat{\mathbf{J}}(2))\right)$$

в $E_{(2j_2+1)} \equiv E_2$.

При этом из E_1, E_2 мы составили $E_1 \otimes E_2$.

ГЛАВА 9. СИММЕТРИЯ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ И ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ

Вопрос. Какие преобразования отвечают унитарным преобразованиям в построенном пространстве?

$$\begin{cases} |\psi_1\rangle \rightarrow |\psi'_1\rangle, \\ |\psi_2\rangle \rightarrow |\psi'_2\rangle, \end{cases} \Rightarrow |\psi'_1\rangle \otimes |\psi'_2\rangle = (\hat{U}_1|\psi_1\rangle) \otimes (\hat{U}_2|\psi_2\rangle) = (\hat{U}_1 \otimes \hat{U}_2)(|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle)$$

Лемма. Для операторов \hat{U}_1, \hat{U}_2 групповая операция представления группы $SO(3)$ в $E_1 \otimes E_2$ сохраняется.

$$\begin{aligned} \hat{U}' &= \hat{U}_1 \otimes \hat{U}_2 \\ \hat{U}'(G_1 G_2) &= \hat{U}'(G_1) \hat{U}'(G_2) \end{aligned}$$

Определение. Представление группы G , которое реализовано при помощи операторов $\hat{U}_1 \otimes \hat{U}_2$ в пространстве состояний $E_1 \otimes E_2$, называется *прямым произведением представлений*.

9.10.4 Генераторы прямого произведения представлений

Напоминание. Инфинитезимальные операторы нужны для того, чтобы описать окрестность единичного элемента группы преобразований. Говоря другим языком, они определяют соответствующую группу Ли.

$$\begin{cases} \hat{U}_1(\delta\vec{\varphi}) \simeq \hat{1} + \frac{i}{\hbar} \delta\varphi(\mathbf{n}, \hat{\mathbf{J}}(1)), \\ \hat{U}_2(\delta\vec{\varphi}) \simeq \hat{1} + \frac{i}{\hbar} \delta\varphi(\mathbf{n}, \hat{\mathbf{J}}(2)). \end{cases}$$

$$\hat{U}_1(\delta\vec{\varphi}) \otimes \hat{U}_2(\delta\vec{\varphi}) \simeq \hat{1} + \frac{i}{\hbar} \delta\varphi(\mathbf{n}, (\hat{\mathbf{J}}(1) \otimes \hat{1} + \hat{1} \otimes \hat{\mathbf{J}}(2)))$$

Роль инфинитезимальных операторов играют операторы

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{J}}(1) \otimes \hat{1} + \hat{1} \otimes \hat{\mathbf{J}}(2)$$

Введением «единичек» устраняется некорректность, описанная выше (операторы действуют в разных пространствах).

В пространстве $E_1 \otimes E_2$ есть независимая система наблюдаемых

$$\hat{\mathbf{J}}^2(1), \hat{\mathbf{J}}^2(2), \hat{J}_z(1), \hat{J}_z(2).$$

Система собственных векторов:

$$|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle.$$

Оказывается, что построенное нами представление является *приводимым*. Поэтом построенное пространство содержит инвариантное подпространство. Выделим его, выделив все базисные векторы.

Чтобы построить базис такого пространства, надо построить общие собственные векторы $\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_z$.

$$\begin{cases} \hat{\mathbf{J}}^2 |JM\rangle = \hbar^2 J(J+1) |JM\rangle, \\ \hat{J}_z |JM\rangle = \hbar M |JM\rangle. \end{cases}$$

Вспомним, что для фиксированного J число M пробегает значения

$$M = \underbrace{-J, -J+1, \dots, J}_{2J+1}$$

Задача сводится к нахождению всевозможных значений J (то есть J_1, J_2, \dots).

Построенное пространство раскладывается в прямую сумму

$$E_1 \otimes E_2 = \mathcal{H}(J_1) \oplus \mathcal{H}(J_2)$$

Теорема. (о сложении моментов)

$$|j_1 j_2 JM\rangle = \sum_{m_1 m_2} C_{j_1 j_2 m_1 m_2}^{JM} |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle,$$

где $C_{j_1 j_2 m_1 m_2}^{JM}$ — коэффициенты Клебша-Гордана.

Правила.

$$1. \hat{J}_z |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle = (\hat{J}_z(1) \otimes \hat{1} + \hat{1} \otimes \hat{J}_z(2)) |j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle$$

$$\hat{J}_z |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle = \hbar(m_1 + m_2) |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle = \hbar M |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$$

Таким образом, матрица \hat{J}_z является диагональной уже в старом базисе. Отсюда

$$M = m_1 + m_2$$

2. Связь между квантовыми числами J устроена гораздо сложнее. Для начала,

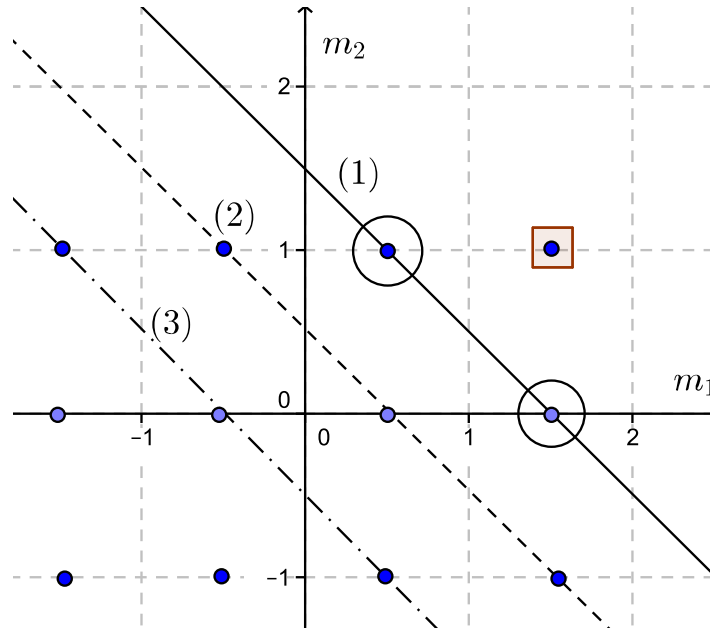
$$M_{\max} = j_1 + j_2$$

Затем, сдвигаемся по диагонали таблицы:

$$\begin{cases} J = j_1 + j_2, \\ M = j_1 + j_2 - 1. \end{cases}$$

$$\begin{cases} J = j_1 + j_2 - 1, \\ M = j_1 + j_2. \end{cases}$$

Сдвинулись до следующей диагонали, и т.д.



Надо обратить внимание, что далее порядок матричного уравнения для диагонализации $\hat{\mathbf{J}}^2$ увеличиваться не будет (в прямоугольнике количество точек не будет увеличиваться).

$$\begin{aligned} J = j_1 + j_2 & : 2J + 1 = 2(j_1 + j_2) + 1 \\ J = j_1 + j_2 - 1 & : 2J + 1 = 2(j_1 + j_2) - 1 \\ & \dots\dots\dots \\ J = |j_1 - j_2| & : 2|j_1 - j_2| + 1 \end{aligned}$$

Количество разных значений J равно $2j_{\min} + 1$.

Находим количество линейно независимых собственных векторов

$$\begin{aligned} \sum_{|j_1 - j_2|}^{j_1 + j_2} (2J + 1) &= \frac{1}{2} (2|j_1 - j_2| + 1 + 2(j_1 + j_2) + 1) \cdot (2j_{\min} + 1) \\ &= (2j_{\max} + 1)(2j_{\min} + 1) \\ &= (2j_1 + 1)(2j_2 + 1) \end{aligned}$$

Итак, подводя итог, правила выглядят следующим образом:

$$\begin{cases} M = m_1 + m_2, \\ J = j_1 + j_2, \dots, |j_1 - j_2|. \end{cases}$$

9.1 Теория возмущений

В этой части будем исследовать приближённые решения уравнения Шрёдингера с возмущённым гамильтонианом.

Рассмотрим возмущённое уравнение Шрёдингера:

$$\left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} \right\} |\Psi\rangle = 0$$

Пусть, при этом,

$$\hat{H} = \hat{H}^{\circ} + \hat{V},$$

где \hat{H}° — гамильтониан невозмущённой задачи, а \hat{V} — оператор возмущения.

Чтобы считать возмущение «малым», считаем, что

$$\hat{V} = \lambda \hat{U}, \quad \lambda \ll 1$$

В зависимости от постановки для приближённого решения задачи используют следующие два метода:

- Метод Релея-Джинса (стационарная теория возмущений, $V(t) \equiv \text{const}$).
- Метод Дирака

Позже мы увидим, что нестационарную задачу можно свести к стационарной.

9.2 Стационарная теория возмущений

9.2.1 Стационарная теория возмущений в отсутствии вырождения

В стационарном случае

$$\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0, \quad |\psi(t)\rangle = \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) |\psi\rangle$$

Стационарное уравнение Шрёдингера:

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle, \quad \hat{H}^{\circ}|\psi^{(\circ)}\rangle = E^{(\circ)}|\psi^{(\circ)}\rangle$$

Точное решение будем искать методом последовательных приближений при разложении в ряд Тейлора.

Разобьём рассуждение на несколько шагов.

- **Шаг 1.** Предположим, что энергия и решение уравнения Шрёдингера разложимы в ряды (по λ):

$$\begin{cases} E &= E^{(0)} + E^{(1)} + \dots, \\ |\psi\rangle &= |\psi^{(0)}\rangle + |\psi^{(1)}\rangle + \dots \end{cases}$$

Вопросы о сходимости рядов рассматривать не будем. Для этого нужно рассматривать сходимость для каждого конкретного гамильтониана.

ГЛАВА 9. СИММЕТРИЯ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ И ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ

Ряды *асимптотические*, и совершенно не обязаны сходиться в том смысле, в котором мы предполагаем.

Подставляя в уравнение Шрёдингера, получаем:

$$\left(\hat{H}^{(0)} + \hat{V}\right)\left(|\psi^{(0)}\rangle + |\psi^{(1)}\rangle + \dots\right) = \left(E^{(0)} + E^{(1)} + \dots\right)\left(|\psi^{(0)}\rangle + |\psi^{(1)}\rangle + \dots\right)$$

Раскрывая скобки и приравнявая коэффициенты при соответствующих степенях λ , получаем:

$$\left(\hat{H}^{(0)} - E^{(0)}\right)|\psi^{(0)}\rangle = 0 \quad (9.2)$$

$$\left(\hat{H}^{(0)} - E^{(0)}\right)|\psi^{(1)}\rangle = (E^{(1)} - \hat{V})|\psi^{(0)}\rangle \quad (9.3)$$

$$\left(\hat{H}^{(0)} - E^{(0)}\right)|\psi^{(k)}\rangle = (E^{(1)} - \hat{V})|\psi^{(k-1)}\rangle + E^{(2)}|\psi^{(k-2)}\rangle + \dots + E^{(k)}|\psi^{(0)}\rangle \quad (9.4)$$

- **Шаг 2.** Считаем спектр энергий уравнения (9.2) невырожденным.

Тогда каждому значению $E_n^{(0)}$ соответствует единственная волновая функция $\psi_n^{(0)}$, причём семейство функций $\{|\psi_n^{(0)}\rangle\}$ образует полную ортонормированную систему и является базисом.

Точное решение ищем в виде разложения по этому базису:

$$|\psi_n\rangle = \sum_m C_{nm}|\psi_m^{(0)}\rangle$$

Таким образом мы ищем поправки к *начальному состоянию с номером n* .

Отсюда $C_{nm}^{(0)} = \delta_{nm}$, чтобы в начальном приближении было только одно слагаемое.

Теорема Фредгольма. Неоднородное уравнение имеет решение тогда и только тогда, когда правая часть ортогональна пространству решений однородного уравнения.

Пусть $E_n^{(0)} \rightarrow |\psi_n^{(0)}\rangle$ — пространство решений является одномерным.

$$\langle\psi_n^{(0)}|\hat{H}^{(0)} - E_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle = \langle\psi_n^{(0)}|E_n^{(1)} - \hat{V}|\psi_n^{(0)}\rangle$$

Пользуясь ортогональностью, получаем:

$$0 = E_n^{(1)} - \langle\psi_n^{(0)}|\hat{V}|\psi_n^{(0)}\rangle,$$

откуда получается формула для энергии в первом приближении:

$$E_n^{(1)} = \langle\psi_n^{(0)}|\hat{V}|\psi_n^{(0)}\rangle = V_{nn}$$

Найдём поправки к вектору состояния.

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_m C_{nm}^{(1)}|\psi_m^{(0)}\rangle = \sum_m |\psi_m^{(0)}\rangle \langle\psi_m^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle$$

Подставляя в уравнение (9.3), получаем

$$\sum_m C_{nm}^{(1)} (\hat{H}^{(0)} - E_n^{(0)}) |\psi_m^{(0)}\rangle = (E_n^{(1)} - \hat{V}) |\psi_n^{(0)}\rangle$$

Домножая скалярно на $\langle \psi_k^{(0)} |$, в силу ортогональности, получаем:

$$\sum_m C_{nm}^{(1)} (E_k^{(0)} - E_n^{(0)}) \delta_{km} = E_n^{(1)} \delta_{kn} - \hat{V}_{kn}$$

Отсюда получается окончательное выражение для коэффициентов $C_{nk}^{(1)}$.

$$C_{nk}^{(1)} = \begin{cases} \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} & , \quad n \neq k, \\ \text{не определён} & , \quad n = k. \end{cases}$$

Мы не фиксировали нормировку, поэтому соответствующие коэффициенты не определены.

$$|\psi_n\rangle \approx 1 + C_{nn}^{(1)} |\psi_n^{(0)}\rangle + \sum_{k \neq n} \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} |\psi_k^{(0)}\rangle$$

В этом приближении нормировка не выполняется:

$$1 = |1 + C_{nn}^{(1)}|^2 + \sum (\dots)$$

$$1 = 1 + 2\text{Re } C_{nn}^{(1)}$$

Для удобства можно положить $\text{Re } C_{nn}^{(1)} = 0$, $\text{Im } C_{nn}^{(1)} = 0$, то есть

$$C_{nn}^{(1)} = 0$$

$$|\psi_n\rangle \approx |\psi_n^{(0)}\rangle + \sum_{k \neq n} \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} |\psi_k^{(0)}\rangle$$

В непрерывном случае:

$$|\psi_n\rangle \approx |\psi_n^{(0)}\rangle + \int d\nu \frac{V_{n\nu}}{E_n^{(0)} - E_\nu^{(0)}} |\psi_\nu^{(0)}\rangle$$

- **Шаг 3.** Поиск поправки к энергии во втором приближении.

Домножим уравнение с номером (9.4) скалярно на $\langle \psi_n^{(0)} |$:

$$\begin{aligned} 0 = & E_n^{(1)} \langle \psi_n^{(0)} | \psi_n^{(k-1)} \rangle - \langle \psi_n^{(0)} | \hat{V} | \psi_n^{(k-1)} \rangle \\ & + E_n^{(2)} \langle \psi_n^{(0)} | \psi_n^{(k-2)} \rangle + \dots + E_n^{(k)} \underbrace{\langle \psi_n^{(0)} | \psi_n^{(0)} \rangle}_1 \end{aligned}$$

$$E_n(k) = \langle \psi_n^{(0)} | \hat{V} | \psi_n^{(k-1)} \rangle - \sum_{s=1}^{k-1} E_n^{(s)} \langle \psi_n^{(0)} | \psi_n^{(k-s)} \rangle$$

9.3 Нестационарная теория возмущений. Теория квантовых переходов

9.3.1 Постановка задачи. Общие формулы

Рассмотрим естественное уравнение Шрёдингера

$$\left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} \right\} |\Psi(t)\rangle = 0 \quad (9.5)$$

Считается, что гамильтониан можно представить в виде суммы

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{V}, \quad \hat{V} = \hat{V}(t)$$

В отличие от предыдущего подхода, тут будем считать, что возмущение *зависит от времени*. В этом заключается основное отличие.

Зависимость \hat{H} от времени характерна для незамкнутых систем.

Например, поле атома, взаимодействующее с внешним полем волнового типа.

- При постановке задачи будем считать, что

$$\hat{V}(t) = \begin{cases} \hat{W}(t), & 0 < t < T \\ 0, & t \leq 0, t \geq T. \end{cases}$$

Другими словами, если одно слагаемое зависит от времени (система нестационарная), то и весь гамильтониан зависит от времени. У такой системы вообще не может быть стационарных состояний.

Считаем, что в задаче есть некоторый безразмерный параметр $\lambda \ll 1$.

- При $t \leq 0$, $\hat{H} = \hat{H}^{(0)}$. Возмущение ещё не включилось.

Положим, что в этой системе у гамильтониана существовала полная система собственных векторов, отвечающая дискретному спектру.

$$\left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}^{(0)} \right\} |\Psi_n^{(0)}(t)\rangle = 0$$

Как и положено для стационарных состояний,

$$|\Psi_n^{(0)}(t)\rangle = e^{-iE_n^{(0)}/\hbar}, \quad \hat{H}^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle$$

Для удобства введём обозначения

$$\omega_n = \frac{E_n^{(0)}}{\hbar}, \quad |\Psi_n^{(0)}(t)\rangle = e^{-i\omega_n t} |\psi_n^{(0)}\rangle$$

Эти «уровни энергии» $E_n^{(0)}$ такими и останутся (задача нестационарная), поэтому индекс (0) сверху можно не писать.

Полное решение уравнения Шрёдингера до включения возмущения можно записать в виде разложения по этой системе

$$|\Psi^{(0)}(t)\rangle = \sum_n C_n e^{-i\omega_n t} |\psi_n^{(0)}\rangle = \sum_n C_n |\Psi_n^{(0)}(t)\rangle$$

В духе вероятностной интерпретации, коэффициенты C_n — это амплитуды соответствующих вероятностей.

$$|C_n|^2 = w_n$$

- Посмотрим на уравнение (9.5). Пусть «включено» возмущение $\hat{V}(t)$.

Считаем, что указанные выше коэффициенты являются функциями времени:

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= \sum_n C_n(t) e^{-i\omega_n t} |\psi_n^{(0)}\rangle \\ &= \sum_n C_n(t) |\Psi_n^{(0)}(t)\rangle \end{aligned}$$

Вероятности тоже являются функциями времени

$$|C_n(t)|^2 = w_n(t)$$

$$i\hbar \sum_k \left\{ \dot{C}_k |\Psi_k^{(0)}(t)\rangle + C_k \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_k^{(0)}(t)\rangle \right\} = \sum_k C_k \left(\hat{H}^{(0)} |\Psi_k^{(0)}(t)\rangle + \hat{V} |\Psi_k^{(0)}(t)\rangle \right)$$

Для начала, учтём уравнение Шрёдингера нулевого (невозмущённого) порядка приближения. Из него:

$$i\hbar \sum_k \left\{ \dot{C}_k |\Psi_k^{(0)}(t)\rangle \right\} = \sum_k C_k \left(\hat{V} |\Psi_k^{(0)}(t)\rangle \right)$$

Умножим исходное равенство слева на $\langle \Psi_m^{(0)} | (t)$ и учтём ортонормированность системы.

$$i\hbar \dot{C}_m = \sum_k C_k V_{mk} e^{i\omega_{mk} t},$$

где

$$V_{mk} = \langle \psi_m^{(0)} | \hat{V} | \psi_k^{(0)} \rangle, \quad \omega_{mk} = \frac{E_m - E_k}{\hbar}$$

Важно понимать: получившийся коэффициент V_{mk} зависит от времени.

Для начала отметим, что данное уравнение является *точным*. Хорошее оно или нет? Если уровней энергии не очень много ($k = 1, 2, 3$), то уравнения можно решать. А что делать в случае, когда их больше, или когда спектр непрерывный? Получается интегродифференциальное уравнение. Решить его в общем виде нельзя. Значит, нужно применять какие-то приближения. Они представляют собой *метод Дирака*, также известный как метод квантовых переходов.

ГЛАВА 9. СИММЕТРИЯ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ И ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ

• Метод Дирака

Предположим, что $C_n(t)$ можно представить в виде функционального ряда

$$C_k(t) = C_k^{(0)}(t) + C_k^{(1)}(t) + \dots,$$

где $C_k^{(m)}(t)$ содержит малый параметр в качестве «множителя» в степени m .

Пусть до «включения» возмущения система находилась в стационарном состоянии с номером n .

Включается возмущение $C_k(0) = C_k^{(0)}(0) = C_k^{(0)} = \delta_{nk}$.

Итак, в разложении $\Psi(t)$ в начальный момент времени есть только одно слагаемое, с номером n .

Удобно обозначить вместо C_k коэффициентом C_{nk} , где n — начальное состояние, а k — состояние, к которому этот коэффициент относится, поправка.

Подставляя в уравнение, получаем

$$i\hbar(\underbrace{\dot{C}_{nm}^{(0)}}_{=0} + \dot{C}_{nm}^{(1)} + \dots) \simeq \sum_k (C_{nk}^{(0)} + \underbrace{C_{nk}^{(1)}}_{\sim \lambda^2} + \dots) V_{mk} e^{i\omega_{mk}t}$$

Уравнение в первом приближении:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C_{nm}^{(1)} = V_{mn} e^{i\omega_{mn}t}$$

Если формально провести интегрирование по времени, то соответствующее выражение для C_{nm} запишется вот каким образом:

$$C_{nm}^{(1)}(T) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^T V_{mn}(t') e^{i\omega_{mn}t'} dt'$$

Смысл этого коэффициента, ещё раз напомним, в том, что он даёт поправку *первого порядка*.

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_m C_{nm}(t) |\Psi_m^{(0)}(t)\rangle$$

до включения возмущения $n = m$. Теперь эти коэффициенты, отличные от нуля, становятся ненулевыми. Следовательно, если рассмотреть

$$|C_{nm}^{(1)}(T)|^2 = P_{nm},$$

где P_{nm} — вероятность обнаружить систему в состоянии m в момент T , если она изначально находилась в состоянии n . Другими словами, это *вероятность квантового перехода* из состояния n в состояние m за время T .

