QMW

I. Физическая система

Вопросы к физической системе:

- состояние физической системы, ее пространство состояний,
- наблюдаемые (измеряемые физические величины) физической системы,
- измерение наблюдаемой в данном состоянии (сопоставление паре наблюдаемая - состояние действительного числа),
- наблюдаемая, определяющая физическую систему (отличающая одну физическую систему от другой),
- динамика физической системы (определение состояния системы в будущем по заданному начальному состоянию).

Классическая теория (гамильтонов подход)

1. Пространство состояний – фазовое пространство ($2s$-мерное пространство с координатами $q_1, \dots, q_s; p_1, \dots, p_s$, s - число степеней свободы), состояние – точка фазового пространства.

2. Наблюдаемые – вещественные функции, заданные на фазовом пространстве $O(q, p)$, где $q = \{q_1, \dots, q_s\}, p = \{p_1, \dots, p_s\}$.

3. Измеренная физическая величина – значение функции $O(q, p)$ в данной точке фазового пространства.

4. Конкретная физическая система задается гамильтонианом $H(q, p)$.

5. Динамика определяется принципом наименьшего действия: в расширенном фазовом пространстве (p, q, t) рассмотрим кривые γ, концы которых лежат на s-мерных подпространствах $(t = t_i, q = q_i)$ и $(t = t_f, q = q_f)$, тогда *истинная траектория* γ_0 – экстремаль действия

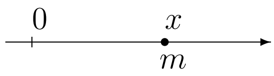
$$S = \int_\gamma [p\mathrm{d}q - H(q, p)\mathrm{d}t].$$

Следствие принципа наименьшего действия – уравнения движения Гамильтона

$$\dot{q} = \frac{\partial}{\partial q} H(q,p), \qquad \dot{p} = -\frac{\partial}{\partial p} H(q,p).$$

Примеры физических систем.

1. Свободная нерелятивистская частица с массой m.



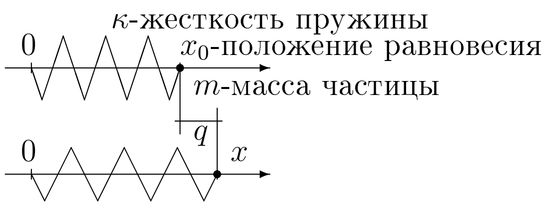
$$H(x,p) = \frac{1}{2m} p^2.$$

Уравнения движения

$$\dot{x} = \frac{p}{m}, \quad \dot{p} = 0.$$

Движение вдоль прямой с постоянной скоростью.

2. Гармонический осциллятор.



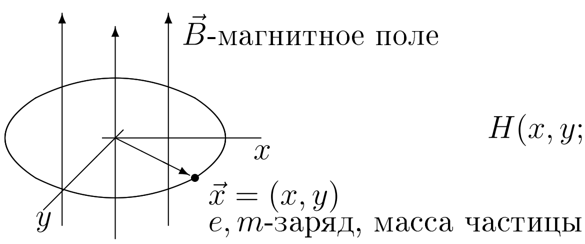
$$H(q,p) = \frac{1}{2m} p^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 q^2, \ \omega^2 = \frac{\kappa}{m}$$

Уравнения движения

$$\dot{q} = \frac{p}{m}, \quad \dot{p} = -m\omega^2 q.$$

Движение – гармонические колебания с частотой ω около положения равновесия.

3. Заряженная частица в однородном магнитном поле.



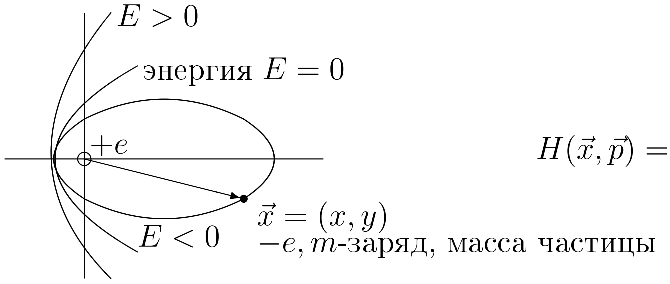
$$H(x,y;p_x,p_y) = \frac{1}{2m}(p_x + eBy)^2 + \frac{1}{2m} p_y^2$$

Уравнения движения

$$\dot{x} = \frac{1}{m}(p_x + eBy), \ \dot{p}_x = 0, \quad \dot{y} = \frac{1}{m} p_y, \ \dot{p}_y = -\frac{eB}{m}(p_x + eBy).$$

Частица равномерно вращается с частотой $\omega = \dfrac{eB}{m}$ в плоскости, перпендикулярной к направлению магнитного поля.

4. Заряженная частица в поле неподвижного кулоновского центра.



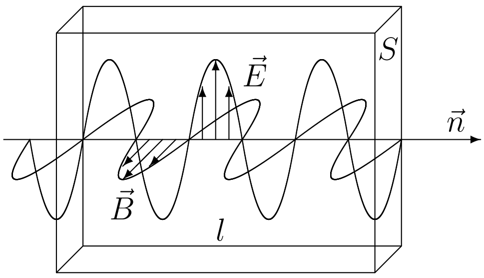
$$H(\vec{x}, \vec{p}) = \frac{1}{2m}\vec{p}^2 - \frac{e^2}{|\vec{x}|}$$

Уравнения движения

$$\dot{\vec{x}} = \frac{\vec{p}}{m}, \quad \dot{\vec{p}} = -\frac{e^2}{\vec{x}^2}\frac{\vec{x}}{|\vec{x}|}.$$

Частица, в зависимости от ее энергии, движется в плоскости по эллипсу, параболе или гиперболе, причем один из фокусов этих конических сечений совпадает с положением неподвижного кулоновского центра.

5. Плоская монохроматическая электромагнитная волна.



$$H(\vec{Q}, \vec{P}) = \int_V \mathrm{d}V \frac{\vec{E}^2 + \vec{B}^2}{8\pi} = \frac{1}{2}(\vec{P}^2 + k^2\vec{Q}^2)$$

Структура электромагнитной волны в фиксированный момент времени. Электрическое поле $\vec{E}$ и магнитное поле $\vec{B}$ направлены перпендикулярно к направлению распространения волны $\vec{n}$ и друг к другу. Величины полей осциллируют вдоль направления $\vec{n}$, что и изображено. Выделим мысленно в пространстве ящик объема V (как показано на рис.), длина которого l кратна периоду электромагнитной волны $k/2\pi$(периодические граничные условия) с площадью поперечного сечения S. Это и будет исследуемой физической системой.

Поля электромагнитной волны

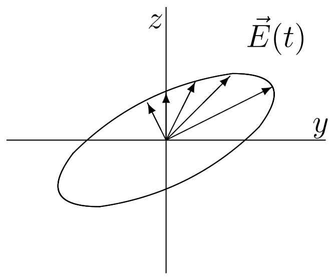
$$\vec{E}(t, x) = -\sqrt{\frac{4\pi}{V}}(k\vec{Q}(t)\sin kx + \vec{P}(t)\cos kx), \quad \vec{B} = [\vec{n}\vec{E}],$$

канонические переменные $\vec{Q}, \vec{P}$ лежат в плоскости, перпендикулярной вектору $\vec{n}$.

Уравнения движения

$$\dot{\vec{Q}} = \vec{P}, \qquad \dot{\vec{P}} = -\omega^2\vec{Q},\ \omega^2 = k^2.$$

В каждой точке пространства вектор $\vec{E}$ электрического поля равномерно вращается с частотой ω в плоскости, перпендикулярной к направлению распространения волны, его конец описывает эллипс (эллипс поляризации).

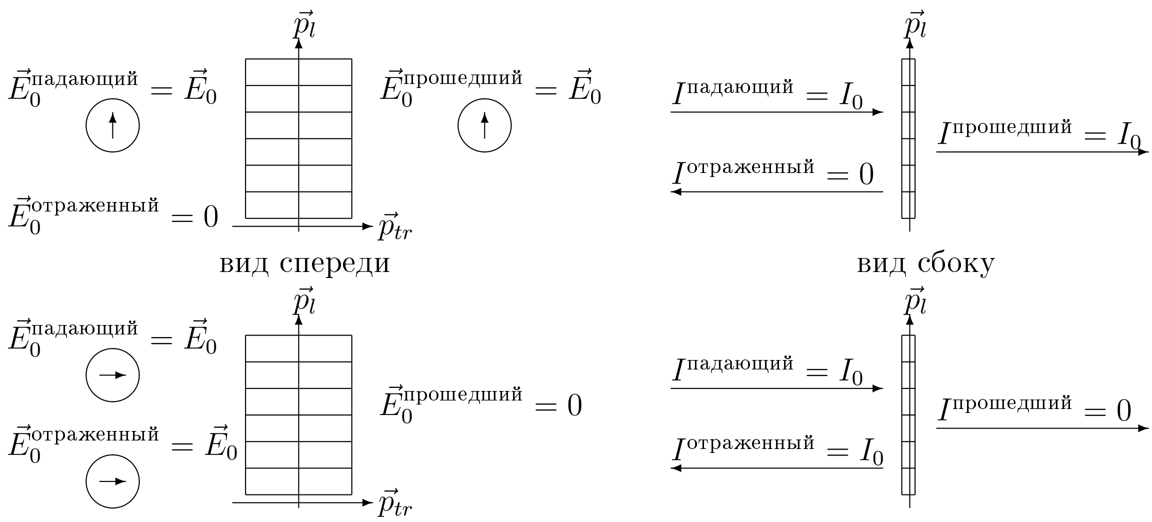


$$\vec{E}(t,x) = \Re(\vec{E}_0 \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t + \mathrm{i}kx}),\ \vec{E}_0\text{-комплексний вектор}, \vec{n}\vec{E}_0 = 0$$

So: свойства монохроматической плоской волны определяются вектором $\vec{E}_0$ двумерного *евклидова пространства над полем комплексных чисел.*

II. GEDANKEN эсперименты: наш мир – не классический

Эксперимент А. Прохождение света (электромагнитной волны) через поляризатор. Идеальный поляризатор



Идеальный поляризатор – это прибор, демонстрирующий следующие определяющие свойства:

a. прибор преобразует электромагнитноное излучение, имеет выделенную ось $\vec{p}_l$ – ось поляризатора,

b. свет, линейно поляризованный {свет линейно поляризован, если его эллипс поляризации вырождается в отрезок} вдоль оси поляризатора, *проходит* через последний, не изменяя своих свойств,

c. свет, линейно поляризованный перпендикулярно оси поляризатора, *отражается* от последнего, не изменяя своих свойств.

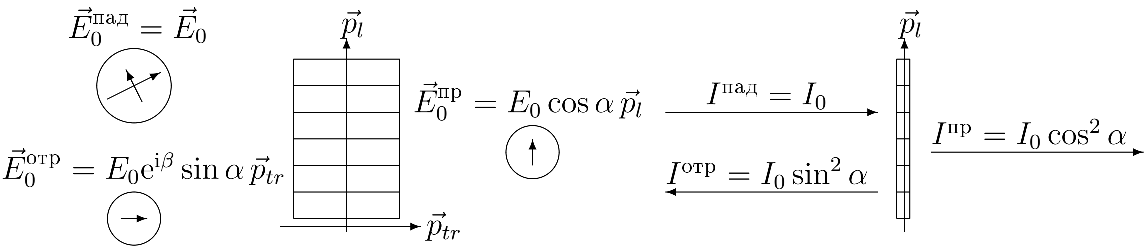
Интенсивность света (средний поток энергии через единичную поверхность в единицу времени) для плоской монохроматической волны можно записать в виде

$$I = \frac{1}{8\pi}\vec{E}_0\bar{\vec{E}}_0.$$

Рассмотрим прохождение через поляризатор электромагнитной волны с поляризацией общего положения

$$\vec{E}_0 = E_0(\cos\alpha\,\vec{p}_l + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta}\sin\alpha\,\vec{p}_{tr}).$$

Для понимания того, что происходит воспользуемся принципом суперпозиции, справедливым в теории электромагнитного поля.



So: при падении света интенсивности I_0 с произвольной поляризацией $\vec{E}_0 = E_0(\cos\alpha\,\vec{p}_l + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta}\sin\alpha\,\vec{p}_{tr})$ на поляризатор, падающий пучок света расщепляется на два пучка: линейно поляризованный вдоль оси поляризатора *прошедший через поляризатор* интенсивности $I_0\cos^2\alpha$ и линейно поляризованный перпендикулярно оси поляризатора *отраженный от поляризатора* интенсивности $I_0\sin^2\alpha$.

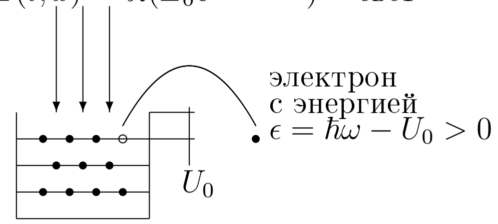
Эксперимент B. Фотоэффект.

a. сущность эффекта – вылет электронов из вещества под воздействием электромагнитного излучения

b. величина энергии ϵ вырванного электрона не зависит от интенсивности падающего света I_0, а зависит только от частоты последнего ω (пороговая зависимость)

c. интенсивность света лишь фиксирует количество вырванных электронов (прямо пропорциональная зависимость)

$\vec{E}(t,x) = \Re(\vec{E}_0 \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t + \mathrm{i}\vec{k}\vec{x}})$ – свет



электроны взаимодествуют с *фотонами*

энергия фотона $\varepsilon_{ph} = \hbar\omega$

импульс фотона $\vec{p}_{ph} = \hbar\vec{k}$

Объяснение эффекта (A.Einstein): при взаимодействии света с электронами электромагнитную волну следует рассматривать как поток частиц – фотонов, энергия и импульс которых определяются частотой и волновым вектором электромагнитной волны, причем плотность потока этих частиц {плотность потока – число частиц, проходящих через единичную поверхность в единицу времени} пропоциональна интенсивности потока света.

Рассмотрим эксперимент A с точки зрения объяснения эксперимента B.

- можно ли концепцию фотонов применить к эксперименту о прохождении света через поляризатор? Да, потому что это – эффект взаимодействия электромагнитной волны с веществом.

- можно ли свойство поляризации электромагнитной волны приписать единичному фотону? Можно (a. линейно поляризованный свет в фотоэффекте вырывает электроны в выделенном направлении, b. факт прохождения линейно поляризованного вдоль оси $\vec{p}_l$ света через поляризатор не зависит от интенсивности потока такого света).

- отсюда следует, что фотон, линейно поляризованный вдоль оси $\vec{p}_l$ проходит через поляризатор, а фотон линейно поляризованный вдоль оси $\vec{p}_t r$ отражается от поляризатора.

- что происходит с произвольно поляризованным фотоном при взаимодействии с поляризатором? Диллема:

  – фотон в результате взаимодействия с поляризатором расщепляется на два – прошедший и отраженный, в этом случае закон сохранения энергии требует, чтобы $\hbar\omega^{\text{пад}} = \hbar\omega^{\text{пр}} + \hbar\omega^{\text{отр}}$. Таким образом, частоты прошедшей, отраженной и падающей волны должны отличаться, что *противоречит эксперименту.*

– фотон либо проходит через поляризатор, либо отражается от него. Таким образом, возникает строгая вероятностная картина, которая *противоречит классической теории.*

Физики, когда приходиться выбирать между аргументами теоретическими и экспериментальными, выбирают последние (правда, если их много и они убедительные).

В каком же месте классическая теория выдает *error*? Начнем проверку.

Пункт первый: Пространство состояний – фазовое пространство ($2s$-мерное пространство с координатами $q_1, \dots, q_s; p_1, \dots, p_s$, s - число степеней свободы), состояние – точка фазового пространства.

Утверждение кажется вполне невинным. Определить состояние – это всего лишь задать пару чисел (q, p) (для простоты $s = 1$). Но для физика *задать* значит *измерить*. И здесь крайне важно, что нужно измерить *пару* величин. Дело в том, что любое измерение возмущает исследуемую систему, более того, повышение точности измерения делает это возмущение более сильным. При этом может возникнуть принципиальное препятствие увеличению точности измерения второй величины. Как показали многочисленные Gedanken эксперименты, именно такая ситуация и реализуется при измерении канонически сопряженных переменных (q, p) {Чтобы увидеть положение частицы в постранстве на нее нужно посмотреть, то есть принять рассеянную на частице электромагнитную волну. При этом фотоны, сталкиваясь с частицей, передают ей импульс и импульс частицы приобретает некоторую неопределенность}. Так, что же: при исследовании конкретной физической системы включать в рассмотрение конкретную процедуру измерения физических величин? К счастью, „Господь Бог изощрен, но не злонамерен“.

Неопределенности в результате измерения координаты и импульса Δq и Δp (квадратный корень из дисперсии) для любой физической системы, в любом ее состоянии, в любом процессе измерения связаны соотношениями (соотношения неопределенности, W.Heisenberg)

$$\boxed{\Delta q \cdot \Delta p \geqslant \frac{\hbar}{2}}$$

III. Пространство состояний квантовой теории

Попытаемся построить пространство состояний квантовой теории, опираясь на эксперимент по прохождению света через поляризатор.

Для проведения эксперимента нужно приготовить исследуемое состояние (фотоны с определенной поляризацией). Обозначим это состояние (*приготовленное состояние*) как $|in\rangle$ (кет-состояние, P.A.M.Dirac). Состояние системы после прохождения поляризатора (*измеренное состояние*) обозначим $\langle f|$ (бра-состояние). Так как измеренное состояние можно рассматривать как приготовленное для другого эксперимента, а процесс приготовления как эксперимент, то между кет- и бра-состояниями можно установить взаимно однозначное соответствие $|\phi\rangle \Longleftrightarrow \langle\phi|$.
Что мы знаем достоверно? Если приготовленное состояние – фотон с линейной поляризацией вдоль оси поляризатора $|+\rangle$, то он проходит через поляризатор и его измеренное состояние такое же $\langle +|$. Аналогично для фотона с линейной поляризацией, перпендикулярной оси поляризатора, обозначение $|-\rangle$, с той лишь разницей, что фотон отражается от поляризатора. Таким образом, у нас есть два различных состояния, для которых результаты эксперимента достоверно известны. Введем числовую характеристику этих экспериментов (амплитуду перехода):

- если приготовленное состояние $|+\rangle$, то фотон *всегда проходит* через поляризатор (измеренное состояние $\langle +|$), не изменяя состояния. Амплитуду такого процесса будем считать равной единицы

$$\langle +|+\rangle = 1.$$

- если приготовленное состояние $|+\rangle$, то фотон *никогда не отражается* от поляризатора (измеренное состояние $\langle -|$). Амплитуду такого процесса будем считать равной нулю

$$\langle -|+\rangle = 0.$$

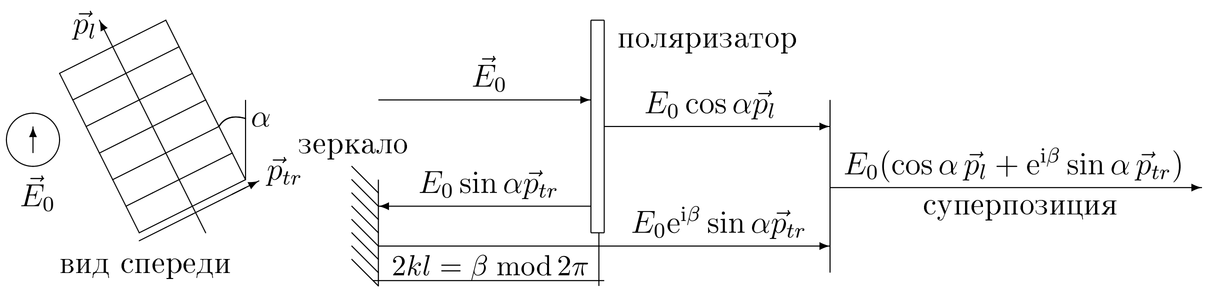
- аналогично определим

$$\langle -|-\rangle = 1, \quad \langle +|-\rangle = 0.$$

Состояния такого типа будем называть собственными. Определены только два таких состояния, на самом деле в рассматриваемом эксперименте их счетно много. Чтобы убедиться в этом, нужно обратиться к n-фотонным состояниям, среди которых $n+1$ собственных.

> Состояния $|\phi_n\rangle$, $n = 1, 2, \ldots$ физической системе в данном эксперименте называются *собственными*, если результаты эксперимента с такими состояниями *полностью достоверны*. Для таких состояний (ортонормированность)
>
> $$\langle \phi_m | \phi_n \rangle = \delta_{mn}.$$

Состояние фотона с произвольной поляризацией. Приготовление такого состояния:



Однофотонное состояние с поляризацией общего положения обозначим $|\phi\rangle$. Фотон в таком состоянии либо проходит через поляризатор (измеренное состояние $\langle +|$), либо отражается от него (измеренное состояние $\langle +|$). Какую физическую величину можно определить из такого эксперимента? Вероятность этих событий. Проведем серию из N экспериментов по прохождению фотона в состоянии $|\phi\rangle$ через поляризатор. Фотон $N^{\text{пр}}$-раз пройдет через поляризатор и $N^{\text{отр}}$-раз отразится от него. Если серия N достаточно длинная ($N \to \infty$), то вероятности прохождения и отражения равны

$$W^{\text{пр}} = \frac{N^{\text{пр}}}{N}, \quad W^{\text{отр}} = \frac{N^{\text{отр}}}{N}.$$

Так как фотоны в данном эксперименте не взаимодействуют друг с другом, нет необходимости проводить серию экспериментов. Можно сразу направить на поляризатор поток фотонов и серию экспериментов провести как один эксперимент. Так как плотность фотонов в потоке пропорциональна интенсивности света (см. эксперимент B), ответ для вероятностей известен (см. эксперимент A)

$$W^{\text{пр}} = \cos^2 \alpha, \quad W^{\text{отр}} = \sin^2 \alpha.$$

Задача: построить конструкцию, которая позволяет *вычислить* эти вероятности.

Какое обстоятельство позволило просто и красиво объяснить эффект прохождения света через поляризатор? Принцип суперпозиции: достаточно лишь представить произвольно поляризованную электромагнитную волну как сумму двух линейно поляризованных, для которых результат эксперимента однозначен. Совершим логический скачок: *распространим принцип суперпозиции на все состояния квантовой теории.* В нашем случае это означает, что состояние $|\phi\rangle$ представимо в виде

$$|\phi\rangle = |+\rangle \cos\alpha + |-\rangle\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta} \sin\alpha.$$

Написав эту формулу, мы фактически договорились, что, не выходя из пространства состояний, мы можем умножать состояния на комплексное число и складывать состояния, то есть наделили пространство состояний математической структурой.

> Утверждение о структуре 1 (принцип суперпозиции). Пространство состояний квантовой теории $\mathcal{H}$ – линейное пространство над полем комплексных чисел: если $|\phi_1\rangle \in \mathcal{H}$ и $|\phi_2\rangle \in \mathcal{H}$, то
>
> $$|\phi_1\rangle\, c_1 + |\phi_2\rangle\, c_2 = |\phi\rangle \in \mathcal{H}, \quad c_1, c_2 \in \mathbb{C}.$$

Вычислим амплитуды перехода $\langle + |\phi\rangle$ и $\langle - |\phi\rangle$. Это легко сделать, если воспользоваться разложением состояния $|\phi\rangle$ по собственным состояниям, ортонормированностью собственных состояний и, *предположив, что амплитуда перехода линейна по кет-аргументу*:

$$\langle +|\phi\rangle = \langle +|\big(|+\rangle \cos\alpha + |-\rangle \mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta} \sin\alpha\big) = \langle +|+\rangle \cos\alpha + \langle +|-\rangle \mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta} \sin\alpha = \cos\alpha,$$
$$\langle -|\phi\rangle = \langle -|\big(|+\rangle \cos\alpha + |-\rangle \mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta} \sin\alpha\big) = \langle -|+\rangle \cos\alpha + \langle -|-\rangle \mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta} \sin\alpha = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta} \sin\alpha.$$

Отюда легко видеть, как вычислять вероятности прохождения и отражения фотона в рассматриваемом эксперименте:

$$W^{\text{пр}} = \cos^2\alpha = |\langle +|\phi\rangle|^2, \quad W^{\text{отр}} = \sin^2\alpha = |\langle -|\phi\rangle|^2.$$

Обобщаем.

> Пусть в эксперименте приготовлено состояние $|in\rangle$ и измерено состояние $\langle f|$. Тогда вероятность такого процесса определяется квадратом модуля амплитуды перехода
>
> $$W_{f,in} = |\langle f|in\rangle|^2.$$

Получим некоторые свойства амплитуды перехода.

1. Сумма вероятностей для фотона пройти и отразиться от поляризатора равна единицы

$$1 = W^{\text{пр}} + W^{\text{отр}} = \overline{\langle +|\phi\rangle}\langle +|\phi\rangle + \overline{\langle -|\phi\rangle}\langle -|\phi\rangle = \overline{\langle +|\phi\rangle}\cos\alpha + \overline{\langle -|\phi\rangle}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta}\sin\alpha. \tag{1}$$

Сделаем утверждение, требующее доказательства: существует такой эксперимент, в котором состояние $|\phi\rangle$ – собственное. В этом случае $\langle\phi|\phi\rangle = 1$.Используя линейность амплитуды перехода по кет-состоянию, получим

$$1 = \langle\phi|\phi\rangle = \langle\phi|+\rangle\cos\alpha + \langle\phi|-\rangle\mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta}\sin\alpha. \tag{2}$$

Сравнив (1) и (2), находим

$$\langle\phi|+\rangle = \overline{\langle +|\phi\rangle}, \quad \langle\phi|-\rangle = \overline{\langle -|\phi\rangle}.$$

So: свойство амплитуды перехода $\langle\phi_1|\phi_2\rangle = \overline{\langle\phi_2|\phi_1\rangle}$.

2. Пусть $|\chi\rangle = |+\rangle c_1 + |-\rangle c_2$, тогда

$$\langle\chi|\chi\rangle = c_1\langle\chi|+\rangle + c_2\langle\chi|-\rangle = c_1\overline{\langle +|\chi\rangle} + c_2\overline{\langle -|\chi\rangle} = c_1\bar{c}_1 + c_2\bar{c}_2 \geqslant 0,$$

причем равенство нулю достигается, если $|\chi\rangle = 0$.

