# Задание по практике от 17 июля

**Автор**: Хоружий Кирилл
**Соавтор**: Примак Евгений

**От**: *17 июля 2021 г.*

## Первая задача. Трансляция импульса

Вводя импульс из трансляции координаты, нашли
$$\hat{\boldsymbol{p}} = -i\hbar\nabla, \quad \Leftrightarrow \quad e^{ik_p\hat{p}}|x\rangle = |x - k_p\hbar\rangle, \quad k_p = \frac{\Delta x}{\hbar}.$$
Для оператора $\hat{p}$ можем найти собственные состояния, как
$$i\hbar\nabla\psi = \boldsymbol{p}\psi, \quad \Rightarrow \quad \psi_p = \text{const}\cdot e^{ipr/\hbar} = e^{ipr/\hbar},$$
где равенство const $= 1$ можем получить из требований нормировки. Тогда волновую функцию можем записать в координатном представление:
$$\psi(\boldsymbol{x}) = \int a(\boldsymbol{p})\psi_p(\boldsymbol{x})\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} = \int a(\boldsymbol{x})e^{ip\cdot r/\hbar}\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3},$$
где $a(\boldsymbol{p})$ – волновая функция в импульсном представление, которую находим, как коэффициенты в разложение по Фурье (так вышло):
$$a(\boldsymbol{p}) = \int \psi(\boldsymbol{x})\psi_p^*(\boldsymbol{x})\,dV = \int \psi(\boldsymbol{x})e^{-ip\cdot r/\hbar}\,dV.$$

Запишем $\langle r\rangle$ в импульсном и координатном представление:
$$\langle\boldsymbol{x}\rangle \overset{(1)}{=} \int \psi^*(\boldsymbol{x})\,\hat{\boldsymbol{x}}\,\psi(\boldsymbol{x})\,dV \overset{(2)}{=} \int a(\boldsymbol{p})\,\hat{\boldsymbol{x}}\,a(\boldsymbol{p})\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}.$$
Интегрируя по частям выражение для $\boldsymbol{x}\psi(\boldsymbol{x})$, можем получить
$$\boldsymbol{x}\psi(\boldsymbol{x}) = \int \boldsymbol{x}a(\boldsymbol{p})e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}/\hbar}\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} = \int i\hbar e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}/\hbar}\partial_{\boldsymbol{p}}a(\boldsymbol{p})\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3},$$
что подставляя в (1), находим
$$\langle r\rangle = \int \psi^*(\boldsymbol{x})e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}/\hbar}\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}\int i\hbar\partial_{\boldsymbol{p}}a(\boldsymbol{p})\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} = \int a^*(\boldsymbol{p})i\hbar\partial_{\boldsymbol{p}}a(\boldsymbol{p})\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3},$$
где был переставлен порядок интегрирования. Сравнивая это выражение с (2), получаем замечательное выражение
$$\hat{\boldsymbol{x}} = i\hbar\partial_{\boldsymbol{p}},$$
в импульсном представление.

Приходим к двум очень похожим ситуациям для канонически сопряжённых переменных
$$\begin{aligned} \hat{\boldsymbol{p}} &= -i\hbar\nabla, & \Leftrightarrow \quad & e^{ik_p\hat{p}}|x\rangle = |x - k_p\hbar\rangle, \\ \hat{\boldsymbol{x}} &= i\hbar\partial_{\boldsymbol{p}}, & \Leftrightarrow \quad & e^{ik_x\hat{x}}|p\rangle = |p + k_x\hbar\rangle, \end{aligned}$$
где вывод для трансляции импульса аналогичен демонстрации явного вида $\hat{\boldsymbol{p}}$, как траляции координаты (Сакурай, 1.7.15), или, чуть более явно, можно разложить $a(\boldsymbol{p} + \hbar k)$ в ряд, тогда возникнет
$$a(p - \hbar k) = \left[1 + \frac{i}{\hbar}\hbar k\hat{\boldsymbol{x}} + \frac{1}{2}\left(\frac{i}{\hbar}\hbar k\hat{\boldsymbol{x}}\right)^2 + \ldots\right]a(p),$$
где выражение в квадратных скобках и есть $\exp(ik\hat{\boldsymbol{x}})$.