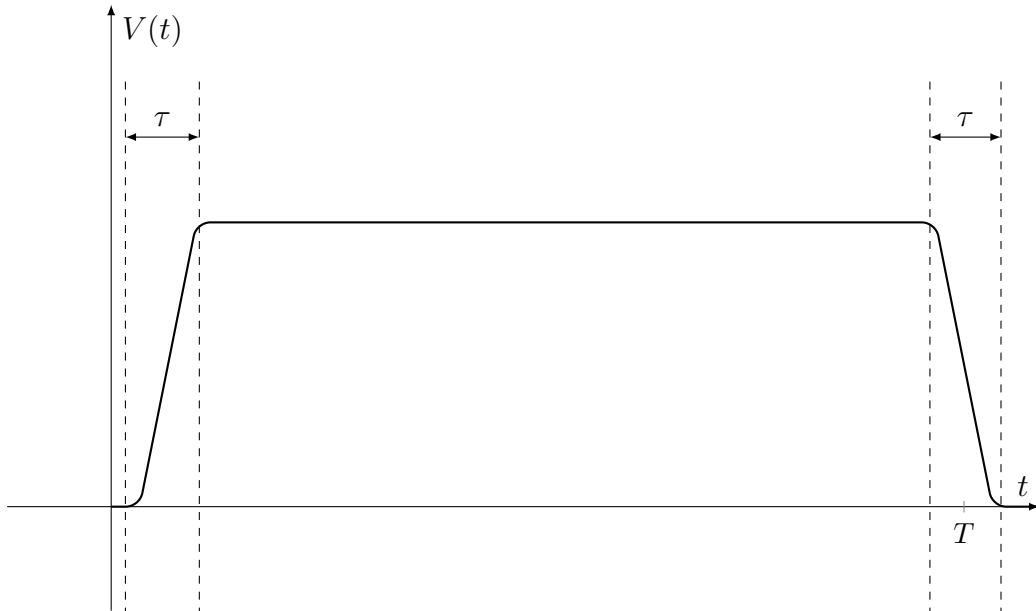
Говорить о стационарных состояниях можно тогда, когда возмущение снято. Именно поэтому мы рассматриваем конечный промежуток времени. Промежутки времени должны быть не очень велики, тогда можно говорить о дискретных квантовых переходах.

Вероятность перехода:

$$P_{nm}(T) = \frac{1}{h^2} \left| \int_0^T V_{mn}(t') e^{i\omega_{mn}t'} dt' \right|^2$$

9.3.2 Адиабатическое и внезапное включение возмущения

Первый случай.



$$C_{nm}(t) = \underbrace{\frac{V_{mn}(t')}{i\hbar} \frac{e^{i\omega_{mn}t'}}{i\omega_{mn}} \bigg|_0^t}_{=0} + \frac{1}{\hbar\omega_{mn}} \int_0^T \frac{dV_{mn}(t')}{dt'} e^{i\omega_{mn}t'} dt'$$

Это будет работать, если изменение матричного элемента на временах характерного периода мало изменяется по сравнению с разностью уровней соответствующих состояний.

$$\frac{dV_{mn}}{dt} \frac{1}{\omega_{mn}} \ll \hbar\omega_{mn}$$

$$T_{mn} \simeq \frac{2\pi}{\omega_{mn}}$$

Из теоремы Лагранжа о среднем можно получить некую оценку на выписанный выше интеграл:

$$P_{nm}(T) \cong \left| \frac{dV_{mn}}{dt} \right|_{t=T} \left(\frac{2}{\hbar\omega_{mn}^2} \right)^2 \sin^2 \left(\frac{\omega_{mn}T}{2} \right)$$

ГЛАВА 9. СИММЕТРИЯ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ И ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ

Эта вероятность экспоненциально мала, $P_{nm}(T) \ll 1$. В первом приближении система остаётся в исходном состоянии. Адиабатические изменения не приводят к изменению состояния.¹

Второй случай.

$$\tau \ll T_{mn} \sim \frac{1}{\omega_{mn}}$$

Выпишем те же уравнения.

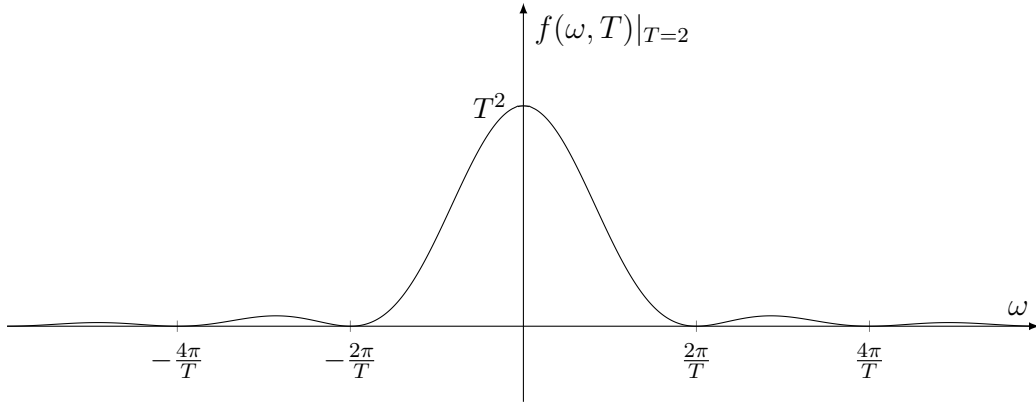
Теперь основному изменению подвержен матричный элемент. Под интегралом от производной получим полый скачок этой функции

$$P_{nm} \cong \frac{|V_{mn}|^2}{(\hbar\omega_{mn})^2}$$

9.3.3 Вероятность переходов в единицу времени

Постоянное возмущение

$$P_{nm}(T) = \frac{1}{\hbar^2} \left| V_{mn} \frac{e^{i\omega_{mn}T} - 1}{i\omega_{mn}} \right|^2 = \frac{|V_{mn}|^2}{\hbar^2\omega_{mn}^2} 2(1 - \cos(\omega_{mn}T))$$
$$f(\omega, T) = \frac{2}{\omega^2} (1 - \cos(\omega T))$$



$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(\omega, T) d\omega = 2\pi T = \text{const}$$

При $T \rightarrow \infty$ функция переходит в δ -функцию.

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \left(\frac{f(\omega, T)}{T} \right) = 2\pi\delta(\omega)$$

¹Существует целая теория адиабатических возмущений. Она включена в задание.

Итак, будем полагать, что время действия возмущения достаточно велико.

$$\begin{aligned} P_{nm}(T) \Big|_{t \gg \frac{1}{\omega_{mn}}} &\simeq \frac{2\pi}{\hbar^2} |V_{mn}|^2 \cdot T \delta(\omega_{mn}) \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} |V_{mn}|^2 T \delta(E_m - E_n) \end{aligned}$$

Поэтому можно ввести вероятность переходов в единицу времени:

$$w_{mn} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{P_{mn}(T)}{T} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{mn}|^2 \delta(E_m - E_n)$$

- Спектр дискретный или непрерывный?
- Нужно найти вероятность перехода во все прочие состояния

$$\left\{ \begin{array}{c} \nearrow \\ n \rightarrow \\ \searrow \end{array} \right\} m$$

•

$$W = \sum_m w_{nm} \rightarrow \int w_{nm} d\nu_m$$

Раньше было дискретное квантовое число m . Теперь в единицу времени происходит какое-то непонятное число переходов (спектр непрерывен?). В непрерывном спектре уровни энергии вырождены. Состояние определяется не только модулем импульса, но и его направлением. В общем случае $dE_m \neq d\nu_m$.

$$d\nu_m = \rho(E_m) dE_m$$

Проинтегрируем по энергии конечных состояний.

$$W_n = \int w_{nm} \rho(E_n) dE_m = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{nn}|^2 \rho(E_n) \Big|_{E_m=E_n}$$

Получили «золотое» правило Ферми (полная вероятность перехода в единицу времени в группу состояний).

Периодическое во времени возмущение

$$V(t) = V^{\pm} e^{\pm i\omega t}$$

Обычно требуется эрмитовость оператора возмущения,

$$\hat{V}(t) = V^{-} e^{-i\omega t} + V^{+} e^{i\omega t} \quad (\omega \rightarrow \pm\omega_{mn})$$

$$C_{nm}^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t V_{mn}^{\pm} e^{\pm i\omega t} e^{i\omega_{mn} t} dt$$

ГЛАВА 9. СИММЕТРИЯ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ И ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ

Аналогичным образом можно получить вероятность переходов в единицу времени.

$$w_{nm}^{\pm} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{mn}^{\pm}|^2 \delta(E_m - E_n \pm \hbar\omega)$$

Если проинтегрировать по энергии конечных состояний, то придём к аналогу правила Ферми

$$2\frac{\pi}{\hbar} |V_{mn}^{\pm}|^2 \rho(E_n \mp \hbar\omega)$$

- Если брать нижний знак, то новая энергия — это старая энергия плюс $\hbar\omega$, то есть система поглощает энергию.

$$\hat{V}^- e^{-i\omega t} \rightarrow E_m = E_n + \hbar\omega$$

- Если брать верхний знак, то описывается *излучение* энергии.

$$\hat{V}^+ e^{+i\omega t} \rightarrow E_m = E_n - \hbar\omega$$

...о месте квантовой механики...

...эйконал...

9.3.4 Переход к уравнениям Гамильтона-Якоби

Перейдём от уравнения Шрёдингера к уравнениям Гамильтона-Якоби.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + U(\vec{r}) \right\} \Psi(\vec{r}, t)$$
$$\Psi(\vec{r}, t) = A \exp(i/\hbar S(\vec{r}, t)) \quad (9.6)$$

Перед тем, как провести вычисления, сделаем несколько замечаний.

Рассмотрим неизвестную функцию $S(\vec{r}, t)$. Она имеет размерность *действия*. Хочется назвать её действием, но пока этого делать нельзя.

Для свободной частицы классическая функция действия имеет вид

$$S(\vec{r}, t) = -E\tau + \vec{p}\vec{r}$$

Эта функция *вещественная*, и строго говоря, функция действия всегда должна быть вещественной. Про уравнения (9.6) такого гарантировать нельзя.

$$\vec{\nabla} \Psi = \left(\frac{i}{\hbar} \vec{\nabla} S \right) \Psi$$
$$i\hbar \left(\frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial t} \right) \Psi = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\left(\frac{i}{\hbar} \vec{\nabla} S \right)^2 + \frac{i}{\hbar} (\vec{\nabla}^2 S) \right) + U(\vec{r}) \right\} \Psi$$
$$\underline{-\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{(\vec{\nabla} S)^2}{2m} + U(\vec{r}) - \frac{i\hbar}{2m} \vec{\nabla}^2 S} \quad (9.7)$$

section: **9.3. НЕСТАЦИОНАРНАЯ ТЕОРИЯ
ВОЗМУЩЕНИЙ. ТЕОРИЯ КВАНТОВЫХ ПЕРЕХОДОВ**

Если бы последнего слагаемого в (9.7) «не было», то мы бы имели уравнение Гамильтона-Якоби. Это слагаемое иногда называют «квантовая поправка», если \hbar устремить к нулю, то оно исчезнет.

Представим ряд миров, в которых постоянная Планка принимает всё меньшие и меньшие значения. Что бы было, если бы постоянная Планка была очень велика? Что бы случилось с нашим миром?

Нужен обходной манёвр, чтобы воспользоваться свойством $\hbar \rightarrow 0$. (Это константа! Константа никогда не стремится к нулю)

- Рассмотрим снова уравнение Шрёдингера, и сгруппируем константы при старшей производной

$$\left\{ \Delta + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(\vec{r})) \right\} \psi(\vec{r}) = 0$$

Потенциальная энергия существенно изменяется на расстояниях порядка a .

$$\frac{\hbar^2}{2mEa^2} \rightarrow 0$$

Это может означать только то, что $E \rightarrow \infty$ ($n \gg 1$)

- **Условие квазиклассичности, применимость квазиклассического приближения.**

Перейти к квазиклассическому приближению можно, если поправка мала.

$$\left| \frac{i\hbar \nabla^2 S}{(\nabla S)^2} \right| \ll 1$$

$$\frac{\hbar |\nabla^2 S|}{(\nabla S)^2} \ll 1$$

В классике импульсу соответствует величина $\nabla S = \vec{p}$. Тогда выполнялось бы

$$\frac{\hbar}{p^2} |\operatorname{div} \vec{p}| \ll 1$$

$$\left| \frac{\hbar}{p^2} \frac{\partial p}{\partial x} \right| \ll 1$$

$$\left| \frac{\hbar}{p^2} \frac{\partial p}{\partial x} \right| = \left| u dx \left(\frac{\hbar}{p} \right) \right|$$

Получаем условия квазиклассического приближения

$$\left| \frac{\partial \lambda_{\text{д.Б.}}}{\partial x} \right|$$

Другими словами, изменение длины волны де-Бройля на расстояниях порядка волны де-Бройля имеет порядок волны де-Бройля.

ГЛАВА 9. СИММЕТРИЯ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ И ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ

- Перейдём к более, чем одномерному пространству.

$$p(x) = \sqrt{2m(E - U(x))}$$

$$\frac{\partial p}{\partial x} = \frac{1}{p} m \left(-\frac{\partial U}{\partial x} \right) = \frac{m}{p} \cdot F$$

$$\left| \frac{\hbar m}{p^2} \frac{\partial U}{\partial x} \right| \ll 1$$

Эти условия плохо работают при малых импульсах (импульс пытается попасть в знаменатель).

Совсем не применима эта теория в классических точках поворота: $p(x) = 0$.

Из этого равенства вытекает также, что нужен плавный ход потенциальной кривой. (Аналогия с геометрической оптикой: плавный ход показателя преломления).

9.4 Это должен быть 5 параграф. Квазиклассический метод ВКБ

(Вентцель, Крамерс, Бриллюэн)

Это изучалось как метод приближённого решения уравнений типа уравнения Шрёдингера с малым параметром при старшей производной.

- Карлини (1817)
- Лиувилль (1837)
- Дебай (1909)
- Релей (1912)
- Джеффрис (1923)
- ВКБ (1926)

Идея этого метода шире, чем просто классическое приближение. Он позволяет не просто решать уравнения Гамильтона-Якоби, а получать квантовые поправки к решению этого уравнения с учётом малости постоянной Планка.

9.4.1 Общий вид решения

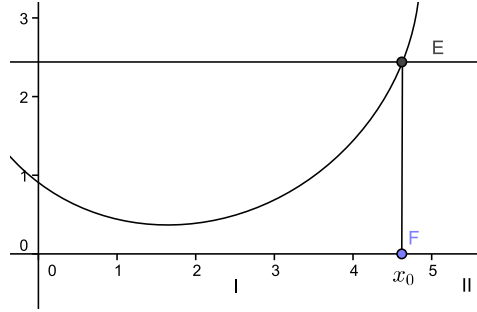
Нужно представить функцию S (решение (9.7)) в виде

$$S(\vec{r}, t) = S_0 + S_1 + S_2 + \dots$$

$\sim \hbar^2$

Метод нахождения поправок является очень общим, потому что приближения можно проводить не только в квазиклассической области ($E > U(x)$), но и в классически запрещённой.

Рассмотрим конкретный вид потенциала, x_0 — классическая точка поворота. Ось x разбивается на области I и II.



$$S(x, t) = -Et + S(x)$$

$$(S')^2 - i\hbar(S'') = 2m(E - U(x)) = p^2(x)$$

$$(S'_0 + S'_1 + \dots)^2 = i\hbar(S''_0 + S''_1 + \dots) = p^2(x)$$

Малый параметр равен $\frac{\hbar}{pa} \sim \frac{1}{p}$

• Область I.

В этой области $E > U(x)$, $p^2(x) > 0$

$$\begin{cases} (S'_0)^2 &= p^2(x), \\ 2S'_0 S'_1 - i\hbar S''_0 &= 0. \end{cases}$$

Из первого уравнения

$$S_0 = \pm \int_x^{x_0} p(x') dx'$$

Из второго

$$\begin{aligned} S'_1 &= \frac{i\hbar S''_0}{2 S'_0} = \frac{i\hbar \mp p'(x)}{2 \pm p(x)} \\ &= \frac{i\hbar}{2} \frac{d(\ln p(x))}{dx} \end{aligned}$$

Отсюда

$$S_1 = \frac{i\hbar}{2} \ln p(x) = i\hbar \ln \sqrt{p(x)}$$

$$\psi_{x < x_0} = A e^{\frac{i}{\hbar} S} \approx \frac{A}{\sqrt{p(x)}} \exp \left(\pm \frac{i}{\hbar} \int_x^{x_0} p(x') dx' \right)$$

• Область II.

В этой области $E < U(x)$, $p^2(x) > 0$.

$$p(x) = \pm i \sqrt{2m(U(x) - E)} = \pm i |p(x)|$$

Если ввести такое обозначение, то дальше решение получается по аналогии

$$\psi_{x > x_0} = A e^{\frac{i}{\hbar} S} \approx \frac{A}{|\sqrt{p(x)}|} \exp \left(\pm \frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x |p(x')| dx' \right)$$

Анализ решения.

В классически разрешённой области имеем осциллирующее решение. Бросается в глаза импульс, стоящий в знаменателе.

$$\begin{cases} \psi_I &= \frac{1}{\sqrt{p}} \{a \sin(z + \gamma_1) + b \cos(z + \gamma_2)\}, & z = \frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} p(x') dx' \\ \psi_{II} &= . \end{cases}$$

Оказывается, что нужно сшивать эти функции в тех точках, где приближение не работает!

9.4.2 Правило квантования Бора-Зоммерфельда

Предположим, что имеется потенциальная яма, удовлетворяющая всем условиям квазиклассического приближения. Если строить решение ВКБ, удовлетворяющее всем условиям, то представляет интерес решение, которое убывает на $\pm\infty$.

При переходе через точки a, b нужно использовать правило номер 1. (см. выше).

$$\psi_{x < b}(x) \approx \frac{a_1}{p} \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_x^b p(x') dx' + \pi/4 \right) = \frac{a_1}{\sqrt{p}} \sin(z_1 + \pi/4)$$

$$\psi_{x > a}(x) \approx \frac{a_2}{p} \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' + \pi/4 \right) = \frac{a_2}{\sqrt{p}} \sin(z_2 + \pi/4)$$

Теперь необходимо поставить достаточно жёсткое условие. Нужно потребовать, чтобы в области $a < x < b$ обе эти функции совпадали во всех точках.

Вспомогательная лемма:

$$z_2 = \frac{1}{\hbar} \int_a^b p(x') dx' - z_1$$

Условие совпадения функций:

$$\frac{a_1}{\sqrt{p}} \sin \left(z_1 + \frac{\pi}{4} \right) = \frac{a_2}{\sqrt{p}} \sin \left(z_2 + \frac{\pi}{4} \right)$$

Подставляем в правое равенство z_2 . Получаем

$$\frac{a_1}{\sqrt{p}} \sin \left(z_1 + \frac{\pi}{4} \right) = \frac{-a_2}{\sqrt{p}} \sin \left(z_1 - \frac{1}{\hbar} \int_a^b p(x') dx' - \frac{\pi}{4} \right)$$

Нужно потребовать совпадения фаз и амплитуд:

$$z_1 + \frac{\pi}{4} = z_1 - \frac{1}{\hbar} \int_a^b p(x') dx' - \frac{\pi}{4} + \pi(n+1),$$
$$a_2 = (-1)^n a_1$$

$$\boxed{\int_a^b p(x) dx = \pi \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right)}$$

Можно записать правило в виде взятия интеграла по полному периоду частицы, от a до b , а затем от b до a

$$\oint p(x) dx = 2\pi \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right),$$

где $p(x) = \sqrt{2m(E - U(x))}$

Замечания.

- Слева стоит адиабатический инвариант. То, что мы рассмотрели, есть не что иное как квантование адиабатических инвариантов. Классическая теорема о том, что адиабатический инвариант плавно изменяется при малом изменении параметра. С точки зрения квантовой механики, система остаётся в том же квантовом состоянии, $n = \text{const}$.
- Смысл величины n . Через него определяются E_n , уровни энергии, которые появляются при квантовании по Бору-Зоммерфельду. С другой стороны, это ещё и число узлов волновой функции. Если стартовать от точки $x = a$, то фаза синуса равна $\pi/4$. При $x = b$ мы получаем $\pi(n + 1/2) = \pi n + \frac{3\pi}{4}$. Другими словами, функция n раз пройдёт через 0.

Это частный случай *осцилляционной теоремы* о том, что номер уровня энергии совпадает с числом узлов.

ГЛАВА 9. СИММЕТРИЯ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ И ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ

- Квазиклассический метод (ВКБ) на самом деле плохо работает при маленьких значениях классического p , и не работает в классических точках поворота. Нужно иметь возможность отойти от этих точек на большое расстояние по сравнению с длиной волны. Нужно, чтобы между точками поворота умещалось большое число длин волн. Напоминаем, что расстояние между узлами как раз имеет порядок длины волны.

$$\lambda(x) = \frac{\hbar}{p(x)}$$

Такое возможно при $n \gg 1$. Квазиклассический случай — это по сути случай больших квантовых чисел.

- Можно ли при $n \gg 1$ выкинуть слагаемое $\frac{1}{2}$? Что мы вообще отбрасываем?

На самом деле отбрасываются слагаемые порядка \hbar^2 , поэтому можно показать, что слагаемое $\frac{1}{2}$ отбросить нельзя.

- Можно взглянуть на интеграл $\oint(\dots)$ с точки зрения фазовой плоскости. У нас имеется две координаты (x, p) . С точки зрения фазовой плоскости это площадь, которая ограничивает состояние с энергией $E < E_n$. Отсюда следует, что осуществляя шаг $E_n \rightarrow E_{n+1}$, площадь увеличивается на $2\pi\hbar$.

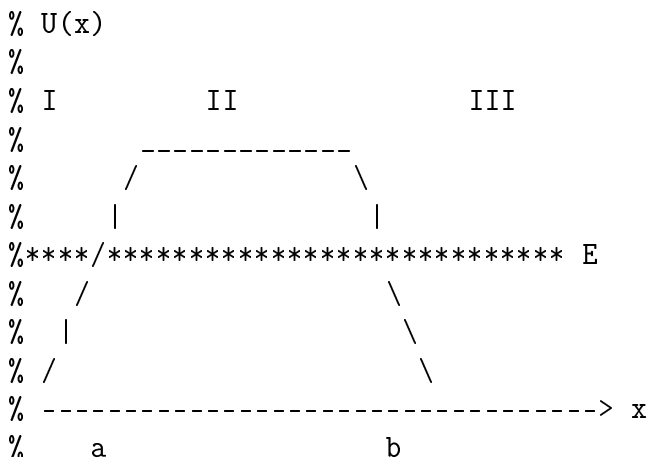
На одно квантовомеханическое состояние в фазовой плоскости приходится клетка площадью $2\pi\hbar$.

Отсюда возникает известная формула статистической физики:

Число квантовых состояний на единицу фазового объёма равно ΔN

$$\Delta N = \frac{\Delta p \Delta x}{2\pi\hbar}$$

9.4.3 Туннельный эффект при прохождении частиц через потенциальный барьер



Из-за плавающего изменения функции барьер должен быть очень широким.

На $+\infty$ будет прошедшая волна, а до барьера — падающая и отражённая.

Выберем функцию, которая будет описывать состояние частицы в области III.

$$\psi_{x>b} \approx \frac{A}{\sqrt{p}} \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_b^x p(x') dx' + \frac{i\pi}{4} \right)$$

Это волна, которая распространяется слева направо.