Утверждение о структуре 2 (амплитуда перехода).

a. каждому кет-состоянию $|\phi\rangle$ отвечает одно и только одно бра-состояние $\langle\phi|$,

b. каждой паре кет- и бра-состояний ставится в соответствие комплексное число $\langle\phi_1|\phi_2\rangle \in \mathbb{C}$ – скалярное произведение,

c. $\langle\phi_1|\phi_2\rangle = \overline{\langle\phi_2|\phi_1\rangle}$,

d. $\langle\phi|\phi\rangle \geqslant 0$, причем равенство достигается тогда и только тогда, когда $|\phi\rangle = 0$.

Используя свойства скалярного произведения, в пространстве состояний можно ввести растояние между состояниями

$$d(|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle) = \||\chi\rangle\| = \sqrt{\langle\chi|\chi\rangle},\ |\chi\rangle = |\phi_1\rangle - |\phi_2\rangle,$$

и, следовательно, понятие о сходимости последовательностей состояний. Это понятие позволяет сформулировать

Утверждение о структуре 3 (полнота пространства состояний). Всякая фундаментальная последовательность в пространстве состояний – сходящаяся. Следовательно:

пространство состояний квантовой теории – гильбертово пространство.

Последнее утверждение не следовало из анализа нашего Gedanken эксперимента. Однако, и его следует признать *физическим требованием* к теории. Дело в том, что абстрактное пространство состояний квантовой теории можно реализовать различными математическими конструкциями. И только гильбертовость пространства состояний гарантирует, что физические величины (вероятности переходов, спектр наблюдаемых физических величин) не зависят от выбора конкретной математической реализации (J.von Neumann).

Важное замечание.

Электромагнитная волна $\Re(E_0\vec{p}_l \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t+\mathrm{i}kx})$ – поток фотонов в состоянии $|+\rangle$. Рассмотрим другую волну $\Re(c \cdot E_0\vec{p}_l \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t+\mathrm{i}kx})$, где c - комплексное число, отличное от нуля. Распространение принципа суперпозиции на квантовую теорию дает нам состояние фотона вида $c\cdot|+\rangle$. Однако, в экперименте по прохождению света через поляризатор эти две электромагнитные волны отличаются лишь интенсивностями, то есть только плотностями потоков фотонов, а не самими фотонами. Поэтому следует признать, что вектора гильбертова пространства $|\phi\rangle$ и $c\cdot|\phi\rangle,\ c \neq 0$, задают одно и то же состояние физической системы.

Для выбора представителя из набора одних и тех же состояний используется условие нормировки

$$\langle\phi|\phi\rangle = 1.$$

Однако, это условие не фиксирует единственного представителя, остается произвол в выборе *фазового множителя*, то есть

– нормированные векторы $|\phi\rangle$ и $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}|\phi\rangle,\ \theta -$ действительное число, определяют одно и тоже состояние физической системы.

Важное замечание к важному замечанию.

Пусть $|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle$ - два различных состояния. Тогда, казалось бы, $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_1}|\phi_1\rangle, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_2}|\phi_2\rangle$ -

два таких же состояния. Устроим суперпозицию первых и вторых

$$|\phi_1\rangle + |\phi_2\rangle$$

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_1}|\phi_1\rangle + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_2}|\phi_2\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_1}\left(|\phi_1\rangle + \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\theta_2-\theta_1)}|\phi_2\rangle\right)$$

Видно, что результаты суперпозиции – разные {В нашем эксперименте состояние света с произвольной поляризацией $|\phi\rangle = |+\rangle\cos\alpha + |-\rangle\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta}\sin\alpha$. Фазовый множитель $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta}$ позволяет различить существенно разные физические ситуации: если $\beta = 0$, свет линейно поляризован, а если $\beta \neq 0$, свет поляризован эллиптически}.

So: Крайне важную роль играют относительные фазы состояний, из которых устраивается суперпозиция. Эквивалентность состояний с разными фазовыми множителями относится только к состоянию физической системы *в целом.*

Полнота собственных состояний.

Из рассмотренного Gedanken эксперимента следует, что измеренное состояние – всегда собственное. Физически очевидно предположение, что любое состояние, кроме нулевого, может быть измерено, то есть хотя бы одна вероятность перехода в собственное состояние отлична от нуля. Или, по-другому,

$$\text{если } \langle\phi_n|X\rangle = 0 \text{ для всех } n \quad\Longrightarrow\quad |X\rangle = 0.$$

Определим кет-вектор следующим образом

$$|\chi\rangle = |\phi\rangle - \sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n|\phi\rangle,$$

где $|\phi\rangle$ - произвольное состояние, $|\phi_n\rangle$ - собственное состояние и сумма берется по всем собственным состояниям. Найдем скалярное произведение этого кет-вектора с бра-вектором $\langle\phi_m|$

$$\langle\phi_m|\chi\rangle = \langle\phi_m|\phi\rangle - \sum_n\langle\phi_m|\phi_n\rangle\langle\phi_n|\phi\rangle = \langle\phi_m|\phi\rangle - \sum_n \delta_{mn}\langle\phi_n|\phi\rangle = 0.$$

Так как равенство справедливо для любого m, заключаем, что $|\chi\rangle = 0$.

So: любое состояние физической системы можно разложить по собственным состояниям следующим образом

$$|\phi\rangle = \sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n|\phi\rangle.$$

Если в пространстве состояний ввести единичный оператор $\hat{\mathrm{I}}$, переводящий любое состояние в себя же, сделанное утверждение можно переформулироваит вот так:

Собственные состояния $|\phi_n\rangle$, $n = 1, \ldots$, образуют полный базис в пространстве состояний и для них справедливо *разложение единицы*

$$\hat{\mathrm{I}} = \sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n|.$$

IV. Наблюдаемые, измерение наблюдаемых

Пространство состояний физической системы есть. Нужно его обживать: переходить из одного состояния в другое. Естественный математический объект для этого – оператор, действующий на пространстве состояний. Так как принцип суперпозиции главенствующий в мире квантовом, естественно ограничиться линейными операторами. Напоминающее определение:

Линейным оператором $\hat{O}: \mathcal{H} \to \mathcal{H}$, где $\mathcal{H}$ - гильбертово пространство, называется совокупность следующих объектов:

a. подпространства $\mathcal{D}_O$ пространства $\mathcal{H}$ (область определения оператора $\hat{O}$);

b. линейного отображения

$$\hat{O}: \mathcal{D}_O \to \mathcal{H}, \quad \text{т.е. } \hat{O}\big(c_1|\phi_1\rangle + c_2|\phi_2\rangle\big) = c_1\hat{O}|\phi_1\rangle + c_2\hat{O}|\phi_2\rangle,\ |\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle \in \mathcal{D}_O.$$

Так как состоянию физической системы отвечает целый класс векторов гильбертова пространства, в начале ограничимся унитарными операторами, линейными, определенными на всем гильбертовом пространстве и сохраняющими норму вектора (в пределах договоренности норма равна единице).

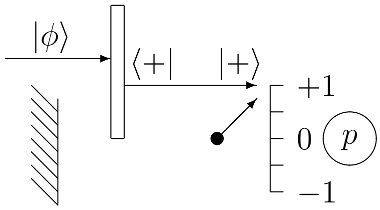
Фактически один унитарный оператор был уже физически построен, когда обсуждался вопрос о приготовлении состояния фотона с произвольной поляризацией. Задача: найдите, как такой оператор действует на состояние $c_1|+\rangle + c_2|-\rangle$? Другой унитарный оператор тоже встречался – единичный.

Попытаемся описать процесс измерения какой-нибудь физической величины. Обратимся вновь к прохождению света через поляризатор. Определим характеристику поляризационных свойств, падающего на поляризатор света

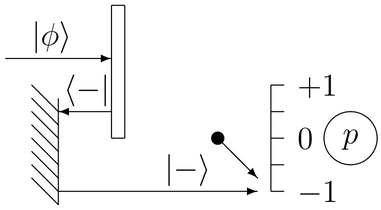
$$p = \cos 2\alpha = \frac{I^{\text{пр}} - I^{\text{отр}}}{I^{\text{пад}}}.$$

Как измерить эту величину в классическом эксперимерте очевидно из определения: достаточно измерить две интенсивности из трех. А что можно измерить, если проводится эксперимент с одним фотоном?

Если приготовлено состояние фотона $|\phi\rangle = |+\rangle\cos\alpha + |-\rangle e^{i\beta}\sin\alpha$, то фотон с вероятностью $W_{+,\phi} = \cos^2\alpha$ либо пройдет через поляризатор, либо с вероятностью $W_{-,\phi} = \sin^2\alpha$ отразится от него. Прибор может фиксировать лишь факт прохождения или отражения. Для характеристики этой диллемы примем, что при прохождение фотона прибор будет показывать значение $p_+ = +1$ (для состояния $|\phi\rangle = |+\rangle$, когда результат измерения достоверен, естественно предположить, что прибор покажет классическое значение), а при отражении – значение $p_- = -1$.



вероятность $W_{+,\phi} = \cos^2\alpha$



вероятность $W_{-,\phi} = \sin^2\alpha$

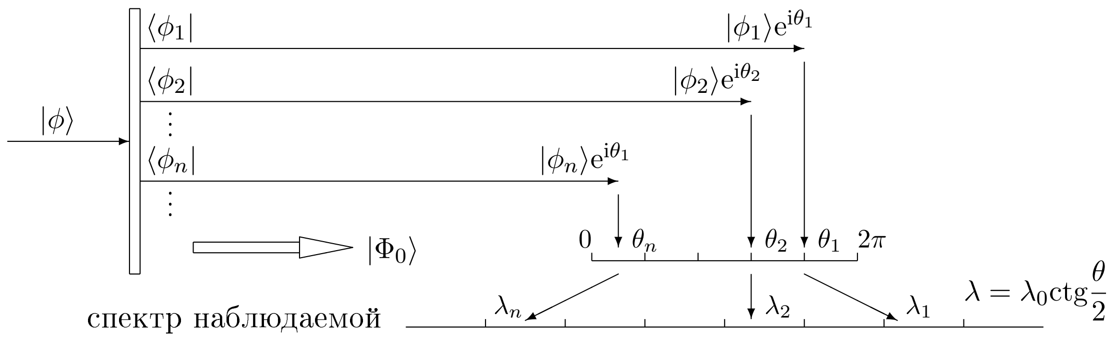
Фиксируем свойство измерения в квантовом случае: если в классическом мире спектр значений физической величины обычно непрерывный $-1 \leqslant p \leqslant 1$, то в квантовом случае он может стать дискретным. Что же получается, в квантовом экперименте, в отличие от классического, нельзя определить никакой характеристики измеряемого состояния? Можно. Для этого нужно провести серию экспериментов и определить из этой серии среднее значение наблюдаемой. Среднее значение по определению

$$\langle p\rangle = \left.\frac{p_+ N^{\text{пр}} + p_- N^{\text{отр}}}{N}\right|_{N\to\infty} = p_+ W_{+,\phi} + p_- W_{-,\phi} = \cos 2\alpha.$$

В такой серии можно вычислить и неопределенность в измерениях (корень квадратный из дисперсии)

$$\Delta p \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\langle (p - \langle p\rangle)^2\rangle} = \sqrt{\langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2} = |\sin 2\alpha|.$$

Формализуем процесс измерения наблюдаемой. Представим процесс измерения наблюдаемой как действие некоторого оператора $\hat{U}_O$ на приготовленное состояние $|\phi\rangle$. Очевидно, что этого нельзя сделать, если состояние $|\phi\rangle$ произвольно, так как результат измерения в этом случае, вообще говоря, не однозначен. Однозначность существует только для собственных состояний $|\phi_n\rangle,\ n = 1, \ldots,$. Но измерение собственного состояния приводит к этому же состоянию, то есть оператор, который определяет процесс измерения – единичный! Это явно не то, что нужно. Но: единственное, что можно сделать, не разрушая собственного состояния, умножить его на фазовый множитель $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_n}$. Само по себе это изменение состояния не наблюдаемо. Однако, если устроить суперпозицию такого состояния с некоторым эталонным, присущем данному прибору состоянием $|\Phi_0\rangle$, изменение фазы можно зафиксировать в виде показаний прибора.



So:

$$\hat{U}_O|\phi_n\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_n}|\phi_n\rangle, \ n = 1, \ldots.$$

Вспомнив разложение единицы, оператор $\hat{U}_O$ запишем в следующем виде

$$\hat{U}_O = \sum_n \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_n}|\phi_n\rangle\langle\phi_n|.$$

Можно и нужно показать, что $\hat{U}_O$ - оператор унитарный.

В рассмотренной ситуации спектр наблюдаемой лежит на отрезке действительной оси $0 < \theta_n < 2\pi$. Классическая наблюдаемая обычно определена на всей действительной оси. Чтобы сохранить соответствие (а оно понадобится), отобразим отрезок на всю действительную ось, например, вот так $\lambda_n = \lambda_0 \mathrm{ctg}(\theta_n/2)$ (λ_0 - выбор единицы измерения), и определим новый оператор $\hat{O}$

$$\hat{O} = \sum_n \lambda_n|\phi_n\rangle\langle\phi_n|.$$

Легко видеть, что новый оператор, вообще говоря, не унитарен. Более того, его область определения может не совпадать со всем пространством $\mathcal{H}$, так как возможна ситуация, когда λ_n неограниченно возрастают и возникают вопросы о сходимости определяющей оператор суммы. Такой оператор называется *самосопряженным.*

Пусть $\hat{O}$ - оператор, определенный на подпространстве $\mathcal{D}_O$, всюду плотным в $\mathcal{H}$. Определим сопряженный к оператору $\hat{O}$ оператор $\hat{O}^+$. Область определения $\hat{O}^+$

состоит из тех и только тех векторов $|\chi\rangle \in \mathcal{H}$, для которых существует $|X\rangle \in \mathcal{H}$, такой, что

$$\langle\chi|\hat{O}|\phi\rangle = \langle X|\phi\rangle \quad \text{для всех } |\phi\rangle \in \mathcal{D}_O,$$

причем по определению $\hat{O}^{+}|\chi\rangle = |X\rangle$.

Пусть $\hat{O}$ - оператор, определенный на подпространстве $\mathcal{D}_O$, всюду плотным в $\mathcal{H}$. Если $\hat{O} = \hat{O}^{+}$, то такой оператор называется *самосопряженным*.

Оператор $\hat{O}$ действует на собственное состояние вот так

$$\hat{O}|\phi_n\rangle = \sum_m \lambda_m|\phi_m\rangle\langle\phi_m|\phi_n\rangle = \sum_m \lambda_m|\phi_m\rangle\delta_{mn} = \lambda_n|\phi_n\rangle,\ n = 1, \dots . \tag{3}$$

Предположим, что вид оператора $\hat{O}$ можно определить независимым от процедуры измерения способом (дальше так оно и окажется). В такой ситуации соотношение (3) превращается в *уравнение, которое позволяет найти собственные состояния и спектр значений (собственных значений) наблюдаемой, заданной оператором* $\hat{O}$.

Утверждение о структуре 4 (наблюдаемые и измерение наблюдаемых). Наблюдаемой в квантовой теории соответствует самосопряженный оператор $\hat{O}$, действующий на гильбертовом пространстве состояний.

Измерение наблюдаемой в состоянии $|\phi\rangle$ с вероятностью $|\langle\phi_n|\phi\rangle|^2$ приводит к действительному значению наблюдаемой λ_n, причем и собственные состояния $|\phi_n\rangle$, и спектр собственных значений λ_n определяются решениями уравнения

$$\hat{O}|\phi_n\rangle = \lambda_n|\phi_n\rangle.$$

Эрмитовость самосопряженного оператора.

Пусть $|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle \in \mathcal{D}_O$. Тогда

$$\langle\phi_1|\hat{O}|\phi_2\rangle = \sum_n \lambda_n\langle\phi_1|\phi_n\rangle\langle\phi_n|\phi_2\rangle = \overline{\sum_n \lambda_n\langle\phi_2|\phi_n\rangle\langle\phi_n|\phi_1\rangle} = \overline{\langle\phi_2|\hat{O}|\phi_1\rangle}.$$

Самосопряженный оператор – эрмитов, но эрмитов – не всегда самосопряжен.

Неважное замечание.

Если вместо оператора $\hat{O}$ взять оператор $\alpha\hat{O} + \beta\,\hat{\mathrm{I}}$, спектр собственных значений изменится и станет равным $\alpha\lambda_n + \beta,\ n = 1, \dots$, что соответствует возможности выбора единицы измерения и начала отсчета на шкале прибора.

Найдем среднее значение наблюдаемой в серии экспериментов

$$\langle O\rangle = \sum_n \lambda_n W_{\phi_n,\phi} = \sum_n \lambda_n \langle\phi_n|\phi\rangle\overline{\langle\phi_n|\phi\rangle} = \langle\phi|\Big[\sum_n |\phi_n\rangle\lambda_n\langle\phi_n|\Big]|\phi\rangle = \langle\phi|\hat{O}|\phi\rangle,$$

и дисперсию наблюдаемой

$$(\Delta O)^2 = \langle O^2\rangle - \langle O\rangle^2 = \sum_n \lambda_n^2 W_{\phi_n,\phi} - \langle O\rangle^2 = \langle\phi|\Big[\sum_n \lambda_n|\phi_n\rangle\lambda_n\langle\phi_n|\Big]|\phi\rangle - \langle O\rangle^2 =$$
$$= \langle\phi|\hat{O}\Big[\sum_n |\phi_n\rangle\lambda_n\langle\phi_n|\Big]|\phi\rangle - \langle O\rangle^2 = \langle\phi|\hat{O}^2|\phi\rangle - \langle\phi|\hat{O}|\phi\rangle^2.$$

Обсудим, что теперь можно сказать о соотношениях неопределенности. Итак, пусть самосопряженные операторы $\hat{q}$ и $\hat{p}$ - наблюдаемые координаты и импульса, соответственно, и пусть их средние значения в состоянии $|\phi\rangle$ равны $\langle q\rangle$ и $\langle p\rangle$, соответственно. Определим новые операторы

$$\hat{Q} = \hat{q} - \langle q\rangle\hat{\mathrm{I}}, \quad \hat{P} = \hat{p} - \langle p\rangle\hat{\mathrm{I}}.$$

Легко показать, что неопределенности координаты и импульса в состоянии $|\phi\rangle$ равны $(\Delta q)^2 = \langle\phi|\hat{Q}^2|\phi\rangle$ и $(\Delta p)^2 = \langle\phi|\hat{P}^2|\phi\rangle$.
Определим состояние $|A\rangle$

$$|A\rangle = (\hat{P} + \mathrm{i}\alpha\hat{Q})|\phi\rangle,$$

где α - действительное число. Рассмотрим квадрат нормы этого состояния, которая безусловно не отрицательна

$$\langle A|A\rangle = \langle A|(\hat{P} + \mathrm{i}\alpha\hat{Q})|\phi\rangle = \langle A|\hat{P}|\phi\rangle + \mathrm{i}\alpha\langle A|\hat{Q}|\phi\rangle = \overline{\langle\phi|\hat{P}|A\rangle} + \mathrm{i}\alpha\overline{\langle\phi|\hat{Q}|A\rangle} =$$
$$\overline{\langle\phi|\hat{P}(\hat{P} + \mathrm{i}\alpha\hat{Q})|\phi\rangle} + \mathrm{i}\alpha\overline{\langle\phi|\hat{Q}(\hat{P} + \mathrm{i}\alpha\hat{Q})|\phi\rangle} = \overline{\langle\phi|\hat{P}^2|\phi\rangle} + \alpha^2\overline{\langle\phi|\hat{Q}^2|\phi\rangle} + \alpha\overline{\langle\phi|\mathrm{i}(\hat{P}\hat{Q} - \hat{Q}\hat{P})|\phi\rangle} =$$
$$(\Delta p)^2 + \alpha^2(\Delta q)^2 + \alpha\overline{\langle\phi|\mathrm{i}(\hat{P}\hat{Q} - \hat{Q}\hat{P})|\phi\rangle} \geqslant 0.$$

Отсюда следует, что

$$C = \langle\phi|\mathrm{i}(\hat{P}\hat{Q} - \hat{Q}\hat{P})|\phi\rangle \ - \ \text{действительное число},$$
$$f(\alpha) = \alpha^2(\Delta q)^2 + \alpha C + (\Delta p)^2 \geqslant 0.$$

Второе неравенство выполняется при любых α, если

$$\Delta q \cdot \Delta p \geqslant \frac{1}{2}|C|.$$

Сравнивая это условие с соотношениями неопределенности Гайзенберга, заключаем, что *для любого состояния* $|\phi\rangle$ *любой физической системы*

$$\langle\phi|\mathrm{i}(\hat{P}\hat{Q}-\hat{Q}\hat{P})|\phi\rangle=\hbar,$$

или, что то же самое

$$\langle\phi|\mathrm{i}(\hat{P}\hat{Q}-\hat{Q}\hat{P})-\hbar\hat{\mathrm{I}}|\phi\rangle=0.$$

Этого легко добиться, если на операторном уровне считать, что

$$\mathrm{i}(\hat{P}\hat{Q}-\hat{Q}\hat{P})=\hbar\hat{\mathrm{I}}.$$

Вспоминая определение операторов $\hat{Q},\hat{P}$, заключаем (уровень закона природы), что

> в квантовой теории наблюдаемые координаты и импульса подчиняются *каноническим коммутационным соотношениям*
>
> $$\boxed{[\hat{q},\hat{p}]\overset{\mathrm{def}}{=}\hat{q}\hat{p}-\hat{p}\hat{q}=\mathrm{i}\hbar\hat{\mathrm{I}}}$$

Замечание.

Если в физической системе s - степеней свободы и они *независимы*, обобщение тривиально

$$[\hat{q}_i,\hat{p}_j]=\mathrm{i}\hbar\delta_{ij}\hat{\mathrm{I}},\quad [\hat{q}_i,\hat{q}_j]=[\hat{p}_i,\hat{p}_j]=0,\quad i,j=1,\ldots,s.$$

V. Динамика в квантовой теории, квантование

Рассмотрим замкнутую физическую систему. Пусть самосопряженный оператор $\hat{H}$ – наблюдаемая, отвечающая энергии замкнутой системы. Как и в классической теории, такая наблюдаемая называется *гамильтонианом.* Спектр собственных значений энергии и собственные состояния гамильтониана находятся из уравнения

$$\hat{H}|\phi_n\rangle=E_n|\phi_n\rangle.$$

Предположим, что собственные состояния не вырождены, то есть каждому собственному значению соответствует только одно состояние (ситуация общего положения).

Пусть в момент времени $t=t_0$ система находится в собственном состоянии гамильтониана $|\phi_n(t_0)\rangle=|\phi_n\rangle$. Как это состояние меняется с течением времени? А никак:

система замкнута и закон сохранения энергии никто не отменял. Единственное, что разрешено, – набег фазы у состояния. Причем, опять-таки, из-за замкнутости системы этот набег фазы однороден по времени, то есть

$$|\phi_n(t)\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_n(t-t_0)}|\phi_n(t_0)\rangle.$$

Продифференцируем по времени и устремим $t_0 \to t$:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\phi_n(t)\rangle = \mathrm{i}\dot{\theta}_n(0)|\phi_n(t)\rangle.$$

Динамика собственного состояния гамильтониана определяется одной действительной величиной $\dot{\theta}_n(0)$ с размерностью, обратной времени. Но единственная физическая величина, которая характеризует это состояние, – его энергия E_n. Используя соображения размерности, без ограничения общности находим

$$\dot{\theta}_n(0) = \pm\frac{E_n}{\hbar},$$

(соотношение могло бы содержать универсальный для всех собственных состояний коэффициент, но, согласовав единицы измерения времени и энергии, его всегда можно выбрать равным единице). Остается вопрос о знаке. Нужен эксперимент. И он есть у нас, целых два: в них динамика электромагнитной волны определяется фазовым множителем $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}$ или, если вспомнить про фотоны, $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar}$. Таким образом, эволюция собственного состояния гамильтониана со временем определяется вот так

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\phi_n(t)\rangle = E_n|\phi_n(t)\rangle = \hat{H}|\phi_n(t)\rangle.$$

Принцип суперпозиции гласит, что если в момент времени t_1 между состояниями есть линейная связь, то в момент времени $t = t_2$ эта линейная связь сохранится при условии, что в промежуток времени от t_1 до t_2 не было произведено измерение. А так как в фиксированный момент времени любое состояние можно разложить по собственным состояниям гамильтониана, окончательно формулируем

> Утверждение о структуре 5 (динамика). Динамика в квантовой теории определяется гамильтонианом $\hat{H}$. Пусть в момент времени t_0 приготовлено состояние из области определения гамильтониана $|\phi_0\rangle$. Тогда дальнейшая эволюция этого состояния, свободная от измерения, определяется уравнением (E.Schrödinger)
>
> $$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\phi(t)\rangle = \hat{H}|\phi(t)\rangle$$

с начальным условием $|\phi(t_0)\rangle = |\phi_0\rangle$.

Замечание.

В формулировке утверждения опущено, что рассматриваемая система - замкнутая. Это не случайно, пусть такое расширение утверждения будет обобщением.

Из проведенных рассуждений видно, что решение задачи о собственных значениях и состояниях гамильтониана $\hat{H}|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle$ *полностью* решает динамическую задачу для замкнутой системы. Пусть в момент времени t_0 задано состояние $|\phi_0\rangle$. Если разложить это состояние по собственным состояниям гамильтониана, эволюция очевидна

$$|\phi(t)\rangle = \sum_n \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{E_n}{\hbar}(t-t_0)}|\phi_n\rangle\langle\phi_n|\phi_0\rangle = \hat{U}_{t-t_0}|\phi_0\rangle,$$

здесь введен оператор эволюции $\hat{U}_t$.

Квантование.

Остался один вопрос, как строить самосопряженные операторы наблюдаемых? На этот вопрос, как может, дает ответ *эвристический рецепт*, который называется *квантованием классической теории*. Суть его состоит в следующем:

0. действие физической системы должно иметь вид

$$S = \int_{t_i}^{t_f} \mathrm{d}t[p\,\dot{q} - H^{\mathrm{cl}}(q,p)],$$

1. если нас интересует какая-нибудь наблюдаемая, нужно взять ее классический аналог в гамильтоновом формализме

$$O^{\mathrm{cl}}(q,p),$$

2. заменить обобщенные координаты q и обобщенные импульсы p на канонически сопряженные операторы $\hat{q}, \hat{p}$, соответственно,

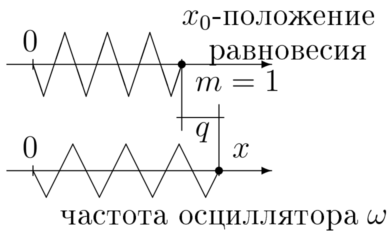
$$\hat{O} = O^{\mathrm{cl}}(\hat{q},\hat{p}), \qquad [\hat{q},\hat{p}] = \mathrm{i}\hbar\hat{\mathrm{I}},$$

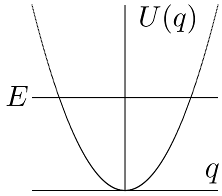
3. выполнить формальные действия так, чтобы опрератор $\hat{O}$ был самосопряженным.

