Задания по практике «Квантовая механика»

Автор: Хоружий Кирилл
Соавтор: Примак Евгений

От: *17 июля 2021 г.*

Содержание

1 Задание от 8 июля

Первая задача

Вообще собственные значение эрмитова линейного оператора в конечномерном пространстве вещественны, а собственные векторы, соответсвующие различным собственным значениеям, ортогональны. Действительно, пусть A – эрмитов оператор, α, β – собственные значение, отвечающие векторам $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}$, тогда:

$$(\alpha \boldsymbol{a},\, \boldsymbol{b}) = (A\boldsymbol{a},\, \boldsymbol{b}) = (\boldsymbol{a},\, A^\dagger \boldsymbol{b}) = (\boldsymbol{a},\, A\boldsymbol{b}) = (\boldsymbol{a},\, \beta \boldsymbol{b}) = \beta^*(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}),$$

тогда $(\alpha - \beta^*)(\boldsymbol{a},\, \boldsymbol{b}) = 0$, откуда выделяем два случая: 1) $\boldsymbol{a} = \boldsymbol{b}$, а тогда $\alpha = \alpha^*$; 2) $\boldsymbol{a} \neq \boldsymbol{b}$, откуда $\alpha \neq \beta$, тогда $(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}) = 0$ что и доказывает ортогональность.

Введенная аксиоматика квантовой механики позволяет провести аналогичные рассуждения для *эрмитова* оператора $\boldsymbol{A}$ и набора собственных состояний наблюдаемых системы $\{|q\rangle\}$.

$$\begin{aligned} \hat{A}|q'\rangle &= q'|q'\rangle, \\ \langle q''|\hat{A} &= q''^*\langle q''| \end{aligned} \quad \Rightarrow \quad \begin{aligned} \langle q''|\hat{A}|q'\rangle &= q'\langle q'' \mid q'\rangle \\ \langle q''|\hat{A}|q'\rangle &= q''^*\langle q'' \mid q'\rangle \end{aligned} \quad \Rightarrow \quad (q' - q''^*)\langle q'' \mid q'\rangle = 0,$$

сводящееся к аналогичным двум случаям говорящие о вещественности наблюдаемых и ортогональности собственных состояний.

Можно пойти с другой стороны, и потребовать вещественности среднего значения наблюдаемой, тогда

$$\langle q\rangle = \langle\Psi|A\Psi\rangle = \langle q\rangle^* \quad \Leftrightarrow \quad \langle\Psi \mid A\Psi\rangle = \langle\Psi \mid A\Psi\rangle^\dagger = \langle\Psi \mid A^\dagger\Psi\rangle,$$

для любого $\forall\ |\Psi\rangle$, что соответсвует операторному равенству $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$, которое по условию и выполняется.

Вторая задача

Магнитный момент заряженной частицы $\boldsymbol{\mu}$ и момент импульса $\boldsymbol{L}$, соответственно, равны

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{1}{2c}e\left[\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{v}\right], \qquad \boldsymbol{L} = \left[\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}\right] = \gamma m\left[\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{v}\right],$$

откуда можем найти их соотношение, считая $v \ll c$,

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{e}{2\gamma mc}\boldsymbol{L} \approx \frac{e}{2mc}\boldsymbol{L},$$

что в два раза отличается от встретившегося выражения для момента электрона

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{e}{m_e c}\boldsymbol{L}.$$

Третья задача

Можем просто посчитать оба оператора:

$$\begin{aligned} \hat{S}_x &= \tfrac{\hbar}{2}|+\rangle\langle-| + \tfrac{\hbar}{2}|-\rangle\langle+| \\ \hat{S}_y &= -\tfrac{i\hbar}{2}|+\rangle\langle-| + \tfrac{i\hbar}{2}|-\rangle\langle+| \end{aligned}$$

И найти $[\hat{S}_x,\, \hat{S}_y] \neq 0$:

$$[\hat{S}_x,\, \hat{S}_y] = \hat{S}_x\hat{S}_y - \hat{S}_y\hat{S} = \frac{i\hbar^2}{2}\left(|+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-|\right) \neq 0,$$

где воспользовались нормировкой состояний на 1 и ассоцитивностью.