Найдём плотность тока вероятности

$$j_x = \frac{i\hbar}{2m} (\psi\psi'^* - \psi^*\psi')$$

При дифференцировании нужно дифференцировать только показатель экспоненты (подумайте, почему)².

$$j_x = \frac{i\hbar}{2m} \frac{|A|^2}{p(x)} \left[e^{i(z+\pi/4)} \left(-\frac{ip(x)}{\hbar} \right) e^{-i(z+\pi/4)} - k_1 c_1 \right] = \frac{|A|^2}{m} > 0$$

Действительно получили распространяющуюся волну.

Подходим к точке поворота $x = b$. Нужно применить правило соответствия номер 3.

Согласно этому правилу, в области $x < b$

$$\psi_{x<b} \approx \frac{A}{\sqrt{p}} e^{1/\hbar \int_x^b |p(x')| dx'}$$

Продолжая эту запись, получаем

$$\psi_{x<b} = \frac{A}{\sqrt{p}} \exp \left(\underbrace{\frac{1}{\hbar} \int_a^b |p(x')| dx'}_{\gamma} - \frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' \right)$$

Хотим составить квазиклассическое решение в области I. Для перехода из области III в область I используем правило согласования 1.

$$\psi_{x<a} \approx \frac{2Ae^\gamma}{\sqrt{p}} \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_x^a p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right) = \frac{2Ae^\gamma}{2i\sqrt{p}} \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_x^a p(x') dx' + \frac{i\pi}{4} \right) - \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_x^a p(x') dx' - \frac{i\pi}{4} \right)$$

Первое слагаемое соответствует падающей волне, второе — отражённой.

²Возможно, это как-то связано с порядком нашего приближения

ГЛАВА 9. СИММЕТРИЯ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ И ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ

Чтобы найти коэффициент прохождения по общему правилу, запишем формулу Гамова (1928)

$$D = \frac{|j_x^{pass}|}{j_x^{fall}} = e^{-2\gamma} = e^{-\frac{2}{\hbar} \int_a^b |p(x)| dx}$$

Замечания.

- При таком подходе коэффициент отражения равен 1. Экспоненциально малые поправки в нашем методе отбрасываются.
- Отсюда вытекает парадокс: барьер выступает в роли источника частиц. В рамках ВКБ все рассуждения проведены строго.
- Что происходит, если мы сталкиваемся с нарушением условий применимости метода ВКБ? Тогда нужно выписывать точное решение.

Глава 10

Введение в релятивистскую квантовую механику

10.1 Релятивистские уравнения

10.1.1 Предварительные замечания

Традиционная квантовая механика базируется на уравнении Шрёдингера и теории спиновых частиц Паули. Эта теория не является Лоренц-ковариантной. Принцип относительности требует Лоренц-ковариантности. Уравнение Шрёдингера является нерелятивистским.

В теории Паули спин электрона вводится «руками». В хорошей теории он должен следовать из основ теории. Всё дело в том, что он имеет релятивистскую природу.

Попытаемся обобщить квантовую механику в релятивистском случае и сформулировать её в Лоренц-ковариантном виде.

На пути релятивистского продвижения мы также получим ответ на происхождение спина электрона, и продвинемся в обосновании гипотезы Уленбека и Гаудсмита.

Рассмотрим нашу модель (идеализацию).

- Частицы будем считать точечными. Под точечностью имеется в виду бесструктурность. В случае электронов точечность доказана с точностью до 10^{-18} см. В случае нуклонов, напротив, известно, что частицы имеют структуру в виде кварков. Тем не менее, будем предполагать точечность.
- Частицы будут изолированными. Если рассматривать частицы больших энергий, то могут происходить различные превращения частиц, и непонятно, можно ли выделить и рассмотреть одну частицу. Нужно указывать границы применимости такого подхода.
- Сохранение числа частиц. При больших энергиях ($E \gtrsim mc^2 = 0.5$ МэВ) это совершенно необязательно (могут рождаться электрон-позитронные пары).

ГЛАВА 10. ВВЕДЕНИЕ В РЕЛЯТИВИСТСКУЮ КВАНТОВУЮ МЕХАНИКУ

Процессы, которые описывают рождение и аннигиляцию частиц, мы рассматривать не будем. О квантовой теории поля мы поговорим совсем немного.

Этот подход называется иногда «одночастичное приближение». При этом основные уравнения будут релятивистскими, и энергии будут большими (как же так?).

10.1.2 Общая идея построения релятивистских волновых уравнений

Уравнение Шрёдингера.

Само по себе уравнение изначально является нерелятивистским. Будем $\psi(\dots)$ обозначать нерелятивистскую волновую функцию, а большой буквой $\Psi(\dots)$ — релятивистскую.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r}) \right) \psi(\mathbf{r}, t)$$

Заменим $E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$, $\mathbf{p} \rightarrow -i\hbar \nabla$.

Какому же соотношению между энергией и импульсом отвечает уравнение Шрёдингера?

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U(\mathbf{r})$$

Ясно, что по отношению к преобразованию Лоренца оно не может быть ковариантным. Более того, в релятивистской механике пространство и время равноправны. В квантовой механике это не так!

Заметим, что E, \mathbf{p} являются компонентами 4-вектора импульса.

$$p^\mu = \left\{ \frac{E}{c}; \mathbf{p} \right\}$$

При этом μ, ν, α, \dots обозначают индексы в пространстве Минковского. Латинские индексы будут соответствовать Евклидову пространству.

- 4-вектор $X^\mu = \{ct, \mathbf{r}\}$
- Четырёхмерный градиент:

$$\partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu} = \left\{ \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, \vec{\nabla} \right\}$$

После замены из принципа соответствия, получаем

$$p^\mu = \left\{ \frac{E}{c}, \mathbf{p} \right\} \rightarrow \left\{ \frac{i\hbar}{c} \frac{\partial}{\partial t}, -i\hbar \vec{\nabla} \right\} = i\hbar \delta_\mu$$

Положим в основу нашего будущего уравнения релятивистскую связь.

$$E = \sqrt{c^2 \mathbf{p}^2 + m^2 c^4}$$

- $E^2 = c^2 \mathbf{p}^2 + m^2 c^4$, откуда вытекает уравнение Клейна-Фока-Гордона
- А что если попытаться «извлечь» этот корень?

Эта процедура называется линеаризация радикала.

$$E = c(\hat{\alpha} \mathbf{p}) + \hat{\beta} m c^2$$

Из полученного уравнения вытекает уравнение Дирака.

10.2 Уравнение Клейна-Фока-Гордона

$$\left(-\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \Delta - \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right) \Psi(\mathbf{r}, t) = 0$$

Здесь принято $\frac{mc}{\hbar} = k_0 = \frac{1}{\lambda_{\text{компт}}}$.

10.2.1 Различные способы записи уравнения

Заметим, что в уравнении фигурирует оператор Д'Аламбера.

$$\square = \Delta - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} = -\frac{\partial}{\partial x^\mu} \frac{\partial}{\partial x_\mu} = -\partial_\mu \partial^\mu$$

Уравнение принимает вид:

$$(\square - k_0^2) \Psi = 0$$

Или

$$(\partial_\mu \partial^\mu + k_0^2) \Psi = 0$$

10.2.2 Анализ уравнения

Принцип соответствия требует выполнения релятивистской ковариантности.

$$x^\mu \rightarrow x'^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu$$

$$\square \rightarrow \square' = \square$$

При этом волновая функция преобразовывается как

$$\Psi(x) \rightarrow \Psi'(x) = \Psi(x)$$

Волновая функция должна быть релятивистским скаляром. При преобразованиях Лоренца волновая функция не должна преобразовываться.

- При $k_0 \rightarrow 0$ ($m \rightarrow 0$) получаем уравнение д'Аламбера. При $m \neq 0$ уравнение описывает квантовое поле, состоящее из мезонов.

10.2.3 Сложности в теории Клейна-Фока-Гордона

Мы получим выражение для *плотности вероятности* и для *плотности тока вероятности*.

Мы получили выражение вида

$$(\partial_\mu \partial^\mu + k_0^2)\Psi = 0,$$

где

$$k_0 = \frac{mc}{\hbar} = \lambda_{\text{компт.}}^{-1}.$$

Рассмотрим комплексно сопряжённое данного уравнения:

$$\Psi^*(\partial_\mu \partial^\mu)\Psi - \Psi(\partial_\mu \partial^\mu)\Psi^* = 0$$

Отсюда получаем закон непрерывности

$$\frac{\partial}{\partial x^\mu} j^\mu = 0, \quad j^\mu = \{c\rho, \mathbf{j}\}$$

$$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } \mathbf{j} = 0} \quad (10.1)$$

Можно получить явные выражения для j, ρ :

$$\mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2m} ((\nabla\Psi^*)\Psi - \Psi^*(\nabla\Psi))$$
$$\rho = \frac{\hbar}{2mci} \left(\left(\frac{\partial}{\partial t} \Psi^* \right) \Psi - \Psi^* \left(\frac{\partial}{\partial t} \Psi \right) \right)$$

Проблема заключается в том, что в такой постановке плотность вероятности не является знакоопределённой.

При больших энергиях ($E \gtrsim mc^2$) нельзя отдельно проследить за каждой частицей. Вместо того, чтобы интерпретировать выражение (10.1) как закон сохранения тока, будем интерпретировать его как закон сохранения электрического тока:

$$\rho \rightarrow \rho_e = e\rho, \quad \mathbf{j} \rightarrow \mathbf{j}_e = e\mathbf{j}$$

Когда меняется заряд, число частиц может меняться. По сути это есть теория одного заряда, но не теория одной частицы.

$$\boxed{\frac{\partial \rho_e}{\partial t} + \text{div } \mathbf{j}_e = 0}, \quad \boxed{\int \rho_e d^3\mathbf{x} = Q}$$

Решение с отрицательным знаком энергии. Посмотрим на волновую функцию решения этого уравнения для одной частицы. Для нерелятивистского случая это плоская волна.

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = A \exp \left(-\frac{i}{\hbar} (Et - \mathbf{p}\mathbf{r}) \right)$$

$$(\square - k_0^2)\Psi = 0,$$

откуда

$$E = \pm \sqrt{c^2 \mathbf{p}^2 + m^2 c^4}$$

Знак здесь нельзя отбросить, потому что мы ищем *полное* решение системы.¹

Перед тем, как переходить к уравнению Дирака, проанализируем нерелятивистский предел уравнения Клейна-Фока-Гордона.

10.2.4 Уравнение Клейна-Фока-Гордона для заряженной частицы во внешнем электромагнитном поле

Поле задаётся при помощи четырёхмерного потенциала

$$A^\mu = \{\psi, \mathbf{A}\}$$

Классическая функция Гамильтона имеет вид

$$H_{cl} = \sqrt{c^2 \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + m^2 c^4} + e\varphi$$

Иногда также пишут

$$H_{cl} = \sqrt{c^2 \vec{p}^2 + m^2 c^4} + e\varphi$$

Введём *оператор удлинённого импульса*:

$$\mathcal{P}^\mu \rightarrow \hat{\mathcal{P}}^\mu = \hat{p}^\mu - \frac{e}{c} A^\mu = i\hbar D^\mu,$$

и оператор *удлинённой производной*:

$$D^\mu = \partial^\mu + \frac{ie}{\hbar c} A^\mu$$

Описание частицы во внешнем электромагнитном поле делается заменой импульса на удлинённый, либо производной на удлинённую производную.

$$(D^\mu D_\mu + k_0^2)\Psi = 0$$

Перейдём к нерелятивистскому пределу. Посмотрим, получим ли мы при этом уравнение Шрёдингера или уравнение Паули.

Для начала, рассмотрим стационарный случай:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \psi(\mathbf{r}), \quad \varphi = 0$$

¹Вспомните, откуда взялось это выражение. Мы возвели в квадрат выражение для энергии и воспользовались принципом соответствия. Наличие знака — по сути особенности релятивистских квантовых уравнений.

Подставляя в уравнение, получаем:

$$\left(E^2 - c^2 \hat{\vec{p}}^2 - m^2 c^4 \right) \psi(\mathbf{r}) = 0$$

$$E = mc^2 + \varepsilon, \quad \varepsilon \ll mc^2$$

$$(m^2 c^4 + 2\varepsilon mc^2 - c^2 \hat{\vec{p}}^2 - m^2 c^4) \psi(\mathbf{r}) = 0$$

Отсюда получаем уравнение Шредингера:

$$\left(\varepsilon - \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} \right) \psi = 0$$

Итак, уравнение Клейна-Фока-Гордона, описывает скалярные, или бесспиновые частицы.

10.3 Уравнение Дирака

Уравнение Дирака — это самое главное уравнение физики XX века. Идей, которые мы будем обосновывать, довольно мало, но выводы из этого уравнения сами по себе довольно мощные.

Уравнение описывает любые частицы со спином $\frac{1}{2}$.

Нужно вложить возможность описания частицы с помощью многокомпонентной волновой функции, отдельные компоненты которой при переходе между инерциальными системами отсчёта будут преобразовываться в соответствии с группой Лоренца.

$$\psi(\mathbf{r}, t, s) = \psi_s(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_N \end{pmatrix}, \quad S = 1, \dots, N$$

$$\psi(\mathbf{r}, t, s) = \langle \mathbf{r}, s | \Psi(t) \rangle$$

Это находится в пространстве, являющимся тензорным произведением орбитального и внутреннего (спинового) пространства

$$\mathcal{H}^{orb} \otimes \mathcal{H}^{spin}$$

10.3.1 Идеи, которые могут привести к уравнению Дирака

$$E = \sqrt{c^2 \mathbf{p}^2 + m^2 c^4}$$

Рассматривая \mathbf{p} как оператор, попробуем «извлечь» корень, то есть линеаризовать выражение.

Введём специальные коэффициенты $\hat{\alpha}_i, \hat{\beta}$:

$$E = c \sum_{i=1}^3 \hat{\alpha}_i p_i + \hat{\beta} m c^2$$

По-другому это можно записать в виде

$$E = c(\vec{\hat{\alpha}} \mathbf{p}) + \hat{\beta} m c^2$$

Поймём, каким условиям удовлетворяют эти четыре коэффициента $\{\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2, \hat{\alpha}_3, \hat{\beta}\}$.

$$\begin{aligned} E^2 &= c^2 \mathbf{p}^2 + m^2 c^4 = \left[c \sum_{i=1}^3 \hat{\alpha}_i p_i + \hat{\beta} m c^2 \right] \left[c \sum_{i=1}^3 \hat{\alpha}_i p_i + \hat{\beta} m c^2 \right] \\ &= c^2 \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \frac{\hat{\alpha}_i \hat{\alpha}_j + \hat{\alpha}_j \hat{\alpha}_i}{2} p_i p_j + m c^3 \sum_{i=1}^3 (\hat{\alpha}_i \hat{\beta} + \hat{\beta} \hat{\alpha}_i) p_i + \hat{\beta}^2 m^2 c^4 \end{aligned}$$

Отсюда видно, какие (антикоммутиационные) соотношения нужно наложить на операторы:

$$\{\hat{\alpha}_i, \hat{\alpha}_j\} = \hat{\alpha}_i \hat{\alpha}_j + \hat{\alpha}_j \hat{\alpha}_i = 2\delta_{ij} \hat{1}$$

$$\{\hat{\alpha}_i, \hat{\beta}\} = \hat{\alpha}_i \hat{\beta} + \hat{\beta} \hat{\alpha}_i = 0$$

$$\hat{\beta}^2 = \hat{1}$$

Эти соотношения, по сути, и определяют эти объекты. Можно считать их матрицами, тогда получаем матричные уравнения. Есть также подход Зоммерфельда².

Итак, получили уравнение Дирака в Гамильтоновой форме:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \hat{H}_D \Psi(\mathbf{r}, t), \quad \hat{H}_D = c(\vec{\hat{\alpha}} \mathbf{p}) + \hat{\beta} m c^2$$

где \hat{H}_D — Дираковский гамильтониан.

$$\hat{\alpha}_i^+ = \hat{\alpha}_i, \quad \hat{\beta}^+ = \hat{\beta}$$

10.3.2 Пространство спиновых переменных

Вопрос. Какие операторы действуют в этом пространстве?

Ответ. Любые комбинации векторов $\hat{\alpha}_i, \hat{\beta}$, и только они. Формально говоря, это пространство должно быть неприводимо по отношению к набору операторов $\hat{\alpha}_i, \hat{\beta}$. Это должно быть пространство минимальной размерности, не содержащее внутри себя нетривиальных инвариантных подпространств.

²Зоммерфельд. Теория атомов и спектры.

ГЛАВА 10. ВВЕДЕНИЕ В РЕЛЯТИВИСТСКУЮ КВАНТОВУЮ МЕХАНИКУ

В теории Паули (нерелятивистской) пространство \mathcal{H}^{spin} было неприводимо по отношению к набору матриц Паули.

$$\hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j = \delta_{ij} \hat{1} + ie_{ijk} \hat{\sigma}_k$$

В самом деле, спиновое пространство в теории Паули натягивается на базис из собственных векторов $\chi_{\pm 1/2}$, или, в матричном виде, $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$.

По самому построению в нём нет нетривиальных инвариантных подпространств.

В теории Дирака. Используя алгебраические выражения для этих операторов, можно построить ровно два набора матриц, которые будут подчиняться тем же самым алгебраическим соотношениям, что и матрицы Паули.

$$\begin{aligned}\hat{\Sigma}_1 &= -i\hat{\alpha}_2\hat{\alpha}_3 \\ \hat{\Sigma}_2 &= -i\hat{\alpha}_3\hat{\alpha}_1 \\ \hat{\Sigma}_3 &= -i\hat{\alpha}_1\hat{\alpha}_2 \\ \hat{p}_1 &= \hat{\Sigma}_3\hat{\alpha}_3 \\ \hat{p}_2 &= -\hat{\beta}\hat{\alpha}_1\hat{\alpha}_2\hat{\alpha}_3s \\ \hat{p}_3 &= \hat{\beta}\end{aligned}$$

При этом выполняются следующие коммутационные соотношения

$$\begin{aligned}\hat{\Sigma}_i \hat{\Sigma}_j &= \delta_{ij} \hat{1} + ie_{ijk} \hat{\Sigma}_k \\ \hat{p}_i \hat{p}_j &= \delta_{ij} \hat{1} + ie_{ijk} \hat{p}_k \\ [\hat{\Sigma}_i, \hat{p}_j] &= 0\end{aligned}$$

Искомое пространство \mathcal{H}^{spin} можно искать в виде $\mathcal{H}^{(\Sigma)} \otimes \mathcal{H}^{(p)}$.

1. Пространство, неприводимое по отношению к набору Σ . Его можно построить таким же образом, как спиновое пространство Паули. Минимальная размерность такого пространства равна двум.
2. Пространство $\mathcal{H}^{(p)}$ строится аналогично.

Размерность такого тензорного произведения равна $2 \times 2 = 4$.

Если считать операторы матрицами, то это будут квадратные матрицы 4 порядка. Называются такие спиноры *дираковскими спинорами*, или *ди-спинорами*.

Получим явный вид этих матриц в стандартном (дираковском) представлении.

$$\begin{aligned}\hat{\Sigma}_i &= \hat{1} \otimes \hat{\sigma}_i = \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_i & 0 \\ 0 & \hat{\sigma}_i \end{pmatrix} \\ \hat{p}_i &= \hat{\sigma}_i \otimes \hat{1}, \quad \hat{p}_1 = \begin{pmatrix} 0 & \hat{1} \\ \hat{1} & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{p}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i\hat{1} \\ i\hat{1} & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{p}_3 = \hat{\beta} = \begin{pmatrix} \hat{1} & 0 \\ 0 & -\hat{1} \end{pmatrix}\end{aligned}$$

Не у всех из этих матриц есть физический смысл.

10.3.3 Уравнение Дирака для заряженной частицы во внешнем электромагнитном поле

Вводится удлинённый импульс и удлинённая производная (см. выше)

$$A^\mu = \{\varphi, \mathbf{A}\}$$

$$\begin{cases} \hat{p}^\mu & \rightarrow \hat{\mathcal{P}}^\mu - \frac{e}{c}A^\mu, \\ \partial^\mu & \rightarrow D^\mu = \partial^\mu + \frac{ie}{\hbar c}A^\mu \end{cases}$$

Четырёхмерность пространства-времени никак не связана с четырёхмерностью Диракова пространства.

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}, \quad \Psi^+ = (\psi_1^* \psi_2^* \psi_3^* \psi_4^*)$$

Уравнение Дирака:

$$\left\{ \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\varphi \right) - c(\hat{\vec{\alpha}}\hat{\vec{\mathcal{P}}}) - \hat{\beta}mc^2 \right\} \Psi = 0$$

После подстановки получаем:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi - e\varphi \Psi + i\hbar c(\hat{\vec{\alpha}}\hat{\vec{\nabla}})\Psi + e(\hat{\vec{\alpha}}\mathbf{A})\Psi - \hat{\beta}mc^2 \Psi = 0$$

Эрмитово сопрягаем данное уравнение (предполагая, что все операторы имеют матричный вид)

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi^+ - e\varphi \Psi^+ + i\hbar c \left((\hat{\vec{\nabla}}\Psi^+) \hat{\vec{\alpha}} \right) + e\Psi^+ (\hat{\vec{\alpha}}\mathbf{A}) - \Psi^+ mc^2 \hat{\beta} = 0$$

После сокращения получаем:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\Psi^+ \Psi) + i\hbar c \left(\Psi^+ (\hat{\vec{\alpha}}\hat{\vec{\nabla}})\Psi + (\hat{\vec{\nabla}}\Psi^+) \hat{\vec{\alpha}} \Psi \right) = 0$$

Отсюда вытекает уравнение непрерывности

$$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } \mathbf{j} = 0, \quad \rho = \Psi^+ \Psi \succeq 0, \quad \mathbf{j} = c\Psi^+ \hat{\vec{\alpha}} \Psi}$$

10.3.4 Ковариантная форма записи уравнения Дирака

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - c(\hat{\vec{\alpha}}\hat{\vec{\beta}}) - \hat{\beta}mc^2 \right) \Psi(\mathbf{r}, t) = 0$$

Нужно показать, что время и координаты входят в уравнения на «равных правах».