Существенное замечание.

Так как классические переменные q, p коммутативны, а квантовые $\hat{q}, \hat{p}$ нет, указанный способ квантования не позволяет *однозначно* восстановить квантовую наблюдаемую $\hat{O}$ по классической $O^{\mathrm{cl}}(q,p)$.

VI. Гармонический осциллятор





$$H(q,p)=\frac{1}{2}p^2+\frac{1}{2}\omega^2q^2$$

<u>квантование</u>

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\hat{p}^2+\frac{1}{2}m\omega^2\hat{q}^2,\quad [\hat{q},\hat{p}]=\mathrm{i}\hbar\hat{\mathrm{I}}$$

Решим главную задачу квантовой механики

$$\hat{H}|\phi_n\rangle=E_n|\phi_n\rangle.$$

Введем операторы уничтожения и рождения

$$\hat{a}\overset{\text{def}}{=}\frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}}(\hat{p}-\mathrm{i}\omega\hat{q}),\quad \hat{a}^+\overset{\text{def}}{=}\frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}}(\hat{p}+\mathrm{i}\omega\hat{q}).$$

Найдем коммутационные соотношения между этими операторами

$$[\hat{a},\hat{a}^+]=\frac{1}{2\hbar\omega}(-\mathrm{i}\omega[\hat{q},\hat{p}]+\mathrm{i}\omega[\hat{p},\hat{q}])=-\mathrm{i}\frac{1}{\hbar}[\hat{q},\hat{p}]=\hat{\mathrm{I}}.$$

Выразим операторы координаты, импульса через операторы рождения и уничтожения

$$\hat{q}=\mathrm{i}\sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}}(\hat{a}-\hat{a}^+),\quad \hat{p}=\sqrt{\frac{\hbar\omega}{2}}(\hat{a}+\hat{a}^+),$$

и гамильтониан

$$\hat{H}=\frac{1}{2}\hbar\omega(\hat{a}^+\hat{a}+\hat{a}\hat{a}^+)=\hbar\omega\Big[\hat{a}^+\hat{a}+\frac{1}{2}\hat{\mathrm{I}}\Big].$$

Первоначальную задачу перепишем в виде

$$\hbar\omega\Big[\hat{a}^+\hat{a}+\frac{1}{2}\hat{\mathrm{I}}\Big]|\phi_n\rangle=E_n|\phi_n\rangle\quad\Rightarrow$$
$$\hat{a}^+\hat{a}|\phi_n\rangle=\Big(\frac{E_n}{\hbar\omega}-\frac{1}{2}\Big)|\phi_n\rangle=\lambda_n|\phi_n\rangle,\quad E_n=\hbar\omega\Big(\lambda_n+\frac{1}{2}\Big).$$

Докажем несколько утверждений.

1. Собственное значение λ_n не отрицательно.

$$\lambda_n=\langle\phi_n|\lambda_n|\phi_n\rangle=\langle\phi_n|\hat{a}^+\hat{a}|\phi_n\rangle=(|X\rangle=\hat{a}|\phi_n\rangle)=\langle\phi_n|\hat{a}^+|X\rangle=$$
$$=\frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}}\langle\phi_n|\hat{p}+\mathrm{i}\omega\hat{q}|X\rangle=\frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}}(\overline{\langle X|\hat{p}|\phi_n\rangle}+\mathrm{i}\omega\overline{\langle X|\hat{q}|\phi_n\rangle})=\frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}}\overline{\langle X|\hat{p}-\mathrm{i}\omega\hat{q}|\phi_n\rangle}=$$
$$=\overline{\langle X|\hat{a}|\phi_n\rangle}=\overline{\langle X|X\rangle}\geqslant 0,\quad Q.E.D.$$

2. Пусть $|\phi_n\rangle$ собственное состояние оператора $\hat{a}^+\hat{a}$ с собственным значением λ_n. Тогда $\hat{a}^+|\phi_n\rangle$ тоже собственное состояние этого оператора (может быть не нормированное на единицу) с собственным значением $\lambda_n + 1$.

$$\hat{a}^+\hat{a}|\phi_n\rangle = \lambda_n|\phi_n\rangle, \quad \hat{a}^+\hat{a}^+\hat{a}|\phi_n\rangle = \hat{a}^+(\hat{a}\hat{a}^+ - \hat{\mathrm{I}})|\phi_n\rangle = \hat{a}^+\hat{a}\hat{a}^+|\phi_n\rangle - \hat{a}^+|\phi_n\rangle = \lambda_n\hat{a}^+|\phi_n\rangle,$$
$$\text{или} \quad (\hat{a}^+\hat{a})\, \underline{\hat{a}^+|\phi_n\rangle} = (\lambda_n + 1)\underline{\hat{a}^+|\phi_n\rangle}, \quad Q.E.D.$$

3. Пусть $|\phi_n\rangle$ собственное состояние оператора $\hat{a}^+\hat{a}$ с собственным значением λ_n. Тогда $\hat{a}|\phi_n\rangle$ тоже собственное состояние этого оператора (может быть не нормированное на единицу) с собственным значением $\lambda_n - 1$.

Опять рассмотрим собственное состояние $|\phi_n\rangle$ с собственным значением λ_n. Подействуем на это состояние N-раз оператором уничтожения $((\hat{a})^N|\phi_n\rangle)$. Согласно утверждению 3, полученное состояние будет собственным с собственным значением $\lambda_n - N$. Каково бы не было значение λ_n, всегда найдется такое N, чтобы величина $\lambda_n - N$ стала отрицательной, что противоречит утверждению 1. Выход из этого противоречия состоит в том, чтобы согласиться с тем, что на некотором шаге при действии оператором уничтожения получается нулевой вектор гильбертова пространства, который всегда решает уравнение на собственные состояния, но, по определению, не собственное состояние. Поэтому: должно существовать собственное состояние $\phi_0\rangle$ (называется *вакуумное*) такое, что

$$\hat{a}|\phi_0\rangle = 0, \quad \langle\phi_0|\phi_0\rangle = 1.$$

Собственное значение для этого собственного состояния $\hat{a}^+\hat{a}|\phi_0\rangle = 0$, равно нулю $\lambda_n = 0$. Пришел черед операторов рождения: любое состояние вида $(\hat{a}^+)^n|\phi_0\rangle$, n- натуральное число, согласно утверждению 2, – собственное с собственным значением $\lambda_n = n$. Простые рассуждения (методом от противного) показывают, что можно считать, что других собственных состояний нет. Остается отнормировать полученные состояния. Пусть найдены такие c_n, что состояние $|\phi_n\rangle = c_n(\hat{a}^+)^n|\phi_0\rangle$ - нормировано, тогда

$$1 = \langle\phi_n|\phi_n\rangle = c_n\langle\phi_n|(\hat{a}^+)^n\rangle = \frac{c_n}{c_{n-1}}\langle\phi_n|\hat{a}^+|\phi_{n-1}\rangle = \frac{c_n}{c_{n-1}}\overline{\langle\phi_{n-1}|\hat{a}|\phi_n\rangle} =$$
$$= \frac{c_n\bar{c}_n}{c_{n-1}\bar{c}_{n-1}}\overline{\langle\phi_{n-1}|\hat{a}\hat{a}^+|\phi_{n-1}\rangle} = \frac{c_n\bar{c}_n}{c_{n-1}\bar{c}_{n-1}}\overline{\langle\phi_{n-1}|\hat{a}^+\hat{a} + \hat{\mathrm{I}}|\phi_{n-1}\rangle} = \frac{c_n\bar{c}_n}{c_{n-1}\bar{c}_{n-1}}n.$$

Решение рекуррентного соотношения $c_n = 1/\sqrt{n!}$, как и положено, с точностью до фазового множителя.

So: решение задачи о спектре значений энергии и собственных состояниях гамильтониана для гармонического осциллятора

$$E_n = \hbar\omega(n+1/2),\ n = 0, 1, \dots, \quad |n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^+)^n|0\rangle,$$

$$\text{где вакуумное состояние определяется уравнением} \quad \hat{a}|0\rangle = 0,\ \langle 0|0\rangle = 1,$$

(введено новое обозначение $|\phi_n\rangle = |n\rangle$).

Полученные собственные состояния образуют полный базис гильбертова пространства и, следовательно, определяют его. Построенное таким образом пространство состояний называется *фоковским* (В.А.Фок).

Решаем задачи в рамках изученного формализма.

Реализация канонических коммутационных соотношений в некотором *конкретном* гильбертовом пространстве (представление канонических коммутационных соотношений) дает практическую возможность решать задачи квантовой механики, причем при некоторых условиях та или иная реализация приводит к физически эквивалентным ответам.

Рассмотрим пространство $L_2(-\infty < x < \infty, \mathrm{d}x)$ комплекснозначных функций $\phi(x)$, заданных на всей действительной оси, с суммируемым по мере Лебега $\mathrm{d}x$ квадратом

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \bar{\phi}(x)\phi(x) < +\infty.$$

Две функции, отличающиеся друг от друга на множестве меры нуль, считаются эквивалентными.

Такое пространство линейно. Кет-состоянию гильбертова пространства $|\phi\rangle$ ставится в соответствие функция $\phi(x) \in L_2$, а бра-состоянию $\langle\phi|$ – $\bar{\phi}(x)$. Скалярное произведение

$$\langle\chi|\phi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \bar{\chi}(x)\phi(x).$$

Пространство L_2 полно по соответствующем образом определенной норме.

Самосопряженный оператор координаты $\hat{q}$ определен на $\mathcal{D}_q$: $\phi(x) \in \mathcal{D}_q$, если $x\phi(x) \in L_2$. Действует этот оператор очень просто

$$\hat{q}|\phi\rangle \quad \Rightarrow \quad x \cdot \phi(x).$$

Самосопряженный оператор импульса $\hat{p}$ определен на $\mathcal{D}_p$: $\phi(x) \in \mathcal{D}_p$, если $\phi(x)$ - абсолютно непрерывная функция и $\partial_x\phi(x) \in L_2$. Действие этого оператора на $\mathcal{D}_p$

$$\hat{p}|\phi\rangle \quad \Rightarrow \quad -\mathrm{i}\hbar\partial_x\phi(x).$$

Пара самосопряженных операторов $\hat{q}, \hat{p}$, действующих на гильбертовом пространстве $\mathcal{H}$, образуют представление канонических коммутационных соотношений, если в $\mathcal{H}$ существует плотное всюду подпространство $\mathcal{D}:\ \mathcal{D} \subseteq \mathcal{D}_q \cap \mathcal{D}_p$ и

$$\hat{q}\hat{p} - \hat{p}\hat{q} = \mathrm{i}\hbar\,\hat{\mathrm{I}} \quad \text{на } \mathcal{D}.$$

Проверяем

$$(\hat{q}\hat{p} - \hat{p}\hat{q})|\phi\rangle \ \Rightarrow\ x(-\mathrm{i}\hbar\partial_x)\phi(x) - (-\mathrm{i}\hbar\partial_x)x\phi(x) = -\mathrm{i}\hbar\phi(x),\ Q.E.D.$$

Данная конкретная реализация гильбертова пространства и коммутационных соотношений называется *координатным представлением*. Очевидно, что есть и другие (например, *импульсное представление*).

Рассмотрим гармонический осциллятор в координатном представлении.

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\hat{p}^2 + \frac{1}{2}\omega^2\hat{q}^2 \quad \Rightarrow \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2}\partial_x^2 + \frac{1}{2}\omega^2 x^2,$$

(чтобы этот оператор стал наблюдаемой, нужно определить $\mathcal{D}_H$). Задача о спектре гамильтониана и его собственных состояниях

$$-\frac{\hbar^2}{2}\partial_x^2\phi_n(x) + \frac{1}{2}\omega^2 x^2\phi_n(x) = E_n\phi_n(x).$$

Прежде чем решать уравнение, его нужно обезразмерить. Источник размерности – x. Сделаем замену $x = a_0 u$.

$$-\frac{\hbar^2}{2a_0^2}\partial_u^2\phi_n(u) + \frac{1}{2}\omega^2 a_0^2 u^2\phi_n(u) = E_n\phi_n(u), \quad \partial_u^2\phi_n(u) - \frac{\omega^2 a_0^4}{\hbar^2}u^2\phi_n(u) = -2\frac{E_n a_0^2}{\hbar^2}\phi_n(u).$$

Определим a_0 так, чтобы

$$\frac{\omega^2 a_0^4}{\hbar^2} = 1, \quad a_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{\omega}},$$

и введем новую переменную

$$\epsilon_n = \frac{E_n a_0^2}{\hbar^2} = \frac{E_n}{\hbar\omega},$$

тогда уравнение принимает вид

$$\left(\partial_u^2 - u^2\right)\phi_n(u) = -2\epsilon_n\phi_n(u).$$

Это уравнение нужно решать. Но не будем, потому что оно уже решено. Найдем вид решений в координатном представлении. Для этого выпишем уравнение на вакуумное состояние

$$\hat{a}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}}(\hat{p} - \mathrm{i}\omega\hat{q})|0\rangle = 0 \;\Rightarrow\; \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}}(-\mathrm{i}\hbar\partial_x - \mathrm{i}\omega x)\phi_0(x) = 0,$$

$$(\partial_u + u)\phi_0(u) = 0, \quad \phi_0(u) = C\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}u^2}.$$

Нормировка

$$1 = \int \mathrm{d}x\,\bar{\phi}(x)\phi(x) = C^2\sqrt{\frac{\hbar}{\omega}}\int \mathrm{d}u\,\mathrm{e}^{-u^2} = C^2\sqrt{\frac{\pi\hbar}{\omega}}, \quad C = \left(\frac{\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}.$$

Собственные состояния

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^+)^n|0\rangle \;\Rightarrow\; \phi_n(u) = C\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi n/2}}{\sqrt{n!2^n}}(\partial_u - u)^n\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}u^2},$$

и, изменив фазовый множитель (допустимо), ответ можно переписать через полиномы Эрмита

$$\phi_n(u) = \left(\frac{\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\frac{1}{\sqrt{n!2^n}}H_n(u)\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}u^2}, \quad H_n(u) = (-1)^n\mathrm{e}^{u^2}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}u^n}\mathrm{e}^{-u^2}.$$

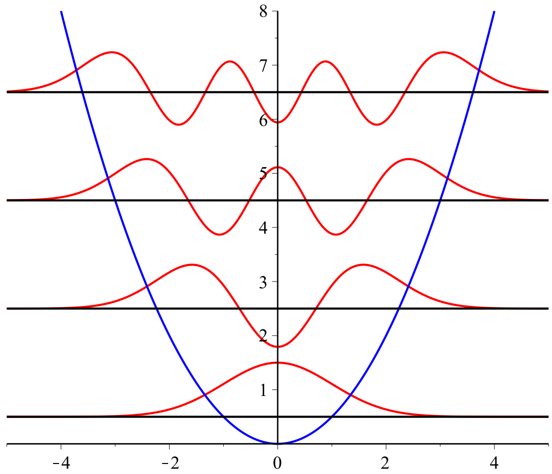


Рис. 1: собственные состояния осциллятора в координатном представлении $\phi_n(u)$ при $n = 0, 2, 4, 6$

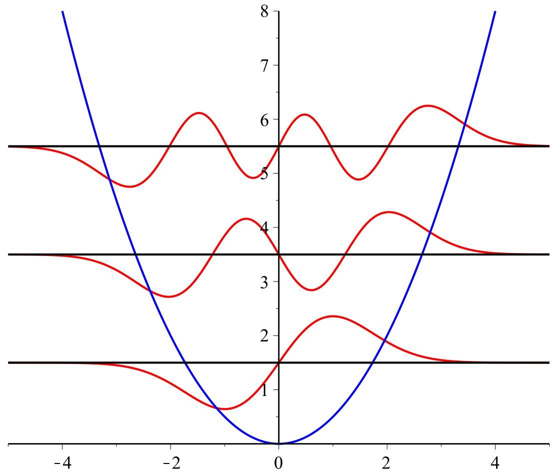


Рис. 2: собственные состояния осциллятора в координатном представлении $\phi_n(u)$ при $n = 1, 3, 5$

Решим задачу о прохождении света через поляризатор.

Гамильтониан системы – $H = \frac{1}{2}(\vec{P}^2 + \omega^2\vec{Q}^2)$.

Поле электромагнитной волны – $\vec{E} = -\sqrt{\frac{4\pi}{V}}(\omega\vec{Q}\sin kx + \vec{P}\cos kx) = \Re(\vec{E}_0 e^{ikx})$.

Интенсивность света – $I = \frac{1}{8\pi}\vec{E}_0\bar{\vec{E}}_0$.

Выразим $\vec{E}_0$ через канонические переменные

$$\vec{E}_0 = -\sqrt{\frac{4\pi}{V}}(\vec{P} - \mathrm{i}\omega\vec{Q}).$$

Разложим канонические переменные по направлениям вдоль оси поляризатора $\vec{p}_l$ и поперек $\vec{p}_{tr}$

$$\vec{Q} = q_l\vec{p}_l + q_{tr}\vec{p}_{tr}, \quad \vec{P} = p_l\vec{p}_l + p_{tr}\vec{p}_{tr}.$$

Наблюдаемые примут вид

$$H = \frac{1}{2}(p_l^2 + \omega^2 q_l^2) + \frac{1}{2}(p_{tr}^2 + \omega^2 q_{tr}^2),$$

$$I^{\text{пр}} = \frac{1}{2V}(p_l + \mathrm{i}\omega q_l)(p_l - \mathrm{i}\omega q_l), \quad I^{\text{отр}} = \frac{1}{2V}(p_{tr} + \mathrm{i}\omega q_{tr})(p_{tr} - \mathrm{i}\omega q_{tr}).$$

Проквантуем теорию в терминах операторов рождения $\hat{a}_l^+, \hat{a}_{tr}^+$ и уничтожения $\hat{a}_l, \hat{a}_{tr}$. Это не сложно, так как это два независимых осциллятора. Коммутационные соотношения

$$[\hat{a}_l, \hat{a}_l^+] = [\hat{a}_{tr}, \hat{a}_{tr}^+] = 1, \quad [\hat{a}_l, \hat{a}_{tr}^+] = [\hat{a}_{tr}, \hat{a}_l^+] = [\hat{a}_l, \hat{a}_{tr}] = [\hat{a}_l^+, \hat{a}_{tr}^+] = 0.$$

Собственные состояния гамильтониана

$$|m,n\rangle = \frac{1}{\sqrt{m!n!}}(\hat{a}_l^+)^m(\hat{a}_{tr}^+)^n|0\rangle, \ m,n = 0,1,\ldots, \quad |0\rangle = |0\rangle_l \otimes |0\rangle_{tr},$$

где $|0\rangle_l, |0\rangle_{tr}$ определяются из уравнений $\hat{a}_l|0\rangle_l = 0, \ \hat{a}_{tr}|0\rangle_{tr} = 0$.

Наблюдаемые

$$\hat{I}^{\text{пр}} = \hbar\omega\frac{1}{V}\hat{a}_l^+\hat{a}_l, \quad \hat{I}^{\text{отр}} = \hbar\omega\frac{1}{V}\hat{a}_{tr}^+\hat{a}_{tr}.$$

Проанализировав эти выражения, можно понять, что оператор числа фотонов определяется вот так

$$\hat{N} = \hat{a}_l^+\hat{a}_l + \hat{a}_{tr}^+\hat{a}_{tr}.$$

Состояния, с которыми мы работали,

$$|+\rangle = \hat{a}_l^+|0\rangle, \quad |-\rangle = \hat{a}_{tr}^+|0\rangle.$$

Теперь можно поверить алгеброй гармонию.

VII. Измерения координаты

Измерение координаты. Координатное представление. Задача на собственные значения:

$$\hat{q}\,|\phi_q\rangle = q\,|\phi_q\rangle. \tag{4}$$

В координатном представлении $|\phi_q\rangle \Rightarrow \phi_q(x) \in \mathcal{D}_q,\ \hat{q}\,|\phi_q\rangle \Rightarrow x\phi_q(x)$ и

$$x\,\phi_q(x) = q\,\phi_q(x).$$

Решение

$$\phi_q(x) = \begin{cases} 0, & \text{если } x \neq q \\ C, & \text{если } x = q \end{cases}.$$

Решение отличается от нуля на множестве меры нуль. Собственных состояний нет. Ответ физически правилен: из соотношения неопределенности $\Delta q\,\Delta p \geqslant \hbar/2$, и точное определение координаты ($\Delta q = 0$) не возможно.

В состоянии $|\phi\rangle$ наблюдаемая $\hat{O}$ с достоверностью принимает значение λ, если $\langle\phi|\hat{O}|\phi\rangle = \lambda$ и неопределенность наблюдаемой в заданном состоянии $\Delta_\phi O = 0$.

Предложение: Наблюдаемая $\hat{O}$ с достоверностью принимает значение λ тогда и только тогда, когда $|\phi\rangle$ – собственный вектор оператора $\hat{O}$ с собственным значением λ.

Физически любую величину λ можно измерить лишь с какой-то точностью, при этом хочется надеяться, что эту точность можно улучшить. Отсюда такое определение измерения (уточнение утверждения о структуре 4):

наблюдаемая $\hat{O}$ принимает значение λ, если для любого $\epsilon > 0$ существует такое нормированное состояние $|\phi_\epsilon\rangle$, что $\langle\phi_\epsilon|\hat{O}|\phi_\epsilon\rangle = \lambda$ и неопределенность наблюдаемой в этом состоянии $\Delta_{\phi_\epsilon} O < \epsilon$, то есть

$$\|\hat{O}|\phi_\epsilon\rangle - \lambda|\phi_\epsilon\rangle\| < \epsilon.$$

Теперь можно утверждать, что спектр измеряемых значений координаты представляет всю действительную ось ($-\infty < q < \infty$). Соответствующее этому измерению состояние

$$|\phi_{q,\epsilon}\rangle \Rightarrow \phi_{q,\epsilon}(x) = \frac{1}{\sqrt{\epsilon\sqrt{\pi}}}\mathrm{e}^{-\frac{(x-q)^2}{2\epsilon^2}}.$$

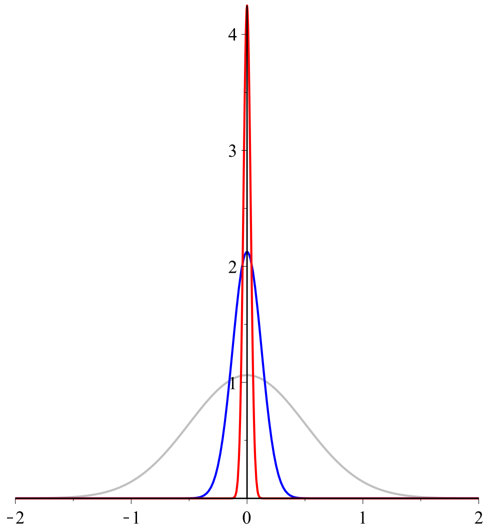


Рис. 3: функция $\phi_{q,\epsilon}(x)$ при $q=0$ и $\epsilon=1/2$ (серый), $\epsilon=1/8$ (синий), $\epsilon=1/32$ (красный).

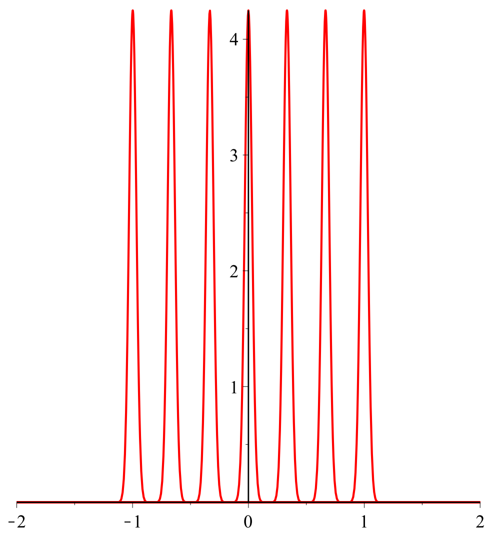


Рис. 4: счетная система векторов $\phi_{q_n,\epsilon}(x)$, для $\epsilon=1/32$.

Действительно,

$$\|\hat{q}|\phi_{q,\epsilon}\rangle - q|\phi_{q,\epsilon}\rangle\| = \left[\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \frac{(x-q)^2}{\epsilon\sqrt{\pi}} \mathrm{e}^{-\frac{(x-q)^2}{\epsilon^2}}\right]^{1/2} = \frac{\epsilon}{\sqrt{2}} < \epsilon.$$

Попытаемся построить „базис – полный и ортонормированный“. На оси спектра координаты $-\infty < q < \infty$ нанесем сетку $q_n = n\delta(\epsilon), n = 0, \pm 1, \ldots$, определяющую счетную систему векторов $\phi_{q_n,\epsilon}(x)$.

Вычислим скалярное произведение

$$\langle\phi_{q_n,\epsilon}|\phi_{q_m,\epsilon}\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \overline{\phi_{q_n,\epsilon}(x)} \phi_{q_m,\epsilon}(x) = \mathrm{e}^{-\frac{\delta^2(\epsilon)}{4\epsilon^2}(n-m)^2}.$$

Если выбрать $\delta(\epsilon) = c\sqrt{\epsilon}$, тогда $\langle\phi_{q_n,\epsilon}|\phi_{q_m,\epsilon}\rangle \to \delta_{n,m}$ при $\epsilon \to 0$ (ортонормированность).