## Вторая задача. Коммутационные соотношения

Известно, что $\hat{H} = \hbar\nu\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\hat{\boldsymbol{I}} + \hbar\omega\hat{S}_z$. Найдём значения $[H,\, J^2]$ и $[H,\, J_z]$, где $\hat{\boldsymbol{J}} = \hat{\boldsymbol{S}} + \hat{\boldsymbol{I}}$.

Для начала заметим, что
$$\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\hat{\boldsymbol{I}} = \frac{1}{2}\left(\hat{\boldsymbol{J}}^2 - \hat{\boldsymbol{S}}^2 - \hat{\boldsymbol{I}}^2\right), \qquad \hat{J}_i\hat{J}^i = \hat{I}_j\hat{I}^j + 2\hat{S}_j\hat{I}^j + \hat{S}_j\hat{S}^j,$$

далее для удобства опусти шляпки у операторов и проигнорируем баланс индексов, за ненадобностью. Для начала найдём коммутатор для $S_iI_i$:

$$\hbar\nu\left[S_iI_i,\, I_jI_j+S_jS_j+2S_jI_j\right]=\hbar\nu\left(2S_iI_iS_jI_j+S_iI_iI^2+S_iI_iS^2-2S_jI_jS_iI_i-I^2S_iI_i-S^2S_iI_i\right).$$

Временно опуская $\hbar\nu$ и вспоминая, что $[S_i, I_j]=0$, а также что $[I_i, I^2]=[S_i, S^2]=0$, находим

$$\left[S_iI_i,\, J^2\right]\sim 2\left(S_iS_jI^iI^j-S_jS_iI^jI^i\right)+S_i\left[I_i,\, I^2\right]+I_i\left[S_i,\, S^2\right]=0.$$

Теперь найдём часть с $S_z$ (считая правой тройку $xyz$):

$$\left[S_z,\, J^2\right]=2(S_zS_iI_i-S_iS_zI_i)+S_zS_iS_i-S_iS_iS_z=2I_i\left[S_z,\, S_i\right]=2I_i\varepsilon_{zik}S_k=2i\hbar\left(I_xS_y+I_yS_x\right).$$

Так находим, что

$$\left[\hat{H}, \hat{J}^2\right]=2i\hbar^2\nu\left(\hat{I}_x\hat{S}_y+\hat{I}_y\hat{S}_x\right)\neq 0,$$

то есть они не коммутируют.

Найдём теперь $\left[\hat{H},\, \hat{J}_z\right]$. Очевидно, что $[S_z,\, S_z+I_z]=0$, так что осталось рассмотреть

$$\begin{aligned}\left[S_iI_i,\, I_z+S_z\right]&=S_iI_iI_z-I_zS_iI_i+S_iI_iS_z-S_zS_iI_i=S_i\left[I_i,\, I_z\right]+I_i\left[S_i,\, S_z\right]=\\&=i\hbar\left(S_i\varepsilon_{izk}I_k+I_i\varepsilon_{izk}S_k\right)=i\hbar\left(-S_xI^y+S_yI_x-I_xS_y+I_yS_x\right)=0,\end{aligned}$$

таким образом нашли, что $\hat{H}$ и $\hat{J}_z$ коммутируют:

$$\left[\hat{H},\, \hat{J}_z\right]=0.$$

## Третья задача. Эффект Зеемана

**Решение в общем случае**. Найдём собственные состояния и собственные значения для гамильтониана вида

$$\hat{H}_p=\hbar\nu\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\hat{\boldsymbol{I}}+\hbar\omega S_z,$$

а именно посчитаем матричные элементы

$$\mathcal{M}=\langle S_z'',\, I_z''\,|\hat{H}_p|\,S_z',I_z'\rangle=\begin{array}{c c}
 & \begin{array}{cccc} |{+}{+}\rangle & |{-}{+}\rangle & |{+}{-}\rangle & |{-}{-}\rangle \end{array}\\
\begin{array}{c}\langle{+}{+}|\\ \langle{-}{+}|\\ \langle{+}{-}|\\ \langle{-}{-}|\end{array} & \begin{pmatrix} \dots & 0 & 0 & 0\\ 0 & \dots & \dots & 0\\ 0 & \dots & \dots & 0\\ 0 & 0 & 0 & \dots \end{pmatrix}
\end{array}$$

в базисе $\mathfrak{B}_1\overset{\text{def}}{=}\{\hat{\boldsymbol{S}}^2,\, \hat{S}_z,\, \hat{\boldsymbol{I}}^2,\, \hat{I}_z\}$, точнее $|S_z,\pm;I_z,\pm\rangle\overset{\text{def}}{=}|\pm,\pm\rangle$ и найдём собственные значения и собственные состояния получившейся матрицы.