Четвертая задача

Воспользуемся полнотой набора наблюдаемых, представляя $|\Psi\rangle$ как

$$|\Psi\rangle = \sum_a \langle a \mid \Psi\rangle|a\rangle,$$

и пременим к нему оператор $\hat{B} = \prod_a(\hat{A} - a)$,

$$\hat{B}|\Psi\rangle = |\Phi\rangle = \sum_a c_a|a\rangle,$$

где снова воспользовались разложением по базису.

Пусть нашлось такое значение a'', что $c_{a''} \neq 0$, тогда для некоторого a'

$$\hat{B}\langle a' \mid \Psi\rangle|a'\rangle \neq 0, \quad \Rightarrow \quad \langle a' \mid \Psi\rangle\big(\underbrace{\hat{A}|a'\rangle}_{a'|a'\rangle} - a'|a'\rangle\big) \neq 0,$$

таким образом пришли к противоречию. Следовательно $c_a = 0\ \forall a$, а тогда и $|\Phi\rangle = 0$ для любого $|\Psi\rangle$, что и даёт операторное равенство $\hat{B} = 0$.

2 Задание от 9 июля

Первая задача

Вероятность измерения $|S_x, +\rangle$ в базисе $\hat{S}_z$ равна 1/2, тогда

$$|\langle + \mid S_x, +\rangle|^2 = |\langle - \mid S_x, -\rangle|^2 = \frac{1}{2}, \quad \Rightarrow \quad \begin{aligned} |S_x, +\rangle &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle + \tfrac{e^{i\delta_1}}{\sqrt{2}}|-\rangle, \\ |S_x, -\rangle &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle - \tfrac{e^{i\delta_2}}{\sqrt{2}}|-\rangle, \end{aligned} \quad \Rightarrow \quad \begin{aligned} |S_x, +\rangle &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle + \tfrac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle, \\ \langle S_x \mid -\rangle &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle - \tfrac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle, \end{aligned}$$

где значение определены с точностью до глобальной фазы; можно показать, что $\delta_1 - \delta_2 = \pm\pi/2$. Теперь можем выразить $|\pm\rangle$ в базисе S_x и подставить в выражение для S_z:

$$\begin{aligned} |+\rangle &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}|S_x, +\rangle + \tfrac{1}{\sqrt{2}}|S_x, -\rangle \\ |-\rangle &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}|S_x, +\rangle - \tfrac{1}{\sqrt{2}}|S_x, -\rangle \end{aligned} \quad \Rightarrow \quad \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\Big(|+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-|\Big) = \frac{\hbar}{2}\Big(|S_x, +\rangle\langle S_x, -| + |S_x, -\rangle\langle S_x, +|\Big).$$

Вторая задача

Известно, что

$$\langle p \mid \alpha\rangle = C \exp\left(-\frac{(p - p_0)^2}{(\hbar k)^2}\right), \qquad \langle \alpha \mid \alpha\rangle = 1.$$

Для начала воспользуемся разложением по базису $|p\rangle$, тогда нормировка запишется в виде

$$\int dp\langle\alpha \underbrace{\mid p\rangle\langle p \mid}_{\equiv \mathbb{1}} \alpha\rangle = 1, \quad \Rightarrow \quad |C|^2 \int dp \exp\left(-\frac{2(p - p_0)^2}{(\hbar k)^2}\right) = |C|^2 \hbar k \sqrt{\frac{\pi}{2}} = 1, \quad \Rightarrow \quad |C| = \sqrt{\sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{1}{\hbar k}}.$$

Таким же разложением можем найти $\langle x \mid \alpha\rangle$:

$$\langle x \mid \alpha\rangle = \int dp, \langle x \mid p\rangle\langle p \mid \alpha\rangle = \kappa \int \exp\left(\frac{ipx}{\hbar} - \frac{(p - p_0)^2}{(\hbar k)^2}\right), \qquad \kappa = \left(\frac{\pi}{2}\right)^{1/4} \frac{1}{\pi\hbar\sqrt{k}}.$$

где воспользовались равенством $\langle x \mid p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ipx}{\hbar}}$. Выделяя полный квадрат

$$p^2 - 2p(p_0 + ix\hbar k^2) + p_0^2 == (p - p_0 - ix\hbar k^2/2)^2 - ix\hbar k^2 + x^2\hbar^2 k^4/4$$

