

Автор: Хоружий Кирилл
Соавтор: Примаков Евгений

От: 17 июля 2021 г.

Первая задача. Трансляция импульса

Вводя импульс из трансляции координаты, нашли

$$\hat{p} = -i\hbar\nabla, \quad \Leftrightarrow \quad e^{ik_p\hat{p}}|x\rangle = |x - k_p\hbar\rangle, \quad k_p = \frac{\Delta x}{\hbar}.$$

Для оператора \hat{p} можем найти собственные состояния, как

$$i\hbar\nabla\psi = \mathbf{p}\psi, \quad \Rightarrow \quad \psi_p = \text{const} \cdot e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} = e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar},$$

где равенство $\text{const} = 1$ можем получить из требований нормировки. Тогда волновую функцию можем записать в координатном представлении:

$$\psi(\mathbf{x}) = \int a(\mathbf{p})\psi_p(\mathbf{x})\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} = \int a(\mathbf{x})e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3},$$

где $a(\mathbf{p})$ – волновая функция в импульсном представлении, которую находим, как коэффициенты в разложении по Фурье (так вышло):

$$a(\mathbf{p}) = \int \psi(\mathbf{x})\psi_p^*(\mathbf{x})dV = \int \psi(\mathbf{x})e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}dV.$$

Запишем $\langle r \rangle$ в импульсном и координатном представлении:

$$\langle \mathbf{x} \rangle \stackrel{(1)}{=} \int \psi^*(\mathbf{x})\hat{\mathbf{x}}\psi(\mathbf{x})dV \stackrel{(2)}{=} \int a(\mathbf{p})\hat{\mathbf{x}}a(\mathbf{p})\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}.$$

Интегрируя по частям выражение для $\mathbf{x}\psi(\mathbf{x})$, можем получить

$$\mathbf{x}\psi(\mathbf{x}) = \int \mathbf{x}a(\mathbf{p})e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar}\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} = \int i\hbar e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar}\partial_p a(\mathbf{p})\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3},$$

что подставляя в (1), находим

$$\langle r \rangle = \int \psi^*(\mathbf{x})e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar}\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \int i\hbar\partial_p a(\mathbf{p})\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} = \int a^*(\mathbf{p})i\hbar\partial_p a(\mathbf{p})\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3},$$

где был переставлен порядок интегрирования. Сравнивая это выражение с (2), получаем замечательное выражение

$$\hat{\mathbf{x}} = i\hbar\partial_p,$$

в импульсном представлении.

Приходим к двум очень похожим ситуациям для канонически сопряжённых переменных

$$\begin{aligned} \hat{p} &= -i\hbar\nabla, & \Leftrightarrow & e^{ik_p\hat{p}}|x\rangle = |x - k_p\hbar\rangle, \\ \hat{x} &= i\hbar\partial_p, & \Leftrightarrow & e^{ik_x\hat{x}}|p\rangle = |p + k_x\hbar\rangle, \end{aligned}$$

где вывод для трансляции импульса аналогичен демонстрации явного вида \hat{p} , как трансляции координаты (Сакурай, 1.7.15), или, чуть более явно, можно разложить $a(\mathbf{p} + \hbar\mathbf{k})$ в ряд, тогда возникнет

$$a(\mathbf{p} - \hbar\mathbf{k}) = \left[1 + \frac{i}{\hbar}\hbar\mathbf{k}\hat{\mathbf{x}} + \frac{1}{2}\left(\frac{i}{\hbar}\hbar\mathbf{k}\hat{\mathbf{x}}\right)^2 + \dots \right] a(\mathbf{p}),$$

где выражение в квадратных скобках и есть $\exp(i\mathbf{k}\hat{\mathbf{x}})$.