Введём ещё один оператор γ .

$$\begin{cases} \gamma^0 = \gamma_0 & = \hat{\beta}, \\ \gamma^i = -\gamma_i & = \hat{\beta}\hat{\alpha}_i. \end{cases}$$

ГЛАВА 10. ВВЕДЕНИЕ В РЕЛЯТИВИСТСКУЮ КВАНТОВУЮ МЕХАНИКУ

Принимая эти обозначения, мы увидим, что уравнение Дирака переписывается в очень лаконичном виде.

$$\gamma^\mu = g^{\mu\nu} \gamma_\nu$$

$$g^{\mu\nu} = g_{\mu\nu} = \text{diag}(+ \ - \ - \ -)$$

$$\left(i\hbar \gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} - mc \right) \Psi(\mathbf{r}, t) = 0$$

Можно придумать ещё много обозначений

$$\gamma^\mu \partial_\mu = \hat{\partial} = \not{\partial},$$

и уравнение Дирака переписывается в виде

$$(i\hat{\partial} - m)\Psi = 0$$

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = \gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2g^{\mu\nu} \hat{1}$$

10.4 Релятивистская ковариантность в уравнении Дирака

Чтобы анализировать релятивистски-ковариантный смысл уравнения Дирака, запишем его в виде

$$\left[i\hbar \left(\gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} \right) - mc \right] \Psi(\mathbf{r}, t) = 0,$$

где

$$\gamma^0 = \gamma_0 = \hat{\beta} = \begin{pmatrix} \hat{1} & 0 \\ 0 & -\hat{1} \end{pmatrix}, \quad \gamma^i = -\gamma_i = \hat{\beta} \hat{\alpha}_i = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}_i \\ -\hat{\sigma}_i & 0 \end{pmatrix}$$

Такой вид выбирается по той причине, что производные по времени и координате входят в это уравнение симметрично.

Нужно найти преобразование

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi(x^\mu) = \Psi(\mathbf{x})$$

при переходе от одной системы отсчёта к другой

10.4.1 Краткий обзор группы Лоренца

Предположим, что имеются два наблюдателя, каждый из которых связан с некоторой инерциальной системой отсчёта. *События* при этом имеют для них разные координаты.

- Матрица преобразования Лоренца

$$x^\mu \rightarrow x^{i\mu} = \Lambda_\nu^\mu x^\nu$$

• **Классификация преобразований Лоренца.**

Как известно искущённому читателю, интервал в теории поля имеет вид

$$ds^2 = dx_\mu dx^\mu = g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu,$$

где $g_{\mu\nu}$ — метрический тензор.

Какие условия должны накладываться на матрицу преобразований Лоренца?

$$dx'^\sigma dx'_\sigma = \Lambda^{\sigma\mu} \Lambda_{\sigma\nu} dx_\mu dx^\nu = \delta_\nu^\mu dx_\mu dx^\nu$$

Отсюда следует, что матрица должна обладать свойством

$$\Lambda^{\sigma\mu} \Lambda_{\sigma\nu} = \delta_\nu^\mu$$

Свёртывая по индексам μ, ν , получаем

$$(\det \Lambda)^2 = 1$$

Значит, преобразования можно классифицировать на 2 типа:

$$\begin{array}{l} \nearrow \\ \searrow \end{array} \left[\begin{array}{l} \det \Lambda = 1, \\ \det \Lambda = -1. \end{array} \right.$$

В первом случае это *собственные преобразования Лоренца*.

Во втором случае это дискретные преобразования типа симметрии плоскости, которые не сводятся к непрерывным движениям.

Будем рассматривать только собственные преобразования Лоренца.

• **Конкретные примеры матриц преобразований.**

Собственные преобразования Лоренца включают тождественные преобразования. Можно рассмотреть инфинитезимальные преобразования. На основе их и единичного (тождественного) можно построить любое непрерывное преобразование.

Пусть верно «приближение»

$$\Lambda_\nu^\mu \simeq \delta_\nu^\mu + \lambda_\nu^\mu \delta\varphi,$$

где λ_ν^μ — генератор однопараметрической подгруппы преобразования Лоренца.

Свойства.

- Антисимметрия. $\lambda_{\mu\nu} = -\lambda_{\nu\mu}$. Это свойство непосредственно следует из определения, данного выше.
- Если вернуться к первой части курса, перед генератором был множитель i . Это связано с тем, что в группе Лоренца не все генераторы эрмитовы.

Построим генераторы для **буста** и для **поворота**.

Пусть $\gamma = (1 - \beta^2)^{-1/2}$ — это релятивистский фактор, $\beta = \frac{v}{c}$.

1. Буст вдоль оси Ox .

$$\begin{cases} x^{10} &= \gamma(x^0 - \beta x^1), \\ x^{11} &= \gamma(x^1 - \beta x^0), \\ x^{12} &= x^2, \\ x^{13} &= x^3. \end{cases}$$

Такой вид не очень приятен, так как нужна каноническая параметризация с аддитивным параметром. Для этого делают замену ($\tilde{\varphi}$ иногда называют «быстрота»)

$$\beta = \text{th } \tilde{\varphi}$$

$$\begin{cases} x^{10} &= x^0 \text{sh } \tilde{\varphi} - x^1 \text{ch } \tilde{\varphi}, \\ x^{11} &= -x^0 \text{ch } \tilde{\varphi} + x^1 \text{sh } \tilde{\varphi}, \\ x^{12} &= x^2, \\ x^{13} &= x^3. \end{cases}$$

$$\Lambda_{\nu}^{\mu} = \begin{bmatrix} \text{sh } \tilde{\varphi} & -\text{ch } \tilde{\varphi} & 0 & 0 \\ -\text{ch } \tilde{\varphi} & \text{sh } \tilde{\varphi} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Генератор преобразования (при дифференцировании матрицы по $\tilde{\varphi}$):

$$\lambda_{(x^0 x^1)}^{\mu} = \frac{\partial}{\partial \tilde{\varphi}} \Lambda_{\nu}^{\mu} \Big|_{\tilde{\varphi}=0} = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

2. Поворот вокруг оси O_z .

$$\lambda_{x^1 x^2}^{\mu} = \frac{\partial}{\partial \varphi} \Lambda_{\nu}^{\mu}(\varphi) \Big|_{\varphi=0} = \frac{\partial}{\partial \varphi} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \varphi & \sin \varphi & 0 \\ 0 & -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \Big|_{\varphi=0} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

3. В этой группе можно выделить 6 параметрических подгрупп (3 поворота и 3 буста). Любое преобразование строится как комбинация бесконечно малых.

10.4.2 Доказательство релятивистской ковариантности уравнения Дирака

Уравнение Дирака в системе s :

$$\left(i\hbar \left(\gamma^{\mu} \frac{\partial}{\partial x^{\mu}} - mc \right) \Psi(x) = 0 \right)$$

Хотим найти волновую функцию, соответствующую этому состоянию, в системе s' .

$$\Psi(x) \rightarrow \Psi'(x')$$

В системе s' уравнение Дирака должно сохранять свой вид. В этом и заключается ковариантность уравнений.

$$\left(i\hbar \left(\gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x'^\mu} - mc \right) \Psi'(x') = 0 \right)$$

- В первой половине указывалось, что при поворотах матрицы Паули не преобразуются. Сейчас мы примем, что матрицы γ^i не преобразуются при переходе в другую систему координат.
- Операторы действуют в пространстве волновых функций. Говоря точнее, в пространстве внутренних переменных Дираковской частицы.
- Будем считать, что и преобразование волновой функции тоже линейно.

$$\Psi'(x') = S(\Lambda)\Psi(x)$$

Операторы преобразования волновой функции будут реализовывать некоторое представление группы Лоренца.

- Должно быть обратное преобразование.

$$\Psi(x) = S^{-1}(\Lambda)\Psi'(x')$$

- Умножаем обратное преобразование таким образом:

$$\left(i\hbar S(\Lambda) \left(\gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} \right) S^{-1}(\Lambda) - mc \right) \underbrace{S(\Lambda)\Psi(x)}_{\Psi'(x')} = 0 \quad (10.2)$$

Как преобразовывается четырёхмерный градиент:

$$\frac{\partial}{\partial x^\mu} = \frac{\partial}{\partial x'^\nu} \frac{\partial x'^\nu}{\partial x^\mu} = \Lambda^\nu_\mu \frac{\partial}{\partial x'^\nu}, \quad x'^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu$$

Таким образом, (10.2) преобразовывается как

$$\left(i\hbar S(\Lambda) \left(\gamma^\mu \Lambda^\nu_\mu \frac{\partial}{\partial x'^\nu} \right) S^{-1}(\Lambda) - mc \right) \Psi'(x') = 0$$

$$S(\Lambda) \Lambda^\nu_\mu \gamma^\mu S^{-1}(\Lambda) = \gamma^\nu$$

Уравнение, определяющее оператор $S(\Lambda)$

$$\boxed{S^{-1}(\Lambda) \gamma^\mu S(\Lambda) = \Lambda^\mu_\nu \gamma^\nu}$$

ГЛАВА 10. ВВЕДЕНИЕ В РЕЛЯТИВИСТСКУЮ КВАНТОВУЮ МЕХАНИКУ

- Напомним, что мы рассматриваем только случай $\det \Lambda = 1$. Ограничимся только бесконечно малыми преобразованиями, потому что любое другое можно через них выразить.

Для пространства Минковского

$$\Lambda_{\nu}^{\mu} \simeq \delta_{\nu}^{\mu} + \lambda_{\nu}^{\mu} \delta \varphi,$$

где

$$\hat{\Lambda} \simeq \hat{1} + \hat{\lambda} \delta \varphi$$

При этом оператор S действует следующим образом:

$$S(\hat{1} + \hat{\lambda} \delta \varphi) \simeq \hat{1} + \hat{T} \delta \varphi$$

$$S^{-1}(\hat{1} + \hat{\lambda} \delta \varphi) \simeq \hat{1} - \hat{T} \delta \varphi$$

Подставляя в соотношение, связывающее S и обратную матрицу S^{-1} (См. пособие Тернова), получаем выражение для оператора \hat{T} :

$$\hat{T} = \frac{1}{8} \lambda^{\mu\nu} (\gamma_{\mu} \gamma_{\nu} - \gamma_{\nu} \gamma_{\mu}) = \frac{-i}{4} \lambda^{\mu\nu} \sigma_{\mu\nu},$$

где $\sigma_{\mu\nu} = \frac{i}{2} [\gamma_{\mu}, \gamma_{\nu}]$.

Различных матриц σ есть всего 6.

$$\hat{\sigma}_{i0} = -\hat{\sigma}_{0i} = i\hat{\alpha}_i, \quad \hat{\sigma}_{ij} = e_{ijk} \hat{\Sigma}_k$$

- В качестве конкретных случаев рассмотрим буст и поворот в пространстве Минковского. Какие операторы будут действовать на волновые функции при поворотах и бустах?

Пользуемся соотношениями

$$\boxed{\lambda_{(x^0 x^1)}^{01} = -\lambda_{(x^0 x^1)}^{10} = +1}, \quad \boxed{\lambda_{(x^1 x^2)}^{12} = -\lambda_{(x^1 x^2)}^{21} = -1}$$

$$\boxed{\hat{T}_{(x^0 x^1)} = \frac{i}{2} \hat{\sigma}_{10} = -\frac{1}{2} \hat{\alpha}_1}$$

Воспользуемся теоремой Ли. Согласно ей,

$$S_{(x^0 x^1)}(\tilde{\varphi}) = e^{-\frac{1}{2} \hat{\alpha}_1 \tilde{\varphi}} = \text{ch} \frac{\tilde{\varphi}}{2} - \hat{\alpha}_1 \text{sh} \frac{\tilde{\varphi}}{2}$$

Видно, что преобразование не является унитарным.

- Подставляем поворот вокруг оси Oz .

$$\lambda^{12} = -\lambda^{21} = -1$$

$$\hat{T}_{(x^1 x^2)} = \frac{i}{2} \hat{\sigma}_{12} = \frac{i}{2} \hat{\sigma}_3$$

Это оператор бесконечно малого поворота.

$$S_{(x^1 x^2)}(\varphi) = e^{\frac{i}{2} \hat{\Sigma}_3 \varphi} = \cos \frac{\varphi}{2} + i \hat{\sigma}_3 \sin \frac{\varphi}{2}$$

Представление реализовано в пространстве внутренних переменных.

Чуть позже мы выясним, что это *спинорное представление*. Волновая функция будет преобразовываться так же, как и частица со спином $\frac{1}{2}$.

10.4.3 Выводы и замечания

Спин частиц Дирака

Спин определяется трансформационными свойствами внутренних переменных по отношению к трёхмерным вращениям.

Теория Паули	Теория Дирака
$\frac{i}{2}\hat{\sigma}_z$	$\frac{i}{2}\hat{\Sigma}_3$
$\exp(\frac{i}{2}\hat{\sigma}_z\varphi)$	$\exp(\frac{i}{2}\hat{\sigma}_z\varphi)$
$\hat{\mathbf{S}} = \frac{\hbar}{2}\hat{\vec{\sigma}}$	$\hat{\mathbf{S}} = \frac{\hbar}{2}\hat{\vec{\sigma}}$

Спин, определённый таким образом, не коммутирует с гамильтонианом и не обладает ковариантными свойствами.³

Некоторые общие свойства матриц преобразований $S(\Lambda)$

При рассмотрении группы вращений общим свойством была унитарность. Здесь же такого не наблюдается.

- Для поворотов унитарность есть:

$$S_{(x^1x^2)}^+ = S_{(x^1x^2)}^{-1}$$

- Для бустов нет унитарности
- Общее свойство (без доказательства)

$$\boxed{\gamma^0 S^+(\Lambda) \gamma^0 = S^{-1}(\Lambda)}$$

10.4.4 Ковариантность уравнения непрерывности

$$\Psi(x) \xrightarrow{\Lambda} \Psi'(x') = S(\Lambda)\Psi(x)$$

$$\Psi^+(x) \xrightarrow{\Lambda} \Psi^{+'}(x') = \Psi^+(x)S^+(\Lambda)$$

Определение.

Дираковски сопряжённый спинор:

$$\bar{\Psi}(x) = \Psi^+(x)\gamma^0$$

$$\bar{\Psi}(x) \xrightarrow{\Lambda} \bar{\Psi}'(x') = \bar{\Psi}(x)S^{-1}(\Lambda)$$

³О построении ковариантного спина см. в пособии Тернова

Обозначим j^μ четырёхмерный вектор плотности вероятности (тока).

$$j^\mu = \{c\rho, \mathbf{j}\} = \{c\Psi^+\Psi, c\Psi^+\hat{\alpha}\Psi\}, \quad j^\mu = c\Psi^+(x)\gamma^0\gamma^\mu\Psi(x) = \bar{\Psi}(x)\gamma^\mu\Psi(x)$$

$$\begin{aligned} j'^\mu &= c\bar{\psi}'(x')\gamma^\mu\Psi'(x') \\ &= c\bar{\Psi}(x)S^{-1}(x)\gamma^\mu S(\Lambda)\Psi(x) \\ &= \Lambda_\nu^\mu c\bar{\Psi}(x)\gamma^\nu\Psi(x) \\ &= \Lambda_\nu^\mu j^\nu \end{aligned}$$

Действительно, данная величина при преобразованиях ведёт себя как четырёхмерный вектор.

Заключение. Ковариантные свойства уравнение Дирака довольно богаты.

Отдельно хотелось бы заметить, что если перемножить всевозможными способами γ -матрицы, то получится 16 всевозможных матриц. Эти матрицы образуют *алгебру Клиффорда*. Если хотим эти матрицы изображать в виде квадратных, то наименьшая размерность равна 4. Число компонент волновой функции тоже должно быть равно 4.

10.5 Операторы физических величин в теории Дирака

10.5.1 Операторы преобразования волновых функций

Нам понадобятся выражения для следующих операторов.

- Преобразования Лоренца
- Трёхмерные вращения
- Пространственно-временные трансляции
- Отражения координатных осей

Нужно рассмотреть операторы, которые действуют во всём пространстве

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(orb)} \otimes \mathcal{H}^{(spin)}$$

Если оператор \hat{T} определён в таком пространстве

$$\Psi(x) \rightarrow \Psi'(x) = \hat{T}\Psi(x),$$

то он однозначно представляется в виде

$$\hat{T} = \hat{T}^{(orb)} \otimes \hat{T}^{(spin)}$$

Замечание. Выше мы рассматривали преобразования вида

$$\Psi(x) \xrightarrow{\Lambda} \Psi'(x') = S(\Lambda)\Psi(x)$$

Эти преобразования производились при помощи матрицы 4×4 (явно её компоненты мы не выписывали)

С другой стороны,

$$S(\Lambda)\Psi(x) = S(\Lambda)\Psi(\Lambda^{-1}x')$$

Поэтому для преобразований Лоренца действие оператора задаётся по формуле

$$\Psi(x) \rightarrow \Psi(x) = S(\Lambda)\Psi(\Lambda^{-1}x)$$

Уравнения Дирака должны сохранять свой вид.

$$\hat{D}\Psi(x) = 0, \quad \hat{D} = i\hbar \left(\gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} \right) - mc$$

$$\underbrace{\hat{T}\hat{D}\hat{T}^{-1}}_{\hat{D}} \underbrace{\hat{T}\Psi(x)}_{\Psi'(x)} = 0$$

Отсюда возникает условие перестановочности с оператором преобразования волновой функции:

$$\hat{T}\hat{D}\hat{T}^{-1} = \hat{D}$$

$$\boxed{[\hat{D}, \hat{T}] = 0}$$

- **Трансляции.** С точки зрения пространства Минковского:

$$\hat{T}^{(spin)} = x^\mu \rightarrow x'^\mu = x^\mu - a^\mu$$

$$\Psi'(x) = \hat{T}_a \Psi(x) = \Psi(\hat{T}_a^{-1}x) = \Psi(x^\mu + a^\mu)$$

Это рассматривалось в прошлом семестре. Нужно провести разложение в ряд Тейлора при малом a . Отсюда получится выражение для инфинитезимальных операторов и генераторов группы Ли.

$$\boxed{\hat{p}^\mu = i\hbar \partial^\mu} \quad \boxed{E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}} \quad \boxed{\mathbf{p} \rightarrow -i\hbar \nabla}$$

- **Трёхмерные вращения.** Соответствующий оператор будет действовать в обоих пространствах:

$$\Psi(x) \rightarrow \Psi'(x) = \hat{R}(\varphi)\Psi(x) = S(\vec{\varphi})\Psi(\hat{T}^{-1}(\vec{\varphi})\mathbf{r})$$

Необходимо рассмотреть, что представляют из себя операторы бесконечно малых поворотов.

Ещё раз обратимся к соответствующей главе лекций, в которых получались аналогичные результаты.

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} \otimes \hat{1} + \hat{1} \otimes \hat{\mathbf{S}}$$

где

$$\hat{\mathbf{L}} = [\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}], \quad \hat{\mathbf{S}} = \frac{\hbar}{2} \hat{\Sigma}$$

Полный момент есть сумма орбитального и спинowego. Орбитальный момент затрагивает только аргумент, спиновый оператор действует в пространстве спиновых переменных.

10.5.2 Интегралы движения в теории Дирака

Среди всех преобразований четырёхмерных координат есть такие, которые затрагивают время.

Если рассматривать только операторы, которые не затрагивают время (пространственные трансляции, трёхмерные вращения и отражения), то операторы этих преобразований коммутируют с $\gamma^0 = \hat{\beta}$.

Например, $[\hat{\sigma}, \hat{\beta}] = 0$, так как операторы действуют в разных пространствах.

Можно переформулировать требования инвариантности нашей теории на языке законов сохранения. Первое требование:

$$[\hat{D}, \hat{T}] = 0.$$

С другой стороны, оператор Дирака можно переписать в виде

$$\hat{D} = \frac{\gamma^0}{c} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}_D \right) = i\hbar \left(\gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} \right) - mc$$

$$[\hat{D}, \hat{T}] = 0 \rightarrow [\hat{H}_D, \hat{T}] = 0$$

Операторы бесконечно малых преобразований были интегралами движения.

Отсюда можно указать, какие операторы будут являться интегралами движения для свободной частицы (и коммутировать с гамильтонианом Дирака).

$$\hat{\mathbf{p}}, \quad \hat{\mathbf{J}}, \quad \hat{\mathcal{P}}$$

Последний оператор означает «чётность».

10.5.3 Сложность интерпретации операторов в теории Дирака

Уравнение Дирака в дальнейшем будем записывать в Гамильтоновой (а не в ковариантной) форме:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \hat{H}_D \Psi(\mathbf{r}, t) = \left(c(\hat{\boldsymbol{\alpha}}, \hat{\mathbf{p}}) + \hat{\beta} mc^2 \right) \Psi$$

Вероятностная интерпретация, постулат средних значений и другие свойства, полученные при изучении нерелятивистской квантовой механики, сохраняются.

Интегралы движения, которые имеют очевидную интерпретацию:

$$\hat{\mathbf{p}}, \quad \hat{\mathbf{J}}, \quad \hat{\mathcal{P}}, \quad \hat{H}_D$$

Вопрос. Как интерпретировать оператор $\hat{\mathbf{L}}$? Он не является интегралом движения дираковских частиц.

Вопрос. Аналогично для оператора $\hat{\mathbf{S}}$.

Спин не является полностью кинематическим свойством, он связан с движением частицы. То, что эти операторы не коммутируют *porozнь* есть именно свойство релятивистского движения.

Общая причина связана с особым движением дираковского электрона. Есть интерференция состояний с разными знаками уровня энергии.

При решении свободного уравнения Дирака получаем

$$E^2 = c^2 \mathbf{p}^2 + m^2 c^4,$$

откуда

$$E = \pm \sqrt{c^2 \mathbf{p}^2 + m^2 c^4}$$

10.5.4 Оператор скорости Дираковской частицы

Необходимо перейти в представление Гейзенберга, и найти этот оператор по определению.

$$\begin{aligned} \hat{v}_x &= \frac{d\hat{x}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_D, \hat{x}] \\ &= \frac{ic}{\hbar} [(\hat{\alpha}\hat{\mathbf{p}}), \hat{x}] \\ &= \frac{ic}{\hbar} \hat{\alpha}_x \underbrace{[\hat{p}_x, \hat{x}]}_{-i\hbar} = c\hat{\alpha}_x \end{aligned}$$

Это довольно странный результат. Принцип соответствия говорит, что матрица α_x соответствует оператору скорости.

Собственные значения матрицы α_x равны ± 1 , поэтому значение любой скорости равно $\pm c$.

Если есть три компоненты, то модуль скорости равнялся бы $c\sqrt{3}$. Кроме того, матрицы не коммутируют, значит даже две компоненты скорости измерить нельзя.

Происходит «расщепление» понятий скорости и импульса. В нерелятивистской теории Шрёдингера такая связь присутствовала: $\hat{v}_x = \hat{p}_x/m$.

Вывод. Принцип соответствия не работает в полной мере. Это связано с интерференцией состояний с разными знаками энергии.

Чтобы объяснить, что это за явление, покажем, что эта интерференция из себя представляет.