Не совсем понятно, как быстро посчитать действие $\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\hat{\boldsymbol{I}}$ на $|\pm,\pm\rangle$, однако мы отлично умеем действовать $\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\hat{\boldsymbol{I}}$ на $|\pm,\pm\rangle$ в базисе $\mathfrak{B}_2\overset{\text{def}}{=}\{\hat{\boldsymbol{J}}^2,\, J_z,\, \hat{\boldsymbol{S}}^2,\, \hat{\boldsymbol{I}}^2\}$:

$$\begin{aligned}\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\hat{\boldsymbol{I}}&=\tfrac{1}{2}(\hat{\boldsymbol{J}}^2-\hat{\boldsymbol{S}}^2-\hat{\boldsymbol{I}}^2)\\ \hat{\boldsymbol{J}}^2|j,\, m\rangle&=\hbar^2j(j+1)|j,\, m\rangle\end{aligned}\quad\Rightarrow\quad \hbar\nu\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\hat{\boldsymbol{I}}|J,\, J_z\rangle=\begin{cases}\ \ \frac{1}{4}\hbar\nu, & J=1,\\ -\frac{3}{4}\hbar\nu, & J=0;\end{cases}$$

в случае $1s$ орбитали электрона.

Более того, мы уже выводили собственные состояния $\mathfrak{B}_2$ выраженные через собственные состояния $\mathfrak{B}_1$:

$$\begin{aligned}
|J=1,\, J_z=1\rangle&=|{+}{+}\rangle, & |{+}{+}\rangle&=|J=1,\, J_z=1\rangle;\\
|J=1,\, J_z=-1\rangle&=|{-}{-}\rangle, & |{-}{-}\rangle&=|J=1,\, J_z=-1\rangle;\\
|J=1,\, J_z=0\rangle&=\tfrac{1}{\sqrt{2}}|{+}{-}\rangle+\tfrac{1}{\sqrt{2}}|{-}{+}\rangle, & |{+}{-}\rangle&=\tfrac{1}{\sqrt{2}}|J=1,\, J_z=0\rangle+\tfrac{1}{\sqrt{2}}|J=0,\, J_z=0\rangle;\\
|J=0,\, J_z=0\rangle&=\tfrac{1}{\sqrt{2}}|{+}{-}\rangle-\tfrac{1}{\sqrt{2}}|{-}{+}\rangle, & |{+}{-}\rangle&=\tfrac{1}{\sqrt{2}}|J=1,\, J_z=0\rangle-\tfrac{1}{\sqrt{2}}|J=0,\, J_z=0\rangle;
\end{aligned}$$

чем мы и воспользуемся для поиска $\mathcal{M}$.

В качестве примера найдём $\hat{H}_p|{+}{-}\rangle$, остальные найдём аналогично:

$$\hat{H}_p|{+}{-}\rangle=\hbar\nu\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\hat{\boldsymbol{I}}\left(\frac{1}{\sqrt{2}}|J=1,\, J_z=0\rangle+\frac{1}{\sqrt{2}}|J=0,\, J_z=0\rangle\right)+\frac{1}{2}\hbar\omega|{+}{-}\rangle=\frac{1}{2}\hbar\omega|{+}{-}\rangle+\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{1}{4}\hbar\nu-\frac{3}{4}\hbar\nu\right),$$