Рассмотрим линейную оболочку

$$|\phi\rangle = \sum_n c_n|\phi_{q_n,\epsilon}\rangle \Rightarrow \phi(x) = \sum_n c_n\phi_{q_n,\epsilon}(x). \tag{5}$$

Перепишем (5) (выбрав $c = \sqrt{2\sqrt{\pi}}$) в виде

$$\phi(x) = \sum_n c_n\phi_{q_n,\epsilon}(x) = \sum_n \delta(\epsilon)c_n \frac{1}{\sqrt{2\epsilon\sqrt{\pi}}}\phi_{q_n,\epsilon}(x) \xrightarrow{\epsilon\to 0} \int \mathrm{d}q c(q)\Phi_q(x),$$

здесь

$$\Phi_q(x) = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{1}{\epsilon\sqrt{2\pi}} \mathrm{e}^{-\frac{(x-q)^2}{2\epsilon^2}} = \delta(x-q).$$

Линейная оболочка ($\mathcal{H}_+$) плотно вложена в гильбертово пространство ($\mathcal{H}$). Функция $\Phi_q(x) \in \mathcal{H}_-$ (пространство антилинейных функционалов $\langle \Phi_q | \phi \rangle$ на $\mathcal{H}_+$) и не принадлежит гильбертову пространству. Итак, мы имеем тройку пространств

$$\mathcal{H}_+ \subset \mathcal{H} \subset \mathcal{H}_-.$$

Правильно описанная (см. Ф.А.Березин, М.А.Шубин, *Уравнение Шредингера*, 1983, добавление 1, параграф 2.) тройка пространств называется *оснащением гильбертова пространства* $\mathcal{H}$.

Поставим в соответствие функции $\Phi_q(x)$ абстрактное состояние из оснащенного гильбертова пространства

$$\Phi_q(x) \Rightarrow \| q \rangle,$$

тогда можно утверждать, что

$$\langle q_1 \| q_2 \rangle = \delta(q_1 - q_2), \quad \text{(ортонормированность на δ-функцию)},$$
$$|\phi\rangle = \int \mathrm{d}q c(q) \| q \rangle \to \hat{\mathrm{I}} = \int \mathrm{d}q \| q \rangle \langle q \|, \quad \text{(разложение единицы)}.$$

Если теперь поставить задачу на собственные значения координаты следующим образом

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

или в координатном представлении

$$x\Phi_q(x) = q\Phi_q(x), \quad \Phi_q(x) \in \mathcal{H}_-, x\Phi_q(x) \in \mathcal{H}_-,$$
$$(x-q)\Phi_q(x) = 0,$$

то эта задача имеет решение

$$-\infty < q < \infty, \quad \Phi_q(x) = C\delta(x-q)$$

и из условия $\langle q_1 \| q_2 \rangle = \delta(q_1 - q_2)$ получаем $C = 1$.

Круг замкнулся.

Итак, точно измерить координату нельзя. Но можно локализовать частицу в любой сколь угодно малой области действительной оси $(q, q+\Delta q)$, $\Delta q \to 0$. Для этого частицу нужно перевести в состояние

$$\phi_{loc}(x) = \begin{cases} (\Delta q)^{-1/2}, & \text{если } x \in (q, q+\Delta q), \\ 0, & \text{если } x \notin (q, q+\Delta q), \end{cases}$$

значение функции на интервале $(q, q+\Delta q)$ определяется из условия нормировки. Амплитуда перехода в такое состояние равна $\langle \phi_{loc} | \phi \rangle = \phi(q)\sqrt{\Delta q}$. Поэтому вероятность обнаружить частицу в интервале $(q, q+\Delta q)$

$$\Delta W(q) = W_{\phi_{loc},\phi} = |\langle \phi_{loc} | \phi \rangle|^2 = \Delta q\, \bar{\phi}(q)\phi(q),\ \Delta q \to 0.$$

то есть квадрат модуля волновой функции $\bar{\phi}(q)\phi(q)$ определяет плотность вероятности обнаружить частицу в интервале $(q, q+\Delta q)$.

VIII. Измерение импульса

Координатное представление. Повторение пройденного с координатой для импульса. Задача на собственные значения:

$$\hat{p}\,|\phi_p\rangle = p\,|\phi_p\rangle.$$

В координатном представлении $|\phi_p\rangle \Rightarrow \phi_p(x) \in \mathcal{D}_p$, $\hat{p}\,|\phi_p\rangle \Rightarrow -\mathrm{i}\hbar\partial_x\phi_p(x)$.

$$-\mathrm{i}\hbar\partial_x\phi_p(x) = p\,\phi_p(x).$$

Решение

$$\phi_p(x) = C\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar} \notin L^2(-\infty < x < \infty, \mathrm{d}x).$$

Собственных состояний нет.

Можно утверждать, что спектр измеряемых значений импульса представляет всю действительную ось $(-\infty < p < \infty)$. Соответствующее этому измерению состояние

$$|\phi_{p,\epsilon}\rangle \Rightarrow \phi_{p,\epsilon}(x) = \frac{\sqrt{\epsilon}}{\pi^{1/4}\sqrt{\hbar}}\mathrm{e}^{-\frac{\epsilon^2 x^2}{2\hbar^2}+\mathrm{i}\frac{px}{\hbar}}.$$

$$\|\hat{p}|\phi_{p,\epsilon}\rangle - p|\phi_{p,\epsilon}\rangle\| = \Big[\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\frac{\epsilon^5 x^2}{\sqrt{\pi}\hbar^3}\mathrm{e}^{-\frac{\epsilon^2 x^2}{\hbar^2}}\Big]^{1/2} = \frac{\epsilon}{\sqrt{2}} < \epsilon.$$

На оси спектра импульса $-\infty < p < \infty$ нанесем сетку $p_n = n\delta(\epsilon), n = 0, \pm 1, \ldots$, определяющую счетную систему векторов $\phi_{p_n,\epsilon}(x)$.

Вычислим скалярное произведение

$$\langle \phi_{p_n,\epsilon} | \phi_{p_m,\epsilon} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \overline{\phi_{p_n,\epsilon}(x)} \phi_{p_m,\epsilon}(x) = \mathrm{e}^{-\frac{\delta^2(\epsilon)}{4\epsilon^2}(n-m)^2}.$$

Если выбрать $\delta(\epsilon) = c\sqrt{\epsilon}$, тогда $\langle \phi_{p_n,\epsilon} | \phi_{p_m,\epsilon} \rangle \to \delta_{n,m}$ при $\epsilon \to 0$ (ортонормированность).

Рассмотрим линейную оболочку

$$|\phi\rangle = \sum_n c_n |\phi_{p_n,\epsilon}\rangle \Rightarrow \phi(x) = \sum_n c_n \phi_{p_n,\epsilon}(x). \tag{6}$$

Перепишем (6) (выбрав $c = \sqrt{2\sqrt{\pi}}$) в виде

$$\phi(x) = \sum_n c_n \phi_{p_n,\epsilon}(x) = \sum_n \delta(\epsilon) c_n \frac{1}{\sqrt{2\epsilon\sqrt{\pi}}} \phi_{p_n,\epsilon}(x) \xrightarrow{\epsilon \to 0} \int \mathrm{d}p c(p) \Phi_p(x),$$

здесь

$$\Phi_p(x) = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \mathrm{e}^{-\frac{\epsilon^2 x^2}{2\hbar^2} + \mathrm{i}\frac{px}{\hbar}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{px}{\hbar}}.$$

Поставим в соответствие функции $\Phi_p(x)$ абстрактное состояние из оснащенного гильбертова пространства

$$\Phi_p(x) \Rightarrow \|p\rangle,$$

тогда можно утверждать, что

$$\langle p_1 \| p_2 \rangle = \delta(p_1 - p_2), \quad \text{(ортонормированность на } \delta\text{-функцию)},$$
$$|\phi\rangle = \int \mathrm{d}p c(p) \|p\rangle \to \hat{\mathrm{I}} = \int \mathrm{d}p \|p\rangle\langle p\|, \quad \text{(разложение единицы)}.$$

Если теперь поставить задачу на собственные значения импульса следующим образом

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

или в координатном представлении

$$-\mathrm{i}\hbar\partial_x \Phi_p(x) = p\Phi_p(x), \quad \Phi_p(x) \in \mathcal{H}_-, \Phi'_q(x) \in \mathcal{H}_-,$$

то эта задача имеет решение

$$-\infty < p < \infty, \quad \Phi_p(x) = C\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}$$

и из условия $\langle p_1 \| p_2 \rangle = \delta(p_1 - p_2)$ получаем $C = 1/\sqrt{2\pi\hbar}$.

Крайне важное соотношение

$$\langle p\|q\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \mathrm{e}^{-\mathrm{i}px/\hbar}\delta(x-q) = \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}pq/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}.$$

Построим импульсное представление коммутационных соотношений, не обращаясь к коммутационным соотношениям. Поставим во главу свойства обобщенных собственным состояний координаты и импульса

$$\hat{q}\|q\rangle = q\|q\rangle, \quad \hat{p}\|p\rangle = p\|p\rangle$$
$$\hat{\mathrm{I}} = \int \mathrm{d}q\, \|q\rangle\langle q\|, \quad \hat{\mathrm{I}} = \int \mathrm{d}p\, \|p\rangle\langle p\|$$
$$\langle q\|p\rangle = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}qp}}{\sqrt{2\pi}} \quad \boxed{\hbar = 1}$$

Определим скалярное произведение абстрактного вектора гильбертова пространства $|\phi\rangle$ с обобщенным состоянием $\langle p\|$

$$\varphi(p) = \langle p\|\phi\rangle.$$

Эта величина – комплексное число, зависящее от действительного числа $-\infty < p < \infty$, то есть комплекснозначная функция, заданная на действительной оси. Так как

$$\int \mathrm{d}p\, \bar{\varphi}(p)\varphi(p) = \int \mathrm{d}p\, \overline{\langle p\|\phi\rangle}\langle p\|\phi\rangle = \int \mathrm{d}p\, \langle\phi\|p\rangle\langle p\|\phi\rangle = \langle\phi|\, \hat{\mathrm{I}}|\phi\rangle = \langle\phi|\phi\rangle,$$

то эта функция с суммируемым квадратом.

Скалярное произведение

$$\langle\phi_1|\phi_2\rangle = \int \mathrm{d}p\, \langle\phi_1\|p\rangle\langle p\|\phi_2\rangle = \int \mathrm{d}p\, \overline{\langle p\|\phi_1\rangle}\langle p\|\phi_2\rangle = \int \mathrm{d}p\, \bar{\varphi}_1(p)\varphi_2(p).$$

Действие оператора координаты

$$\hat{q}|\phi\rangle \;\Rightarrow\; \langle p\|\hat{q}|\phi\rangle = \int \mathrm{d}p_1\, \langle p\|\hat{q}\|p_1\rangle\langle p_1\|\phi\rangle = \int \mathrm{d}p_1 \mathrm{d}q\, \langle p\|\hat{q}\|q\rangle\langle q\|p_1\rangle\langle p_1\|\phi\rangle =$$
$$\int \frac{\mathrm{d}p_1}{2\pi}\mathrm{d}q\, q\varphi(p_1)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p_1-p)q} = \mathrm{i}\partial_p \int \frac{\mathrm{d}p_1}{2\pi}\mathrm{d}q\, \varphi(p_1)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p_1-p)q} = \mathrm{i}\partial_p \int \frac{\mathrm{d}p_1}{2\pi}\varphi(p_1)2\pi\delta(p_1-p) = \mathrm{i}\partial_p\varphi(p).$$

Действие оператора импульса

$$\hat{p}|\phi\rangle \;\Rightarrow\; \langle p\|\hat{p}|\phi\rangle = p\cdot\varphi(p).$$

Гамильтониан

$$\hat{H}|\phi\rangle \;\Rightarrow\; \frac{p^2}{2m}\varphi(p) + \int \frac{\mathrm{d}p_1}{2\pi}\varphi(p_1)\int \mathrm{d}q\, U(q)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p_1-p)q}.$$

Аналогично строится координатное представление

$$\phi(x) = \langle x\|\phi\rangle.$$

Переход от импульсного к координатному представлению

$$\phi(x) = \langle x \| \phi \rangle = \int \mathrm{d}p \, \langle x \| p \rangle \langle p \| \phi \rangle = \int \frac{\mathrm{d}p}{\sqrt{2\pi}} \, \varphi(p) \mathrm{e}^{\mathrm{i}px}$$

– просто преобразование Фурье.

IX. Спектральная теорема

Обобщим полученные результаты на ситуацию общего положения.

Ставим задачу на собственные значения в оснащенном гильбертовом пространстве

$$\hat{O} \| \phi \rangle = \lambda \| \phi \rangle.$$

Собственные значения

- дискретные λ_n (конечное или счетное множество), собственные состояния $|\phi_n\rangle$ из гильбертова пространства;
- непрерывные $\lambda \in CEV \subset \mathbb{R}$ (CEV - множество непрерывных собственных значений), обобщенные собственные состояния $|\phi_\lambda\rangle$ из оснащенного гильбертова пространства.

Свойства обобщенных собственных состояний

i. ортонормированность

$$\langle \phi_n | \phi_m \rangle = \delta_{nm}, \langle \phi_n \| \phi_\lambda \rangle = 0, \langle \phi_\lambda \| \phi_\mu \rangle = \delta(\lambda - \mu), \quad \lambda, \mu \in CEV$$

ii. разложение единицы

$$\hat{\mathrm{I}} = \sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n| + \int_{CEV} \mathrm{d}\lambda \|\phi_\lambda\rangle\langle\phi_\lambda\|.$$

iii. представление оператора $\hat{O}$

$$\hat{O} = \sum_n \lambda_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n| + \int_{CEV} \mathrm{d}\lambda \, \lambda \|\phi_\lambda\rangle\langle\phi_\lambda\|.$$

Определим проектор

$$\hat{E}_\mu = \sum_{n:\lambda_n<\mu} |\phi_n\rangle\langle\phi_n| + \int_{CEV \bigcap \{\lambda<\mu\}} \mathrm{d}\lambda \|\phi_\lambda\rangle\langle\phi_\lambda\|.$$

Теорема о спектральном разложении самосопряженного оператора в сепарабельном гильбертовом пространстве.

Пусть дан самосопряженный оператор $\hat{O}$ в гильбертовом пространстве $\mathcal{H}$. Тогда:

1. Существует разложение единицы $\hat{E}_\lambda, -\infty < \lambda < \infty$, т.е. семейство самосопряженных проекционных операторов $\hat{E}_\lambda$ в пространстве $\mathcal{H}$, зависящих от вещественного параметра λ и обладающих следующими свойствами

a. $\hat{E}_\lambda \hat{E}_\mu = \hat{E}_\mu \hat{E}_\lambda = \hat{E}_\lambda$ при $\lambda \leqslant \mu$;

b. $\hat{E}_{\lambda+0} = \hat{E}_\lambda$ в сильной операторной топологии, т.е. для любого $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ выполнено предельное соотношение $\lim\limits_{\epsilon\to+0} \hat{E}_{\lambda+\epsilon}|\phi\rangle = \hat{E}_\lambda|\phi\rangle$ по норме $\mathcal{H}$;

c. в сильной операторной топологии $\lim\limits_{\lambda\to-\infty} \hat{E}_\lambda = 0$, $\lim\limits_{\lambda\to+\infty} \hat{E}_\lambda = \hat{\mathrm{I}}$;

d. если $\Delta = (\lambda_1, \lambda_2]$ - полуинтервал вещественной оси, $-\infty < \lambda_1 < \lambda_2 < +\infty$ и $\hat{E}(\Delta) = \hat{E}_{\lambda_2} - \hat{E}_{\lambda_1}$, то $\hat{E}(\Delta)\mathcal{H} \subset \mathcal{D}_O$ и для $|\phi\rangle \in \hat{E}(\Delta)\mathcal{H}$ имеют место неравенства

$$\lambda_1\langle\phi|\phi\rangle \leqslant \langle\phi|\hat{O}|\phi\rangle \leqslant \lambda_2\langle\phi|\phi\rangle,$$

а также оценка $\|(\hat{O} - \lambda\hat{\mathrm{I}})|\phi\rangle\| \leqslant (\lambda_2 - \lambda_1)\||\phi\rangle\|$ при $\lambda \in \Delta$, означающая, что векторы из $\hat{E}(\Delta)\mathcal{H}$ при малом Δ – почти собственные вектора оператора $\hat{O}$ с собственным значением $\lambda \in \Delta$;

e. оператор $\hat{O}$ восстанавливается по семейству $\{\hat{E}_\lambda\}$ формулой

$$\hat{O} = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda \mathrm{d}\hat{E}_\lambda,$$

которая означает, что вектор $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ принадлежит $\mathcal{D}_O$ тогда и только тогда, когда сходится интеграл

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \lambda^2 \mathrm{d}\langle\phi|\hat{E}_\lambda|\phi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda^2 \mathrm{d}\|\hat{E}_\lambda|\phi\rangle\|^2 < \infty,$$

причем левая часть этого неравенства равна $\|\hat{O}|\phi\rangle\|^2$ и, кроме того

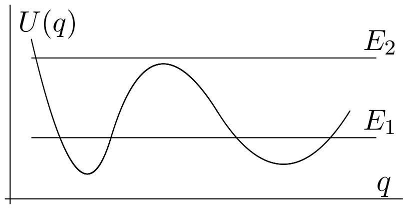
$$\hat{O}|\phi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda \mathrm{d}(\hat{E}_\lambda|\phi\rangle),$$

где интеграл надо понимать как $\lim\limits_{\alpha\to-\infty} \lim\limits_{\beta\to+\infty} \int\limits_\alpha^\beta \lambda \mathrm{d}(\hat{E}_\lambda|\phi\rangle)$ по норме в $\mathcal{H}$, а интегралы по конечному промежутку есть просто пределы своих интегральных сумм по норме в $\mathcal{H}$ и даже равномерные по всем $|\phi\rangle$ с $\||\phi\rangle\| < 1$.

2. Разложение единицы, обладающее свойствами a.-e., единственно.

X. Прямоугольная яма

Координатное представление позволяет свести задачу о движении частицы по прямой ($-\infty < q < \infty$) в произвольном (почти произвольном) потенциале к решению обыкновенного линейного дифференциального уравнения второго порядка.



$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + U(\hat{q})$$

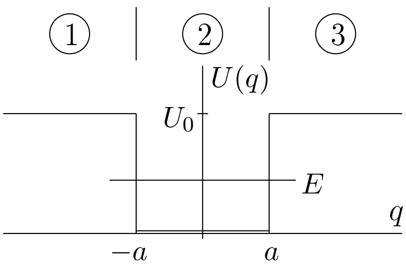
координатное представление

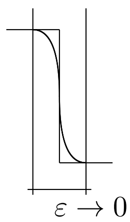
$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + U(x)$$

Задача на собственные значения и собственные состояния гамильтониана

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\phi_n(x) + U(x)\phi_n(x) = E_n\phi_n(x).$$

Если классическое движение принципиально финитное, то собственные состояния обычно принадлежат гильбертову пространству, если же инфинитное, то в основном, следует ожидать, что спектр собственных значений непрерывен, а собственные состояния – обобщенные. Как решать поставленную задачу в ситуации общего положения не известно. Однако, есть ряд очень полезных теорем, связанных с различными ограничениями на вид потенциала $U(x)$, которые определяют характер и структуру спектра E_n и поведение собственных функций $\phi_n(x)$ (см., например, Ф.А.Березин, М.А.Шубин, Уравнение Шредингера, глава 2). Кроме того, существуют классы потенциалов, когда возможно точное решение задачи (можно спросить у И.М.Кричевера).
Мы же рассмотрим, ну, очень простую задачу. So: прямоугольная яма:





1 3 $\quad -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\phi(x) + U_0\phi(x) = E\phi(x)$

$$(\partial_u^2 - \varkappa^2)\phi(u) = 0, \varkappa^2 = \frac{2ma^2(U_0 - E)}{\hbar^2}, x = au$$

2 $\quad -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\phi(x) = E\phi(x)$

$$(\partial_u^2 + k^2)\phi(u) = 0,\ k^2 = \frac{2ma^2E}{\hbar^2}$$

У нас есть уравнения во всех областях пространства, которые просто решаются. Нужно уметь сшивать решения на границах раздела $u = \pm 1$. Понятно, что реальный потенциал должен быть достаточно гладким (см. рис.). Модельный потенциал получается из реального предельным переходом $\varepsilon \to 0$. В случае гладкого потенциала функция $\phi(x)$

должна быть дважды дифференцируемой (чтобы решаемое уравнение имело смысл). Ясно, что при предельном переходе должна сохраниться, как минимум, непрерывность волновой функции $\phi(x)$. Что же касается производной, ее поведение можно восстановить из самого уравнения, проинтегрировав его вблизи особой точки x_0:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{x_0-\varepsilon/2}^{x_0+\varepsilon/2} \mathrm{d}x\, \partial_x^2\phi(x) = \int_{x_0-\varepsilon/2}^{x_0+\varepsilon/2} \mathrm{d}x\, (E - U(x))\phi(x).$$

Так как в рассматриваемом случае $U(x)$ - ограничена, а $\phi(x)$ - непрерывна, в пределе $\varepsilon \to 0$ получается непрерывной и производная волновой функции

$$\partial_x\phi(x_0+0) - \partial_x\phi(x_0-0) = 0.$$

Теперь задачу можно решать, но: лучше еще немного подумать.

Определим оператор $\hat{P}$:

$$\hat{P}\phi(x) = \phi(-x).$$

Подействуем этим оператором на решаемую задачу и воспользуемся тем, что в нашем случае $[\hat{P}, \hat{H}] = 0$:

$$\hat{P}\hat{H}\phi_n(x) = \hat{P}E_n\phi_n(x), \quad \hat{H}\big(\hat{P}\phi_n(x)\big) = E_n\big(\hat{P}\phi_n(x)\big).$$

Тогда всегда можно выбрать такие $\phi_n(x)$ (это утверждение нужно доказать), что

$$\hat{P}\phi_n(x) = c_n\phi_n(x).$$

Отсюда следует цепочка равенств

$$\phi_n(x) = \hat{P}\hat{P}\phi_n(x) = \hat{P}c_n\phi_n(x) = c_n^2\phi_n(x), \quad c_n = \pm 1.$$

So: собственные функции гамильтониана, который инвариантен по отношению к замене $x \to -x$, можно выбрать либо четными, либо нечетными.

Ограничимся нахождением спектра энергии связанных состояний $(0 < E < U_0)$.
Четные состояния.
Решение уравнения на собственные состояния в области $-a < x < a$

$$\phi(u) = C_1 \cos ku,$$

для области $x > a$

$$\phi(u) = C_2 \mathrm{e}^{-\varkappa u} + C_3 \mathrm{e}^{\varkappa u},$$

причем следует считать $C_3 = 0$, иначе $\phi(x) \notin L_2(-\infty < x < \infty, \mathrm{d}x)$.

Условия сшивки

$$C_1 \cos k = C_2 \mathrm{e}^{-\varkappa}, \quad C_1 k \sin k = C_2 \varkappa \mathrm{e}^{-\varkappa}.$$

Наличие нетривиального решения находится из условия равенства нулю определителя этой системы уравнений

$$\mathrm{tg} k = \frac{\varkappa}{k}.$$

Чтобы проанализировать решения этого уравнения, его удобно представить в другом виде

$$\cos k = \pm \beta k, \ \mathrm{tg} k > 0, \quad \beta = \frac{\hbar}{a\sqrt{2mU_0}}.$$

Корни этого уравнения k_n определяют спектр связанных состояний $E_n = \dfrac{\hbar^2 k_n^2}{2ma^2}$.

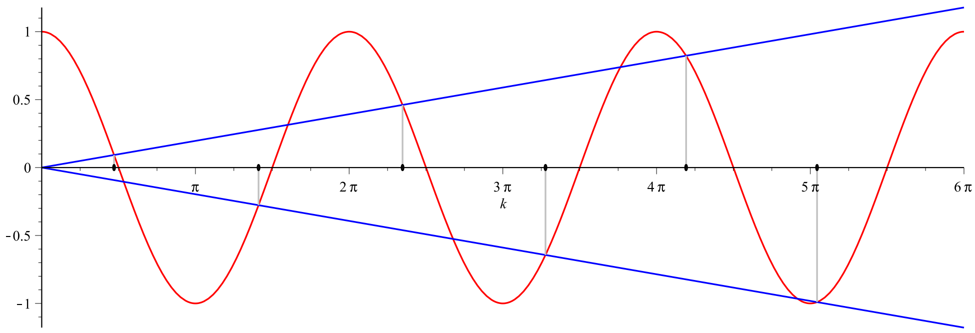


Рис. 5: корни k_n для четных связанных состояний при $\beta = 1/16$.

Нечетные состояния.

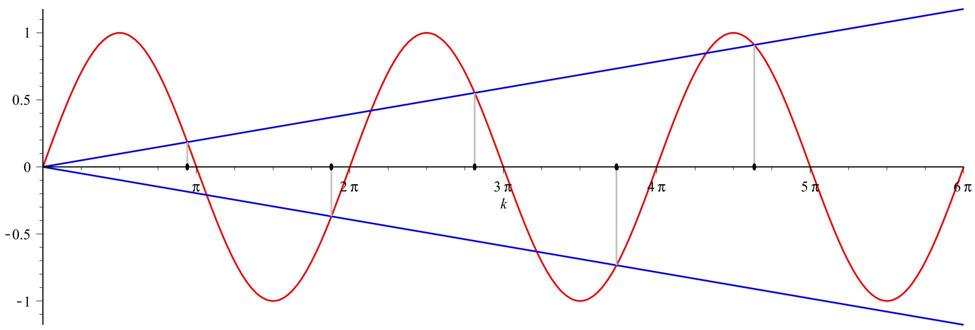


Рис. 6: корни k_n для нечетных связанных состояний при $\beta = 1/16$.

Пропуская выкладки, пишем ответ

$$\sin k = \pm \beta k, \ \mathrm{tg} k < 0.$$

Есть еще один простой модельный потенциал, который используется для понимания важных квантово-механических процессов (расщепление уровней, туннелирование, распад квазистационарного состояния). Это потенциал вида

$$U(q) = \alpha\delta(q),$$

где $\delta(q)$ – дельта-функция Дирака.

В координатном представлении для такого потенциала во всем пространстве, кроме точки $x = 0$, справедливо уравнение

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\phi(x) = E\phi(x), \quad x \neq 0.$$

В точке $x = 0$ волновая функция непрерывна

$$\phi(+0) = \phi(-0) = \phi(0),$$

а производная испытывает скачок

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-0}^{+0} \mathrm{d}x\,\partial_x^2\phi(x) = -\alpha\int_{-0}^{+0} \mathrm{d}x\,\delta(x)\phi(x), \qquad \partial_x\phi(+0) - \partial_x\phi(-0) = \frac{2m\alpha}{\hbar^2}\phi(0).$$

XI. Сохраняющиеся наблюдаемые

В классической теории крайне важную роль играют интегралы движения, то есть наблюдаемые, сохраняющие свое значение в процессе эволюции системы. Квантовая теория требует другого определения.