, сводим интеграл к гауссову, и находим

$$\langle x \mid \alpha\rangle = \left(\frac{k^2}{2\pi}\right)^{1/4} \exp\left(\frac{-ixp_0\hbar k^2 + x^2\hbar^2 k^4/4}{(\hbar k)^2}\right).$$

Третья задача

По Сакураю (3.1.15) поворот в пространстве можем быть найден, как

$$D_z(\varphi) = \exp\left(-\frac{iJ_z\varphi}{\hbar}\right), \qquad J_x \to S_z.$$

Считая $|+\rangle\langle+| = a$, $|-\rangle\langle-| = b$, $\alpha = \frac{i\varphi}{2}$, находим:

$$-\frac{iS_z\varphi}{\hbar} = -\frac{i\varphi}{2}\Big(|+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-|\Big), \quad \begin{aligned} (a - b)^2 &= a + b \\ (a - b)^3 &= a - b \end{aligned} \quad \Rightarrow \quad D_z(\varphi) = 1 + \alpha(a - b) + \frac{\alpha^2}{2}(a + b) + \frac{\alpha^3}{3!}(a - b) + \ldots,$$

немного перегруппируя члены, и пользуясь представлением $\mathbb{1} = \sum |n\rangle\langle n|$, получаем

$$D_z(\varphi) = (1 - (a + b)) + a\left(1 + \alpha\tfrac{\alpha^2}{2} + \ldots\right) + b\left(1 - \alpha + \tfrac{\alpha^2}{2} - \ldots\right) = ae^{\alpha} + be^{-\alpha}.$$

Рассмотрим измерения в базисе S_φ – направления в плоскости Oxy повернутого на φ относительно Ox, тогда

$$\langle\alpha|S_\varphi|\alpha\rangle = {}_{R_{-\varphi}}\langle\alpha|S_x|\alpha\rangle_{R_{-\varphi}} = \langle\alpha \mid D_z^\dagger(-\varphi) S_x D_z(-\varphi) \mid \rangle, \qquad |\alpha\rangle_{R_\varphi} = D_z(\varphi)|\alpha\rangle.$$

Подставляя явное выражение для поворота и для S_x, находим

$$D_z^\dagger(\varphi)S_xD_z(\varphi)=\frac{\hbar}{2}e^{i\varphi}=\frac{\hbar}{2}\Big(|+\rangle\langle-|+|-\rangle\langle+|\Big)\cos\varphi-\frac{i\hbar}{2}\Big(-|+\rangle\langle-|+|-\rangle\langle+|\Big)\sin\varphi=\cos(\varphi)S_x-\sin(\varphi)S_y.$$

Наконец, подставляя $\varphi\to-\varphi$, из операторного равенства, находим значение для S_φ:

$$S_\varphi=\cos(\varphi)S_x+\sin(\varphi)S_y=\frac{\hbar}{2}e^{-i\varphi}|+\rangle\langle-|+\frac{\hbar}{2}e^{i\varphi}|-\rangle\langle+|.$$

Четвертая задача

Рассмотрим, в частности, поворот на малый угол $d\varphi$ относительно оси Oz

$$D_z(d\varphi)=1-\frac{i\,d\varphi}{\hbar}S_z,\qquad |\alpha\rangle_{d\varphi}=|\tilde{\alpha}\rangle=D_z(d\varphi)|\alpha\rangle.$$

Для начала найдём с точки зрения операторного равенства $\tilde{S}_{x,y,z}$:

$$\langle\tilde{\alpha}|S_z|\tilde{\alpha}\rangle=\langle\alpha|\tilde{S}_z|\alpha\rangle,\qquad\Rightarrow\qquad \tilde{S}_z=D\dagger_x(d\varphi)S_zD_z(d\varphi).$$

Подставляя выражения для S_z и для D_z, находим с точностью до членов порядка $d\varphi$

$$\tilde{S}_z=\left(1+\frac{i\,d\varphi}{\hbar}S_z\right)S_z\left(1-\frac{o\,d\varphi}{\hbar}S_z\right)=S_x-\frac{i\,d\varphi}{\hbar}S_z^2+\frac{i\,d\varphi}{\hbar}S_z^2+o(\,d\varphi),\qquad\Rightarrow\qquad\tilde{S}_z=S_z,$$