так получаем четыре вектора $\hat{H}_p|\pm\pm\rangle$, действуя на них соответсующим набором бра-векторов, находим $\mathcal{M}$

$$\begin{aligned}
&\hat{H}_p|++\rangle = \tfrac{1}{4}|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle(\hbar\nu+2\hbar\omega);\\
&\hat{H}_p|-+\rangle = \tfrac{1}{2}\hbar\nu|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle - \tfrac{1}{4}|-\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle(\hbar\nu+2\hbar\omega);\\
&\hat{H}_p|+-\rangle = \tfrac{1}{2}\hbar\nu|-\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle - \tfrac{1}{4}|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle(\hbar\nu-2\hbar\omega);\\
&\hat{H}_p|--\rangle = \tfrac{1}{4}|-\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle(\hbar\nu-2\hbar\omega).
\end{aligned}
\quad\Rightarrow\quad
\mathcal{M} = \frac{\hbar}{4}\begin{pmatrix} \nu+2\omega & 0 & 0 & 0\\ 0 & -\nu-2\omega & 2\nu & 0\\ 0 & 2\nu & 2\omega-\nu & 0\\ 0 & 0 & 0 & \nu-2\omega \end{pmatrix}.$$

Запишем характерестическое уравнение для $\mathcal{M}$:

$$\det(\mathcal{M}-\hbar\lambda_\hbar\mathbb{1}) = \frac{\hbar^4}{256}(4\lambda_\hbar-\nu-2\omega)(4\lambda_\hbar-\nu+2\omega)\left(16\lambda_\hbar^2+8\lambda_\hbar\nu-3\nu^2-4\omega^2\right)=0,$$

где введено $\lambda_\hbar = \lambda/\hbar$. Теперь находим спектр, соответсвтующий энергетическим сдвигам:

$$\lambda_1 = \frac{\hbar}{4}(\nu-2\omega),\quad \lambda_2 = \frac{\hbar}{4}(\nu+2\omega),\quad \lambda_3 = \frac{\hbar}{4}\left(-2\sqrt{\nu^2+\omega^2}-\nu\right),\quad \lambda_4 = \frac{\hbar}{4}\left(2\sqrt{\nu^2+\omega^2}-\nu\right).$$

Не мудрствуя лукаво, сразу же построим количественный график для их поведения, положив $\nu=1$, $\hbar=1$: рис. 1.

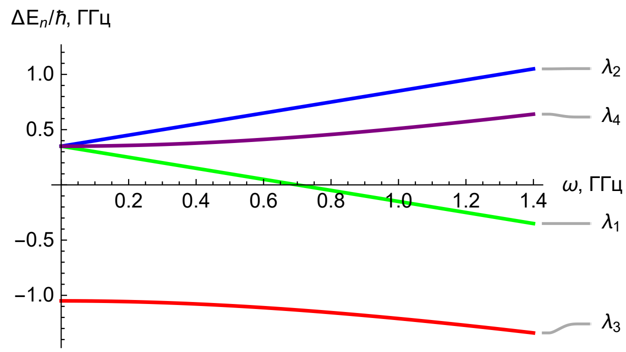


Рис. 1: Поведение энергетических сдвигов при различной силе внешнего поля $B(\omega)$: $\omega\sim\nu_{\rm hf}$.

где ГГц можем, если что, пересчитать в Гс, домножим на $\frac{cm_e}{e}\times 10^9\times 10^{-4}\approx 170$, что сходится с масштабами, приведенными на презентации. Приведём для наглядности аналогичную зависимость в другом масштабе.

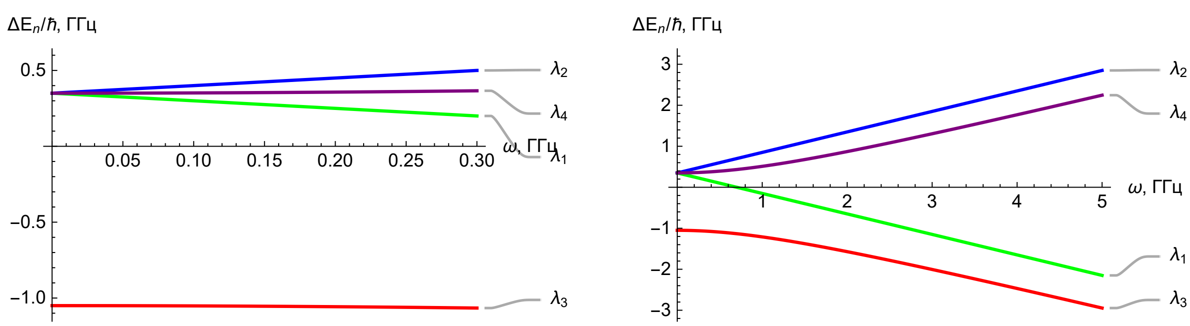


Рис. 2: Поведение энергетических сдвигов при $\omega\ll\nu_{\rm hf}$ и $\omega\gg\nu_{\rm nf}$.