> Пусть в момент времени t_0 произведено измерение наблюдаемой $\hat{O}$ и результатом измерения оказалось собственное значение λ_n. Если в момент времени $t > t_0$ измерение той же наблюдаемой с достоверностью дает то же значение наблюдаемой λ_n, то такая наблюдаемая называется сохраняющейся.

Расшифровав это определение, получим критерий того, что наблюдаемая – сохраняющаяся. Итак:

пусть в момент времени t_0 произведено измерение наблюдаемой $\hat{O}$ и результатом измерения оказалось собственное значение λ_n

$$\hat{O}|\phi_n(t_0)\rangle = \lambda_n|\phi_n(t_0)\rangle,$$

если в момент времени $t > t_0$ (система проэволюционировала согласно уравнению Шредингера, рассмотрим эволюцию за малое время $t - t_0 = \Delta t \to 0$)

$$|\phi_n(t)\rangle = |\phi_n(t_0)\rangle - \mathrm{i}\Delta t\hat{H}|\phi_n(t_0)\rangle,$$

измерение той же наблюдаемой с достоверостью дает то же значение наблюдаемой λ_n

$$\hat{O}|\phi_n(t)\rangle = \lambda_n|\phi_n(t)\rangle,$$

то... отсюда следует, что

$$\hat{O}\hat{H}|\phi_n(t_0)\rangle = \lambda_n\hat{H}|\phi_n(t_0)\rangle = \hat{H}\lambda_n|\phi_n(t_0)\rangle = \hat{H}\hat{O}|\phi_n(t_0)\rangle.$$

Так как $|\phi_n(t_0)\rangle$ - любое собственное состояние наблюдаемой $\hat{O}$, то на операторном уровне

$$\hat{O}\hat{H} - \hat{H}\hat{O} = [\hat{O}, \hat{H}] = 0.$$

So:

> наблюдаемая сохраняется, если она коммутирует с гамильтонианом физической системы.

XII. Полный набор наблюдаемых

Вопрос: какую максимально возможную информацию (достоверную) можно получить в результате измерения?

> Если наблюдаемые $\hat{O}_1, \ldots, \hat{O}_s$ одновременно измеримы и если всякая наблюдаемая, измеримая одновременно с $\hat{O}_1, \ldots, \hat{O}_s$, - некоторая функция от этих величин, то наблюдаемые $\hat{O}_1, \ldots, \hat{O}_s$ образуют полный набор. Натуральное число s - число степеней свободы.

Любую наблюдаемую можно измерить с любой наперед заданной точностью или, подругому, ее неопределенность в результате измерения можно сделать сколь угодно малой. Теперь пусть измеряются одновременно две наблюдаемые.

Найдем соотношение между неопределенностями двух наблюдаемых при измерении произвольного состояния $|\phi\rangle$. Если повторить вывод, который был проведен при исследовании соотношений неопределенности Гайзенберга, то окажется, что

$$\Delta_\phi O_1 \cdot \Delta_\phi O_2 \geqslant \frac{1}{2}|\langle\phi|[\hat{O}_1, \hat{O}_2]|\phi\rangle|.$$

Отсюда следует, что если две наблюдаемые не коммутируют друг с другом, одновременное их измерение в ситуации общего положения, вообще говоря, не возможно.

Необходимо, чтобы наблюдаемые из полного набора коммутировали, достаточно ли этого? Главное, что происходит при измерении это то, что физическая система переходит (или почти переходит) в собственное состояние наблюдаемой. Поэтому если у наблюдаемых есть *общая* (единая) система собственных состояний, то вывести одновременно соответствующие показания на шкалу прибора – дело техники. Докажем достаточность, доказав утверждение: для двух коммутирующих наблюдаемых *существует* общая система собственных состояний.

Упражнение по линейной алгебре. Пусть $|\phi_{n,\alpha}\rangle$ – собственные состояния наблюдаемой $\hat{O}_1$ с собственнным значением λ_n. Здесь $\alpha = 1, \ldots, N$, и разные по α состояния отвечают одному и тому же собственному значению λ_n (состояния вырождены со степенью вырождения N).

$$\hat{O}_1|\phi_{n,\alpha}\rangle = \lambda_n|\phi_{n,\alpha}\rangle, \quad \alpha = 1, \ldots, N. \tag{7}$$

Подействуем наблюдаемой $\hat{O}_2$, которая коммутирует с $\hat{O}_1$, на это уравнение

$$\hat{O}_2\hat{O}_1|\phi_{n,\alpha}\rangle = \hat{O}_2\lambda_n|\phi_{n,\alpha}\rangle,$$

$$\hat{O}_1\big(\hat{O}_2|\phi_{n,\alpha}\rangle\big) = \lambda_n\big(\hat{O}_2|\phi_{n,\alpha}\rangle\big).$$

Сравнив с (7), заключаем, что

$$\hat{O}_2|\phi_{n,\alpha}\rangle = c_{\alpha\beta}|\phi_{n,\beta}\rangle, \tag{8}$$

здесь по повторяющимся индексам продразумевается суммирование, $c_{\alpha\beta}$ - эрмитова матрица (действительно, $c_{\alpha\beta} = \langle\phi_{n,\beta}|\hat{O}_2|\phi_{n,\alpha}\rangle$ и $c_{\alpha\beta} = \bar{c}_{\beta,\alpha}$). Определим новое состояние

$$|\varphi_{n,\alpha}\rangle = U_{\alpha\beta}|\phi_{n,\beta}\rangle,$$

где $U_{\alpha\beta}$ – пока произвольная невырожденная матрица, тогда уравнение (8) можно представить в виде

$$\hat{O}_2|\varphi_{n,\alpha}\rangle = (UcU^{-1})_{\alpha\beta}|\varphi_{n,\beta}\rangle.$$

Так как матрица c - эрмитова, то всегда существует такая унитарная матрица U, что матрица UcU^{-1} - диагональная с действительными собственными значениями μ_α, $\alpha = 1, \ldots, N$. Возьмем такую матрицу, тогда

$$\hat{O}_2|\varphi_{n,\alpha}\rangle = \mu_\alpha|\varphi_{n,\alpha}\rangle, \quad \text{суммирования по } \alpha \text{ нет,}$$

то есть $|\varphi_{n,\alpha}\rangle$ – собственные состояния оператора $\hat{O}_2$. Но эти же состояния – другие, но собственные, состояния и наблюдаемой $\hat{O}_1$. Они ни чем не хуже состояний $|\phi_{n,\alpha}\rangle$: из-за унитарности матрицы U они также ортонормированы и для них есть разложение единицы. Утверждение доказано: для двух коммутирующих наблюдаемых *существует* общая система собственных состояний.

> Наблюдаемые $\hat{O}_1, \ldots, \hat{O}_s$ образуют полный набор тогда и только тогда, когда операторы $\hat{O}_1, \ldots, \hat{O}_s$ перестановочны между собой.

Замечание.
Для данной физической системы могут существовать *разные* полные наборы наблюдаемых.

XIII. Измерение момента импульса

Рассмотрим классическую частицу в трехмерном пространстве ($d = 3$). Пусть q_x, q_y, q_z - ее декартовы координаты, а $p_x.p_y, p_z$ - соответствующие им обобщенные импульсы. Тогда классическая наблюдаемая - момент импульса частицы определяется следующим образом: это псевдовектор с компонентами

$$M_x^{\mathrm{cl}} = q_y p_z - q_z p_y, \quad M_y^{\mathrm{cl}} = q_z p_x - q_x p_z, \quad M_z^{\mathrm{cl}} = q_x p_y - q_y p_x,$$

или в другой форме

$$M_i^{\mathrm{cl}} = \epsilon_{ijk} q_j p_k, \quad i, j, k = x, y, z,$$

где по повторяющимся индексам подразумевается суммирование, а ϵ_{ijk} - полностью антисимметричный тензор третьего ранга, причем $\epsilon_{xyz} = 1$.
Проведем квантование

$$\hat{M}_x = \hat{q}_y \hat{p}_z - \hat{q}_z \hat{p}_y, \quad \hat{M}_y = \hat{q}_z \hat{p}_x - \hat{q}_x \hat{p}_z, \quad \hat{M}_z = \hat{q}_x \hat{p}_y - \hat{q}_y \hat{p}_x,$$

где $\hat{q}_i, \hat{p}_i,\ i = x, y, z$ - самосопряженные операторы координат и импульсов, для которых справедливы канонические коммутационные соотношения

$$[\hat{q}_i, \hat{p}_j] = \mathrm{i}\delta_{ij}\hat{\mathrm{I}}, \quad [\hat{q}_i, \hat{q}_j] = [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0, \quad i, j = x, y, z.$$

Вопрос № 1. Можно ли в квантовой теории измерить момент импульса частицы? То есть одновременно измерить три компоненты $\hat{M}_x, \hat{M}_y, \hat{M}_z$. Ответ дает вычисление коммутационных соотношений

$$[\hat{M}_x, \hat{M}_y] = [\hat{q}_y \hat{p}_z - \hat{q}_z \hat{p}_y, \hat{q}_z \hat{p}_x - \hat{q}_x \hat{p}_z] = \hat{q}_y \hat{p}_x [\hat{p}_z, \hat{q}_z] + \hat{p}_y \hat{q}_x [\hat{q}_z, \hat{p}_z] = \hat{q}_x \hat{p}_y \mathrm{i} - \hat{q}_y \hat{p}_x \mathrm{i} = \mathrm{i}\hat{M}_z.$$

So: в ситуации общего положения можно измерить лишь одну компоненту момента импульса (будем измерять $\hat{M}_z$). Однако, можно проверить или сообразить, что наряду с одной компонентой можно измерить и квадрат момента импульса $\hat{M}^2 = \hat{M}_x^2 + \hat{M}_y^2 + \hat{M}_z^2$

$$[\hat{M}^2, \hat{M}_z] = \hat{M}_x[\hat{M}_x, \hat{M}_z] + [\hat{M}_x, \hat{M}_z]\hat{M}_x + \hat{M}_y[\hat{M}_y, \hat{M}_z] + [\hat{M}_y, \hat{M}_z]\hat{M}_y =$$
$$\hat{M}_x(-\mathrm{i}\hat{M}_y) + (-\mathrm{i}\hat{M}_y)\hat{M}_x + \hat{M}_y(\mathrm{i}\hat{M}_x) + (\mathrm{i}\hat{M}_x)\hat{M}_y = 0, \quad Q.E.D.$$

Следовательно, существует общая система собственных состояний операторов $\hat{M}_z$ и $\hat{M}^2$, которую наряду с собственными значениями m и μ, соответственно, нужно определить:

$$\hat{M}_z|m, \mu\rangle = m|m, \mu\rangle,$$
$$\hat{M}^2|m, \mu\rangle = \mu|m, \mu\rangle.$$

Для решения этой задачи вместо самосопряженных операторов $\hat{M}_x, \hat{M}_y$ определим операторы

$$\hat{M}_+ = \hat{M}_x + \mathrm{i}\hat{M}_y, \quad \hat{M}_- = \hat{M}_x - \mathrm{i}\hat{M}_y.$$

В новых терминах

$$[\hat{M}_z, \hat{M}_\pm] = \pm\hat{M}_\pm, \quad [\hat{M}_+, \hat{M}_-] = 2\hat{M}_z,$$
$$\hat{M}^2 = \hat{M}_+\hat{M}_- + \hat{M}_z^2 - \hat{M}_z = \hat{M}_-\hat{M}_+ + \hat{M}_z^2 + \hat{M}_z, \quad [\hat{M}^2, \hat{M}_\pm] = [\hat{M}^2, \hat{M}_z] = 0.$$

Теперь зафиксируем собственное значение квадрата момента μ и докажем ряд утверждений

1. Квадрат собственного значения проекции момента импульса на ось z не превосходит собственного значения квадрата момента $m^2 \leqslant \mu$

$$\mu = \langle m, \mu|\hat{M}^2|m, \mu\rangle = \langle m, \mu|\hat{M}_x^2|m, \mu\rangle + \langle m, \mu|\hat{M}_y^2|m, \mu\rangle + m^2 \geqslant m^2,$$

2. Пусть $|m, \mu\rangle$ собственное состояние оператора $\hat{M}_z$ с собственным значением m. Тогда $\hat{M}_+|m, \mu\rangle$ тоже собственное состояние этого оператора (может быть не нормированное на единицу) с собственным значением $m + 1$.

$$\hat{M}_z|m, \mu\rangle = m|m, \mu\rangle, \quad \hat{M}_+\hat{M}_z|m, \mu\rangle = \hat{M}_z\hat{M}_+|m, \mu\rangle - \hat{M}_+|m, \mu\rangle = m\hat{M}_+|m, \mu\rangle,$$
$$\text{или} \quad \hat{M}_z\ \underline{\hat{M}_+|m, \mu\rangle} = (m + 1)\underline{\hat{M}_+|m, \mu\rangle}, \quad Q.E.D.$$

3. Пусть $|m, \mu\rangle$ собственное состояние оператора $\hat{M}_z$ с собственным значением m. Тогда $\hat{M}_-|m, \mu\rangle$ тоже собственное состояние этого оператора (может быть не нормированное на единицу) с собственным значением $m - 1$.

Вспоминая квантование гармонического осциллятора, заключаем, что существуют два состояния $|m_{\min}, \mu\rangle$ и $|m_{\max}, \mu\rangle$, такие что

$$\hat{M}_-|m_{\min}, \mu\rangle = 0, \qquad \hat{M}_+|m_{\max}, \mu\rangle = 0.$$

Отсюда немедленно следует, что

$$0 = \hat{M}_+\hat{M}_-|m_{\min}, \mu\rangle = (\hat{M}^2 - \hat{M}_z^2 + \hat{M}_z)|m_{\min}, \mu\rangle = [\mu - m_{\min}(m_{\min} - 1)]|m_{\min}, \mu\rangle,$$
$$0 = \hat{M}_-\hat{M}_+|m_{\max}, \mu\rangle = (\hat{M}^2 - \hat{M}_z^2 - \hat{M}_z)|m_{\max}, \mu\rangle = [\mu - m_{\max}(m_{\max} + 1)]|m_{\max}, \mu\rangle,$$

или

$$m_{\min}(m_{\min} - 1) = j(j + 1),$$
$$\mu = j(j + 1),$$

где $j = m_{\max}$. Решение первого уравнения $m_{\min} = -j$. Собственные состояния можно получить последовательным действием оператора $\hat{M}_-$ на состояние $|m_{\max}, \mu\rangle$, поэтому собственные значения m пробегают значения $j, j-1, \ldots, -j+1, -j$. Это означает, что $2j = n$, где n - неотрицательное целое число единичных шагов от j до $-j$.

So: собственные значения квадрата момента импульса

$$\mu = j(j + 1), \quad j = 0, 1/2, 1, 3/2, 2 \ldots,$$

собственные значения проекции момента на выделенную ось при фиксированном значении квадрата момента

$$m = -j, -j + 1, \ldots, j - 1, j,$$

(состояния с одинаковым значением квадрата момента $2j + 1$-кратно вырождены). Немного изменим обозначения

$$|m, \mu\rangle \quad \Rightarrow \quad |m, j\rangle.$$

Найдем собственные состояния, отвечающие измерению проекции и квадрата момента импульса.

Запишем связь между собственными состояниями, считая их нормированными на единицу

$$\hat{M}_-|m,j\rangle = c_{m,j}|m-1,j\rangle.$$

Определим коэффициент пропорциональности $c_{m,j}$

$$\bar{c}_{m,j}c_{m,j} = \langle m,j|\hat{M}_+\hat{M}_-|m,j\rangle = \langle m,j|\hat{M}^2-\hat{M}_z^2+\hat{M}_z|m,j\rangle = j(j+1)-m^2+m = (j+m)(j+1-m).$$

Отсюда получаем

$$\hat{M}_-|m,j\rangle = \sqrt{(j+m)(j+1-m)}|m-1,j\rangle.$$

Рассмотрим последовательность

$$\hat{M}_-|j,j\rangle = \sqrt{2j\cdot 1}|j-1,j\rangle,$$

$$\hat{M}_-^2|j,j\rangle = \sqrt{2j\cdot 1}\hat{M}_-|j-1,j\rangle = \sqrt{2j\cdot(2j-1)\cdot 1\cdot 2}|j-2,j\rangle,$$

$$\hat{M}_-^3|j,j\rangle = \sqrt{2j\cdot(2j-1)\cdot(2j-2)\cdot 1\cdot 2\cdot 3}|j-3,j\rangle,$$

$$\dots$$

$$\hat{M}_-^m|j,j\rangle = \sqrt{2j(2j-1)\dots(2j-m+1)\cdot 1\cdot 2\dots m}|j-m,j\rangle = \sqrt{\frac{(2j)!m!}{(2j-m)!}}|j-m,j\rangle.$$

Следовательно,

$$|m,j\rangle = \sqrt{\frac{(j+m)!}{(2j)!(j-m)!}}\hat{M}_-^{j-m}|j,j\rangle,$$

где нормированное состояние $|j,j\rangle$ определяется из условия

$$\hat{M}_+|j,j\rangle = 0, \quad \langle j,j|j,j\rangle = 1.$$

Координатное представление.

$$|\phi\rangle \quad\Rightarrow\quad \phi(x,y,z),\ \int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z\,\bar{\phi}(x,y,z)\phi(x,y,z) < \infty$$

$$\langle\phi| \quad\Rightarrow\quad \bar{\phi}(x,y,z)$$

$$\langle\phi_1|\phi_2\rangle = \int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z\,\bar{\phi}_1(x,y,z)\phi_2(x,y,z)$$

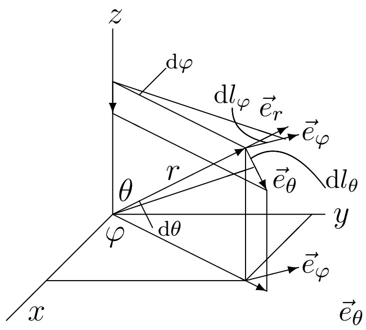
$$\hat{q}_x|\phi\rangle \quad\Rightarrow\quad x\phi(x,y,z),\ \hat{q}_y|\phi\rangle \quad\Rightarrow\quad y\phi(x,y,z),\ \hat{q}_z|\phi\rangle \quad\Rightarrow\quad z\phi(x,y,z)$$

$$\hat{p}_x|\phi\rangle \quad\Rightarrow\quad -\mathrm{i}\partial_x\phi(x,y,z),\ \hat{p}_y|\phi\rangle \quad\Rightarrow\quad -\mathrm{i}\partial_y\phi(x,y,z),\ \hat{p}_z|\phi\rangle \quad\Rightarrow\quad -\mathrm{i}\partial_z\phi(x,y,z)$$

Оператор момента импульса

$$\hat{\vec{M}}|\phi\rangle \quad\Rightarrow\quad -\mathrm{i}[\vec{r}\times\vec{\partial}]\phi(\vec{r}),\ \vec{r} = (x,y,z), \vec{\partial} = (\partial_x,\partial_y,\partial_z).$$

Перейдем к сферическим координатам



$$x = r\sin\theta\cos\varphi,\ y = r\sin\theta\sin\varphi,\ z = r\cos\theta$$

$$0 < r < \infty,\ 0 \leqslant \theta < \pi,\ 0 \leqslant \varphi < 2\pi$$

$$\vec{r} = r\vec{e}_r$$

$$\vec{\partial} = \vec{e}_r\frac{\partial}{\partial l_r} + \vec{e}_\theta\frac{\partial}{\partial l_\theta} + \vec{e}_\varphi\frac{\partial}{\partial l_\varphi} = \vec{e}_r\partial_r + \vec{e}_\theta\frac{1}{r}\partial_\theta + \vec{e}_\varphi\frac{1}{r\sin\theta}\partial_\varphi$$

$$\mathrm{i}\hat{\vec{M}} = \vec{e}_\varphi\partial_\theta - \vec{e}_\theta\frac{1}{\sin\theta}\partial_\varphi$$

$$\vec{e}_\theta = -\vec{e}_z\sin\theta + \cos\theta(\vec{e}_x\cos\varphi + \vec{e}_y\sin\varphi),\ \vec{e}_\varphi = -\vec{e}_x\sin\varphi + \vec{e}_y\cos\varphi$$

Теперь просто получить, что

$$\hat{M}_x = \mathrm{i}\sin\varphi\partial_\theta + \mathrm{i}\mathrm{ctg}\theta\cos\varphi\partial_\varphi,\ \mathrm{i}\hat{M}_y = \cos\varphi\partial_\theta + \mathrm{i}\mathrm{ctg}\theta\,\mathrm{i}\sin\varphi\partial_\varphi,\ \hat{M}_z = -\mathrm{i}\partial_\varphi.$$

So: в координатном представлении

$$\hat{M}_+ = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}(\partial_\theta + \mathrm{i}\mathrm{ctg}\theta\partial_\varphi),\ \hat{M}_- = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}(-\partial_\theta + \mathrm{i}\mathrm{ctg}\theta\partial_\varphi),\ \hat{M}_z = -\mathrm{i}\partial_\varphi,$$

квадрат момента импульса

$$\hat{M}^2 = \hat{M}_+\hat{M}_- + \hat{M}_z^2 - \hat{M}_z = -\Big[\partial_\theta^2 + \mathrm{ctg}\theta\,\partial_\theta + \frac{1}{\sin^2\theta}\partial_\varphi^2\Big].$$

Задача на собственные значения и состояния

$$-\mathrm{i}\partial_\varphi Y_{m,l}(\theta,\varphi) = mY_{m,l}(\theta,\varphi), \tag{9}$$

$$-\Big[\partial_\theta^2 + \mathrm{ctg}\theta\,\partial_\theta + \frac{1}{\sin^2\theta}\partial_\varphi^2\Big]Y_{m,l}(\theta,\varphi) = l(l+1)Y_{m,l}(\theta,\varphi). \tag{10}$$

Так как наблюдаемых $\hat{M}_z, \hat{M}^2$ недостаточно для формирования полного набора измеряемых, состояние системы при измерении этих наблюдаемых содержит произвол (не определяется зависимость волновой функции от координаты r). Поэтому состоянию $|m,j\rangle \equiv |m,l\rangle$ ставится в соответствие функция только от углов $Y_{m,l}(\theta,\varphi)$ с естественным условием нормировки

$$\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\int_0^{\pi}\mathrm{d}\theta\,\sin\theta\bar{Y}_{m,l}(\theta,\varphi)Y_{m,l}(\theta,\varphi) = 1.$$

Решим простое уравнение (9)

$$Y_{m,l}(\theta,\varphi) = \Theta_{m,l}(\theta)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}}{\sqrt{2\pi}}.$$

Для того, чтобы волновая функция $\phi(\vec{r}) = f(r)Y_{m,l}(\theta,\varphi)$ была функцией на $\mathbb{R}^3$, необходимо чтобы $Y_{m,l}(\theta,0) = Y_{m,l}(\theta,2\pi)$. Отсюда находим

$$m = 0, \pm1, \pm2, \ldots$$

и, следовательно, максимально возможная проекция момента импульса на выделенную ось может принимать лишь неотрицательные целые значения

$$l = 0, 1, 2, \ldots !$$

Алгебраическое квантование момента не апеллирует к конкретному выражению оператора момента через операторы импульса и координаты. Оно основано только на коммутационных соотношениях между компонентами момента импульса. Поэтому такая схема может выдать (и выдает!) „лишние“ (полуцелые) значения максимально возможной проекции момента. Такие уж они лишние – обсудим чуть позже (спин). Отмеченное свойство объясняет введение буквы l для орбитального момента вместо буквы j.
Для нахождения неопределяемой из уравнения (9) функции $\Theta_{m,l}(\theta)$ воспользуемся уравнением (10)

$$\Big[\partial_\theta^2 + \mathrm{ctg}\theta\,\partial_\theta - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\Big]\Theta_{m,l}(\theta) = -l(l+1)\Theta_{m,l}(\theta).$$

Решать это уравнение мы конечно же не будем: оно уже решено. Остается выписать полученные решения в координатном представлении.

Решим уравнение на старший вектор $|l,l\rangle$

$$\hat{M}_+|l,l\rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad (\partial_\theta + \mathrm{i}\,\mathrm{ctg}\theta\partial_\varphi)Y_{l,l} = 0,$$

$$(\partial_\theta - l\,\mathrm{ctg}\theta)\Theta_{l,l} = 0, \quad \Theta_{l,l} = C_l \sin^l\theta.$$

Нормировка

$$1 = \bar{C}_l C_l \int_0^\pi \mathrm{d}\theta\, \sin\theta \sin^{2l}\theta \equiv \bar{C}_l C_l J_l,$$

$$J_l = \int_{-1}^1 \mathrm{d}x\,(1-x^2)^l = -\int_{-1}^1 (\mathrm{d}(1-x^2)^l)x = 2l\int_{-1}^1 \mathrm{d}x\, x^2(1-x^2)^l = 2lJ_{l-1} - 2lJ_l,$$

$$J_l = \frac{2l}{2l+1}J_{l-1}, \quad J_0 = 2,$$

$$J_l = \frac{(l!)^2 2^{2l+1}}{(2l+1)!}, \quad C_l = \frac{\sqrt{(2l+1)!}}{l!\,2^{l+1/2}}.$$

Старший вектор в координатном представлении

$$Y_{l,l} = \sqrt{\frac{(2l+1)!}{\pi}}\frac{1}{l!2^{l+1}}\sin^l\theta \mathrm{e}^{\mathrm{i}l\varphi}.$$

Собственные состояния проекции и квадрата момента в координатном представлении

$$Y_{m,l}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l+m)!}{\pi(l-m)!}}\frac{1}{l!\,2^{l+1}}\left[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}(-\partial_\theta + \mathrm{i}\,\mathrm{ctg}\theta\partial_\varphi)\right]^{l-m}\sin^l\theta \mathrm{e}^{\mathrm{i}l\varphi}.$$

В математической физике такие функции (с точностью до фазового множителя) называются сферическими.

На рисунках представлена плотность вероятности $\bar{Y}_{m,l}Y_{m,l}(\theta,\varphi)$ обнаружить частицу в элементе телесного угла $\mathrm{d}o = \mathrm{d}\varphi\,\mathrm{d}\theta\,\sin\theta$.