Вторая задача. Коммутационные соотношения

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

Для начала заметим, что

$$\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{I}} = \frac{1}{2}(\hat{J}^2 - \hat{S}^2 - \hat{I}^2), \quad \hat{J}_i\hat{J}^i = \hat{I}_j\hat{I}^j + 2\hat{S}_j\hat{I}^j + \hat{S}_j\hat{S}^j,$$

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

$$\hbar\nu [S_i I_i, I_j I_j + S_j S_j + 2S_j I_j] = \hbar\nu (2S_i I_i S_j I_j + S_i I_i I^2 + S_i I_i S^2 - 2S_j I_j S_i I_i - I^2 S_i I_i - S^2 S_i I_i).$$

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

$$[S_i I_i, J^2] \sim 2(S_i S_j I^i I^j - S_j S_i I^j I^i) + S_i [I_i, I^2] + I_i [S_i, S^2] = 0.$$

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

$$[S_z, J^2] = 2(S_z S_i I_i - S_i S_z I_i) + S_z S_i S_i - S_i S_i S_z = 2I_i [S_z, S_i] = 2I_i \varepsilon_{zik} S_k = 2i\hbar (I_x S_y + I_y S_x).$$

Так находим, что

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

то есть они не коммутируют.

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

$$\begin{aligned} [S_i I_i, I_z + S_z] &= S_i I_i I_z - I_z S_i I_i + S_i I_i S_z - S_z S_i I_i = S_i [I_i, I_z] + I_i [S_i, S_z] = \\ &= i\hbar (S_i \varepsilon_{izk} I_k + I_i \varepsilon_{izk} S_k) = i\hbar (-S_x I^y + S_y I_x - I_x S_y + I_y S_x) = 0, \end{aligned}$$

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

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

Третья задача. Эффект Зеемана

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

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

а именно посчитаем матричные элементы

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

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

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

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

в случае $1s$ орбитали электрона.

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

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

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

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

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

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

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

Запишем характеристическое уравнение для \mathcal{M} :

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

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

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

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

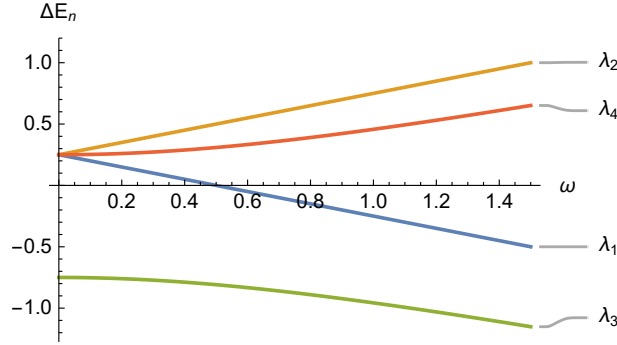


Рис. 1: Поведение энергетических сдвигов при различной силе внешнего поля $B \sim \omega$.

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

$$\begin{aligned}\mathbf{v}_1^T &= \{0, 0, 0, 1\}, \quad \mathbf{v}_2^T = \{1, 0, 0, 0\}, \quad \mathbf{v}_3^T = \left\{ 0, -\frac{\sqrt{\nu^2 + \omega^2} + \omega}{\sqrt{2}\sqrt{\omega\sqrt{\nu^2 + \omega^2} + \nu^2 + \omega^2}}, \frac{\nu}{\sqrt{2}\sqrt{-\omega\sqrt{\nu^2 + \omega^2} + \nu^2 + \omega^2}}, 0 \right\}, \\ \mathbf{v}_4^T &= \left\{ 0, \frac{\nu}{\sqrt{2}\sqrt{\omega\sqrt{\nu^2 + \omega^2} + \nu^2 + \omega^2}}, \frac{\nu}{\sqrt{2}\sqrt{-\omega\sqrt{\nu^2 + \omega^2} + \nu^2 + \omega^2}}, 0 \right\}.\end{aligned}$$

Стоит заметить, что в пределе $\nu \rightarrow 0$, собственные значения переходят в $\pm\omega/2$, а при $\omega \rightarrow 0$ спектр $\text{spec } \mathcal{M}$ перейдет в $\{\frac{\hbar\nu}{4}, -\frac{3}{4}\hbar\nu\}$.

Аналогичное соответствие наблюдается для собственных значений:

$$\nu \rightarrow 0, \Rightarrow \{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3, \mathbf{v}_4\} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \omega \rightarrow 0, \Rightarrow \{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3, \mathbf{v}_4\} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

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

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

$$B \rightarrow \infty \Leftrightarrow \nu \ll \omega, \quad B \approx 0 \Leftrightarrow \nu \gg \omega.$$

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

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

откуда и можем оценить характерные для водорода значения магнитного поля.