Представим решение в виде волнового пакета из двух плоских волн:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = A_1 e^{-i\Omega t} \psi(+) + A_2 e^{i\Omega t} \psi(-)$$

$$\Omega = \frac{|E|}{\hbar}$$

При помощи такой функции вычислим несколько средних. Система функций гамильтониана полна и ортонормирована, и в ней присутствуют состояния с разными знаками энергии.

Подчеркнём, что волновые функции состояний с разными знаками энергии ортогональны.

• Вероятность.

$$\int d^3x \Psi^+ \Psi = \int d^3x \left(|A_1|^2 \psi^+(+) \psi(+) + |A_2|^2 \psi^+(-) \psi(-) \right) = 1$$

- Плотность вероятности.

$$\begin{aligned}
 \mathbf{j} &= c \int d^3x \Psi^\dagger \hat{\boldsymbol{\alpha}} \Psi \\
 &= \int d^3x \left(|A_1|^2 \psi^+(+) \hat{\boldsymbol{\alpha}} \psi(+) \right. \\
 &\quad + |A_2|^2 \psi^+(-) \hat{\boldsymbol{\alpha}} \psi(-) \\
 &\quad + A_1^* A_2 \psi^+(+) \hat{\boldsymbol{\alpha}} \psi(-) e^{2i\Omega t} \\
 &\quad \left. + A_1 A_2^* \psi^+(-) \hat{\boldsymbol{\alpha}} \psi(+) e^{-2i\Omega t} \right)
 \end{aligned}$$

Последние два слагаемых имеют осциллирующий характер. (Zitterbewegung⁴)

- $\Omega \sim 1.6 \cdot 10^{21} \text{с}^{-1}$

10.5.5 Операторы с дефинитной чётностью

Если мы допускаем интерференцию состояний, то мы отходим от одночастичного описания модели.

Для простоты объяснения сути явления перейдём к модели, которая имеет ряд изъянов.

Представим, что в вакууме движется релятивистский электрон. Его путь можно рассматривать как последовательность отрезков пути, причём в стыках отрезков происходит аннигиляция виртуальной электрон-позитронной пары. Затем из вакуума снова происходит рождение, и так далее. В результате направление движения постоянно хаотично изменяется, причём на некоторых отрезках электрона вообще нет.

Виртуальность обозначает лишь то, что эти пары живут в течение времени, не большее, чем

$$\Delta t \gtrsim \frac{\hbar}{\Delta E} \simeq \frac{\hbar}{mc^2}$$

Даже если электрон двигается со скоростью света, он отодвигается лишь на небольшое конечное расстояние

$$c\Delta t \sim \frac{\hbar}{mc} = \bar{\lambda}_{\text{компт.}} \simeq 3.9 \cdot 10^{-11} \text{см}$$

Это комптоновская длина волны электрона. Такое явление не имеет интерпретации в смысле одночастичной теории.

Если выйти за пределы «трубки» с характерным радиусом $\frac{\hbar}{mc}$ на довольно большое расстояние, то эффекты рождения электрон-позитронных пар будут пренебрежимы. Электрон имеет флуктуацию координаты.

⁴ «Дрожащее» движение.

Нужно получить простую физическую одночастичную интерпретацию. Такая теория должна использовать состояния с одним знаком энергии, и использовать такие операторы, которые не смешивают состояния с разными знаками энергии:

$$E > 0$$

Оказывается, что если в начальный момент состояния с отрицательным знаком энергии исключить, то далее они и не появятся. Сейчас мы поймём, какие приближения могут привести нас к такой теории.

- **Свободная частица.** Оператор знака $\hat{\Lambda}$

$$\hat{\Lambda} = \frac{\hat{H}_D}{(\hat{H}_D^2)^{1/2}} = \frac{c(\hat{\alpha}\mathbf{p}) + \hat{\beta}mc^2}{E_p}, \quad |E| = E_p$$

Он обладает такими свойствами:

- $\hat{\Lambda}^+ = \hat{\Lambda} = \hat{\Lambda}^{-1}$, так как $\hat{\Lambda}^2 = \hat{1}$
- $[\hat{\Lambda}\hat{H}_D] = [\hat{\Lambda}, \hat{\mathbf{p}}] = 0$
- $\hat{\Lambda}\Psi(\xi) = \xi\Psi(\xi), \quad \xi = \pm 1$

- **Чётные операторы.**

Определение. Любой оператор можно представить в виде *чётного* и *нечётного* оператора

$$\hat{F} = [\hat{F}] + \{\hat{F}\}$$

При этом

$$\begin{aligned} [\hat{F}]\Psi(\pm) &= \tilde{\Psi}(\pm), \\ \{\hat{F}\}\Psi(\pm) &= \tilde{\Psi}(\mp) \end{aligned}$$

То есть к чётности знака энергии прибавляется чётность оператора. Теория строится при помощи применения чётных операторов.

Найдём правило для представления произвольного оператора \hat{F} в виде такой суммы.

$$\hat{F}\psi(\pm) = [\hat{F}]\Psi(\pm) + \{\hat{F}\}\Psi(\pm)$$

$$\begin{aligned} \hat{\Lambda}\hat{F}\hat{\Lambda}\Psi(\pm) &= \pm\hat{\Lambda}\hat{F}\Psi(\pm) \\ &= [\hat{F}]\Psi(\pm) - \{\hat{F}\}\Psi(\pm) \end{aligned}$$

Отсюда получаем искомое выражение

$$\begin{cases} [\hat{F}] &= \frac{1}{2} \left(\hat{F} + \hat{\Lambda}\hat{F}\hat{\Lambda} \right), \\ \{\hat{F}\} &= \frac{1}{2} \left(\hat{F} - \hat{\Lambda}\hat{F}\hat{\Lambda} \right). \end{cases}$$

Выводы.

ГЛАВА 10. ВВЕДЕНИЕ В РЕЛЯТИВИСТСКУЮ КВАНТОВУЮ МЕХАНИКУ

- Чётная часть оператора является интегралом движения⁵, коммутирует с гамильтонианом, и имеет простую физическую интерпретацию.
- Нечётная часть оператора антикоммутирует с гамильтонианом⁶, осциллирует с частотой $\frac{2E_p}{\hbar}$, и является причиной «дрожащего движения».

Покажем, что нечётная часть антикоммутирует с гамильтонианом.

$$\begin{aligned}\frac{\hat{H}_D}{E_p}\{\hat{F}\} &= \frac{\hat{H}_D}{2E_p}(\hat{F} - \hat{\Lambda}\hat{F}\hat{\Lambda}) \\ &= \frac{1}{2}(\hat{\Lambda}\hat{F} - \hat{F}\hat{\Lambda})\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\{\hat{F}\}\frac{\hat{H}_D}{E_p} &= (\hat{F} - \hat{\Lambda}\hat{F}\hat{\Lambda})\frac{\hat{H}_D}{2E_p} \\ &= \frac{1}{2}(\hat{F}\hat{\Lambda} - \hat{\Lambda}\hat{F})\end{aligned}$$

Если оператор не является функцией координат, то используя представление Гайзенберга, можно записать:

$$\frac{d\{\hat{F}\}}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}_D, \{\hat{F}\}] = -\frac{2i}{\hbar}\{\hat{F}\}\hat{H}_D$$

Получили дифференциальное уравнение. Если гамильтониан явно не зависит от времени $\left(\frac{\partial \hat{H}_D}{\partial t} = 0\right)$, то решая это уравнение, получаем

$$\{\hat{F}(t)\} = \{\hat{F}(0)\} \exp\left(-\frac{2i\hat{H}_D t}{\hbar}\right)$$

Выделим чётную часть у известных нам операторов, чтобы построить законченную версию теории.

Оператор скорости.

$$\hat{v}_x = c\hat{\alpha}_x$$

Чётная часть:

$$\begin{aligned}[\hat{v}_x] &= \frac{1}{2}(\hat{v}_x + \hat{\Lambda}\hat{v}_x\hat{\Lambda}) \\ &= \frac{1}{2}(\hat{v}_x\hat{\Lambda} + \hat{\Lambda}\hat{v}_x)\hat{\Lambda} \\ &= \frac{c}{2E_p}(\hat{\alpha}_x\hat{H}_D + \hat{H}_D\hat{\alpha}_x)\hat{\Lambda} \\ &= \frac{c^2\hat{p}_x}{E_p}\hat{\Lambda}\end{aligned}$$

⁵Лишь в том случае, если оператор, от которого берётся чётная часть, не является функцией координат.

⁶При тех же предположениях

Если «отбросить» множитель $\hat{\Lambda}$, получим формулу для релятивистской скорости, где вместо чисел стоят операторы.

Нечётная часть оператора скорости:

$$\{v_x\} = c\{\hat{\alpha}_x(0)\} \exp\left(-\frac{2i\hat{H}_D t}{\hbar}\right)$$

Операторы момента.

Орбитальный и спиновый операторы по отдельности не являются интегралами движения. Был получен ответ: это связано с интерференцией состояний.

$$\frac{d\hat{\mathbf{L}}}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}_D, \hat{\mathbf{L}}] = c[\hat{\alpha} \times \hat{\mathbf{p}}]$$

При этом $\hat{\alpha}$ является (с точностью до множителя) оператором скорости.

$$\hat{\alpha} = [\hat{\alpha}] + \{\hat{\alpha}\}$$

Отсюда

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{\mathbf{L}}}{dt} &= c\left[\{\hat{\alpha}(0)\} \times \hat{\mathbf{p}}\right] \exp\left(-\frac{2i\hat{H}_D t}{\hbar}\right) \\ \frac{d\hat{\mathbf{S}}}{dt} &= \frac{i}{\hbar}[\hat{H}_D, \hat{\mathbf{S}}] = -\left[\{\hat{\alpha}(0)\} \times \hat{\mathbf{p}}\right] \exp\left(-\frac{2i\hat{H}_D t}{\hbar}\right) \end{aligned}$$

Эти операторы не коммутируют, потому что они осциллируют во времени «в противофазе». Суммарная фаза компенсируется, что интерпретируется, как сохранение полного момента.

Оператор координаты.

$$\begin{aligned} \hat{x} : \hat{v}_x &= \frac{d\hat{x}}{dt} = [\hat{v}_x] + \{\hat{v}_x\} \\ &= \frac{c^2 \hat{p}_x}{E_p} \Lambda + c\{\hat{\alpha}(0)\} \exp\left(-\frac{2i\hat{H}_D t}{\hbar}\right) \end{aligned}$$

$$\hat{x}(t) = \hat{x}(0) + \frac{c^2 \hat{p}_x}{E_p} \Lambda t + c\{\hat{\alpha}_x(0)\} \exp\left(-\frac{2i\hat{H}_D t}{\hbar}\right) (i\hbar)(2\hat{H}_D)^{-1}$$

В классической физике первое слагаемое описывает «макродвижение», то есть изменение положения со временем, движение по траектории.

Второе слагаемое — это дрожание, или квантовые флуктуации траектории. Можно найти их (максимальную) амплитуду.

$$|\{\hat{x}\}| \simeq \frac{c\hbar}{2E_p} \leq \frac{c\hbar}{2mc^2} \approx \frac{\hbar}{mc} = r_{qu}$$

Квантовый радиус электроны равняется комптоновской длине волны.

Координата квантовой релятивистской частица «размазана» на радиус порядка квантовой длины волны электрона.

Условия, при которых можно отбросить осцилляцию, совпадают с условиями одночастичной интерпретации (появления электрон-позитронных пар). Если находиться на расстоянии квантового радиуса, то движение будет проходить по классической траектории.

Итог: релятивистская квантовая механика обычно подразумевает многочастичную модель.

10.6 Квазирелятивистское приближение в теории Дирака

10.6.1 Уравнение Паули как нерелятивистский предел уравнения Дирака

Вспомним уравнение Дирака (во внешнем поле)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left(c(\hat{\boldsymbol{\alpha}} \hat{\mathbf{P}}) + \hat{\beta} mc^2 - e\Phi \right) \Psi(\mathbf{r}, t)$$

Используем обозначения

$$\hat{\mathbf{P}} = \hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c} \mathbf{A}, \quad \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla, \quad -e < 0$$

Потенциал имеет вид

$$A^\mu = \{\Phi, \mathbf{A}\}$$

В стационарном случае

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \psi(\mathbf{r}), \quad E > 0$$

$$\psi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \psi(\mathbf{r}) \\ \chi(\mathbf{r}) \end{pmatrix}$$

Уравнение переписывается в виде системы

$$\begin{cases} c(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \hat{\mathbf{P}}) \chi(\mathbf{r}) &= (E - mc^2 + e\Phi) \varphi(\mathbf{r}), \\ c(\hat{\boldsymbol{\sigma}}) \varphi(\mathbf{r}) &= (E + mc^2 + e\Phi) \chi(\mathbf{r}). \end{cases}$$

Пользуемся следующими приближениями:

$$E = mc^2 + \mathcal{E}, \quad |\mathcal{E} + e\Phi| \ll mc^2$$

Уравнения принимают вид

$$\begin{cases} c(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \hat{\mathbf{P}}) \chi(\mathbf{r}) &= (\mathcal{E} + e\Phi) \varphi(\mathbf{r}), \\ c(\hat{\boldsymbol{\sigma}}) \varphi(\mathbf{r}) &= (2mc^2 + \mathcal{E} + e\Phi) \chi(\mathbf{r}). \end{cases}$$

$$\chi(\mathbf{r}) \simeq \frac{(\hat{\sigma}\hat{\mathcal{P}})}{2mc}\varphi(\mathbf{r}), \quad \frac{v}{c} \rightarrow 0$$

Принято говорить, что нижние компоненты малы по сравнению с верхними двумя компонентами (здесь существенно, что энергия имеет положительный знак)

После подстановки получаем уравнение на $\varphi(\cdot)$:

$$(\mathcal{E} + e\Phi)\varphi(\mathbf{r}) = \frac{1}{2m}(\hat{\sigma}\hat{\mathcal{P}})(\hat{\sigma}\hat{\mathcal{P}})\varphi(\mathbf{r})$$

Здесь нужно воспользоваться вспомогательной формулой (она получена на семинарах):

$$(\hat{\sigma}\hat{\mathcal{P}})(\hat{\sigma}\hat{\mathcal{P}}) = \hat{\mathcal{P}}^2 + \frac{e\hbar}{c}(\hat{\sigma}\mathcal{H})$$

Уравнение Паули:

$$\mathcal{E}\varphi(\mathbf{r}) = \left(\frac{\hat{\mathcal{P}}^2}{2m} + \frac{e\hbar}{2mc}(\hat{\sigma}\mathcal{H}) - e\Phi \right) \varphi$$

Для $\varphi(\mathbf{r})$ нужны 4 компоненты (спин, функции энергии могут принимать оба знака).

$$\xi = \pm 1, \quad s = \pm 1$$

В этом уравнении Паули коэффициент $\frac{e\hbar}{2mc}$ — это *магнетон Бора*.

Достоинство теории Дирака состоит в том, что в ней уже содержатся спиновые свойства электрона, g -фактора Ланде, и т.д.

Свойства, которые раньше были получены с помощью принципа соответствия, теперь могут быть получены непосредственно из теории Дирака.

Возможен переход в подпространство «больших» (верхних) компонент. При этом 3, 4-я координаты отбрасываются. Что при этом происходит с операторами?

10.6.2 Квазирелятивистское приближение в атоме водорода

Физическая интерпретация спиновых и релятивистских эффектов в атоме водорода наиболее удобна в нерелятивистском приближении. Уравнение Дирака допускает *точное решение* в случае атома водорода.

Ограничимся нерелятивистским приближением, и в его рамках получим все необходимые физические свойства, тонкую структуру, и так далее.

Что является малым параметром? Отношение скорости движения электрона к скорости света.

$$\frac{v_{\text{ат}}}{c} \approx \frac{p}{mc} \approx \frac{\hbar}{a} \frac{1}{mc} \approx \frac{\hbar}{mc} \frac{me^2}{\hbar^2} = \frac{e^2}{\hbar c} = \alpha \approx \frac{1}{137} \ll 1$$

Эта константа α называется *постоянной тонкой структуры*.

ГЛАВА 10. ВВЕДЕНИЕ В РЕЛЯТИВИСТСКУЮ КВАНТОВУЮ МЕХАНИКУ

Терминология.

Спиновые эффекты в магнитном поле проявляются в первом порядке по v/c , и этот случай называют *нерелятивистским приближением*.

Электрическое поле: $(v/c)^2$, квазирелятивистское приближение. Это название необязательное, допустимо оба приближения называть нерелятивистскими (при этом необходимо указывать, какой порядок приближения имеется в виду).

Релятивистскую поправку можно учесть в классической задаче (Кеплер).

$$\begin{aligned} E &= (m^2 c^4 + c^2 \mathbf{p}^2)^{1/2} \\ &= mc^2 \left(1 + \left(\frac{p}{mc} \right)^2 \right)^{1/2} \\ &\approx mc^2 + \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3 c^2} \end{aligned}$$

Эта поправка приводит к прецессии Кеплерова эллипса вокруг одного из фокусов. (За период эллипс поворачивается вокруг одного из фокусов. Получается замкнутая кривая, которая называется *розеточная траектория Зоммерфельда*. Это эффект специальной теории относительности.)

Итак, квазирелятивистское приближение решения в атоме водорода характеризуется величиной

$$\left(\frac{v}{c} \right)^2 \sim \left(\frac{1}{mc} \right)^2 \sim \alpha^2$$
$$\mathbf{A} = 0, \quad -e\Phi = v(r)$$

Можно провести разложение с точностью до v/c в первой, второй степени. Могут встречаться некоммутирующие выражения, поэтому для второго порядка следует проявлять осторожность. Эта тема разобрана более подробно в семинарских занятиях, но входит в экзаменационный материал. Материал есть в задачнике.

Есть один существенный момент, на котором нужно заострить внимание. При переходе к уравнению Паули две нижние компоненты спинора $(\varphi \chi)$ малы, и имеют порядок (v/c) по отношению к верхним. Просто отбросить их *нельзя*, потому что порядок приближения (v/c) . Истинная двух компонентная функция Паули φ^P должна строиться следующим образом:

$$\psi^P(\mathbf{r}) = \hat{A}\varphi$$

Результат разложения и гамильтониан в квазирелятивистском приближении (в стационарном случае) имеют вид

$$\varepsilon\psi^P(\mathbf{r}) = \hat{H}^q\psi^P(\mathbf{r}), \quad \hat{H}^q = \underbrace{\hat{H}^S}_{\text{Schrödinger}} + \hat{V}^q,$$

где

$$\hat{H}^S = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(r), \quad \hat{V}^q = -\frac{\hat{\mathbf{p}}^4}{8m^3 c^2} + \frac{1}{2m^2 c^2} \frac{dv}{dr} \frac{(\hat{\mathbf{S}}\hat{\mathbf{L}})}{r} + \frac{1}{8} \left(\frac{\hbar}{mc} \right)^2 (\vec{\nabla}^2 U(r))$$

Интерес представляет именно анализ приближённого вида гамильтониана. (На экзамене можно предоставлять его без вывода)

Анализ приближённого вида гамильтониана

Если считать магнитное поле равным нулю, то получится гамильтониан Паули.

- *Основной член.* Это может быть \hat{H}^S или \hat{H}^P .
- *Релятивистская поправка.* $\hat{V}^{rel} = -\frac{\hat{\mathbf{p}}^4}{8m^3c^2}$. Это слагаемое учитывает зависимость энергии от импульса частицы. У этого слагаемого есть классический аналог. Учёт этой классической поправки приводит к изменению траектории. Кеплеровский эллипс прецессирует вокруг одного из фокусов (розеточная траектория Зоммерфельда). Такая же поправка есть в уравнении Клейна-Фока-Гордона.
- *Спин-орбитальное взаимодействие.* $\hat{V}^{so} = \frac{Ze^2}{2m^2c^2} \frac{(\hat{\mathbf{S}}\hat{\mathbf{L}})}{r^3}$. Именно в атоме водорода впервые при рассмотрении этих поправок возник этот термин. Его название идёт от соответствующего скалярного произведения.⁷

$$- \hat{\boldsymbol{\mu}} = -\mu_0 \hat{\boldsymbol{\sigma}} = -\frac{e\hbar}{2mc} \hat{\boldsymbol{\sigma}} = -\frac{e}{mc} \hat{\mathbf{S}}, \quad -e < 0$$

Двигаясь по орбите со скоростью v , электрон начинает обладать дипольным моментом:

$$- \mathbf{d} = \frac{1}{c} [\mathbf{v} \times \boldsymbol{\mu}] = \frac{1}{mc} [\mathbf{p} \times \boldsymbol{\mu}].$$

Если у электрона, летящего по орбите, есть также дипольный электрический момент, он начинает взаимодействовать с ядром.

Дополнительная энергия взаимодействия:

$$- U^{add} = -(\mathbf{d}, \boldsymbol{\mathcal{E}})$$

После подстановки

$$U^{add} = \frac{-Ze}{mc r^3} ([\mathbf{p} \times \boldsymbol{\mu}]) \cdot \mathbf{r} = \frac{Ze^2}{m^2 c^2} \frac{(\mathbf{S}\mathbf{L})}{r^3}$$

В операторном виде:

$$\hat{U}^{add} \stackrel{?}{=} \frac{Ze^2}{m^2 c^2} \frac{(\hat{\mathbf{S}}\hat{\mathbf{L}})}{r^3}$$

(см. прим⁸)

⁷Будьте внимательны при физической интерпретации! Не следует говорить, что это буквально является взаимодействием механических моментов. Из ниоткуда не может появиться новый вид взаимодействия, не описанный в теории. Это слагаемое обязано своим происхождением электромагнитному взаимодействию.

⁸Полезно сравнить с тем, что получается в результате точного расчёта. Возникает коэффициент $\frac{1}{2}$! Это оказалось достаточно драматическим моментом. Если пользоваться принципом соответствия так, как продемонстрировано выше, то нельзя получить «правильный» коэффициент $\frac{1}{2}$, который сходится с экспериментом.

Задача была решена в 1926 году. Оказалось, что спин испытывает дополнительную Томасовскую прецессию. Пришлось более точно анализировать формулы перехода в разных системах отсчёта.

- *Контактное взаимодействие.*

$$\hat{V}^c = \frac{\pi}{2} Z e^2 \left(\frac{\hbar}{mc} \right)^2 \delta(\mathbf{r}), \quad \nabla^2(1/r) = -4\pi\delta^{(3)}(\mathbf{r})$$

Это взаимодействие так называется из-за присутствия дельта-функции. Электрон находится в «контакте» с ядром, есть вероятность того, что электрон находится в одной точке с ядром.