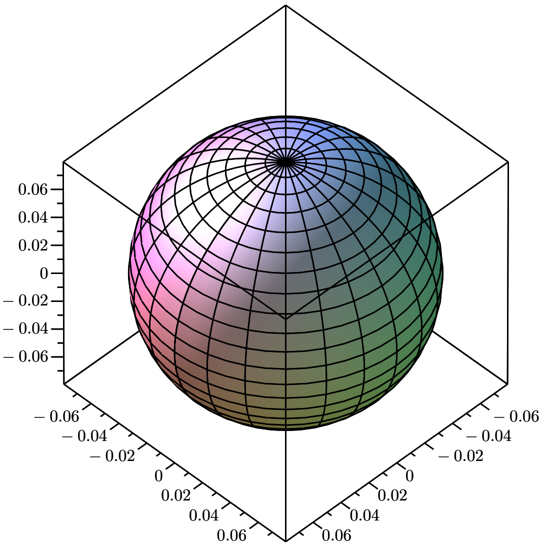


Рис. 7: $Y_{0,0} = \dfrac{1}{\sqrt{4\pi}}$

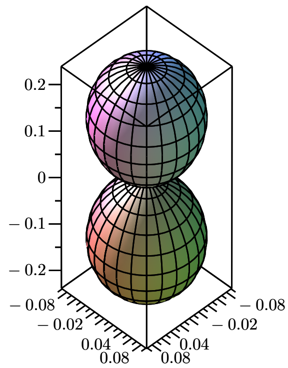


Рис. 8: $Y_{0,1} = -\sqrt{\dfrac{3}{4\pi}}\cos\theta$

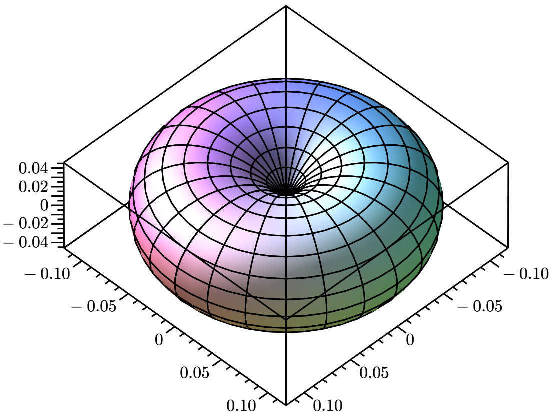


Рис. 9: $Y_{\pm1,1} = \pm\sqrt{\dfrac{3}{8\pi}}\sin\theta\,\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\varphi}$

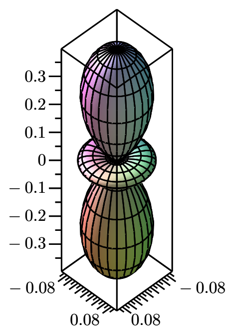


Рис. 10: $Y_{0,2} = \sqrt{\dfrac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta - 1)$

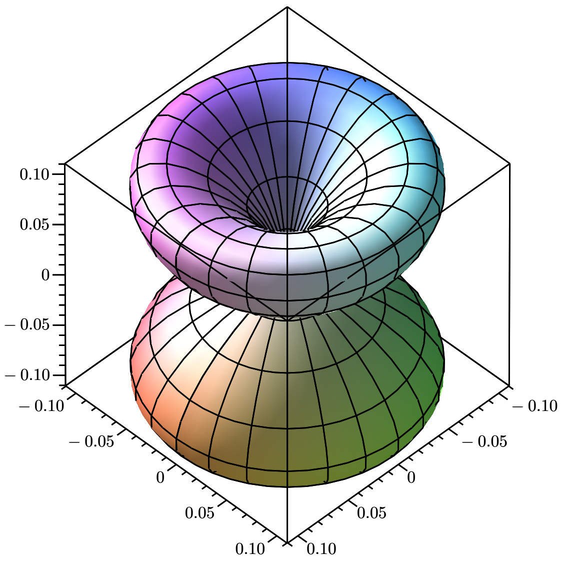


Рис. 11: $Y_{\pm 1,2} = \mp\sqrt{\dfrac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta \mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}\varphi}$

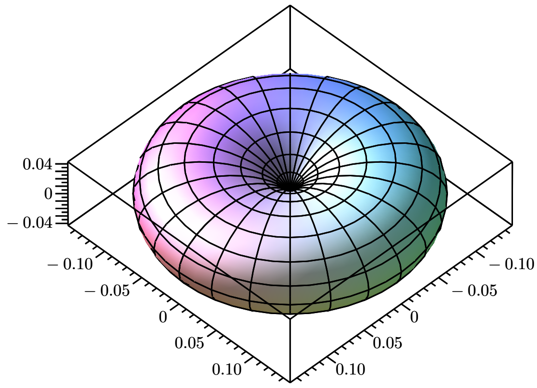


Рис. 12: $Y_{\pm 2,2} = \sqrt{\dfrac{15}{32\pi}}\sin^2\theta \mathrm{e}^{2\mathrm{i}\varphi}$

Состояния с разными значениями максимально возможной проекцией момента на выделенную ось иногда обозначают буквами (истоки – атомная спектроскопия). Так состояние с $l = 0$ обозначают буквой s (s-состояние, от sharp - резкая серия в атомных спектрах), $l = 1$ – p-состояние (principal - главная), $l = 2$ – d-состояние (diffuse - диффузная), $l = 3$ – f-состояние (fundamental - фундаментальная), далее по латинскому алфавиту (g,h,i,...).

Квантование момента как квантование двух осцилляторов.

Определим две пары операторов рождения и уничтожения

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = [\hat{b}, \hat{b}^+] = 1, \quad [\hat{a}, \hat{b}] = [\hat{a}^+, \hat{b}] = [\hat{a}, \hat{b}^+] = [\hat{a}^+, \hat{b}^+] = 0.$$

Построим фоковское пространство с базисом

$$|n_a, n_b\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_a! n_b!}}(\hat{a}^+)^{n_a}(\hat{b}^+)^{n_b}|0_a\rangle \otimes |0_b\rangle, \quad n_a, n_b = 0, 1, 2, \ldots,$$

$$\hat{a}|0_a\rangle = 0,\ \hat{b}|0_b\rangle = 0, \quad \langle 0_a|0_a\rangle = \langle 0_b|0_b\rangle = 1,$$

$$\hat{a}^+\hat{a}|n_a, n_b\rangle = n_a|n_a, n_b\rangle, \quad \hat{b}^+\hat{b}|n_a, n_b\rangle = n_b|n_a, n_b\rangle.$$

Если определить операторы

$$\hat{M}_x = \frac{1}{2}(\hat{a}^+\hat{b} + \hat{b}^+\hat{a}),\ \hat{M}_y = \frac{1}{2\mathrm{i}}(\hat{a}^+\hat{b} - \hat{b}^+\hat{a}),\ \hat{M}_z = \frac{1}{2}(\hat{a}^+\hat{a} - \hat{b}^+\hat{b}),$$

то они будут удовлетворять коммутационным соотношениям для компонент момента импульса. А если ввести еще один самосопряженный оператор

$$\hat{J} = \frac{1}{2}(\hat{a}^+\hat{a} + \hat{b}^+\hat{b}),$$

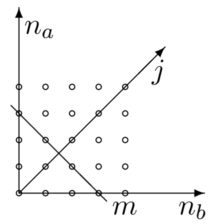
то через него можно определить и оператор квадрата момента импульса

$$\hat{M}^2 = \hat{J}^2 + \hat{J}.$$

Решение задачи об измерения проекции и квадрата момента во введенном фоковском пространстве

$$|m,j\rangle = |n_a = j+m, n_b = j-m\rangle, \quad j = \frac{1}{2}(n_a+n_b) = 0, 1/2, 1, \ldots .$$

Действительно,



$(n_a, n_b) \to (j, m)$

$$\hat{J}|m,j\rangle = \frac{1}{2}(\hat{a}^+\hat{a} + \hat{b}^+\hat{b})|n_a = j+m, n_b = j-m\rangle = j|m,j\rangle$$
$$\hat{M}^2|m,j\rangle = j(j+1)|m,j\rangle, \quad j = 0, 1/2, 1, \ldots$$
$$\hat{M}_z|m,j\rangle = \frac{1}{2}(\hat{a}^+\hat{a} - \hat{b}^+\hat{b})|n_a = j+m, n_b = j-m\rangle = m|m,j\rangle$$
$$m = \frac{1}{2}(n_a - n_b) = n_a - j, \ (n_a)_{\min} = 0, (n_a)_{\max} = 2j$$
$$m = -j, -j+1, \ldots, j-1, j$$

XIV. Квантовая теория частицы в центральном потенциале

Наиболее интересны полные наборы наблюдаемых, которые содержат гамильтониан. Очевидно, что такие полные наборы состоят из сохраняющихся наблюдаемых. Поэтому, если мы хотим дополнить наблюдаемые проекции и квадрата момента до полного набора, содержащего гамильтониан, нужно обратить внимание на физические системы, которые инвариантны относительно вращений в трехмерном пространстве. На классическом уровне это, прежде всего, частица, движущаяся в центральном поле

$$H(\vec{q},\vec{p}) = \frac{1}{2m}\vec{p}^2 + U(|\vec{q}|) \quad \underline{\text{квантование}} \quad \hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{\vec{p}}^2 + U(|\hat{\vec{q}}|),$$
$$[\hat{q}_i, \hat{p}_j] = \mathrm{i}\delta_{ij}\hat{\mathrm{I}}, \quad [\hat{q}_i, \hat{q}_j] = [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0, \quad i, j = x, y, z.$$

Покажем, что $[\hat{\vec{M}}, \hat{H}] = 0$. Но сделаем это не совсем прямым способом:

$$\hat{M}^2 = \hat{M}_i\hat{M}_i = \epsilon_{ijk}\epsilon_{imn}\hat{q}_j\hat{p}_k\hat{q}_m\hat{p}_n = \hat{q}_m\hat{p}_n\hat{q}_m\hat{p}_n - \hat{q}_n\hat{p}_m\hat{q}_m\hat{p}_n = \hat{\vec{q}}^2\hat{\vec{p}}^2 + \mathrm{i}\hat{q}_m\hat{p}_m + (\mathrm{i}\hat{q}_m\hat{p}_m)(\mathrm{i}\hat{q}_n\hat{p}_n),$$

координатное представление (сферические координаты) $\quad \hat{\vec{q}}^2 \Rightarrow r^2, \quad \mathrm{i}\hat{q}_m\hat{p}_m \Rightarrow r\partial_r,$

$$\hat{\vec{p}}^2 = \frac{1}{r^2}\hat{M}^2 - \frac{1}{r}\partial_r^2 r \tag{11}$$

Так как в координатном представлении оператор момента импульса зависит лишь от углов в сферических координатах и не зависит от r, то

$$[\hat{\vec{p}}^2, \hat{M}_i] = [U(r), \hat{M}_i] = 0, \quad \text{то есть} \quad [\hat{H}, \hat{M}_i] = 0, \ Q.E.D.$$

So: полный набор наблюдаемых $\hat{M}_z, \hat{M}^2, \hat{H}$, задача на собственные значения и собственные состояния

$$\hat{M}_z|m,l,n\rangle = m|m,l,n\rangle,$$
$$\hat{M}^2|m,l,n\rangle = l(l+1)|m,l,n\rangle,$$
$$\hat{H}|m,l,n\rangle = E_n|m,l,n\rangle.$$

Координатное представление (сферические координаты) $|m,l,n\rangle \Rightarrow R_{n,l}(r)Y_{m,l}(\theta,\varphi)$. Используя (11), получим

$$\hat{M}_z Y_{m,l}(\theta,\varphi) = mY_{m,l}(\theta,\varphi), \quad \hat{M}^2 Y_{m,l}(\theta,\varphi) = l(l+1)Y_{m,l}(\theta,\varphi),$$
$$\Big[-\frac{1}{2mr}\partial_r^2 r + \frac{l(l+1)}{2mr^2} + U(r)\Big] R_{n,l}(r) = E_n R_{n,l}(r).$$

Если ввести новую функцию $\chi_{n,l}(r) = rR_{n,l}(r)$, то последнее уравнение принимает следующий вид

$$\Big[-\frac{1}{2m}\partial_r^2 + U_{\text{eff}}(r)\Big]\chi_{n,l}(r) = E_n\chi_{n,l}(r), \quad U_{\text{eff}}(r) = U(r) + \frac{l(l+1)}{2mr^2},$$

с условием нормировки

$$\int_0^\infty \mathrm{d}r\, \bar{\chi}_{n,l}(r)\chi_{n,l}(r) = 1.$$

Это уравнение – одномерное уравнение на собственные значения и состояния, заданное на полуоси $0 < r < \infty$. Так как эффективная потенциальная энергия зависит только от квантового числа l, спектр гамильтониана почти всегда вырожден с минимальной кратностью вырождения $2l+1$. Постановка задачи на полуоси требует граничного условия на функцию $\chi_{n,l}(r)$ при $r = 0$. Оно должно следовать из условия самосопряженности представленного оператора. В рамках тех задач, которые будут нас интересовать, это условие формулируется достаточно просто

$$\chi_{n,l}(0) = 0.$$

XV. Атом водорода

Атом водорода состоит из двух частиц – электрона и протона, взаимодействующих по закону Кулона в трехмерном пространстве.

Канонические переменные

$$(\hat{q}_{e,i}, \hat{q}_{p,i}; \hat{p}_{e,i}, \hat{p}_{p,i}), \quad i = 1, 2, 3.$$

Гамильтониан

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}_e^2}{2m_e} + \frac{\hat{\vec{p}}_p^2}{2m_p} - \frac{e^2}{|\hat{\vec{q}}_e - \hat{\vec{q}}_p|}. \tag{12}$$

Каноническое преобразование (выделение относительного движения и движения центра масс)

$$\hat{\vec{Q}} = \frac{m_e\hat{\vec{q}}_e + m_p\hat{\vec{q}}_p}{m_e + m_p}, \quad \hat{\vec{q}} = \hat{\vec{q}}_e - \hat{\vec{q}}_p$$

$$\hat{\vec{P}} = \hat{\vec{p}}_e + \hat{\vec{p}}_p, \quad \hat{\vec{p}} = \frac{m_p\hat{\vec{p}}_e - m_e\hat{\vec{p}}_p}{m_e + m_p}.$$

Проверка каноничности

$$[\hat{Q}, \hat{P}] = \frac{\mathrm{i}m_e}{m_e + m_p} + \frac{\mathrm{i}m_p}{m_e + m_p} = \mathrm{i},$$

$$[\hat{q}, \hat{p}] = \frac{\mathrm{i}m_p}{m_e + m_p} + \frac{\mathrm{i}m_e}{m_e + m_p} = \mathrm{i},$$

$$[\hat{q}, \hat{P}] = \mathrm{i} - \mathrm{i} = 0,$$

$$[\hat{Q}, \hat{p}] = \frac{\mathrm{i}m_e m_p}{(m_e + m_p)^2} - \frac{\mathrm{i}m_e m_p}{(m_e + m_p)^2} = 0.$$

Кинетическая энергия

$$\frac{\hat{p}^2(m_e + m_p)}{2m_e m_p} + \frac{\hat{P}^2}{2(m_e + m_p)} =$$

$$\frac{\hat{p}_e^2 m_p}{2m_e(m_e + m_p)} + \frac{\hat{p}_p^2 m_e}{2m_p(m_e + m_p)} - \frac{\hat{\vec{p}}_e\hat{\vec{p}}_p}{m_e + m_p} + \frac{\hat{p}_e^2 + \hat{p}_p^2 + 2\hat{\vec{p}}_e\hat{\vec{p}}_p}{2(m_e + m_p)} =$$

$$\frac{\hat{p}_e^2}{2m_e} + \frac{\hat{p}_p^2}{2m_p}.$$

Гамильтониан распадается в сумму гамильтонианов движения центра масс и относительного движения

$$\hat{H} = H_{cm}(\hat{\vec{P}}, \hat{\vec{Q}}) + H_{rm}(\hat{\vec{p}}, \hat{\vec{q}}), \tag{13}$$

$$H_{cm}(\vec{P}, \vec{Q}) = \frac{P^2}{2M}, \quad H_{rm}(\vec{p}, \vec{q}) = \frac{p^2}{2\mu} - \frac{e^2}{|\vec{q}|}, \tag{14}$$

$$M = m_e + m_p, \quad \mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p}. \tag{15}$$

Задача на собственные значения и состояния

$$\hat{H}|\Phi_N\rangle = E_N|\Phi_N\rangle.$$

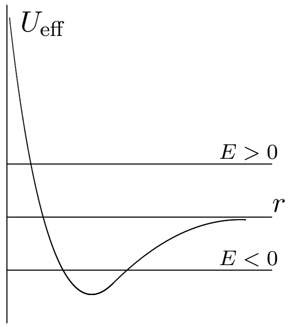
$$|\Phi_N\rangle \equiv |\Phi_{n_1,n_2}\rangle = |\phi_{n_1}\rangle \otimes |\psi_{n_2}\rangle \longrightarrow$$

$$\hat{H}_{cm}|\phi_{n_1}\rangle = \epsilon_{n_1}|\phi_{n_1}\rangle, \quad \hat{H}_{rm}|\psi_{n_2}\rangle = \varepsilon_{n_2}|\psi_{n_2}\rangle, \quad E_N \equiv E_{n_1,n_2} = \epsilon_{n_1} + \varepsilon_{n_2}$$

Так как $[\hat{H}_{cm}, \hat{\vec{P}}] = 0$, то в качестве $|\phi_{n_1}\rangle$ можно выбрать обобщенные собственные состояния оператора импульса $\|\vec{P}\rangle$

$$|\phi_{n_1}\rangle = \|\vec{P}\rangle \Rightarrow \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{P}\vec{Q}}}{\sqrt{2\pi}}, \quad \epsilon_{n_1} \equiv \epsilon_{\vec{P}} = \frac{P^2}{2M}.$$

Относительное движение представляет собой движение частицы массой $\dfrac{m_e m_p}{m_e + m_p}$ в центральном поле $-\dfrac{e^2}{|\vec{q}|}$. Такая задача сводится к решению дифференциального уравнения



$$\Big[-\frac{1}{2\mu}\partial_r^2 + U_{\text{eff}}(r)\Big]\chi_{n,l}(r) = E_n\chi_{n,l}(r)$$

$$U_{\text{eff}}(r) = -\frac{e^2}{r} + \frac{l(l+1)}{2\mu r^2}$$

$$|\psi_{n_2}\rangle = |m,l,n\rangle \Rightarrow \frac{1}{r}\chi_{n,l}(r)Y_{m,l}(\theta,\varphi), \quad \varepsilon_{n_2} = E_n$$

Исследуем связанные состояния с $E < 0$.

0. Обезразмеривание

$$r = a_0 u, \quad \partial_u^2 - \frac{l(l+1)}{u^2} + \frac{2\mu a_0 e^2}{u} + 2\mu a_0^2 E = 0, \quad a_0 = \frac{1}{\mu e^2},$$

$$(u^2\partial_u^2 - l(l+1) + 2u - \nu^2 u^2)\chi(u) = 0, \quad E = -\frac{1}{2}\mu e^4 \nu^2, \ \nu > 0.$$

1. Асимптотики

$$u \to 0, \quad (u^2\partial_u^2 - l(l+1))\chi(u) = 0, \ \chi(u) = c_1 u^{l+1} + c_2 u^{-l}, \ c_2 = 0 \,(\text{гран. усл.}).$$

$$u \to \infty, \quad (\partial_u^2 - \nu^2)\chi(u) = 0, \ \chi(u) = C_1\mathrm{e}^{-\nu u} + C_2\mathrm{e}^{\nu u}, \ C_2 = 0 \,(\chi \in L_2(0 < u < \infty, \mathrm{d}u)).$$

2. Введение новой функции $w(u)$ ($\chi(u)$ определяется как произведение асимптотик на $w(u)$)

$$\chi(u) = u^{l+1}\mathrm{e}^{-\nu u}w(u).$$

Уравнение на $w(u)$

$$uw'' + 2(l + 1 - \nu u)w' + 2\big(1 - \nu(l+1)\big)w = 0.$$

3. Ищем решение в виде ряда
$$w(u)=\sum_{k=0}c_ku^k.$$
Результат подстановки ряда в уравнение на $w(u)$
$$c_{k+1}=2\frac{\nu(k+l+1)-1}{\big(k+2(l+1)\big)(k+1)}c_k,\quad k=0,1,\ldots.$$

4. Возьмем такое очень большое число K, что для $k\geqslant K\to\infty$
$$c_{k+1}=\frac{2\nu}{k}c_k,\quad c_k=(K-1)!\frac{(2\nu)^{k-K}}{(k-1)!}c_K,\ k\geqslant K.$$
Тогда
$$w(u)=\sum_{k=0}^{K-1}c_ku^k+\frac{uc_K(K-1)!}{(2\nu)^{K-1}}\sum_{k=K}\frac{(2\nu u)^{k-1}}{(k-1)!}=$$
$$=\sum_{k=0}^{K-1}c_ku^k-\frac{uc_K(K-1)!}{(2\nu)^{K-1}}\sum_{k=1}^{K-1}\frac{(2\nu u)^{k-1}}{(k-1)!}+\frac{uc_K(K-1)!}{(2\nu)^{K-1}}\mathrm{e}^{2\nu u}=$$
$$=P_{K-1}(u)+\frac{uc_K(K-1)!}{(2\nu)^{K-1}}\underline{\mathrm{e}^{2\nu u}}.$$

5. Отсюда следует, что если $c_K\neq 0$, то $\chi(u)\notin L_2(0<u<\infty,\mathrm{d}u)$. Для того, чтобы этого не случилось, должно существовать такое $k_0, k_0=0,1,2,\ldots$, что $c_{k_0+1}=0$. То есть
$$\nu(k_0+L+1)=1,\quad \nu=\frac{1}{n},\ n=1,2,\ldots,\ l<n.$$

Полученный полином – обобщенный полином Лагерра
$$w_{n,l}(u)=\sum_{k=0}^{n-l-1}c_ku^k,\quad c_{k+1}=\frac{2}{n}\frac{k+l+1-n}{\big(k+2(l+1)\big)(k+1)}c_k,$$
действительный c_0 определяется из условия нормировки
$$\int_0^\infty \mathrm{d}u\,\mathrm{e}^{-2u/n}u^{2(l+1)}w_{n,l}^2(u)=1.$$

Простые Maple-вычисления
$$w_{1,0}=2,$$
$$w_{2,0}=\frac{1}{\sqrt{2}}\Big(1-\frac{1}{2}u\Big),\quad w_{2,1}=\frac{1}{2\sqrt{6}},$$
$$w_{3,0}=\frac{2}{3\sqrt{3}}\Big(1-\frac{2}{3}u+\frac{2}{27}u^2\Big),\quad w_{3,1}=\frac{8}{27\sqrt{6}}\Big(1-\frac{1}{6}u\Big),\quad w_{3,2}=\frac{4}{81\sqrt{30}}.$$

На рисунках (13), (14) изображена плотность вероятности $\chi^2_{n,l}(u)$ обнаружить частицу в интервале $\mathrm{d}u$ для нижних орбиталей.

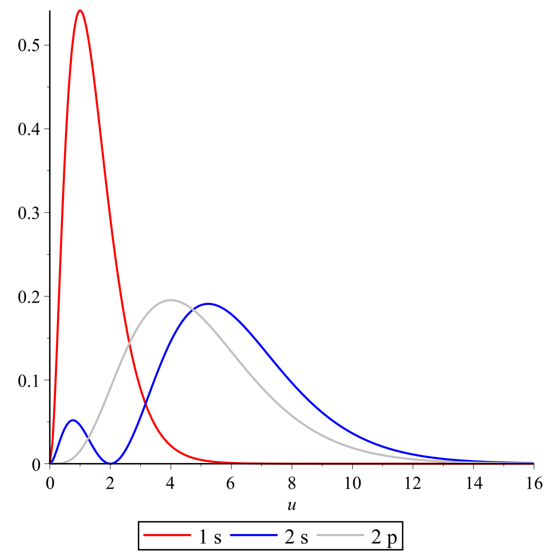


Рис. 13: орбитали 1s,2s,2p

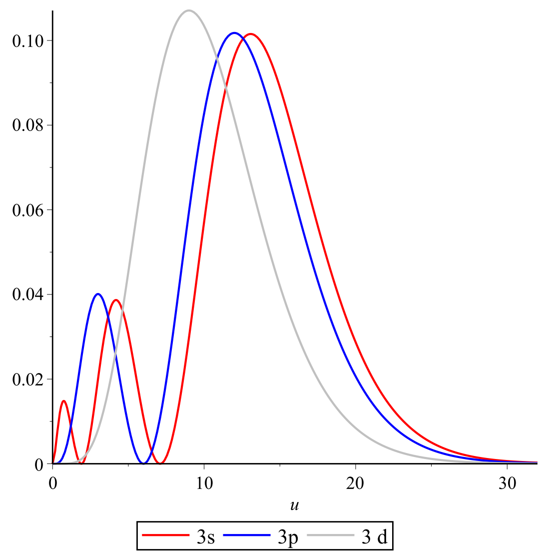
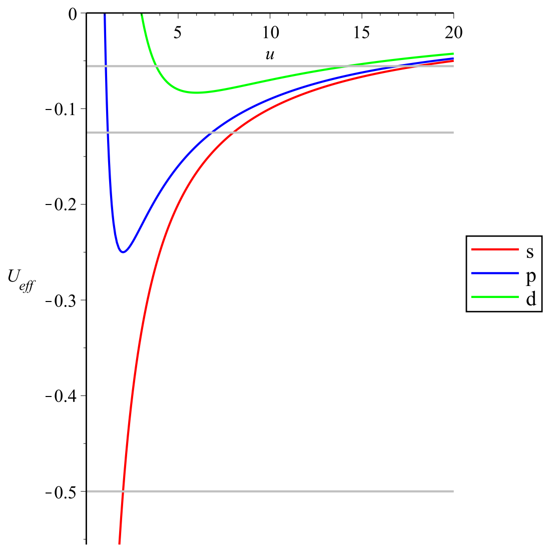


Рис. 14: орбитали 3s,3p,3d



Спектр атома водорода

$$E_{n,\vec{P}} = \frac{\vec{P}^2}{2M} - \frac{1}{2n^2}\mu e^4, \; n = 1, 2, \ldots.$$

Уровни с данным квантовым числом n

n^2-кратно вырождены.