Также можем найти собственные векторы для $\mathcal{M}$, соответствующие собственным состояниям $\hat{H}_p$:

$$\boldsymbol{v}_1^{\rm T} = \{0,0,0,1\},\qquad \boldsymbol{v}_2^{\rm T} = \{1,0,0,0\},\qquad \boldsymbol{v}_3^{\rm T} = \left\{0,-\frac{\sqrt{\nu^2+\omega^2}+\omega}{\sqrt{2}\sqrt{\omega\sqrt{\nu^2+\omega^2}+\nu^2+\omega^2}},\frac{\nu}{\sqrt{2}\sqrt{-\omega\sqrt{\nu^2+\omega^2}+\nu^2+\omega^2}},0\right\},$$

$$\boldsymbol{v}_4^{\rm T} = \left\{0,\frac{\nu}{\sqrt{2}\sqrt{\omega\sqrt{\nu^2+\omega^2}+\nu^2+\omega^2}},\frac{\nu}{\sqrt{2}\sqrt{-\omega\sqrt{\nu^2+\omega^2}+\nu^2+\omega^2}},0\right\}.$$

Стоит заметить, что в пределе $\nu\to 0$, собственные значения переходя в $\pm\omega/2$, а при $\omega\to 0$ спектр $\operatorname{spec}\mathcal{M}$ перейдёт в $\left\{\frac{\hbar\nu}{4},-\frac{3}{4}\hbar\nu\right\}$.

Аналогичное соответствие наблюдается для собственных значений:

$$\nu \to 0, \;\Rightarrow\; \{\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \boldsymbol{v}_3, \boldsymbol{v}_4\} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \omega \to 0, \;\Rightarrow\; \{\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \boldsymbol{v}_3, \boldsymbol{v}_4\} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

где я вроде бы перепутал порядок $\boldsymbol{v}_i$, но суть должна быть ясна.

Собственно, эти пределы и можно рассматривать как $B \approx 0$ и $B \to \infty$, а именно

$$B \to \infty \;\Leftrightarrow\; \nu \ll \omega, \qquad B \approx 0 \;\Leftrightarrow\; \nu \gg \omega.$$

Для численной оценки положим $\omega = \alpha\nu$, тогда

$$B = \frac{m_e c \omega}{|e|} = \alpha \frac{\nu_{\text{hf}} m_e c}{|e|} = \alpha \times 239\,\text{Гс},$$

откда и можем оценить характерные для водорода значения магнитного поля. Можем построить $\lambda_i/\lambda_i^{\text{approx}}$:

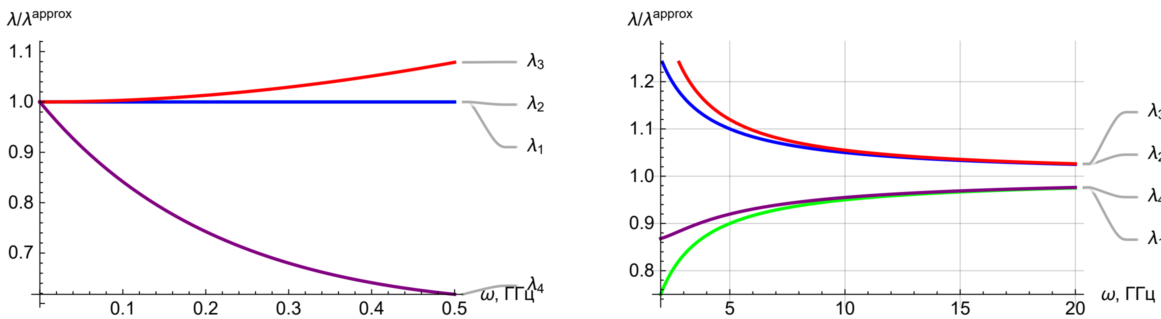


Рис. 3: Визуализация ошибки приближения: малые $\alpha \ll 1$ и большие $\alpha \gg 1$ (примерно).