таким образом поворот не затрагивает S_z, что действительно похоже на поворот. Аналогично находим

$$\tilde{S}_x=S_x+\frac{i\,d\varphi}{\hbar}\,[S_x,\,S_z]+o(d\varphi)=S_x+S_y\,d\varphi+o(d\varphi),$$

и аналогично $\tilde{S}_y=S_y-S_x\,d\varphi+o(d\varphi)$. Здесь мы воспользовались выражением для коммутатора $S_{x,y,z}$:

$$[S_i,S_j]=i\hbar\varepsilon_{ijk}S_k.$$

Итого, с точностью до $o(d\varphi)$, находим преобразование «проекций», очень сильно похожих на инфинитезимальный поворот

$$\begin{aligned}\tilde{S}_x&=S_x+S_y\,d\varphi,\\ \tilde{S}_y&=S_y-S_x\,d\varphi,\\ \tilde{S}_z&=S_z.\end{aligned}$$

Пятая задача

В шестой задаче покажем, что

$$R_z(d\varphi)=1-\frac{i\,d\varphi}{\hbar}L_z=1-\frac{i\,d\varphi}{\hbar}(xp_y-yp_x),$$

где $\hat{L}_{x,y,z}$ удовлетворяет коммутативным свойствам и $\hat{L}=\hat{x}\times\hat{p}$.

Рассмотрим действие этого оператора на состояние $|x,y,z\rangle$, вспоминая, что $\hat{p}$ строился из оператора трансляции:

$$R_z(\,d\varphi)|x,y,z\rangle=\left(1-\frac{i\,d\varphi}{\hbar}p_yx+\frac{i\,d\varphi}{\hbar}p_xy\right)|x,y,z\rangle=|x-y\,d\varphi,\,y+x\,d\varphi,\,z\rangle,$$

с точностью до $o(d\varphi)$. Можно заметить, что это и есть инфинитезимальный поворот вокруг Oz.

Шестая задача

Оператор $L=\hat{x}\times\hat{p}$ удовлетворяет $[L_i,\,L_j]=i\varepsilon_{ijk}\hbar L_k$, по Сакураю (3.6.2). Тогда

$$\begin{aligned}[L_x,\,L_y]&=[yp_z-zp_y,\,zp_x-xp_z]=[yp_z,\,zp_x]+[zp_y,\,xp_z]=\\&=yp_x\,[p_z,z]+p_yx[z,\,p_z]=i\hbar\,(xp_y-yp_x)=i\hbar L_z,\end{aligned}$$

что и показывает корректность введения $\hat{L}$ через $\hat{x}$ и $\hat{p}$.

3 Задание от 14 июля

Первая задача

Для начала выпишем явный вид $\hat{S}_i$ в базисе S_z и найдём $\boldsymbol{S}^2$:

$$\begin{aligned}\hat{S}_z &= \tfrac{\hbar}{2}|+\rangle\langle+| - \tfrac{\hbar}{2}|-\rangle\langle-|;\\ \hat{S}_x &= \tfrac{\hbar}{2}|+\rangle\langle-| + \tfrac{\hbar}{2}|-\rangle\langle+|; \qquad \Rightarrow \quad \boldsymbol{S}^2 = S_i S_i = \frac{3\hbar^2}{4}\Big(|+\rangle\langle+| + |-\rangle\langle-|\Big) = \frac{3\hbar^2}{4}.\\ \hat{S}_y &= -\tfrac{i\hbar}{2}|+\rangle\langle-| + \tfrac{i\hbar}{2}|-\rangle\langle+|.\end{aligned}$$

Заметим, что для S_i верно коммутационные соотношения, аналогичные J:

$$[S_i,\, S_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}S_k, \qquad [J_i,\, J_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}J_k.$$

Так как рассуждение по собственным векторам J^2 и J_z (Сакурай, 3.5) опирается только на коммутационные соотношения для J_i, то аналогичным образом мы могли бы получить, что

$$\boldsymbol{S}^2|j,\, m\rangle = \hbar^2 j(j+1)|j,\, m\rangle,$$

где j, m – максимальный набор наблюдаемых и

$$a = \hbar^2 j(j+1), \qquad b = m\hbar,$$

с a, b собственными числамми операторов $\boldsymbol{S}^2$, S_z соответственно.