Основное состояние – $|m = 0, l = 0, n = 1\rangle$

(не вырождено)

Первое возбужденное –

$|m = 0, l = 0, n = 2\rangle, |m = 0, l = 1, n = 2\rangle, |m = \pm 1, l = 1, n = 2\rangle$

Атом водорода $\rightarrow$ два момента импульса $\rightarrow$ четыре осциллятора

Интеграл движения

$$\hat{\vec{A}} = \frac{e^2\vec{q}}{q} + \frac{1}{2\mu}(\hat{\vec{M}} \times \hat{\vec{p}} - \hat{\vec{p}} \times \hat{\vec{M}})$$

Доказательство:

$$[H, A_i] = \frac{e^2}{2\mu}[p^2, \frac{q_i}{q}] + \frac{e^2}{2\mu}\epsilon_{ijk}(M_j[p_k, \frac{1}{q}] - [p_j, \frac{1}{q}]M_k).$$

$$[p^2, \frac{q_i}{q}] = p_k[p_k, \frac{q_i}{q}] + [p_k, \frac{q_i}{q}]p_k = -\mathrm{i}p_k\frac{1}{q}(\delta_{ik} - \frac{q_iq_k}{q^2}) - \mathrm{i}(\delta_{ik} - \frac{q_iq_k}{q^2})\frac{1}{q}p_k,$$

$$\epsilon_{ijk}(M_j[p_k,\frac{1}{q}]-[p_j,\frac{1}{q}]M_k)=\mathrm{i}\epsilon_{ijk}\epsilon_{jmn}p_nq_m\frac{q_k}{q^3}-\mathrm{i}\epsilon_{ijk}\epsilon_{kmn}\frac{q_j}{q^3}q_mp_n=$$

$$=\mathrm{i}p_k\frac{1}{q}(\delta_{ik}-\frac{q_iq_k}{q^2})+\mathrm{i}(\delta_{ik}-\frac{q_iq_k}{q^2})\frac{1}{q}p_k;$$

$$[H,A_i]=0,\quad Q.E.D.$$

Рассмотрим коммутатор

$$[M_s,A_i]=\frac{e^2}{q}[M_s,q_i]+\frac{1}{2\mu}\epsilon_{ijk}[M_s,M_jp_k]-\frac{1}{2\mu}\epsilon_{ijk}[M_s,p_jM_k]$$

$$\frac{e^2}{q}[M_s,q_i]=\frac{e^2}{q}\mathrm{i}\epsilon_{sik}q_k=\mathrm{i}\epsilon_{sik}\quad\frac{e^2q_k}{q}$$

$$\epsilon_{ijk}[M_s,M_jp_k]=\epsilon_{ijk}\mathrm{i}\epsilon_{sjm}M_mp_k+\epsilon_{ijk}M_j\mathrm{i}\epsilon_{skn}p_n=$$

$$\mathrm{i}(\delta_{is}\delta_{km}-\delta_{im}\delta_{ks})M_mp_k-\mathrm{i}(\delta_{is}\delta_{jn}-\delta_{in}\delta_{js})M_jp_n=\mathrm{i}M_mp_k(\delta_{is}\delta_{km}-\delta_{im}\delta_{ks}-\delta_{is}\delta_{mk}+\delta_{ik}\delta_{ms})=$$

$$\mathrm{i}M_mp_k(\delta_{ik}\delta_{ms}-\delta_{im}\delta_{ks})=\mathrm{i}\epsilon_{sik}\quad\epsilon_{kmn}M_mp_n$$

Таким образом, получаем, в общем-то, очевидное равенство

$$[M_s,A_i]=\mathrm{i}\epsilon_{sik}A_k.$$

So: есть еще один полный набор наблюдаемых, содержащий гамильтониан,

$$\hat{H},\hat{M}_z,\hat{A}_z.$$

Определим коммутатор

$$[A_i,A_s]=[\frac{e^2q_i}{q},A_s]+\frac{1}{2\mu}\epsilon_{ijk}[M_jp_k,A_s]-\frac{1}{2m}\epsilon_{ijk}[p_jM_k,A_s]=$$

$$\frac{e^2}{2\mu}\epsilon_{smn}[\frac{q_i}{q},M_mp_n+p_nM_m]+\frac{1}{2\mu}\epsilon_{ijk}[M_jp_k+p_kM_j,A_s]=$$

$$\frac{e^2}{2\mu}\epsilon_{smn}(M_m[\frac{q_i}{q},p_n]+[\frac{q_i}{q},p_n]M_m+[\frac{q_i}{q},M_m]p_n+p_n[\frac{q_i}{q},M_m])$$

$$\frac{1}{2\mu}\epsilon_{ijk}(M_j[p_k,A_s]+[p_k,A_s]M_j+[M_j,A_s]p_k+p_k[M_j,A_s])=$$

$$\frac{e^2}{2\mu}\big((p_sq_n-p_nq_s)\frac{\mathrm{i}}{q}(\delta_{in}-\frac{q_iq_n}{q^2})+\frac{\mathrm{i}}{q}(\delta_{in}-\frac{q_iq_n}{q^2})(q_np_s-q_sp_n)+\mathrm{i}\epsilon_{smn}\epsilon_{imp}(\frac{q_p}{q}p_n+p_n\frac{q_p}{q})\big)-$$

$$\frac{\mathrm{i}}{2\mu}\epsilon_{ijk}\epsilon_{jsm}(A_mp_k+p_kA_m)\frac{e^2}{2\mu}\big((p_iq_k-p_kq_i)[p_k,\frac{q_s}{q}]+[p_k,\frac{q_s}{q}](q_kp_i-q_ip_k)\big)+$$

$$\frac{1}{4\mu^2}\big((p_iq_k-p_kq_i)[p_k,\epsilon_{smn}(M_mp_n+p_nM_m)]+[p_k,\epsilon_{smn}(M_mp_n+p_nM_m)](q_kp_i-q_ip_k)\big)=$$

$$-\mathrm{i}\frac{e^2}{2\mu}\big[(p_iq_s-p_sq_i)\frac{2}{q}+(\frac{q_s}{q}p_i+p_i\frac{q_s}{q})-\underline{\delta_{is}(\frac{q_k}{q}p_k+p_k\frac{q_k}{q})}\big]+$$

$$\frac{i}{2\mu^2}\big((q_kp_i-\underline{q_ip_k})\epsilon_{smn}\epsilon_{kmp}p_pp_n+\epsilon_{smn}\epsilon_{kmp}p_pp_n(p_iq_k-\underline{p_kq_i})\big)$$

$$-\frac{\mathrm{i}}{2\mu}\big(\underline{\delta_{is}(A_kp_k+p_kA_k)}-(A_ip_s+p_sA_i)\big)=$$

$$-\frac{2\mathrm{i}}{\mu}\frac{e^2}{q}(p_iq_s-p_sq_i)+$$

$$\frac{i}{2\mu^2}\big(q_sp_ip^2-(q_kp_k)p_ip_s-p_ip_s(p_kq_k)+p^2p_iq_s\big)+$$

$$\frac{i}{4\mu^2}\big(-q_ip_sp^2+(q_kp_k)p_ip_s-p_kq_ip_kp_s+(p_kq_k)p_ip_s-p_sp_kq_ip_k+p_sp_iq_kp_k-p_sp^2q_i+p_sp_kp_iq_k\big)=$$

$$=\frac{2}{\mu}\big[\frac{p^2}{2\mu}-\frac{e^2}{q}\big]\mathrm{i}(p_iq_s-p_sq_i)=-\frac{2}{\mu}\hat{H}\ \mathrm{i}\epsilon_{ism}\hat{M}_m$$

Выкладки, которые не удалось сократить, выдали

$$[\hat{A}_i,\hat{A}_j]=-\frac{2\hat{H}}{\mu}\ \mathrm{i}\epsilon_{ijk}\hat{M}_k.$$

Приглядимся к коммутационным соотношениям операторов $\hat{M}_i, \hat{A}_i$, $i=x,y,z$. Так как гамильтониан коммутирует со всеми этими операторами, вместо $\hat{A}_i$ введем другой $\hat{B}_i$

$$\hat{A}_i=\sqrt{-\frac{2\hat{H}}{\mu}}\hat{B}_i.$$

Тогда получаем такую вот алгебру

$$[\hat{M}_i,\hat{M}_j]=\mathrm{i}\epsilon_{ijk}\hat{M}_k,\quad [\hat{M}_i,\hat{B}_j]=\mathrm{i}\epsilon_{ijk}\hat{B}_k,\quad [\hat{B}_i,\hat{B}_j]=\mathrm{i}\epsilon_{ijk}\hat{M}_k.$$

Это алгебра генераторов поворотов в четырехмерном евклидовом пространстве, которая ответственна за симметрию кулоновской задачи.

Определим еще одни новые операторы

$$\hat{\vec{J}}_1=\frac{1}{2}(\hat{\vec{M}}+\hat{\vec{B}}),\quad \hat{\vec{J}}_2=\frac{1}{2}(\hat{\vec{M}}-\hat{\vec{B}}).$$

Для этих операторов

$$[\hat{J}_{1,i},\hat{J}_{1,j}]=\mathrm{i}\epsilon_{ijk}\hat{J}_{1,k},\quad [\hat{J}_{2,i},\hat{J}_{2,j}]=\mathrm{i}\epsilon_{ijk}\hat{J}_{2,k},\quad [\hat{J}_{1,i},\hat{J}_{2,j}]=0,$$

то есть это правила коммутации двух *независимых* векторов трехмерного момента импульса. Собственные значения $\hat{\vec{J}}_1^2$, $\hat{\vec{J}}_2^2$ равны $j_1(j_1+1)$, $j_2(j_2+1)$, причем $j_1,j_2=0,1/2,1,\ldots$. Легко показать, что $\hat{\vec{M}}\hat{\vec{B}}=0$, поэтому

$$\hat{\vec{J}}_1^2=\hat{\vec{J}}_2^2=\frac{1}{4}(\hat{M}^2+\hat{B}^2)=-\frac{1}{4}\Big[1+\frac{\mu e^4}{2\hat{H}}\Big]=j(j+1),$$

где $j \equiv j_1 = j_2$. So:

$$\hat{H} = -\frac{\mu e^4}{2n^2}, \quad n = 2j + 1 = 1, 2, \ldots,$$

кратность вырождения $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1) = (2j + 1)^2 = n^2$.

Таким образом, вывод: движение в кулоновском поле описывается двумя независимыми моментами импульса, каждый из которых, в свою очередь, сводится к двум независимым осцилляторам. Движение в кулоновском поле $\Leftrightarrow$ четыре независимых осциллятора.

XVI. Теория Дирака, спин

Теорию, которую мы строили до сих пор, была нерелятивистской. Посмотрим, как выглядит теория свободной релятивистской частицы. На классическом уровне

$$H^{\mathrm{cl}}(\vec{q}, \vec{p}) = \sqrt{\vec{p}^2 + m^2},$$

здесь m - масса релятивистской частицы, скорость света равна единицы.
Стандартное квантование и переход в координатное представление приводят вот к такому уравнению динамики квантовой теории релятивистской частицы

$$\mathrm{i}\partial_0 \phi(t, \vec{x}) = \sqrt{-\vec{\partial}^2 + m^2}\phi(t, \vec{x}), \quad \phi(t_0, \vec{x}) = \phi_0(\vec{x}). \tag{16}$$

Пол Дирак: „Хотя в уравнении (16) и учтена релятивистская связь между импульсом и энергией, оно все же неудовлетворительно с точки зрения релятивистской теории“. Оно столь несимметрично относительно ∂_0 и других $\vec{\partial}$, что это противоречит самому общему уровню понимания релятивистской теории, которая настаивает на единообразном рассмотрении пространственных координат частицы и времени. Понятно, что мешает корень квадратный. Математически с корнем квадратным можно разобраться двумя способами – либо возвести его в квадрат, либо извлечь его.

Способ первый (O.Klein, W.Gordon). Продифференцируем уравнение (16) по времени и воспользуемся им же, тогда

$$(-\partial_0^2 + \vec{\partial}^2 - m^2)\phi(t, \vec{x}) = (\partial_\mu \partial^\mu - m^2)\phi = 0.$$

С релятивистской инвариантность все очень хорошо, с точки же зрения квантовой теории изменилось динамическое уравнение теории

$$\cancel{-\partial_0^2|\phi\rangle = \hat{H}^2|\phi\rangle}$$

и такое изменение *абсолютно не допустимо.* Действительно, состояние – это та информация, которую нужно задать, чтобы предсказать дальнейшую эволюцию физической системы. Поэтому динамическое уравнение на состояние в любой теории, как математический объект, – это дифференциальное по времени уравнение *первого порядка.*

Способ второй (P.A.M.Dirac). Запишем гамильтониан, линейный по импульсу $\hat{\vec{p}}$ (тогда в координатном представлении динамическое уравнение квантовой теории будет линейно как по времени, так и по пространственным переменным)

$$\hat{H} = \hat{\alpha}_i\hat{p}_i + m\hat{\beta} = \sqrt{\hat{p}^2 + m^2},$$

для свободной частицы в трехмерном пространстве (в квантовой теории частица свободна, если ее импульс сохраняется) операторы $\hat{\beta}, \hat{\alpha}_i,\ i = x, y, z$ не зависят от $\hat{q}_i$ и коммутируют с каноническими переменными. Поэтому $\hat{\alpha}_i, \hat{\beta}$ описывают некоторые новые наблюдаемые, относящиеся к какому-то внутреннему устройству частицы. Так как $\hat{H}^2 = \hat{p}^2 + m^2$, то

$$\hat{\alpha}_i\hat{\alpha}_k\hat{p}_i\hat{p}_k + m(\hat{\alpha}_i\hat{\beta} + \hat{\beta}\hat{\alpha}_i)\hat{p}_i + m^2\hat{\beta}^2 = \delta_{ik}\hat{p}_i\hat{p}_k + m^2.$$

Отсюда следует, что

$$\hat{\alpha}_i\hat{\alpha}_k + \hat{\alpha}_k\hat{\alpha}_i = 2\delta_{ik}, \quad i, k = x, y, z \tag{17}$$

$$\hat{\alpha}_i\hat{\beta} + \hat{\beta}\hat{\alpha}_i = 0, \tag{18}$$

$$\hat{\beta}^2 = 1, \tag{19}$$

четыре оператора антикоммутируют друг с другом и их квадраты равны единичному оператору. Так как гамильтониан эрмитов, то эрмитовы и эти операторы. Найдем представление для этих операторов миинимальной размерности.

Очевидны простые утверждения

$$\hat{\alpha}_i^{-1} = \hat{\alpha}_i, \quad \hat{\beta}^{-1} = \hat{\beta}.$$

Унитарным преобразованием диагонализуем матрицу β, ее собственные значения равны $+1$ или -1. Так как

$$\hat{\alpha}_i\hat{\beta} = -\hat{\beta}\hat{\alpha}_i,\ \hat{\beta} = -\hat{\alpha}_i^{-1}\hat{\beta}\hat{\alpha}_i,\ \mathrm{Sp}\hat{\beta} = -\mathrm{Sp}\hat{\alpha}_i^{-1}\hat{\beta}\hat{\alpha}_i = -\mathrm{Sp}\hat{\beta}, \quad \mathrm{Sp}\hat{\beta} = 0,$$

поэтому количество +1 и −1 – одинаково. Матрица $\hat{\beta}$ представима в блочном виде

$$\hat{\beta} = \begin{Vmatrix} \mathrm{I} & 0 \\ 0 & -\mathrm{I} \end{Vmatrix},$$

причем размеры всех блоков равны. Используя (18), матрицы $\hat{\alpha}_i$ можно представить следующим образом (тоже блочный вид)

$$\hat{\alpha}_i = \begin{Vmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{Vmatrix}, \quad i = x, y, z,$$

а применение условия (17) дает следующее соотношение на матрицы σ_i, размеры которых вдвое меньше матриц $\hat{\alpha}_i, \hat{\beta}$,

$$\sigma_i \sigma_k + \sigma_k \sigma_i = 2\delta_{ik}, \quad i, k = x, y, z.$$

Легко видеть, что задача осталась той же, только количество матриц стало на одну меньше. Повторяем процедуру

$$\sigma_z = \begin{Vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{Vmatrix}, \quad \sigma_m = \begin{Vmatrix} 0 & \bar{c}_m \\ c_m & 0 \end{Vmatrix}, \; m = x, y.$$

Условие на c_m

$$c_m \bar{c}_n + \bar{c}_m c_n = 2\delta_{mn}, \quad m, n = x, y,$$

и это условие можно выполнить, если считать c_m - комплексными числами, равными $c_x = 1, c_y = \mathrm{i}$.

So: определим матрицы Паули

$$\sigma_x = \begin{Vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{Vmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{Vmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{Vmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{Vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{Vmatrix},$$

а через них матрицы

$$\hat{\alpha}_i = \begin{Vmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{Vmatrix}, \; i = x, y, z, \quad \hat{\beta} = \begin{Vmatrix} \mathrm{I} & 0 \\ 0 & -\mathrm{I} \end{Vmatrix}.$$

Теперь можно выписать уравнение динамики волновой функции релятивистской частицы в координатном представлении

$$\mathrm{i}\partial_0 \phi = \hat{H}\phi = (-\mathrm{i}\hat{\alpha}_i \partial_i + \hat{\beta} m)\phi.$$

Умножим это уравнение на матрицу $\hat{\beta}$, и определим новые матрицы 4×4

$$\gamma^\mu = (\gamma^0, \gamma^i) = (\hat{\beta}, \hat{\beta}\hat{\alpha}_i).$$

Эти матрицы определяются антикоммутационными соотношениями

$$[\gamma^\mu, \gamma^\nu]_+ = \gamma^\mu\gamma^\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu = -2g^{\mu\nu},$$

где $g_{\mu\nu}$ - метрический тензор плоского пространства-времени с сигнатурой $(-,+,+,+)$. Используя эти γ-матрицы, уравнение динамики состояния можно переписать в явно релятивистски инвариантном виде (уравнение Дирака)

$$(\mathrm{i}\gamma^\mu\partial_\mu - m)\phi = 0.$$

Остается понять, какой объект ϕ представляет состояние частицы в гильбертовом пространстве? Из вывода очевидно, что

$$\phi(\vec{x}) = \begin{Vmatrix} \varphi_1(\vec{x}) \\ \phi_2(\vec{x}) \\ \phi_3(\vec{x}) \\ \phi_4(\vec{x}) \end{Vmatrix}, \quad \text{нормировка: } 1 = \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\vec{x} \begin{Vmatrix} \bar{\phi}_1(\vec{x}) & \bar{\phi}_2(\vec{x}) & \bar{\phi}_3(\vec{x}) & \bar{\phi}_4(\vec{x}) \end{Vmatrix} \begin{Vmatrix} \phi_1(\vec{x}) \\ \phi_2(\vec{x}) \\ \phi_3(\vec{x}) \\ \phi_4(\vec{x}) \end{Vmatrix},$$

то есть $\phi(\vec{x}) \in L^2(\vec{x} \in \mathbb{R}^3, \mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z) \otimes \mathbb{C}^4$. Каждой наблюдаемой, определенной ранее для частиц без внутренних степеней свободы, соответствует наблюдаемая в пространстве состояний частиц с внутренними степенями свободы: оператор $\hat{O}$ в $L^2(\dots)$ переходит в оператор $\hat{O}\otimes\hat{\mathrm{I}}$. Аналогично, оператор $\hat{M}$, определенный на $\mathbb{C}^4$, действует в пространстве состояний как $\hat{\mathrm{I}} \otimes \hat{M}$.

Итак, релятивистская свободная частица сохраняет импульс. Нерелятивистская свободная частица сохраняет не только импульс, но и момент последнего. Посмотрим сохранилось ли это свойство в релятивистской теории: вычислим коммутатор

$$[\hat{H}, \hat{M}_i] = \hat{\alpha}_k[\hat{p}_k, \hat{M}_i] = \mathrm{i}\epsilon_{ijk}\hat{p}_j\hat{\alpha}_k \neq 0. \tag{20}$$

Орбитальный (построенный из координат и импульсов) момент импульса *не сохраняется* для свободной частицы.

Определим оператор, связанный с внутренними степенями свободы

$$\hat{S}_i = \frac{1}{2}\begin{Vmatrix} \sigma_i & 0 \\ 0 & \sigma_i \end{Vmatrix}, \ i = x, y, z.$$

Свойства этого оператора следуют из коммутационных свойств матриц Паули

$$[\sigma_x, \sigma_y] = 2\mathrm{i}\sigma_z,\ [\sigma_z, \sigma_x] = 2\mathrm{i}\sigma_y,\ [\sigma_y, \sigma_z] = 2\mathrm{i}\sigma_x, \quad [\sigma_i, \sigma_j] = 2\mathrm{i}\epsilon_{ijk}\sigma_k.$$

Коммутационные соотношения на компоненты этой наблюдаемой

$$[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = \mathrm{i}\epsilon_{ijk}\hat{S}_k.$$

совпадают с коммутационными соотношениями компонент момента импульса. Более того, коммутатор

$$[\hat{H}, \hat{S}_i] = -\mathrm{i}\epsilon_{ijk}\hat{p}_j\hat{\alpha}_k.$$

Сравнив это выражение с (20), приходим к важному выводу

> оператор $\hat{J}_i = \hat{M}_i + \hat{S}_i$ (*полного момента импульса частицы*), который равен сумме оператора $\hat{M}_i = \epsilon_{ijk}\hat{q}_j\hat{p}_k$ (*орбитального момента импульса частицы*) и оператора $\hat{S}_i$ (*спина частицы*), представляет собой сохраняющуюся наблюдаемую релятивистской частицы
>
> $$[\hat{H}, \hat{J}_i] = 0$$
>
> и подчиняется коммутационным соотношениям для момента импульса
>
> $$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = \mathrm{i}\epsilon_{ijk}\hat{J}_k.$$

Так как

$$\hat{S}^2 = \frac{3}{4}\hat{\mathrm{I}} = \frac{1}{2}\Big(\frac{1}{2} + 1\Big)\hat{\mathrm{I}},$$

то максимально возможная проекция оператора спина на выделенную ось равна

$$\boxed{s = \frac{1}{2}}\ !!!$$

Исследуем собственные значения и состояния гамильтониана свободной релятивистской частицы. Определим двухкомпонентные функции

$$\varphi(\vec{x}) = \begin{Vmatrix} \phi_1(\vec{x}) \\ \phi_2(\vec{x}) \end{Vmatrix}, \quad \chi(\vec{x}) = \begin{Vmatrix} \phi_3(\vec{x}) \\ \phi_4(\vec{x}) \end{Vmatrix}.$$

Тогда задача на собственные значения и состояния гамильтониана принимает вид

$$\begin{cases} -\mathrm{i}\vec{\sigma}\vec{\partial}\chi(\vec{x}) + m\varphi(\vec{x}) = E\varphi(\vec{x}) \\ -\mathrm{i}\vec{\sigma}\vec{\partial}\varphi(\vec{x}) - m\chi(\vec{x}) = E\chi(\vec{x}) \end{cases}$$

Так как гамильтониан свободной частицы коммутирует с оператором импульса, а обобщенные собственные состояния импульса известны, то

$$\varphi(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{p}\vec{x}} \varphi_{\vec{p}}, \quad \chi(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{p}\vec{x}} \chi_{\vec{p}}.$$

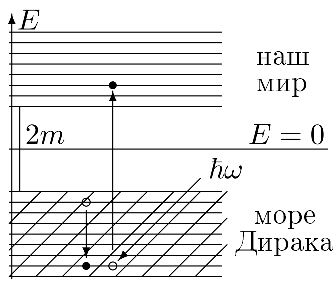
Следовательно,

$$\begin{cases} (E-m)\varphi_{\vec{p}} - \vec{\sigma}\vec{p}\chi_{\vec{p}} = 0 \\ \vec{\sigma}\vec{p}\varphi_{\vec{p}} - (E+m)\chi_{\vec{p}} = 0 \end{cases} \tag{21}$$

Спектр гамильтониана определяется равенством нулю детерминанта

$$\det[\delta_{\alpha\beta}(E-m)] \det[\delta_{\alpha\beta}(E+m) - p_i(\sigma_i)_{\alpha\gamma} \frac{1}{E-m} (\sigma_k)_{\gamma\beta} p_k] = \big(E^2 - (p^2+m^2)\big)^2 = 0,$$

$$E^{(1)} = E^{(2)} = \varepsilon_{\vec{p}},\ E^{(3)} = E^{(4)} = -\varepsilon_{\vec{p}}, \quad \varepsilon_{\vec{p}} = \sqrt{\vec{p}^2 + m^2}.$$



Собственные состояния с положительной энергией $s = \uparrow, \downarrow$

$$\phi_s^{(+)}(\vec{x}) = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{p}\vec{x}}}{4\pi\sqrt{\pi\varepsilon_{\vec{p}}(\varepsilon_{\vec{p}}+m)}} \begin{Vmatrix} (\varepsilon_{\vec{p}}+m)\varphi_s \\ \vec{\sigma}\vec{p}\varphi_s \end{Vmatrix}, \quad \varphi_\uparrow = \begin{Vmatrix} 1 \\ 0 \end{Vmatrix}, \varphi_\downarrow = \begin{Vmatrix} 0 \\ 1 \end{Vmatrix}$$

Собственные состояния с отрицательной энергией $s = \uparrow, \downarrow$

$$\phi_s^{(-)}(\vec{x}) = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{p}\vec{x}}}{4\pi\sqrt{\pi\varepsilon_{\vec{p}}(\varepsilon_{\vec{p}}+m)}} \begin{Vmatrix} -\vec{\sigma}\vec{p}\chi_s \\ (\varepsilon_{\vec{p}}+m)\chi_s \end{Vmatrix}, \quad \chi_\uparrow = \begin{Vmatrix} 1 \\ 0 \end{Vmatrix}, \chi_\downarrow = \begin{Vmatrix} 0 \\ 1 \end{Vmatrix}$$

При заданном значении $\varepsilon_{\vec{p}}$ у нас есть двукратно вырожденное состояние с положительной энергией и двукратно вырожденное с отрицательной энергией. В нерелятивистском пределе $p \ll m$ для решений с положительной энергией $\chi_{\vec{p}} \ll \varphi_{\vec{p}}$, а для решений с отрицательной энергией выполняется обратное соотношение $\varphi_{\vec{p}} \ll \chi_{\vec{p}}$.