Это слагаемое можно связать с не-локальностью взаимодействия и с наличием дрожания. Весь комплекс физических явлений, который обсуждался выше, проявляется здесь. Электрон размазан по некоторому объёму с линейными размерами порядка квантового радиуса.

$$r_{qu} \sim \frac{\hbar}{mc}$$

Он «чувствует» не только Кулоновское поле, но и усреднённое поле.

$$U^{add} = \langle \delta U(\mathbf{r}) \rangle = \langle U(\mathbf{r} + \delta \mathbf{r}) - U(\mathbf{r}) \rangle$$

Если $\delta \mathbf{r}$ мало, то при усреднении получаем

$$U^{add} = \langle (\delta \mathbf{r} \nabla) U(r) \rangle + \frac{1}{2} \sum_i \sum_j \delta x_i \delta x_j \nabla_i \nabla_j U(r) = \frac{1}{6} (\delta \mathbf{r})^2 (\nabla^2 U(r))$$

Поступим с этим слагаемым достаточно «грубо». Заменяем $\delta \mathbf{r}$ на комптоновскую длину волны:

$$U^{add} = \frac{1}{6} \left(\frac{\hbar}{mc} \right)^2 (\nabla^2 U(r))$$

10.7 Тонкая структура уровней энергии атома водорода

Если решать задачу об уровнях энергии атома водорода, используя уравнение Шрёдингера, то получим результат

$$E_n^{(0)} = -\frac{Z^2}{2n^2} \left(\frac{e^2}{a} \right)$$

Смысл круглых скобок — переход в другую систему единиц.

Это надо воспринимать как нулевое приближение. Уравнение Шрёдингера не включает ни релятивистских, ни орбитальных поправок. Нужно привлекать уравнение Дирака. Этим путём мы не пойдём.

Пора возвращаться к физическому смыслу. Поправки к энергии мы получим с помощью теории возмущений.

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{V}^{qurel}$$

10.7.1 Постановка задачи

- **Невозмущённая задача.** Если взять привычные нам водородные функции,

$$\psi_{n\ell m} = C_{n\ell} E_{n\ell} Y_{\ell}^{(m)}(\theta, \varphi) \leftarrow \hat{\mathbf{L}}^2 \hat{\mathbf{S}}^2, \hat{L}_z, \hat{S}_z$$

$$[(\hat{\mathbf{L}}, \hat{\mathbf{S}}), \hat{J}_z] = 0$$

Правильными функциями будут те функции, которые являются общими собственными векторами для следующего набора операторов:

$$\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{\mathbf{S}}^2, \hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_z$$

Эти операторы связаны с предыдущими некоторым линейным преобразованием: $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$.

В координатном представлении $\Psi_{n\ell m_j}^{(j)}(\mathbf{r})$ — это шаровые спиноры.

10.7.2 Вычисление тонкого расщепления

- *Релятивистская поправка.*

$$E_{rel}^{(1)} = \int d^3x \Psi_{n\ell m_j}^{(j)+}(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hat{\mathbf{p}}^4}{3m^3c^2} \right) \Psi_{n\ell m_j}^{(j)}(\mathbf{r})$$

$$= -\frac{1}{2mc^2} \int d^3 \left(\Psi_{n\ell m_j}^{(j)+}(\mathbf{r}) \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} \right) \left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} \Psi_{n\ell m_j}^{(j)}(\mathbf{r}) \right)$$

Если $\Psi_{n\ell m_j}^{(j)}$ — решение уравнения Дирака, то

$$E_{rel}^{(1)} = -\frac{1}{2mc^2} \langle n\ell m_j | \left(E_n^{(0)} + \frac{Ze^2}{r} \right)^2 | n\ell m_j \rangle$$

$$= -\frac{1}{2mc^2} \left((E_n^{(0)})^2 + 2E_n^{(0)} Ze^2 \langle 1/r \rangle + (Ze^2)^2 \langle 1/r^2 \rangle \right)$$

Средние для $1/r^\alpha$ вычислялись в первом семестре⁹. С помощью несложных преобразований:

$$E_{rel}^{(1)} = E_n^{(0)} \frac{Z^2 \alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{\ell + 1/2} - \frac{3}{4} \right)$$

Возникает зависимость от квантового числа ℓ . Вырождения нет.

9

$$\langle 1/r \rangle = \left(\frac{Z}{a} \right) \frac{1}{n^2}$$

$$\langle 1/r^2 \rangle = \left(\frac{Z}{a} \right)^2 \frac{1}{n^3(\ell + 1/2)}$$

$$\langle 1/r^3 \rangle = \left(\frac{Z}{a} \right)^3 \frac{1}{n^3(\ell + 1/2)\ell(\ell + 1)}, \ell \neq 0$$

- *Спин-орбитальная поправка.*

$$E_{so}^{(1)} = \frac{Ze^2}{2m^2c^2} \langle n\ell m_j | \frac{(\hat{\mathbf{S}}\hat{\mathbf{L}})}{r^3} | n\ell m_j \rangle$$

Воспользуемся вспомогательным соотношением

$$(\hat{\mathbf{S}}\hat{\mathbf{L}}) = \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{S}}^2)$$

Продолжая равенство, получаем:

$$E_{so}^{(1)} = \frac{Ze^2}{2m^2c^2} \frac{\hbar^2}{2} (j(j+1) - \ell(\ell+1) - s(s+1)) \langle 1/r^3 \rangle$$

$$E_{so}^{(1)} = -E_n^{(0)} \frac{Z^2\alpha^2}{n} \frac{j(j+1) - \ell(\ell+1) - s(s+1)}{2(\ell+1/2)\ell(\ell+1)} (1 - \delta_{\ell 0})$$

Сложение моментов производится по правилу $j = \ell \pm 1/2$, $\ell \neq 0$, и $j = 1/2$, $\ell = 0$.

- *Контактная поправка.*

$$E_{cont}^{(1)}$$

Заметим, что

$$\langle \delta^{(3)}(\mathbf{r}) \rangle = \left| \Psi_{n\ell m_j}^{(j)}(0) \right|^2 = \left(\frac{1}{\pi} \frac{1}{n^3} \left(\frac{Z}{a} \right)^3 \right) \delta_{\ell 0}$$

$$E_{cont}^{(1)} = -E_n^{(0)} \frac{Z^2\alpha^2}{n}$$

Если сложить результат по всем j , то он не будет зависеть от ℓ (формула Зоммерфельда).

$$E_{nj} = -\frac{Z^2}{2n^2} \left(\frac{e^2}{a} \right) \left(1 + \frac{Z^2\alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4} \right) \right)$$

Этот результат был получен без использования теории Шрёдингера, с помощью правила квантования Зоммерфельда.

10.7.3 Анализ формулы Зоммерфельда

-

$$E_{nj} = mc^2 \left[1 - \frac{Z^2\alpha^2}{(\sqrt{(j+1/2)^2 - Z^2\alpha^2} - (n - (j+1/2)))^2} \right]^{-1/2}$$

Если эту формулу разложить при малом α , то получится то, что написано выше.

Нужно, чтобы подкоренное выражение в знаменателе было неотрицательно.

$$j_{\min} = 1/2, \quad Z < Z_{critical} = 137$$

В противном случае может возникнуть нестабильность вакуума, что проявляется в рождении электрон-позитронных пар (парадокс Клейна).

- *Квантовые числа.*

- главное: $n = 1, 2, \dots$
- орбитальное: $\ell = 1, 2, \dots, n - 1$
- внутреннее: $j = \ell \pm 1/2, \ell \neq 0; j = 1/2, \ell = 0$
- магнитное: $m_j = -j, j + 1, \dots, j$

Можно видеть, что по ℓ снова наблюдается вырождение (это особенность не только приближённого решения, но даже точного). Есть специфическое Кулоновское вырождение, которое встречается и в релятивистском атоме водорода, $\ell = j \pm 1/2$.

- *Кратность вырождения*

- По m_j кратность $(2j + 1)$
- По ℓ кратность $2(2j + 1)$ кроме $j = j_{\max} = n - 1/2$. Тогда кратность вырождения 1, $\ell = \ell^{\max} = n - 1$.

- Уровни энергии атома водорода обозначаются $n^{\kappa}\ell_j$, $\kappa = 2s + 1$.

10.7.4 Экспериментальная проверка формулы тонкой структуры Зоммерфельда

Эксперимент ставят с помощью спектральных линий. На этом эксперименте будут наблюдаться только те спектральные линии, которые разрешены правилами отбора (им будет посвящена отдельная лекция).

Мощность излучения дипольного электричества

$$W^d \sim \left| \langle f | \mathbf{r} | i \rangle \right|^2$$

$$\langle n' \ell' m'_j | \mathbf{r} | n \ell m_j \rangle$$

Правила отбора.

- Величина $\delta n = n' - n$ может быть любая
- $\delta j = j' - j = 0, \pm 1$
- $\delta m_j = m'_j - m_j = 0, \pm 1$

$$\nu_{nn'} = \frac{E_n - E_{n'}}{h}$$

Спектр объясняется формулой Зоммерфельда, кроме двух исключений. (Одно из них объяснила квантовая электродинамика, второе исключение — сверхтонкая структура, связанная с магнитным моментом ядра, который возникает из-за того, что ядро — не точечное.)

10.8 Трудности в теории Дирака. Античастицы.

$$E = \pm \sqrt{c^2 \mathbf{p}^2 + m^2 c^4}$$

Было выяснено, что уровни энергии образуют два континуума состояний. Через запрещённую зону нельзя «перепрыгнуть». Решения с отрицательным знаком энергии — часть общей системы решений.

10.8.1 Дырочная интерпретация

Это была первая теория электрон-позитронного вакуума. Там были объяснены все эффекты, связанные с вакуумом. Все состояния с отрицательным знаком энергии уже заняты, и ничего туда «впихнуть» нельзя, в соответствии с принципом Паули. Выходит так, что вокруг нас есть бесконечно большая энергия с отрицательным знаком. Постулируется, что это ненаблюдаемо.

Если частица перескакивает с нижнего слоя на верхний, то рождается электрон-позитронная пара, а «дырка» интерпретируется как античастица.

10.9 Эффект Зеемана

10.9.1 Исходные уравнения

Гамильтониан для водородоподобного атома в магнитном поле:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c} \hat{\mathbf{A}} \right)^2 - \frac{Ze^2}{r} + \frac{e}{mc} (\hat{\mathbf{S}} \mathbf{H}) + \hat{V}^{qu} = \hat{H}^{pauli} + \hat{V}^{qu}$$

Проанализируем этот гаммильтониан.

$$\hat{H} = \hat{H}^{\text{без поля}} + \frac{e}{2mc} (\hat{\mathbf{p}} \mathbf{A} + \mathbf{A} \hat{\mathbf{p}}) + \frac{e^2}{2mc^2} \mathbf{A}^2 + \frac{e}{mc} \mathbf{H} \hat{\mathbf{S}}$$

$$(\hat{\mathbf{p}} \mathbf{A} + \mathbf{A} \hat{\mathbf{p}}) = 2(\mathbf{A} \hat{\mathbf{p}}) + [\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{A}] = 2(\mathbf{A} \hat{\mathbf{p}}) - i\hbar \text{div } \mathbf{A}$$

Калибровка Лоренца: $\text{div } \mathbf{A} = 0$. При этом

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} [\mathbf{H} \times \mathbf{r}] + \underbrace{\nabla f}_{=0}$$

$$\mathbf{H} = \text{rot } \mathbf{A}$$

Первое слагаемое:

$$\frac{e}{2mc} \left(2 \left(\frac{1}{2} [\mathbf{H} \times \mathbf{r}] \right) \hat{\mathbf{p}} \right) = \frac{e}{2mc} (\mathbf{H} \hat{\mathbf{L}})$$

Второе слагаемое:

$$\frac{e^2}{8mc^2}[\mathcal{H} \times \mathbf{r}]^2$$

В результате гамильтониан тождественно преобразуется к виду

$$\hat{H} = \hat{H}^{\text{без поля}} + \frac{e}{2mc} \left(\mathcal{H}(\hat{L} + 2\hat{S}) \right) + \frac{e^2}{8mc^2}[\mathcal{H} \times \mathbf{r}]^2$$

10.9.2 Выбор приближения

Подразумеваем, что внешнее поле слабое, и квадратичная поправка по полю гораздо меньше, чем линейная. Проверим, при каких условиях это может быть выполнено.

$$\frac{e^2}{mc^2} \mathcal{H}^2 \langle r^2 \rangle \ll \frac{e\hbar}{mc} \mathcal{H}$$

Приходим к условию

$$\mathcal{H} \ll \left(\frac{e}{a^2} \right) \frac{\hbar c}{e^2} \approx 10^9 \text{ Гс}$$

Это условие уже встречалось в эффекте Штарка. Такие поля в земных условиях недостижимы. Это условие нельзя отбросить в случае сложных атомов. В них слагаемое, соответствующее линейному члену, может обратиться в ноль.

Считаем, что $\mathcal{H} \parallel Oz$, то есть $\mathcal{H} = \{0, 0, \mathcal{H}\}$.

Обозначим ларморовскую частоту $\Omega = \frac{e\mathcal{H}}{2mc}$.

$$\hat{H} = \hat{H}^{\text{Б.П.}} + \Omega(\hat{L}_z + 2\hat{S}_z)$$

Поле называется «слабым», если поправки, которые оно вносит, меньше, чем соответствующие квазирелятивистские.

$$\frac{e\mathcal{H}}{mc} \hbar \ll E_{\text{тонк}}^{(1)} = \left(\frac{e^2}{a} \right) \alpha^2$$

Отсюда

$$\mathcal{H} \ll \frac{e}{a^2} \alpha \approx 1.2 \cdot 10^5 \text{ Гс}$$

Если поле слабое, открывается возможность повторного применения теории возмущения. Первый раз теория возмущений применяется для нахождения уровней энергий тонкой структуры. После этого найденное приближение используется для нахождения возмущения, вносимого магнитным полем.

Отсюда получается *аномальный эффект* Зеемана. При этом снимается вырождение уровней по магнитному квантовому числу, и очень богатый спектр.

В случае *сильного поля* наоборот, квазирелятивистские поправки меньше, чем поправки поля.

$$\left(\frac{e}{a^2} \right) \alpha \ll \mathcal{H} \ll \left(\frac{e}{a^2} \right) \alpha^{-1}$$

10.9.3 Расчёт в случае слабого поля

$$\hat{H}^{(0)} = \hat{H}^{\text{Б.П.}}, \quad \hat{V} = \Omega(\hat{L}_z + 2\hat{S}_z)$$

Вопрос. Какие функции являются функциями нулевого приближения?

Ответ. Сферические спиноры.

Они являются общими собственными функциями операторов $\hat{L}^2, \hat{S}^2, \hat{J}^2, \hat{J}_z$.

$$E_{\mathcal{H}}^{(1)} = \Omega \langle \ell s j m_j | \hat{L}_z + 2\hat{S}_z | \ell s j m_j \rangle$$

Теорема Вигнера-Эккарта

Это теорема из теории Групп.

Определение. Неприводимое представление группы трёхмерных вращений (см. выше)

Некоторое преобразование векторов состояний можно представить по-другому, как преобразование операторов. Примером могут являться представление Шрёдингера и Гайзенберга.

Рассмотрим векторный оператор (три наблюдаемых).

$$\hat{\mathbf{V}} = \{\hat{V}_x, \hat{V}_y, \hat{V}_z\}$$

Векторный оператор — это оператор, который при вращении преобразуется как вектор.

Пусть оператор $\hat{U}(\varphi)$ реализует неприводимое представление группы трёхмерных вращений.

$$\hat{U}^{-1}(\varphi) \hat{\mathbf{V}} \hat{U}(\varphi) = \hat{V}_{\varphi} \hat{\mathbf{V}}$$

Рассмотрим инфинитезимальное преобразование

$$(1 - \frac{i}{\hbar} \delta\varphi(\mathbf{n}\hat{\mathbf{J}}) \hat{\mathbf{V}} (1 + \frac{i}{\hbar} \delta\varphi(\mathbf{n}\hat{\mathbf{J}}))$$

Как гласит формула Эйлера из механики:

$$= \hat{\mathbf{V}} - \delta\varphi[\mathbf{n} \times \hat{\mathbf{V}}]$$

Приравнивая обе части, получаем

$$-\frac{i}{\hbar} \delta\varphi[(\mathbf{n}\hat{\mathbf{J}}), \hat{\mathbf{V}}] = -\delta\varphi[\mathbf{n} \times \hat{\mathbf{V}}]$$

В тензорных обозначениях¹⁰:

$$\begin{aligned} n_i [\hat{J}_i, \hat{V}_j] &= -i\hbar e_{jik} n_i \hat{V}_k \\ [\hat{J}_i, \hat{V}_j] &= i\hbar e_{ijk} \hat{V}_k \end{aligned}$$

Введём обозначения

$$\hat{T}_0^1 = \hat{V}_z, \quad \hat{V}_{\pm 1}^1 = \hat{V}_x \pm i\hat{V}_y$$

¹⁰Это верно для любых проекций n_i , поэтому можно сократить

В новых обозначениях

$$\begin{cases} [\hat{J}_z, \hat{T}_m^1] &= \hbar m \hat{T}_m^1, \\ [\hat{J}_\pm, \hat{T}_m^1] &= \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} \hat{T}_{m \pm 1}^1. \end{cases}$$

Эти операторы ведут себя как базисные векторы неприводимого представления группы трёхмерных вращений.

Система \hat{T}_m^j , $j = -j, \dots, j$, которая удовлетворяет коммутационным соотношениям, называется неприводимой системой тензорных операторов ранга j .

Теорема. Пусть дана система \hat{T}_m^j . Общий собственный вектор $|\gamma_1 j_1 m_1\rangle$ системы $\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_z$ с собственными значениями $\hbar j_1(j_1 + 1)$, $\hbar m_1$.

Второй такой вектор: $|\gamma_2 j_2 m_2\rangle$, с собственными значениями $\hbar j_2(j_2 + 1)$, $\hbar m_2$.

Тогда

$$\langle \gamma_2 j_2 m_2 | \hat{T}_m^j | \gamma_1 j_1 m_1 \rangle = \langle j_2 m_2 | j m j_1 m_1 \rangle \langle \gamma_2 j_2 | \hat{T}_j | \gamma_1 j_1 \rangle$$

Здесь имеется в виду коэффициент сложения моментов Клебша-Гордана

$$\langle j_2 m_2 | j m j_1 m_1 \rangle = C_{j m j_1 m_1}^{j_2 m_2}, \quad \mathbf{j}_2 = \mathbf{j} + \mathbf{j}_1$$

Смысл теоремы в том, что мы представили матричный элемент в виде произведения некоторых величин. Первый множитель описывает поведение при поворотах. Он зависит только от свойств векторов при вращении. Второй сомножитель — редуцированный матричный элемент, и содержит в себе всю информацию относительно характеристик квантовой системы и квантовой величины, от которой берётся среднее. Он не зависит ни от одного из магнитных квантовых чисел.

Проверим критерий того, что оператор является векторным. (?)

$$\langle l s j' m'_j | \hat{L}_z + 2\hat{S}_z | l s j m_j \rangle = \langle l s j' m'_j | \hat{J}_z + \hat{S}_z | l s j m_j \rangle = g \langle l s j' m'_j | \hat{J}_z | l s j m_j \rangle$$

g — это фактор Ланде. Можно его явно выразить.

$$E_{\mathcal{H}}^{(1)} = \Omega g \hbar m_j$$

Вычисление фактора Ланде.

$$\begin{aligned} & \langle \hat{\mathbf{J}}(\hat{\mathbf{J}} + \hat{\mathbf{S}}) \rangle \\ \hat{\mathbf{J}}^2 + (\hat{\mathbf{J}}\hat{\mathbf{S}}) &= \langle \hat{\mathbf{J}}^2 + \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{J}}^2 + \hat{\mathbf{S}}^2 - \hat{\mathbf{L}}^2) \rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{2}(3j(j+1) + s(s+1) - \ell(\ell+1)) \\ & \sum_{i=1}^3 \sum_j \langle \gamma m_j | \hat{J}_i | \gamma m'_j \rangle \langle \gamma m'_j | \hat{J}_i + \hat{S}_i | \gamma m_j \rangle = g \hbar^2 j(j+1) \\ \omega &= \frac{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}}{\hbar} + \hbar \Omega (g_1 m_{j_1} - g_2 m_{j_2}) \end{aligned}$$

10.9.4 Расчёт в сильном поле. Эффект Пашена-Бака

Как говорилось ранее, под сильным полем подразумевается такое поле, что

$$\left(\frac{e}{a^2}\right)\alpha \ll \mathcal{H} \ll \left(\frac{e}{a^2}\right)\alpha^{-1}$$

где $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$ — постоянная тонкой структуры.

Применим теорию возмущений, а затем наложим квазирелятивистские поправки.

$$\hat{H}^{(0)} = \hat{H}^{\text{без поля}} - \hat{V}^{\text{кв. рел.}} = \hat{H}^S$$

\hat{H}^S — Шрёдингеровский гамильтониан.

$$\hat{V} = \Omega(\hat{L}_z + 2\hat{S}_z), \quad \Omega = \frac{e\mathcal{H}}{2mc}$$

Собственные векторы этой системы имеют вид

$$|n\ell sm_\ell m_s\rangle = \underbrace{|n\ell m\ell\rangle}_{\psi_{n\ell m}(\mathbf{r})} \otimes \underbrace{|sm_s\rangle}_{\chi}$$

В базисе из этих векторов диагонален не только гамильтониан, но и оператор возмущения, потому что они являются собственными векторами для набора

$$\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{\mathbf{S}}^2, \hat{L}_z, \hat{S}_z$$

Таким образом, поправки для энергии в магнитном поле равны

$$E_{\mathcal{H}}^{(1)} = \hbar\Omega(m_\ell + 2m_s)$$

$$\omega_{21} = \frac{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}}{\hbar} + \Omega(\Delta m_\ell + 2\Delta m_s)$$

Повторно применяя теорию возмущений, можно получить и другие поправки.

10.9.5 Наблюдаемые частоты. Правила отбора

Правила отбора связывают квантовые числа в начальном и конечном состоянии.

$$\langle f|\hat{\mathbf{d}}|i\rangle \neq 0 \quad \Rightarrow \quad \langle f|\hat{\mathbf{d}}|i\rangle \neq 0$$

Как и в предыдущем пункте, рассмотрим случаи слабого и сильного поля.

Слабое поле.

Состояние электрона в атоме водорода описывается функцией, которая является общим собственным вектором операторов

$$\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{\mathbf{S}}^2, \hat{L}_z, \hat{S}_z \rightarrow |n\ell s j m_j\rangle$$

Известно значение коммутатора

$$[\hat{J}_i, \hat{x}_j] = i\hbar e_{ijk} \hat{x}_k$$

Это говорит о том, что оператор \hat{x} является векторным оператором относительно поворотов в пространстве, компоненты которого являются компоненты углового момента. $\mathcal{H}^{orb} \otimes \mathcal{H}^{spin}$.

Для $m = 0, \pm 1$ оператор \hat{X}_m^1 является неприводимым тензорным оператором ранга 1.