Частный случай. Посмотрим на явный величин и операторов, используемых в доказательстве 3.5 для S. Введём повышающий и понижающий операторы

$$S_\pm = S_x \pm iS_y = \hbar|\pm\rangle\langle\mp|,$$

заметим, что всё так же

$$S_\pm|+\rangle = \begin{bmatrix} 0, & \text{if } S_+ \\ \hbar|-\rangle, & \text{if } S_- \end{bmatrix} \qquad S_\pm|-\rangle = \begin{bmatrix} \hbar|+\rangle, & \text{if } S_+ \\ 0, & \text{if } S_- \end{bmatrix}$$

то есть $S_\pm$ переводит собственные состояния $|S_z,\, \pm\rangle$ в $|S_z,\, \pm\rangle$. Более того,

$$S_z S_\pm|\tfrac{3}{4}\hbar^2,\, \pm\tfrac{\hbar}{2}\rangle = \Bigg([S_z,\, S_\pm] + S_\pm S_z\Bigg)|a,\, b\rangle = (\pm\hbar + b)\, S_\pm|a,\, b\rangle,$$

где $b \in \left\{+\frac{\hbar}{2},\, -\frac{\hbar}{2}\right\}$, то есть $b_{\max} = +\frac{1}{2}\hbar$ и $b_{\min} = -\frac{1}{2}\hbar$.

Дейтсвительно, должно выполняться $\boldsymbol{S}^2 - S_z^2 = \frac{\hbar^2}{2} > 0$, точнее

$$\langle a,\, b|(\boldsymbol{S}^2 - S_z^2)|a,\, b\rangle \geqslant 0, \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} S_+|a,\, b_{\max}\rangle = 0 \\ S_-|a,\, b_{\min}\rangle = 0 \end{cases}$$

что мы уже и проверили. Также может быть интересно взглянуть на $S_\pm S_\mp$:

$$\begin{aligned} S_-S_+ &= S^2 - S_z^2 - \hbar S_z = \hbar^2|-\rangle\langle-| \\ S_+S_- &= S^2 - S_z^2 + \hbar S_z = \hbar^2|+\rangle\langle+| \end{aligned} \quad \overset{S_\pm S_\mp|a,b_{\max/\min}\rangle=0}{\Rightarrow} \quad \begin{aligned} &\tfrac{3}{4}\hbar^2 - b_{\max}^2 - b_{\max}\hbar = 0 \\ &\dots \end{aligned} \quad \Rightarrow \quad \begin{aligned} b_{\max} &= \tfrac{\hbar}{2}, \\ b_{\min} &= -\tfrac{\hbar}{2} = -b_{\max}, \end{aligned}$$

откуда можем указать, что $j = \frac{b_{\max}}{\hbar} = \frac{1}{2}$, и получить соотношение

$$\boldsymbol{S}^2|a,b\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|a,b\rangle, \qquad \frac{3}{4}\hbar^2 = a = \hbar^2 j(j+1), \qquad \Rightarrow \qquad \boldsymbol{S}^2|a,b\rangle = \hbar^2 j(j+1)|a,b\rangle, \qquad \text{Q. E. D.}$$

для b – собственного S_z состояния.

Вторая задача. Спин электрона в постоянном магнитном поле

Рассмотрим электрон в постоянном магнитном поле, то есть систему с гамильтонианом $\hat{H} = -\hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \bar{B} = \omega\hat{S}_z$, где $\omega = \frac{|e|B}{m_e c}$.

Знаем, что $|\alpha,\, t = 0\rangle = |S_x+\rangle$. Хотелось бы найти $|\alpha, t\rangle$ и вероятность пребывания в состояниях $S_{x,y,z}$ в момент времени t с указанным начальным условием.

Так как гамильтониан от времени явно не зависит, то очень просто выглядит оператор эволюции:

$$i\hbar\partial_t\hat{U} = \hat{H}\hat{U}, \qquad \Rightarrow \qquad \hat{U}(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) = \exp\left(-\frac{i\omega S_z}{\hbar}t\right).$$

В начальный момент времени сисетма находится в состоянии $|S_x, +\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle$, значит

$$|\alpha, t_0 = 0;\, t\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\exp\left(-\frac{i\omega t}{2}\right)|+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\exp\left(+\frac{i\omega t}{2}\right)|-\rangle,$$

аналогично рассуждению в третьей задаче от 9 июля (см. страницу 3), где был получен явный вид для $\exp\left(-\frac{iS_z\varphi}{\hbar}\right)$.