Как следует из теоремы Вигнера-Эккарта, он имеет матричный вид

$$\langle \gamma_2 j_2 m_2 | \hat{X}_m^1 | \gamma_1 j_1 m_1 \rangle = C_{j m j_1 m_1}^{j_2 m_2} \langle \gamma_2 j_2 || \hat{X}^1 || \gamma_1 j_1 \rangle$$

Здесь $\langle \gamma_2 j_2 || \hat{X}^1 || \gamma_1 j_1 \rangle$ — это приведённый матричный коэффициент.

Для того, чтобы коэффициенты Клебша-Гордана были отличны от нуля, надо, чтобы выполнялись соотношения

$$\begin{cases} j_2 &= j + j_1, \\ m_2 &= m + m_1. \end{cases}$$

Другими словами, из векторов $\{j_2, j, j_1\}$ надо уметь строить треугольник, с учётом квантования.

Суммарный момент j_2 изменяется в пределах $j_1 + 1, j_1, j_1 - 1$.

Кроме того, $m_2 = m_1 - 1, m_1, m_1 + 1$

Правила отбора принимают вид

$$\begin{cases} \Delta m &= m_2 - m_1 = 0, \pm 1, \\ \Delta j &= j_2 - j_1 = 0, \pm 1. \end{cases}$$

На самом деле, при значении $\Delta j = 0$ возникает неточность, надо исключить случай $j_1 = j_2 = 0$.

Сильное поле

Состояние электрона в атоме описывается функцией

$$|n\ell m_\ell\rangle \otimes |s m_s\rangle,$$

которая является общей собственной функцией операторов

$$\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{\mathbf{S}}^2, \hat{L}_z, \hat{S}_z$$

Кроме коммутатора $[\hat{J}_i, \hat{x}_j]$, в прошлом семестре был получен коммутатор

$$[\hat{L}_i, \hat{x}_j] = i\hbar e_{ijk} \hat{x}_k$$

ГЛАВА 10. ВВЕДЕНИЕ В РЕЛЯТИВИСТСКУЮ КВАНТОВУЮ МЕХАНИКУ

Оператор \hat{x} является вектором не только для полного пространства состояний, а также относительно поворотов в орбитальном пространстве.

$$\langle \gamma_2 \ell_2 m_2 | \hat{X}_m^1 | \gamma_1 \ell_1 m_1 \rangle = C_{j_1 m \ell_1 m_1}^{\ell_2 m_2} \langle \gamma_2 j_2 || \hat{X}^1 || \gamma_1 j_1 \rangle$$

Отсюда возникают правила отбора для слабого поля

$$\begin{cases} \Delta m_\ell &= m_{\ell_2} - m_{\ell_1} = 0, \pm 1, \\ \Delta \ell &= \ell_2 - \ell_1 = 0, \pm 1. \end{cases}$$

Правила отбора по чётности

Как известно, чётность — это собственное значение оператора инверсии.

$$\hat{I}|\gamma\ell\rangle = (-1)^\ell |\gamma\ell\rangle = \prod(\ell) |\gamma\ell\rangle$$

$$\begin{aligned} \hat{I}^{-1} \hat{\mathbf{r}} \hat{I} &= -\hat{\mathbf{r}}_j - \langle \gamma_2 \ell_2 | \hat{\mathbf{r}} | \gamma_1 \ell_1 \rangle \\ &= \langle \gamma_2 \ell_2 | \hat{I}^{-1} \hat{\mathbf{r}} \hat{I} | \gamma_1 \ell_1 \rangle \\ &= \prod(\ell_1) \prod(\ell_2) \langle \gamma_2 \ell_2 | \hat{\mathbf{r}} | \gamma_1 \ell_1 \rangle \end{aligned}$$

Правило отбора:

$$\boxed{\prod(\ell_1) \prod(\ell_2) = -1}, \quad \text{то есть } \ell_1 + \ell_2 = 2n + 1$$

Надо отметить, что такая жёсткая связь есть только у атома водорода.

Правило отбора по спину

Так как $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$.

Отсюда

$$[\hat{S}_i, \hat{x}_j] = 0$$

Таким образом, в спиновом пространстве \mathcal{S} оператор \mathbf{x} является скалярным оператором.

Снова можем применить теорему Вигнера-Эккарта. Из неё следует, что

$$\Delta S = 0, \quad \delta m_s = 0$$

Вспомним, что для эффекта Зеемана наблюдаемые линии имели вид

$$\omega_{12} = \omega_0 + \Omega(\Delta m_\ell + 2\Delta m_s),$$

где $\Delta m_s = 0, \Delta m_\ell = 0, \pm 1$. Нормальный эффект Зеемана переходит в аномальный.

В этом и состоит эффект.

Примечание. Разные случаи рассматривались, чтобы выделить группы квантовых чисел. Эти правила годятся для любых случаев, где эти числа встречаются. Правила носят «запретительный» характер. Таким образом, излучение возможно лишь тогда, когда выполнены все правила отбора.

Глава 11

Тождественные частицы в квантовой механике

11.1 Принцип тождественности (неразличимости) частиц

11.1.1 Пространство состояний N частиц

Пока частицы не обязательно тождественные (общий случай).

Для того, чтобы построить состояния N частиц, надо стартовать с пространства состояний для одной частицы.

Рассмотрим самый простой случай бесспиновой частицы. Её пространство $\mathcal{H}^{(orb)}$ можно представить в виде пространства $L_2(\mathbb{R}^3)$ интегрируемых функций.

Спиновые частицы (спин $\frac{1}{2}$): $\mathcal{H}^{(orb)} \otimes \mathcal{H}^{(spin)}$, которое представимо в виде $L(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^2$

Это пространство мы, в зависимости от контекста, называем \mathcal{H} .

Пусть имеется N частиц. Тогда пространство состояний описывается как

$$\mathcal{H}(1) \otimes \mathcal{H}(2) \otimes \dots \otimes \mathcal{H}(N) = \mathcal{H}$$

Эксперимент говорит о том, что это годится лишь для случая, когда среди частиц нет одинаковых. В случае одинаковых частиц уточнения к теории даёт принцип тождественности.

Всю теорию будем строить в координатном представлении. Элементом пространства будет N -частичная волновая функция

$$\Psi(\xi_1, \dots, \xi_N),$$

где в случае бесспиновой частицы, $\xi_i = \mathbf{r}_i$, а в случае спиновой $\xi_i = (\mathbf{r}_i, s_i)$, если спин $\frac{1}{2}$.

Как выглядит скалярное произведение в этом пространстве?

$$\langle \Psi | \Phi \rangle = \sum_{S_1, \dots, S_N} \int d^3x_1 \dots d^3x_N \Psi^*(\xi_1, \dots, \xi_N) \Phi(\xi_1, \dots, \xi_N)$$

11.1.2 Группа перестановок из N элементов

Напомним необходимые свойства этой группы. Каждый её элемент — это перестановка, как подсказывает нам её название.

Элементы этой группы будут также операторами в исходном пространстве. Например,

$$\hat{1} = \begin{pmatrix} 1 & \cdots & N \\ 1 & \cdots & N \end{pmatrix}$$

Особую роль будут играть *транспозиции* π_{ij} , которые переставляют местами два элемента.

Любую конечную перестановку можно представить в виде композиции транспозиций. Количество транспозиций в разложении может быть разным, но чётность этого числа предопределена. Каждой перестановке можно сопоставить её чётность.

$$(-1)^{[\pi]}$$

Формально, оператор определяется как

$$\hat{\mathcal{P}}_\pi \Psi(\xi_1, \dots, \xi_N) = \Psi(\xi_{i_1}, \dots, \xi_{i_N})$$

Эти операторы реализуют унитарное представление.

В этом пространстве можно выделить два пространства, инвариантных относительно группы перестановок (пространство симметричных и антисимметричных функций).

$$\hat{\mathcal{P}}_\pi \Psi_S(\xi_1, \dots, \xi_N) = \Psi_S(\xi_1, \dots, \xi_N)$$

$$\hat{\mathcal{P}}_\pi \Psi_A(\xi_1, \dots, \xi_N) = (-1)^{[\pi]} \Psi_A(\xi_1, \dots, \xi_N)$$

Если $N = 2$, то других инвариантных подпространств нет. Любую функцию от двух аргументов можно единственным образом представить в виде суммы чётной и нечётной части.

Иначе говоря,

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \oplus \mathcal{H}_S$$

Если $N > 2$, то появляются и другие, более сложные инвариантные подпространства.

11.1.3 Тожественность частиц в квантовой механике

В классике частицы тоже иногда называют одинаковыми. На самом деле, в классике они строго индивидуальны, за каждой частицей можно проследить, потому что у них есть *траектории*. Зная начальные координаты и скорости, решая задачу Коши, находим уравнения движения.

В квантовой механике, даже если в начальный момент времени создать локализованные пакеты, то они «расплываются». Начинают проявляться волновые свойства частиц, например, интерференция.

Имеет смысл характеризовать N -частичную систему N -частичной функцией, симметрия которой следует из симметрии гамильтониана. Который пока не выписан.

Гамильтониан N тождественных частиц

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m} + U(\mathbf{r}_i) \right\} + \sum_{i < j} \Phi(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$$

Так как гамильтониан симметричен, то для любого оператора $\hat{\mathcal{P}}_\pi$

$$[\hat{H}, \hat{\mathcal{P}}_\pi] = 0$$

Должны быть другие N -частичные физические наблюдаемые. Чтобы частицы были тождественные, эти операторы тоже должны коммутировать со всеми операторами перестановки частиц.

$$[\hat{F}, \hat{\mathcal{P}}_\pi] = 0$$

Принцип. N частиц тождественные, если гамильтониан и все физические наблюдаемые не меняются при любой перестановке частиц.

Операторы, описывающие наблюдаемые величины

Для того, чтобы описать состояние частицы, нужна полная система взаимно коммутирующих наблюдаемых. Для одной частицы $\hat{a}_i = \{\hat{\mathbf{p}}_i, m_i\}$.

Для N частиц $\hat{A} = \{\hat{a}_1, \dots, \hat{a}_N\}$. Необходимо использовать N -частичные операторы. Среди них нужно рассматривать только симметричные функции.

Мы сильно сузили возможные операторы. Если на пространство \mathcal{H} не наложить дополнительных условий, то потеряется свойство полноты. Постулат тождественности должен помочь наложить эти ограничения, чтобы восстановить свойства полноты.

Постулат тождественности.¹ Истинным пространством состояний является пространство \mathcal{H}_S или \mathcal{H}_A . Притом выбор одного из этих пространств связан только с природой рассматриваемых частиц. Конкретнее — со спином.

- Если спин целый, то рассматриваются бозоны, для которых выполняется статистика Бозе-Эйнштейна, рассматриваются симметрические волновые функции.
- Если спин полуцелый, то выполняется статистика Ферми-Дирака, рассматриваются антисимметрические волновые функции.

11.1.4 Принцип Паули

Рассмотрим систему из N тождественных фермионов, которые между собой не взаимодействуют.

¹В нерелятивистской квантовой механике нужны всего два факта со стороны. Первый факт — это спинорные операторы, второй факт — это постулат тождественности. Первое мы получили из уравнения Дирака, второе просто примем как данность. Он не выводится из других положений квантовой механики, но следует из более общей теории.

ГЛАВА 11. ТОЖДЕСТВЕННЫЕ ЧАСТИЦЫ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

Тогда гамильтониан имеет аддитивную структуру,

$$\hat{H} = \sum \hat{H}_i$$

Если для каждого из них есть полная система собственных функций

$$\hat{H}_i : \{\psi_{n_i}(\xi_i)\},$$

то для гамильтониана \hat{H} имеем

$$\tilde{\Psi}(\xi_1, \dots, \xi_N) = \psi_{n_1}(\xi_1) \dots \psi_{n_N}(\xi_N)$$

Этого недостаточно, надо антисимметризовать, для этого используется определитель Слеттера

$$\Psi_A(\xi_1, \dots, \xi_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{n_1}(\xi_1) & \dots & \psi_{n_1}(\xi_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{n_N}(\xi_1) & \dots & \psi_{n_N}(\xi_N) \end{vmatrix}$$

Не для любого набора функций можно построить волновую функцию в виде детерминанта. Если среди волновых функций есть хотя бы две одинаковых, то детерминант занулится.

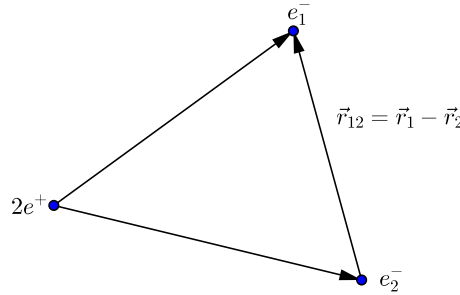
Принцип Паули. В каждом однофермионном состоянии может находиться не более одной частицы.

11.2 Атом гелия

Из «сложных атомов» это самый простой.

У гелия есть ядро, заряд 2, два электрона, с координатами $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$, относительная координата

$$\mathbf{r}_{12} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$$



Гамильтониан атома гелия

$$\hat{H} = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m} - 2\frac{e^2}{r_1} - 2\frac{e^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}}$$

Поскольку релятивистские эффекты проявляются только в членах порядка $(v/c)^2$ (спинорбитальное взаимодействие), в этом гамильтониане никаких следов спина нет.

11.2.1 Постановка задачи

Так как взаимодействие от спина не зависит, в волновой функции координатные функции отделяются от спиновых:

$$\begin{aligned}\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, s_1, s_2) &= \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\chi(s_1, s_2) \\ \hat{H}\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= E\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\end{aligned}$$

Сложность задачи состоит в том, что задача не имеет точного аналитического решения (как и любая уважающая себя задача трёх тел). Следовательно, нужно искать приближённое решение.

11.2.2 Теория возмущения

Очень многое зависит от того, как мы разделим гамильтониан на основную часть и возмущение.

Естественно разделить гамильтониан на кулоновское взаимодействие и всё остальное:

$$\hat{V} = \frac{e^2}{r_{12}}$$

Очень трудно оценить малый параметр. На самом деле, он окажется порядка $\frac{1}{3}$, приближение очень неточное. Существуют более точные оценки, но для начала мы пойдём самым простым, «лобовым» путём, и посмотрим, какие следствия отсюда можно получить.

Разбивая оставшуюся часть гамильтониана на две части, получаем уравнение на собственные функции в виде

$$(\hat{H}_1^{(0)} + \hat{H}_2^{(0)} - E^{(0)})\Psi^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = 0$$

$$E^{(0)} = E_{nk}^{(0)} = -\left(\frac{1}{n^2} + \frac{1}{k^2}\right) \frac{4e^2}{2a}$$

$$\Psi_{nk}^{(0)} = \begin{cases} \psi_n(\mathbf{r}_1)\psi_k(\mathbf{r}_2) & , \text{ первый элемент в } n, \text{ второй в } k, \\ \psi_k(\mathbf{r}_1)\psi_n(\mathbf{r}_2) & , \text{ наоборот.} \end{cases}$$

Имеет место *обменное вырождение* состояний.

$$\Psi_{\pm}^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_n(\mathbf{r}_1)\psi_k(\mathbf{r}_2) \pm \psi_k(\mathbf{r}_1)\psi_n(\mathbf{r}_2))$$

$$\langle \Psi_{\pm}^{(0)} | \frac{e^2}{r_{12}} | \Psi_{\pm}^{(0)} \rangle = \int d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \Psi_{\pm}^{*(0)} \Psi_{\pm}^{(0)} = 0$$

Подынтегральное выражение поменяет знак, если поменять местами $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$. Построенные функции являются правильными волновыми функциями нулевого приближения.

$$E_{\pm}^{(0)} = \frac{e^2}{2} \int d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \frac{|\psi_n(\mathbf{r}_1)\psi_k(\mathbf{r}_2) \pm \psi_k(\mathbf{r}_1)\psi_n(\mathbf{r}_2)|^2}{r_{12}}$$

ГЛАВА 11. ТОЖДЕСТВЕННЫЕ ЧАСТИЦЫ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

Вводим следующие обозначения

$$\rho_{nn} = \rho_{nn}(\mathbf{r}) = e\psi_n^*(\mathbf{r})\psi_n(\mathbf{r})$$

Это **плотность заряда**, которая создаётся в точке с координатой \mathbf{r} .

Обменная плотность заряда:

$$\rho_{nk} = \rho_{nk}(\mathbf{r}) = e\psi_n^*(\mathbf{r})\psi_k(\mathbf{r})$$

Это плотность заряда, которая создаётся электроном, *как бы находящимся* одновременно в состояниях n, k .

Кулон:²

$$C = \int d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \frac{\rho_{nn}(\mathbf{r}_1)\rho_{kk}(\mathbf{r}_2)}{r_{12}}$$

Это есть электростатическая энергия взаимодействий электронов, один из которых находится в состоянии n , а другой — в состоянии k .

Обменный интеграл:³

$$A = \int d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \frac{\rho_{nk}(\mathbf{r}_1)\rho_{kn}(\mathbf{r}_2)}{r_{12}}$$

Обменная энергия взаимодействия электрона, который *как бы находится* одновременно в состояниях n, k .

Оказывается, что в введённых нами обозначениях

$$E_{\pm}^{(1)} C \pm A$$

11.2.3 Учёт спина

Напомним, что в исходном гамильтониане нет никакого спина. В точном решении отделяются координатные и спиновые части.

В соответствии с постулатом тождественности (два электрона это два фермиона), волновая функция должна быть антисимметризована относительно обмена частиц ($\mathbf{r}_1 \leftrightarrow \mathbf{r}_2$).

Если вся функция должна быть антисимметричная, то возможны два случая:

- $\Phi_A(\cdot) = \Psi_S(\cdot)\chi_A$
- $\Phi_A(\cdot) = \Psi_A(\cdot)\chi_S$

Буквы A, S означают соответственно антисимметричность или симметричность.

$$\mathcal{H}^{(spin)} = \mathcal{H}_1^{(spin)} \otimes \mathcal{H}_2^{(spin)}$$

²Coulomb (фр.)

³Austausch (нем.)

Волновая спиновая функция должна быть общей собственной функцией операторов

$$\hat{S}^2, \hat{S}_z, \quad \hat{S} = \hat{S}(1) + \hat{S}(2)$$

Вспоминаем, какие собственные числа могут быть у операторов \hat{S} , \hat{S}_z .

- $\chi(1, 1) = \alpha(1)\alpha(2)$
- $\chi(1, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2))$
- $\chi(1, -1) = \beta(1)\beta(2)$
- $\chi(0, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2))$

Здесь $\alpha = (10)^\top = \chi_{1/2}$, $\beta = (01)^\top = \chi_{-1/2}$

Если суммарный спин равен нулю, то спин антисимметричный.

Анализ. Существенную роль играет тот факт, что $A > 0$. В нашем курсе это не доказывается, предлагается обдумать в качестве не очень сложного упражнения.

Пример. Из правила Хунда: суммарный спин имеет минимальное значение: $S = 1$. Итак, через антисимметрию волновой функции мы получили условия на спин (при этом в гамильтониане он не участвовал!).

Обменное вырождение есть явление сугубо квантовое, не имеет классического аналога. Оно связано с принципом тождественности частиц, выражающимся в антисимметрии волновой функции, и приводящим к особым корреляциям в движении электронов, в соответствии со статистикой Ферми-Дирака.

Взаимодействие проявляется в том, что уровни энергии **зависят от суммарного спина**.

Парагелий, ортогелий. Уровни энергии атома гелия можно классифицировать по значению суммарного спина. $S = 1$ — парагелий, $S = 0$ — ортогелий.

С точки зрения излучения они себя ведут как два независимых вещества. Квантовые переходы возможны только если $\Delta S = 0$.

В основном состоянии ($n = 1, k = 1$) может находиться только парагелий.

Этому основному состоянию отвечает следующая электронная конфигурация: $1s1s = 1s^2$.

Ортогелий: $1s2s$. Это состояние метастабильное, переход к основному состоянию занимает порядка года.

Терм. Это уровни энергии, соответствующие S, L, J .

$$^{2S+1}L_J \quad \rightarrow \quad \boxed{^1S_0}$$

11.3 Квантование свободного электромагнитного поля

11.3.1 Классическое поперечное электромагнитное поле

Такое поле описывается векторным потенциалом $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$, который удовлетворяет уравнению Даламбера:

$$\left(\Delta - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = 0$$

Выберем некоторую калибровку потенциала.

$$\operatorname{div} \mathbf{A} = 0$$

В этой калибровке

$$\begin{cases} \mathcal{H} &= \operatorname{rot} \mathbf{A}, \\ \mathcal{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}. \end{cases}$$
$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{L^{3/2}} \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{A}(\mathbf{k}, t) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$$

Рассматриваются граничные условия типа коробки,

$$e^{ik_i(x_i+L)} = e^{ik_ix_i}, \quad k_i = \frac{2\pi}{L} n_i, \quad n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Подставляя полученную функцию в уравнение Даламбера, получаем уравнение

$$\ddot{\mathbf{A}}(\mathbf{k}, t) + \omega^2 \mathbf{A}(\mathbf{k}, t) = 0, \quad \omega = k \cdot c$$

Каждая амплитуда Фурье по отдельности удовлетворяет уравнению гармонического осциллятора.

Запишем общее решение:

$$\mathbf{A}(\mathbf{k}, t) = \mathbf{A}(\mathbf{k}) e^{-i\omega t} + \mathbf{B}(\mathbf{k}) e^{i\omega t}$$

Когда мы подставляем решение в исходное уравнение, величины \mathcal{E}, \mathcal{H} вещественные, но про потенциал никто ничего не обещает. Для удобства хотим, чтобы \mathbf{A} тоже был вещественным. Для этого достаточно, чтобы

$$\mathbf{B}(\mathbf{k}) = \mathbf{A}^*(-\mathbf{k})$$

В итоге получим после подстановки в решение:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{L^{3/2}} \sum_{\mathbf{k}} (\mathbf{A}(\mathbf{k}) e^{-i(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r})} + \mathbf{A}^*(\mathbf{k}) e^{i(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r})}) \quad (11.1)$$

Полная энергия системы.

Обозначим полную энергию системы

$$H = \frac{1}{8\pi} \int d^3\mathbf{r} (\mathcal{H}^2 + \mathcal{E}^2)$$

Зная потенциал, можно получить полную энергию системы. Из условия ортогональности экспонент можно получить упрощение для слагаемых $\mathcal{H}^2, \mathcal{E}^2$:

$$\int d^3x e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r}} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$$

Если применить условие $\text{div } \mathbf{A} = 0$ к выражению (11.1), то получим *условие поперечности*:

$$(\mathbf{k}\mathbf{A}(\mathbf{k})) = (\mathbf{k}\mathbf{A}^*(\mathbf{k})) = 0$$

Проделявая всю эту процедуру, получаем ответ⁴:

$$H = \frac{1}{4\pi} \sum_{\mathbf{k}} k^2 (\mathbf{A}^*(\mathbf{k})\mathbf{A}(\mathbf{k}) + \mathbf{A}(\mathbf{k})\mathbf{A}^*(\mathbf{k}))$$

Переходим к нормированным амплитудам.

$$\mathbf{A}(\mathbf{k}) = \sqrt{\frac{2\pi c^2 \hbar}{\omega}} \mathbf{A}(\mathbf{k})$$

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{L^{3/2}} \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{2\pi c^2 \hbar}{\omega}} (\mathbf{a}_{\mathbf{k}} e^{-i(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r})} + \mathbf{a}_{\mathbf{k}}^* e^{i(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r})})$$

В таком виде:

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar\omega}{2} (\mathbf{a}_{\mathbf{k}}^* \mathbf{a}_{\mathbf{k}} + \mathbf{a}_{\mathbf{k}} \mathbf{a}_{\mathbf{k}}^*)$$

Поляризация электромагнитных волн.

Когда мы записываем амплитуду $\mathbf{a} = \{a_1, a_2, a_3\}$, нужно учесть, что между ними есть связь:

$$(\mathbf{k}\mathbf{a}_{\mathbf{k}}) = (\mathbf{k}\mathbf{a}_{\mathbf{k}}^*) = 0$$

Амплитуды Фурье перпендикулярны волновому вектору. Две независимые компоненты отвечают поляризациям.

Проиллюстрируем процесс выбора этих компонент. Пусть

$$\mathbf{a} = C_1 \mathbf{e}_1 + C_2 \mathbf{e}_2,$$

где $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2$ выбираются из условий

$$(\mathbf{k}\mathbf{e}_1) = (\mathbf{k}\mathbf{e}_2) = (\mathbf{e}_1\mathbf{e}_2) = 0$$

$$\mathbf{e}_2 = \frac{[\mathbf{k} \times \mathbf{e}_1]}{|\mathbf{k}|}$$

- Если $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2$ вещественные, то поляризация линейная.
- Если $\mathbf{e}_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{e}_1 \pm i\mathbf{e}_2)$, то это циркулярная поляризация.

Новый вид полной энергии поля.

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\lambda=1,2} (C_{\mathbf{k}\lambda}^* C_{\mathbf{k}\lambda} + C_{\mathbf{k}\lambda} C_{\mathbf{k}\lambda}^*) \frac{\hbar\omega}{2}$$

⁴Для удобства, которое мы поймём позже, не приводим подобные слагаемые

11.3.2 Вторичное квантование электромагнитного поля

Что такое первичное квантование? Результатом первичного квантования было уравнение Шрёдингера, которое сопоставило частице волну. Введение квантовых операторов, которые подчиняются уравнению эволюции в форме Гайзенберга

$$\frac{d\hat{F}}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{F}]$$

Вторичное квантование — это получение описания поля в терминах частиц, то есть сопоставление волновому процессу частиц. В данном случае это будут фотоны.

У электромагнитного поля «первичного квантования» нет, поэтому термин не очень удачный. В результате мы надеемся получить описание поля при помощи векторов состояний, подчиняющихся принципу суперпозиции. При этом векторы $\mathbf{A}, \mathbf{H}, \mathbf{E}$ станут операторами.

Нужно наложить соответствующие коммутационные соотношения (пока держим это в голове). Заменяем числа C на операторы:

$$\begin{cases} C_{\mathbf{k}\lambda} & \rightarrow \hat{C}_{\mathbf{k}\lambda} = \hat{C}_{\alpha}, \\ C_{\mathbf{k}\lambda}^* & \rightarrow \hat{C}_{\mathbf{k}\lambda}^+ = \hat{C}_{\alpha}^+. \end{cases}$$

Эти операторы должны удовлетворять уравнению Гайзенберга.

$$\hat{C}_{\alpha}(t) = \hat{C}_{\alpha}e^{-i\omega t}, \quad \hat{C}_{\alpha}^+(t) = \hat{C}_{\alpha}^+e^{+i\omega t}$$

Дифференцируя, получаем

$$\begin{aligned} -\omega C_{\alpha} &= \frac{1}{\hbar}(\hat{H}\hat{C}_{\alpha} - \hat{C}_{\alpha}\hat{H}) \\ &= \frac{1}{\hbar} \sum_{\alpha'} \frac{\hbar\omega'}{2} \left((\hat{C}_{\alpha'}^+\hat{C}_{\alpha'} + \hat{C}_{\alpha'}\hat{C}_{\alpha'}^+)\hat{C}_{\alpha} - \hat{C}_{\alpha}(\hat{C}_{\alpha'}^+\hat{C}_{\alpha'} + \hat{C}_{\alpha'}\hat{C}_{\alpha'}^+)\hat{C}_{\alpha} \right) \\ &= \sum_{\alpha'} \frac{\omega'}{2} \left(\begin{aligned} &\hat{C}_{\alpha'}^+(\hat{C}_{\alpha'}\hat{C}_{\alpha} - \hat{C}_{\alpha}\hat{C}_{\alpha'}) + \hat{C}_{\alpha'}(\hat{C}_{\alpha'}^+\hat{C}_{\alpha} - \hat{C}_{\alpha}\hat{C}_{\alpha'}^+) \\ &- (\hat{C}_{\alpha}\hat{C}_{\alpha'}^+ - \hat{C}_{\alpha'}^+\hat{C}_{\alpha})\hat{C}_{\alpha'} - (\hat{C}_{\alpha}\hat{C}_{\alpha'} - \hat{C}_{\alpha'}\hat{C}_{\alpha})\hat{C}_{\alpha'}^+ \end{aligned} \right) \end{aligned}$$

Коммутационные соотношения

$$\boxed{\begin{cases} [\hat{C}_{\mathbf{k}\lambda}, \hat{C}_{\mathbf{k}'\lambda'}] &= [\hat{C}_{\mathbf{k}\lambda}^+, \hat{C}_{\mathbf{k}'\lambda'}^+], \\ [\hat{C}_{\mathbf{k}\lambda}, \hat{C}_{\mathbf{k}'\lambda'}^+] &= \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\delta_{\lambda\lambda'}. \end{cases}}$$

$$\boxed{\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\lambda} \hbar\omega \left(\hat{C}_{\mathbf{k}\lambda}^+ \hat{C}_{\mathbf{k}\lambda} + \frac{1}{2} \right)}$$

Эти коммутационные соотношения и дают нам вторичное квантование.

11.3.3 Пространство состояний

Изучим структуру оператора Гамильтона.

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\lambda} \hbar\omega (\hat{C}_{\mathbf{k}\lambda}^+ \hat{C}_{\mathbf{k}\lambda} + \frac{1}{2})$$

Он раскладывается в сумму гамильтонианов гармонических осцилляторов, коих бесконечно много

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \hat{H}_{\mathbf{k}\lambda}$$

Имеется полная система собственных векторов у каждого из $\hat{H}_{\mathbf{k}\lambda}$

$$|N_{\mathbf{k}\lambda}\rangle$$

Их тензорное произведение даёт собственный вектор для исходного гамильтониана

$$|\dots N_{\mathbf{k}\lambda} \dots\rangle \rightarrow \{N_{\mathbf{k}\lambda}\}$$

Каждый собственный вектор характеризуется набором чисел $N_{\mathbf{k}\lambda}$, где

$$\hat{N}_{\mathbf{k}\lambda} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{C}_{\lambda}^+ \hat{C}_{\mathbf{k}\lambda}$$

$$\hat{H}|\dots N_{\mathbf{k}\lambda} \dots\rangle = E_{\{N_{\mathbf{k}\lambda}\}}|\dots N_{\mathbf{k}\lambda} \dots\rangle$$

Аналогичные формулы были описаны в начале курса для гармонического осциллятора. Каждое следующее состояния можно получить из нулевого состояния по формуле

$$\prod_{\mathbf{k}\lambda} \frac{(\hat{C}_{\mathbf{k}\lambda}^+)^{N_{\mathbf{k}\lambda}}}{\sqrt{N_{\mathbf{k}\lambda}!}} |0\rangle$$

Корпускулярная интерпретация.

- $\{N_{\mathbf{k}\lambda}\}$ — число заполнения — это число фотонов с определённым значением волнового вектора \mathbf{k} и поляризации λ .
- $\hat{C}_{\mathbf{k}\lambda}, \hat{C}_{\mathbf{k}\lambda}^+$ — операторы рождения и уничтожения фотонов состояния с волновым вектором \mathbf{k} , поляризацией λ .

$$\hat{C}_{\mathbf{k}\lambda}^+ |\dots N_{\mathbf{k}\lambda} \dots\rangle = \sqrt{N_{\mathbf{k}\lambda} + 1} |\dots N_{\mathbf{k}\lambda} + 1 \dots\rangle$$

$$\hat{C}_{\mathbf{k}\lambda} |\dots N_{\mathbf{k}\lambda} \dots\rangle = \sqrt{N_{\mathbf{k}\lambda}} |\dots N_{\mathbf{k}\lambda} - 1 \dots\rangle$$

- $|0\rangle$ — состояния без реальных фотонов. Среднее число фотонов в таком состоянии равно нулю, но тем не менее возможны виртуальные процессы типа аннигиляции. Это есть особое состояние электромагнитного поля с наименьшей энергией, и фотоны могут рождаться из этого вакуума.
- Все рассматриваемые кванты электромагнитного поля являются неразличимыми, про каждый индивидуальный фотон ничего сказать невозможно. В каждом состоянии число этих фотонов может изменяться от 0 до ∞ , то есть рассматриваются *бозоны*.

11.4 Взаимодействие квантовой системы с электромагнитным излучением

Как квантовая, так и классическая теория хочет определить две вещи.

- *Частота излучения.* В квантовой теории $\omega_{nn'} = \frac{E_n - E_{n'}}{\hbar}$.
- *Мощность излучения.* Это есть энергия, которая излучается в единицу времени. Мощность отличается от интенсивности излучения. Это отличие имеет значение для релятивистских частиц. Об этом подробнее можно прочитать в задачнике.

11.4.1 Основные уравнения и приближения

В основе теории лежит временное уравнение Шрёдингера.

$$\left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 - U(r) \right\} \Psi(\mathbf{r}, t) = 0$$

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}_{\text{внеш}} + \mathbf{A}_{\text{излучения}}$$

При этом

$$\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{L^{3/2}} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\lambda} \sqrt{\frac{2\pi c^2 \hbar}{\omega}} \{ \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} \hat{C}_{\mathbf{k}\lambda} e^{-i(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r})} + (\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} \hat{C}_{\mathbf{k}\lambda} e^{-i(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r})})^* \}$$

здесь $\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda}$ — вектор поляризации.

Кулоновская калибровка.

$$\text{div } \mathbf{A} = 0$$

Возводя в квадрат, будем считать, что квадрат потенциала пренебрежимо мал. В кулоновской калибровке операторы $\hat{\mathbf{p}}$, $\hat{\mathbf{A}}$ коммутируют. Таким образом, задачу можно сформулировать следующим образом:

$$\left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}^{(0)} - \hat{V}^{(0)} \right\} \Psi(\mathbf{r}, t) = 0$$

$$\hat{H}^{(0)} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(\mathbf{r}), \quad \hat{V}^{(1)} = -\frac{e}{mc} \mathbf{A} \hat{\mathbf{p}}$$

Оператор возмущения записывается в виде суммы двух слагаемых

$$\hat{V}^{(1)} = \hat{V} + \hat{V}^+$$

$$\hat{V}^+ = -\frac{e}{mcL^{3/2}} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\lambda} \sqrt{\frac{2\pi c^2 \hbar}{\omega}} \left(e^{i(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r})} \hat{C}_{\mathbf{k}\lambda}^+ (\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda}^* \hat{\mathbf{p}}) \right)$$

11.4.2 Временная теория возмущений. Золотое правило Ферми

Рассмотрим одно слагаемое и выражения для \hat{V}^+ ,

$$\hat{V}_{\mathbf{k}} = \hat{V}_{\mathbf{k}}^{0+} e^{i\omega t}$$

При помощи временной теории возмущений найдём вероятность переходов в единицу времени.

$$W_{nn'} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{knn'}^{0+}|^2 \delta(E_{n'} - E_n + \hbar\omega)$$

При фиксации состояний излучение будет идти только на частоте $\omega \rightarrow \omega_{nn'}$.

В невозмущённой задаче

$$|E_n\rangle \otimes |\dots N_{\mathbf{k}\lambda} \dots\rangle = |E_n; \dots N_{\mathbf{k}\lambda} \dots\rangle$$

Рассмотрим однофотонный процесс, для него выполняется условие

$$\omega = ck$$

Хотим, чтобы одновременно излучался фотон, имеющий ровно такую связь.

Что означает, что должен излучаться только один фотон?

Общая структура матричного элемента должна иметь вид

$$V_{nn'}^{0+} = \langle E_n; \dots N'_{\mathbf{k}\lambda} \dots | \hat{V}^{0+} | E_n; \dots N_{\mathbf{k}\lambda} \dots \rangle$$

Число фотонов должно увеличиться на единицу:

$$N'_{\mathbf{k}\lambda} = N_{\mathbf{k}\lambda} + 1$$

$$\langle \dots N_{\mathbf{k}\lambda} + 1 \dots | \hat{C}_{\mathbf{k}\lambda}^+ | \dots N_{\mathbf{k}\lambda} \dots \rangle = \sqrt{N_{\mathbf{k}\lambda} + 1}$$

При такой постановке начального и конечного условий вклад матричного элемента даёт единственное слагаемое из всей суммы.

Пока мы не знаем энергию. Введём обозначение $\mathbf{p}_{n'n}$. Это среднее значение оператора $\hat{\mathbf{p}}$.

$$\mathbf{p}_{n'n} = \int d^3\mathbf{r} \Psi_{n'}^{(0)*}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \hat{\mathbf{p}} \Psi_n^{(0)}(\mathbf{r})$$

Находим квадрат модуля матричного элемента.

$$|V_{n'n}^{0+}|^2 = \left(\frac{e}{mc}\right)^2 \frac{1}{L^3} \left(\frac{2\pi c^2 \hbar}{\omega}\right) |\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} \mathbf{p}_{n'n}|^2 \cdot (N_{\mathbf{k}\lambda} + 1)$$

Пока мы не готовы провести все преобразования до конца. При квантовании электромагнитного поля мы рассматривали его в кубе большого размера L циклическими граничными условиями. При этом как энергия, так и компоненты волнового вектора дискретны. В обычной жизни фотоны имеют непрерывный спектр.

ГЛАВА 11. ТОЖДЕСТВЕННЫЕ ЧАСТИЦЫ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

Дельта-функция должна сниматься в результате интегрирования по энергиям конечных состояний. Должен получиться множитель, представляющий энергетическую плотность конечных состояний.

Расстояние между ближайшими значениями компонент волнового вектора

$$\Delta k_x = \Delta k_y = \Delta k_z = \frac{2\pi}{L}$$

Таким образом, прорабатывая переход от суммам к интегралу, получаем

$$\frac{1}{L^3} \sum_{\mathbf{k}} F(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{k}} F(\mathbf{k}) \frac{\Delta k_x}{2\pi} \frac{\Delta k_y}{2\pi} \frac{\Delta k_z}{2\pi} \rightarrow \int (\dots)$$

$$\boxed{\frac{1}{L^3} \sum_{\mathbf{k}} F(\mathbf{k}) \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \int \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3} F(\mathbf{k})}$$

В сферической системе координат

$$d^3 \mathbf{k} = k^2 dk d\Omega$$

По углам вылета фотона Ω интегрировать пока не будем. Получим дифференциальное сечение вероятности.

Совершая эти преобразования, учитывая $E_k = \hbar\omega = \hbar kc$, окончательно получаем

$$\begin{aligned} dW_{nn'} &= \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{e}{mc} \right)^2 \frac{1}{L^3} \left(\frac{2\pi c^2 \hbar}{\omega} \right) |e_{\mathbf{k}\lambda}^* \mathbf{p}_{n'n}|^2 (N_{\mathbf{k}\lambda} + 1) \cdot \frac{L^3}{(2\pi)^3} \frac{k^2 dk d\Omega}{dE_k} \\ &\quad \boxed{\hbar\omega_{nn'} = E_n - E_{n'}} \\ &= \left(\frac{e}{m} \right)^2 \left(\frac{1}{\omega} \right) |e_{\mathbf{k}\lambda}^* \mathbf{p}_{n'n}|^2 (N_{\mathbf{k}\lambda} + 1) \cdot \frac{1}{(2\pi)} \frac{k^2 dk d\Omega}{dE_k} \end{aligned}$$

Кроме того,

$$\frac{k^2 dk d\Omega}{dE_k} = \frac{k^2 dk d\Omega}{\hbar c dk} = \frac{\omega^2 d\Omega}{\hbar c^3}$$

Подставляя, получаем

$$\boxed{dW_{nn'}^\lambda = \frac{e^2}{\hbar c} \cdot \frac{\omega_{nn'}}{2\pi} \left| \frac{(e_{\mathbf{k}\lambda}^* \mathbf{p}_{n'n})}{mc} \right| (N_{\mathbf{k}\lambda} + 1) d\Omega}$$

Эта формула предполагает излучение фотонов с определённой поляризацией. Хочется уметь измерять излучение всех фотонов независимо от поляризации. Просуммируем вероятность по поляризациям конечных фотонов.

$$\sum_{\lambda=1,2} (e_{\mathbf{k}\lambda})_i (e_{\mathbf{k}\lambda})_j N_{\mathbf{k}\lambda} = A(\mathbf{k}) \delta_{ij} + B(\mathbf{k}) k_i k_j$$

Ответ не может иметь другой вид, потому что это единственно возможные симметричные тензоры. Здесь A, B — некоторые коэффициенты. Найдём их.

- Поперечность поля. $(\mathbf{e}\mathbf{k}) = 0$

$$0 = (A(\mathbf{k}) + B(\mathbf{k})k^2)k_j$$

$$B(\mathbf{k}) = -\frac{A(\mathbf{k})}{k^2}$$

- $(\mathbf{e}^*\mathbf{e}) = 1$.

$$\sum_{\lambda} N_{\mathbf{k}\lambda} = N_1 + N_2 = 3A(\mathbf{k}) + B(\mathbf{k})k^2 = 2A(\mathbf{k})$$

Таким образом,

$$A(\mathbf{k}) = \frac{N_1 + N_2}{2} \stackrel{\text{def}}{=} N(\mathbf{k})$$

Это усреднённое по поляризациям число начальных фотонов.

Сформулируем само правило.

$$\boxed{\sum_{\lambda=1,2} (\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda})_i (\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda}^*)_j (N_{\mathbf{k}\lambda} + 1) = (N(\mathbf{k}) + 1) \left(\delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2} \right)}$$

Применим эту формулу к чему-нибудь. Обозначим для краткости $\mathbf{k}^0 \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{k}/|\mathbf{k}|$

$$\sum_{\lambda=1,2} (\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda})_i (\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda}^*)_j (\mathbf{p}_{n'n}^*)_i (\mathbf{p}_{n'n})_j (N_{\mathbf{k}\lambda} + 1) = (N(\mathbf{k}) + 1) \left((\mathbf{p}_{n'n}^* \mathbf{p}_{n'n}) - (\mathbf{p}_{n'n}^* \mathbf{k}^0)(\mathbf{p}_{n'n} \mathbf{k}^0) \right)$$

Если ввести систему координат, в которой ось z направлена вдоль волнового вектора, то выражение приобретает вид

$$\boxed{\sum_{\lambda=1,2} (\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda})_i (\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda}^*)_j (\mathbf{p}_{n'n}^*)_i (\mathbf{p}_{n'n})_j (N_{\mathbf{k}\lambda} + 1) = |[\mathbf{k}^0 \times \mathbf{p}_{n'n}]|^2 (N(\mathbf{k}) + 1)}$$

$$dW_{nn'} = \frac{e^2}{\hbar c} \cdot \frac{\omega_{nn'}}{2\pi} S_{\text{изл.}} d\Omega,$$

где

$$S_{\text{изл.}} = \left| \frac{[\mathbf{k} \times \mathbf{p}_{n'n}]}{mc} \right|^2 (N(\mathbf{k}) + 1)$$

Замечание. Эта формула показывает, что дифференциальная вероятность состоит из двух слагаемых. Первое слагаемое пропорционально числу квантов электромагнитного поля, уже бывших в системе. Таким образом, имеется некоторое поле, излучение которого, воздействуя на нашу систему, вызывает излучение фотона (индуцированное излучение).

Второе слагаемое пропорционально единице. Это слагаемое обеспечивает возможность излучения в случае, если в системе фотонов не было (спонтанное излучение).

11.4.3 Излучение в дипольном приближении

Именно эта часть имеет практический смысл.

Приблизим экспоненту рядом Тейлора, затем отбросим всё кроме единицы.

$$\mathbf{p}_{n'n} \approx \int d^3x \Psi_{n'}^{(0)*}(\mathbf{r})(1 - i(\mathbf{k}\mathbf{r}) + \dots)\hat{\mathbf{p}}\Psi_n^{(0)}(\mathbf{r})$$

$$|\mathbf{k}\mathbf{r}| \ll |\mathbf{k}| \cdot |\mathbf{r}| \sim \frac{\omega}{c}a \sim \frac{\hbar\omega}{\hbar c}a \sim \frac{e^2}{\hbar c} = \alpha \approx \frac{1}{137} \ll 1$$

Если учитывать это слагаемое, получим *квадрупольное излучение*.

Есть такая формула

$$\frac{d\hat{\mathbf{r}}}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{\mathbf{r}}] = \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m}$$

Отсюда

$$\begin{aligned} \frac{1}{m}\mathbf{p}_{n'n} &= \frac{i}{\hbar}\langle n'|\hat{H}\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{r}}\hat{H}|n\rangle \\ &= \frac{i}{\hbar}(E_{n'} - E_n)\langle n'|\mathbf{r}|n\rangle \\ &= -i\omega_{n'n}\mathbf{r}_{n'n} \end{aligned}$$

$$\boxed{\frac{1}{m}\mathbf{p}_{n'n} = -i\omega_{nn'}\mathbf{r}_{n'n}}$$

Для дипольного момента $\hat{\mathbf{d}} = e\hat{\mathbf{r}}$.

В дипольном приближении дифференциальная вероятность принимает вид.

$$\boxed{dW_{nn'}^{\text{дип}} = \frac{e^2}{\hbar c} \frac{\omega_{nn'}^3}{2\pi c^2} |[\mathbf{k}^0 \times \mathbf{r}_{n'n}]|^2 (N(\mathbf{k}) + 1) d\Omega}$$

Полная вероятность получается интегрированием по углам.

$$W_{nn'}^{\text{дип.}}$$