Теперь найдём соответствующие значения:

$$\begin{pmatrix} S_x \\ S_y \\ S_z \end{pmatrix} |\alpha, t\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left(-\frac{i\omega t}{2}\right) \begin{pmatrix} \frac{\hbar}{2}|-\rangle \\ \frac{i\hbar}{2}|-\rangle \\ \frac{\hbar}{2}|+\rangle \end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left(+\frac{i\omega t}{2}\right) \begin{pmatrix} \frac{\hbar}{2}|+\rangle \\ -\frac{i\hbar}{2}|+\rangle \\ -\frac{\hbar}{2}|-\rangle \end{pmatrix},$$

откуда уже можем посчитать

$$\langle\alpha, t|\hat{\boldsymbol{S}}|\alpha, t\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left(+\frac{i\omega t}{2}\right)\langle +| + \frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left(-\frac{i\omega t}{2}\right)\langle -|\right) \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left(-\frac{i\omega t}{2}\right) \begin{pmatrix} \frac{\hbar}{2}|-\rangle \\ \frac{i\hbar}{2}|-\rangle \\ \frac{\hbar}{2}|+\rangle \end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left(+\frac{i\omega t}{2}\right) \begin{pmatrix} \frac{\hbar}{2}|+\rangle \\ -\frac{i\hbar}{2}|+\rangle \\ -\frac{\hbar}{2}|-\rangle \end{pmatrix}\right) =$$

$$= \frac{\hbar}{4} \begin{pmatrix} e^{i\omega t} + e^{-i\omega t} \\ -i(e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}) \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos\omega t \\ \sin\omega t \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \Rightarrow \quad \boxed{\langle\alpha, t|\hat{\boldsymbol{S}}|\alpha, t\rangle = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos\omega t \\ \sin\omega t \\ 0 \end{pmatrix}},$$

что очень сильно похоже на правду.

Третья задача

Исследуемый оператор энергии сверхтонкого взаимодействия:

$$\hat{H} = \hbar\nu \hat{\boldsymbol{S}} \cdot \hat{\boldsymbol{I}},$$

введём оператор $\hat{\boldsymbol{F}} = \hat{\boldsymbol{S}} + \hat{\boldsymbol{I}}$, и воспользуемся соотношением и предыдущей задачи

$$\hat{\boldsymbol{J}}^2|j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1)|j, m\rangle, \qquad \hat{\boldsymbol{S}} \cdot \hat{\boldsymbol{I}} = \frac{1}{2}\left(\hat{\boldsymbol{F}}^2 - \hat{\boldsymbol{S}}^2 - \hat{\boldsymbol{I}}^2\right),$$

тогда, подставляя, находим

$$\hat{H} = \hbar\nu\left(\frac{f(f+1)}{2} - \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2} + 1\right) - 1(1+1)\right) = \hbar\nu\left(\frac{f(f+1)}{2} - \frac{11}{4}\right).$$

Для него собственные числа (энергетические сдвиги) можем найти, подставив $f = l + \frac{1}{2}$ и $f = l - \frac{1}{2}$, тогда соответствующие сдвиги: $\frac{1}{2}\hbar\nu$ и $-\hbar\nu$.

Соответствующие собственные значения, в таком случае:
$|F = \frac{3}{2}, F_z = +\frac{3}{2}\rangle$, $|F = \frac{3}{2}, F_z = -\frac{3}{2}\rangle$, $|F = \frac{3}{2}, F_z = +\frac{1}{2}\rangle$, $|F = \frac{3}{2}, F_z = -\frac{1}{2}\rangle$, $|F = \frac{1}{2}, F_z = +\frac{1}{2}\rangle$, $|F = \frac{1}{2}, F_z = -\frac{1}{2}\rangle$, где последние два соответсвуют сдвигу на $-\hbar\nu$. Нужно выразить вектора из одного базиса в другом.

4 Задание от 17 июля

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:

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

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

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

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

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

где вывод для трансляции импульса аналогичен демонстрации явного вида $\hat{\boldsymbol{p}}$, 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

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

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 $\mathfrak{B}_2 \overset{\text{def}}{=} \{\hat{\boldsymbol{J}}^2,\, J_z,\, \hat{\boldsymbol{S}}^2,\, \hat{\boldsymbol{I}}^2\}$:

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

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.

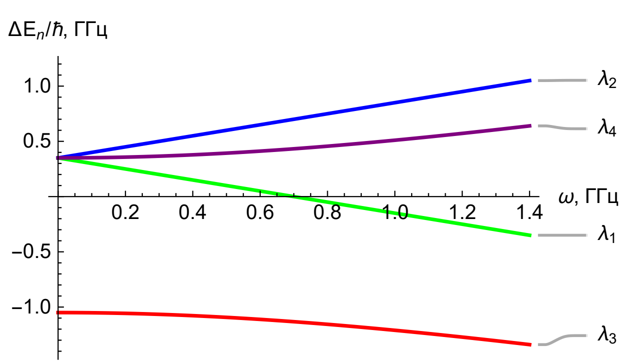

Рис. 1: Поведение энергетических сдвигов при различной силе внешнего поля $B(\omega)$: $\omega \sim \nu_{\text{hf}}$.

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.

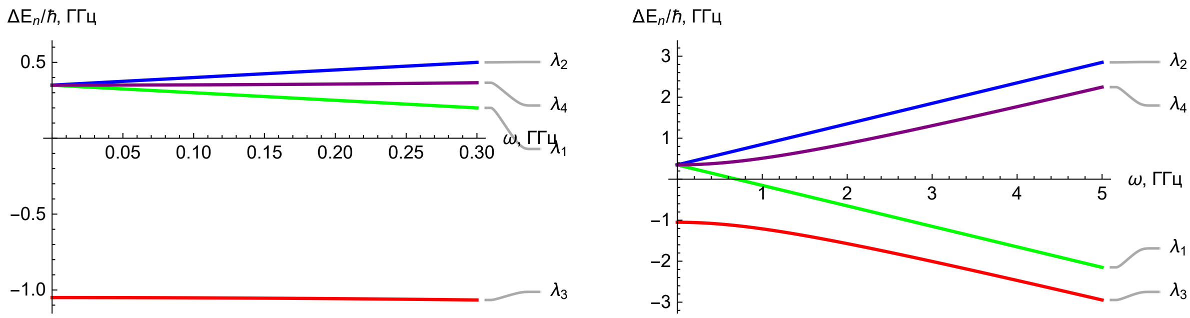

Рис. 2: Поведение энергетических сдвигов при $\omega \ll \nu_{\rm hf}$ и $\omega \gg \nu_{\rm nf}$.

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

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

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

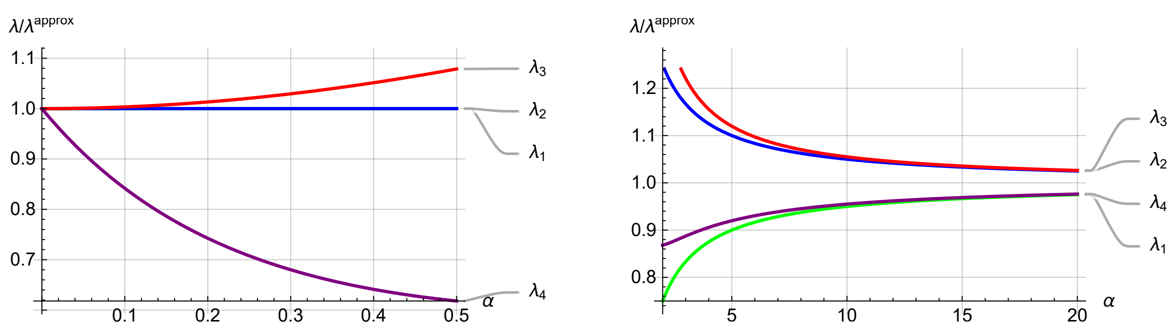

Рис. 3: Визуализация ошибки приближения: малые $\alpha \ll 1$ и большие $\alpha \gg 1$ (примерно).