Спектр гамильтониана не ограничен снизу, поэтому *следует признать одночастичную релятивистскую теорию не состоявшейся.*

Проблем бы не было, если бы вероятность переходов из состояний с положительной энергией в состояния с энергией отрицательной была бы равна нулю. Однако, это не так, например, под влиянием внешнего поля. Дирак: „предположим, что почти все состояния с отрицательной энергией заполнены, причем в каждом состоянии в соответствии с принципом запрета Паули находится по одному электрону“ (море Дирака). В этом случае переходы из состояний с положительной энергией в состояния моря Дирака невозможны, если последние полностью заполнены.

Если же в результате внешнего воздействия (например, γ-квант) некоторое состояние в море Дирака становится свободным, то такое состояние с отрицательной энергией проявляет себя как частица, обладающая энергией положительной, так как для того, чтобы такой объект исчез, нужно добавить электрон с отрицательной энергией. Более того, легко понять, что такая дырка в дираковском море, взаимодействовала бы с электромагнитным полем как частица с зарядом, противоположным заряду частицы с положительной энергией.

So: *взаимодействие* вынуждает прибегнуть к многочастичной (здесь „много“≡“бесконечно много“) формулировке, в которой число частиц не сохраняется, то есть к *квантовой теории поля.*

XVII. Движение электрона в магнитном поле

Чтобы физически проявилась новая внутренняя степень свободы частицы - спин, рассмотрим поведение частицы в электромагнитном поле.

Утверждение: пусть $H(\vec{q},\vec{p})$ – гамильтониан частицы в трехмерном пространстве. Если заряд этой частицы равен e, то ее движение в электромагнитном поле с 4-потенциалом $A^\mu = \big(\phi(\vec{x}),\vec{A}(\vec{x})\big)$ описывается гамильтонианом

$$H\big(\vec{q},\vec{p}-e\vec{A}(\vec{q}),\vec{q}\big)+e\phi(\vec{q}).$$

Сами электромагнитные поля определяются оотношениями

$$\vec{E}(\vec{x}) = -\partial_0\vec{A}(\vec{x})-\vec{\partial}\phi(\vec{x}),\quad \vec{B}=[\vec{\partial}\times\vec{A}(\vec{x})].$$

Используя это утверждение, исследуем поведение дираковской частицы в постоянном электромагнитном поле

$$\hat{H} = \hat{\alpha}_i\big(\hat{p}_i - eA_i(\vec{q})\big)+m\hat{\beta}+e\phi(\vec{q}),$$

$$\begin{cases}\sigma_i\big(\hat{p}_i - eA_i(\vec{x})\big)\chi(\vec{x})+m\varphi(\vec{x})+e\phi(\vec{x})\varphi(\vec{x}) = E\varphi(\vec{x})\\ \sigma_i\big(\hat{p}_i - eA_i(\vec{x})\big)\varphi(\vec{x})-m\chi(\vec{x})+e\phi(\vec{x})\chi(\vec{x}) = E\chi(\vec{x})\end{cases}$$

Будем рассматривать нерелятивистский предел для состояний с положительной энергией (наш мир). Энергию будем отсчитывать от значения массы как принято в нерелятивистской теории, то есть $E=m+\varepsilon$.

Второе уравнение в главном нерелятивистском приближении можно решить относительно $\chi(\vec{x})$

$$(2m+\varepsilon-e\phi(\vec{x}))\chi(\vec{x})=2m\chi(\vec{x})=\sigma_i\big(\hat{p}_i-eA_i(\vec{x})\big)\varphi(\vec{x}),\quad |\varepsilon-e\phi(\vec{x})|\ll m,$$

$$\chi(\vec{x})=\frac{1}{2m}\sigma_i\big(\hat{p}_i-eA_i(\vec{x})\big)\varphi(\vec{x}).$$

Подстановка в первое уравнение

$$(\varepsilon-e\phi(\vec{x}))\varphi(\vec{x})=\frac{1}{2m}\sigma_i\big(\hat{p}_i-eA_i(\vec{x})\big)\sigma_k\big(\hat{p}_k-eA_k(\vec{x})\big)\varphi(\vec{x})=$$

$$\frac{1}{2m}(\delta_{ik}+\mathrm{i}\epsilon_{ikm})\sigma_m\big(\hat{p}_i-eA_i(\vec{x})\big)\big(\hat{p}_k-eA_k(\vec{x})\big)\varphi(\vec{x})=$$

$$\frac{1}{2m}\big(\hat{\vec{p}}-e\vec{A}(\vec{x})\big)^2\varphi(\vec{x})-\frac{e}{2m}\mathrm{i}\epsilon_{ikm}\sigma_m[A_i(\vec{x}),\hat{p}_k)]\varphi(\vec{x})=$$

$$\frac{1}{2m}\big(\hat{\vec{p}}-e\vec{A}(\vec{x})\big)^2\varphi(\vec{x})+\frac{e}{2m}\mathrm{i}\epsilon_{ikm}\sigma_m(\partial_kA_i(\vec{x}))\varphi(\vec{x})=\Big[\frac{1}{2m}\big(\hat{\vec{p}}-e\vec{A}(\vec{x})\big)^2-\frac{e}{2m}\vec{\sigma}\vec{B}(\vec{x})\Big]\varphi(\vec{x}).$$

So: гамильтониан дираковской нерелятивистской частицы в электромагнитном поле

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\big(\hat{\vec{p}}-e\vec{A}(\vec{x})\big)^2-\underline{\frac{e}{2m}\vec{\sigma}\vec{B}(\vec{x})}+e\phi(\vec{x}).$$

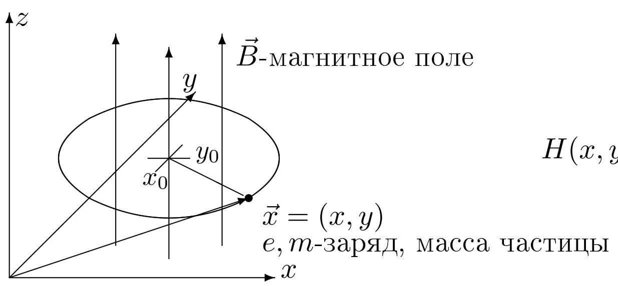
Отсюда видно, что дираковская заряженная частица обладает магнитным моментом, пропорциональным ее спину

$$\hat{\vec{\mu}}=\frac{e}{m}\hat{\vec{s}},\quad \hat{\vec{s}}=\frac{1}{2}\vec{\sigma}.$$

Состояние такой частицы в координатном представлении $\varphi(\vec{x})\in L^2(\vec{x}\in\mathbb{R}^3,\mathrm{d}\vec{x})\otimes\mathbb{C}^2$:

$$\varphi(\vec{x})=\begin{Vmatrix}\psi_1(\vec{x})\\ \psi_2(\vec{x})\end{Vmatrix},\quad 1=\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\vec{x}\,\big[\bar{\psi}_1(\vec{x})\psi_1(\vec{x})+\bar{\psi}_2(\vec{x})\psi_2(\vec{x})\big].$$

Заряженная частица в однородном магнитном поле (классическая теория).



$$A_x=-yB,\ A_y=A_z=0$$

$$H(x,y;p_x,p_y)=\frac{1}{2m}(p_x+eBy)^2+\frac{1}{2m}p_y^2$$

Уравнения движения

$$\dot{x}=\frac{1}{m}(p_x+eBy),\ \dot{p}_x=0,\quad \dot{y}=\frac{1}{m}p_y,\ \dot{p}_y=-\frac{eB}{m}(p_x+eBy).$$

Решим уравнения движения

$$p_x = \mathrm{const}$$

$$\ddot{y} = -\Big(\frac{eB}{m}\Big)^2\Big(y + \frac{p_x}{eB}\Big), \quad y = -\frac{p_x}{eB} + R\cos\omega t, \quad \omega^2 = \Big(\frac{eB}{m}\Big)^2$$

$$\dot{x} = \omega R\cos\omega t, \quad x = x_0 + R\sin\omega t$$

Положение центра окружности x_0, y_0, по которой вращается заряженная частица, не меняется с течением времени. Если нам удастся выразить эти величины через канонические переменные, мы получим два интеграла движения

$$y_0 = -\frac{1}{eB}p_x, \quad x_0 = x - R\sin\omega t = x + \frac{1}{\omega}\dot{y} = x + \frac{1}{eB}p_y$$

Квантовая теория.

Гамильтониан

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{p}_x + eB\hat{y})^2 + \frac{1}{2m}\hat{p}_y^2 - \frac{eB}{2m}\sigma_z.$$

Канонические коммутационные соотношения

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = [\hat{y}, \hat{p}_y] = 1, \quad [\hat{x}, \hat{y}] = [\hat{x}, \hat{p}_y] = [\hat{p}_x, \hat{y}] = [\hat{p}_x, \hat{p}_y] = 0.$$

Наблюдаемые центра орбиты

$$\hat{X} = \hat{x} + \frac{1}{eB}\hat{p}_y, \quad \hat{Y} = -\frac{1}{eB}\hat{p}_x.$$

Выполним каноническое преобразование

$$\hat{Q} = \hat{y} + \frac{1}{eB}\hat{p}_x, \ \hat{P} = \hat{p}_y, \quad \hat{X} = \hat{x} + \frac{1}{eB}\hat{p}_y, \ \hat{\Pi} = \hat{p}_x.$$

Необходимо проверить каноничность:

$$[\hat{Q}, \hat{P}] = [\hat{X}, \hat{\Pi}] = 1, \quad [\hat{P}, \hat{\Pi}] = [\hat{P}, \hat{X}] = [\hat{Q}, \hat{\Pi}] = 0, \ [\hat{Q}, \hat{X}] = \frac{1}{eB}([\hat{y}, \hat{p}_y] + [\hat{p}_x, \hat{x}]) = 0.$$

Гамильтониан в новых переменных

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{P}^2 + \frac{m\omega^2}{2}\hat{Q}^2 - \mathrm{sgn}e\frac{\omega}{2}\sigma_z, \quad \omega = \frac{|e|B}{m}.$$

Сохраняющиеся наблюдаемые центра орбиты

$$\hat{X}, \quad \hat{Y} = -\frac{1}{eB}\hat{\Pi}.$$

Сразу видны два полных набора, содержащих гамильтониан

$$(\hat{H}, \hat{X}, \hat{\sigma}_z) \qquad (\hat{H}, \hat{Y}, \hat{\sigma}_z)$$

Спектр собственных значений гамильтониана (для тех, кто квантовал осциллятор, он очевиден)

$$E_n = \omega n, \qquad n = 0, 1, 2, \dots,$$

причем основное состояние „не вырождено“, а состояния с $n > 0$ „двукратно вырождены“. В этом состоит экспериментально проверяемое проявление новой внутренней степени свободы – спина. Кавычки расставлены не случайно, потому что кратность вырождения любого уровня нужно умножить на бесконечность. Это связано с тем, что гамильтониан не зависит от операторов $\hat{X}, \hat{Y}$, каждый из которых может быть включен в полный набор. Заметим, что если ограничить движение заряженной частицы в плоскости большой, но конечной, областью площади S, то кратность вырождения станет конечной, но очень большой, $eBS/2\pi$ (основное состояние).

Есть еще один физически важный полный набор. Правда, он более ярко проявляется в другой калибровке:

$$A_x = -\frac{1}{2} yB, \ A_y = \frac{1}{2} xB, \ A_z = 0.$$

Гамильтониан:

$$\frac{1}{2m}(\hat{p}_x + \frac{eB}{2}\hat{y})^2 + \frac{1}{2m}(\hat{p}_y - \frac{eB}{2}\hat{x})^2 = \frac{1}{2m}(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2) + \frac{m\omega^2}{8}(\hat{x}^2 + \hat{y}^2) - \frac{eB}{2m}(\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x)$$

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{\vec{p}}^2 + \frac{m\omega^2}{8}\hat{\vec{x}}^2 - \frac{eB}{2m}(\hat{M}_z + 2\hat{S}_z).$$

Полный набор (полярная симметрия) – $(\hat{H}, \hat{M}_z, \hat{S}_z)$.

XVIII. Тождественные частицы

Рассмотрим физическую систему, состоящую из N одинаковых (тождественных) частиц. Наперво нужно пояснить слова „одинаковые“, „тождественные“. Физическая система определяется гамильтонианом, в котором каждая частица задается каноническими переменными и внутренними степенями свободы (спин, например) – $\hat{\vec{q}}_\alpha, \hat{\vec{p}}_\alpha, \hat{\vec{s}}_\alpha, \ \alpha = 1, \dots, N$. Кроме того, гамильтониан содержит некоторые параметры – массы, заряды и тому подобное. Так вот: физическая система состоит из тождественных частиц, если гамильтониан

$$\hat{H} = H(\hat{\vec{q}}_1, \hat{\vec{p}}_1, \hat{\vec{s}}_1, \ldots, \hat{\vec{q}}_\alpha, \hat{\vec{p}}_\alpha, \hat{\vec{s}}_\alpha, \ldots, \hat{\vec{q}}_\beta, \hat{\vec{p}}_\beta, \hat{\vec{s}}_\beta, \ldots, \hat{\vec{q}}_N, \hat{\vec{p}}_N, \hat{\vec{s}}_N)$$

при любой замене $\hat{\vec{q}}_\alpha, \hat{\vec{p}}_\alpha, \hat{\vec{s}}_\alpha \quad \Longleftrightarrow \quad \hat{\vec{q}}_\beta, \hat{\vec{p}}_\beta, \hat{\vec{s}}_\beta$ остается прежним.
Полный набор для такой системы выберем как объединяющий полные наборы для каждой частицы в отдельности $(\hat{\eta}_1, \ldots, \hat{\eta}_N)$, где, например, $\hat{\eta}_\alpha = (\hat{\vec{q}}_\alpha, \hat{s}_{\alpha,z}),\ \alpha = 1, \ldots, N$. Состояния нашей физической системы $|\phi\rangle$ будем представлять в виде комплекснозначной с суммируемым квадратом функции

$$\phi(\eta_1, \ldots, \eta_N) = \langle \eta_1 | \otimes \cdots \otimes \langle \eta_N | \phi \rangle,$$

где $|\eta_\alpha\rangle,\ \alpha = 1, \ldots, N,$ – собственные состояния полного набора наблюдаемых $\hat{\eta}_\alpha$ одной частицы.

> Принцип тождественности частиц.
>
> Состояние $\phi(\eta_1, \ldots, \eta_\alpha, \ldots, \eta_\beta, \ldots, \eta_N)$ физической системы тождественных частиц *не изменяется* при любой замене $\eta_\alpha \ \Leftrightarrow\ \eta_\beta$ (состояние физической системы не изменяется при перестановки двух тождественных частиц).

Это означает, что

$$\phi(\eta_1, \ldots, \eta_\beta, \ldots, \eta_\alpha, \ldots, \eta_N) = C \cdot \phi(\eta_1, \ldots, \eta_\alpha, \ldots, \eta_\beta, \ldots, \eta_N), \text{причем } |C| = 1.$$

Применяя операцию перестановки повторно, получаем $C^2 = 1$ или $C = \pm 1$.
So: принцип тождественности частиц требует, чтобы волновая функция системы таких частиц была либо *симметрична*

$$\phi(\eta_1, \ldots, \eta_\alpha, \ldots, \eta_\beta, \ldots, \eta_N) = +\phi(\eta_1, \ldots, \eta_\beta, \ldots, \eta_\alpha, \ldots, \eta_N), \quad \underline{\text{бозоны}}$$

либо *антисимметрична*

$$\phi(\eta_1, \ldots, \eta_\alpha, \ldots, \eta_\beta, \ldots, \eta_N) = -\phi(\eta_1, \ldots, \eta_\beta, \ldots, \eta_\alpha, \ldots, \eta_N), \quad \underline{\text{фермионы}}$$

при перестановки любых двух аргументов.

В квантовой теории поля есть замечательная теорема, которая утверждает, что *бозоны – это частицы с целым спином*, а *фермионы – частицы с полуцелым спином* (теорема о связи спина со статистикой). Имеется в виду локальная, лоренц-инвариантная, с единственным вакуумом теория поля, в которой выполнено условие микропричинности.

То есть, локальные плотности наблюдаемых $\hat{O}(t,\vec{x})$

$$\hat{\mathcal{O}} = \int \mathrm{d}\vec{x}\,\hat{O}(t,\vec{x})$$

должны коммутировать для пространственно-подобных интервалов

$$[\hat{O}(t_1,\vec{x}_1),\hat{O}(t_2,\vec{x}_2)] = 0, \quad \text{если } (t_1-t_2)^2 < (\vec{x}_1-\vec{x}_2)^2.$$

Рассмотрим две невзаимодействующие тождественные частицы с гамильтонианом

$$\hat{H} = h(\hat{\vec{q}}_1,\hat{\vec{p}}_1,\hat{\vec{s}}_1) + h(\hat{\vec{q}}_2,\hat{\vec{p}}_2,\hat{\vec{s}}_2).$$

Задача на собственные значения и состояния гамильтониана

$$\hat{H}\phi_N(\eta_1,\eta_2) = \big(h(\hat{\vec{q}}_1,\hat{\vec{p}}_1,\hat{\vec{s}}_1) + h(\hat{\vec{q}}_2,\hat{\vec{p}}_2,\hat{\vec{s}}_2)\big)\phi_N(\eta_1,\eta_2) = E_N\phi_N(\eta_1,\eta_2).$$

Эта задача допускает разделение переменных

$$\phi_N(\eta_1,\eta_2) = \phi_{n_1}(\eta_1)\cdot\phi_{n_2}(\eta_2), \quad \frac{\hat{h}\phi_{n_1}(\eta_1)}{\phi_{n_1}(\eta_1)} + \frac{\hat{h}\phi_{n_2}(\eta_2)}{\phi_{n_2}(\eta_2)} = \epsilon_{n_1} + \epsilon_{n_2} = E_N.$$

Однако, полученная собственная функция не обладает нужными свойствами. Она не симметрична и не антисимметрична по отношению к перестановке аргументов. Ситуацию спасает то обстоятельство, что состояние с данным значением энергии, как минимум, двукратно вырождено. Действительно, состояние $\varphi_N(\eta_1,\eta_2) = \phi_{n_2}(\eta_1)\phi_{n_1}(\eta_2)$ тоже собственное с энергией $\epsilon_{n_2} + \epsilon_{n_1} = E_N$. А уже используя эти *два* состояния, нетрудно получить состояние для бозонов

$$\phi^B_{N=\{n_1,n_2\}}(\eta_1,\eta_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\big[\phi_{n_1}(\eta_1)\phi_{n_2}(\eta_2) + \phi_{n_1}(\eta_2)\phi_{n_2}(\eta_1)\big],\ n_1 \neq n_2,$$

$$\phi^B_{N=\{n,n\}}(\eta_1,\eta_2) = \phi_n(\eta_1)\phi_n(\eta_2)\ -\ \text{бозоны}$$

и фермионов

$$\phi^F_{N=\{n_1,n_2\}}(\eta_1,\eta_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\big[\phi_{n_1}(\eta_1)\phi_{n_2}(\eta_2) - \phi_{n_1}(\eta_2)\phi_{n_2}(\eta_1)\big]\ -\ \text{фермионы.}$$

Из последней формулы следует широко известный в узких кругах *принцип запрета Паули*: два невзаимодействующих фермиона (электрона, например) не могут находиться

в одинаковых одночастичных состояниях ($n_1 \neq n_2$). Состояние с $n_1 = n_2$ просто не существует $\phi^F = 0$.
Отмеченные особенности систем тождественных невзаимодействующих частиц легко распространяются на число частиц большее, чем 2.

Формализм теории с любым числом тождественных частиц.
Пусть пространство состояний системы из N частиц – $\mathcal{H}^N$. Состояние системы – комплекснозначная функция с суммируемым квадратом $\phi(\eta_1, \ldots, \eta_N) \in \mathcal{H}^N$. Система из N тождественных частиц описывается или подпространством $\mathcal{H}_B^N \subset \mathcal{H}^N$, состоящем из симметричных функций (бозоны), или подпространства $\mathcal{H}_F^N \subset \mathcal{H}^N$ антисимметричных функций (фермионы). Система же, состоящая из переменного числа бозонов или фермионов, описывается с помощью пространства состояний

$$\mathcal{H}_B = \bigoplus_{N=0}^{\infty} \mathcal{H}_B^N, \quad \text{или} \quad \mathcal{H}_F = \bigoplus_{N=0}^{\infty} \mathcal{H}_F^N.$$

Строим базис таких пространств. Пусть $\phi_n(\eta), n = 0, 1, \ldots \eta\eta$ – собственные состояния полного одночастичного набора наблюдаемых (полная ортонормированная система функций). Тогда в $\mathcal{H}^N$ можно задать базис

$$\phi_{n_1}(\eta_1)\phi_{n_2}(\eta_2)\ldots\phi_{n_N}(\eta_N) = \prod_{k=1}^{N} \phi_{n_k}(\eta_k),$$

$n_1, n_2, \ldots, n_N$ - все возможные выборки из индексов собственных состояний $\phi_n(\eta),\ n = 0, 1, \ldots$.
В пространствах $\mathcal{H}_B^N$ и $\mathcal{H}_F^N$ базисы (ненормированные) получаются действием симметризующего оператора $\hat{S}_N$ или антисимметризующего оператора $\hat{A}_N$ по всем аргументам η на базис в $\mathcal{H}^N$

$$\hat{S}_N \prod_{k=1}^{N} \phi_{n_k}(\eta_k), \quad \hat{A}_N \prod_{\substack{k=1 \\ n_1 < n_2 < \cdots < n_N}}^{N} \phi_{n_k}(\eta_k).$$

Чтобы понять как действуют вновь введенные операторы, нужен небольшой экскурс в простые свойства перестановок.

- Перестановка связывает совокупность N упорядоченных объектов $\eta_1, \ldots, \eta_N$ с той же совокупностью, расположенной в другом порядке $\eta_{\alpha_1}, \ldots, \eta_{\alpha_N}$, где $\alpha_1, \ldots, \alpha_N$ - за исключением порядка, то же самое множество, что и $1, \ldots, N$.

- Перестановку можно записывать в виде

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & N \\ \alpha_1 & \alpha_2 & \cdots & \alpha_N \end{pmatrix},$$

причем $P\eta_1 = \eta_{\alpha_1}, \ldots, P\eta_N = \eta_{\alpha_N}$.

- Перестановка столбцов не меняет перестановки.

  Пусть
$$Q = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \alpha_2 & \cdots & \alpha_N \\ \beta_1 & \beta_2 & \cdots & \beta_N \end{pmatrix},$$
  тогда определено произведение
$$QP = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & N \\ \beta_1 & \beta_2 & \cdots & \beta_N \end{pmatrix}.$$
  Легко определить тождественную перестановку и обратную. Совокупность всех перестановок N объектов образуют группу (симметрическая группа).

- Транспозиция - перестановка вида
$$P_T = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & \alpha & \cdots & \beta & \cdots & N \\ 1 & 2 & \cdots & \beta & \cdots & \alpha & \cdots & N \end{pmatrix}.$$

- Каждая перестановка может быть разбита на произведение транспозиций. Четность числа транспозиций, на которые разбита перестановка, однозначна. Таким образом, перестановку P можно охарактеризовать ее четностью δ_P, равной $+1$ для четной перестановки, и -1 для нечетной.

Теперь легко определить
$$\hat{S}_N f(\eta_1, \ldots, \eta_N) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{N!} \sum_P f(P\eta_1, \ldots, P\eta_N),$$
$$\hat{A}_N f(\eta_1, \ldots, \eta_N) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{N!} \sum_P \delta_P f(P\eta_1, \ldots, P\eta_N),$$
где суммирование идет по $N!$ элементам симметрической группы.

Полученные действием операторов $\hat{S}_N$ и $\hat{A}_N$ базисы можно записывать в виде
$$|N_0, N_1, \ldots, N_n, \ldots\rangle\,, \tag{22}$$
в этом выражении $N_n,\ n = 0, 1, \ldots,$ - число функций $\phi_n(\eta)$ в выписанных произведениях. Очевидно, что N_n может принимать значения $0, 1, 2, \ldots$ для бозонов и $0, 1$ для фермионов, так что
$$\sum_{n=0} N_n = N.$$

Последнее ограничение можно снять, если перейти в пространства состояний $\mathcal{H}_B$ и $\mathcal{H}_F$. Описанная конструкция – *представление чисел заполнения.*

Введем операторы, позволяющие путешествовать в пространстве состояний. Это операторы рождения и уничтожения. Для пространства $\underline{\mathcal{H}_B}$

$$\hat{a}_n^+ \left| N_0, N_1, \dots, N_n, \dots \right\rangle \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{N_n+1} \left| N_0, N_1, \dots, N_n+1, \dots \right\rangle,$$

$$\hat{a}_n \left| N_0, N_1, \dots, N_n, \dots \right\rangle \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{N_n} \left| N_0, N_1, \dots, N_n-1, \dots \right\rangle.$$

Можно показать, что эти операторы подчиняются коммутационным соотношениям

$$[\hat{a}_m, \hat{a}_n^+] = \delta_{mn}, \quad [\hat{a}_m, \hat{a}_n] = [\hat{a}_m^+, \hat{a}_n^+] = 0$$

(вспоминаем гармонический осциллятор).

Определим вакуумное состояние следующего вида

$$|0\rangle = |0, 0, \dots, 0, \dots\rangle,$$

тогда состояние (22) представимо в виде

$$\left| N_0, N_1, \dots, N_n, \dots \right\rangle = (\hat{a}_0^+)^{N_0} (\hat{a}_1^+)^{N_1} \dots (\hat{a}_n^+)^{N_n} \dots |0\rangle = \prod_{n \in O} \hat{a}_n^+ |0\rangle,$$

где $O = \{n_1, n_2, \dots, n_N\}$ - множество занятых одночастичных состояний с учетом кратности их заполнения (то есть в множестве O могут быть одинаковые элементы.

Пусть $\hat{h} = h(\hat{\vec{q}}, \hat{\vec{p}}, \hat{\vec{s}})$ - одночастичный гамильтониан. Посмотрим как на N-частичное состояние действует гамильтониан

$$\hat{H}_0 = \sum_{m=1}^{N} \hat{h}_m.$$

Очевидно, что $[\hat{H}_0, \hat{S}_N] = 0$, поэтому

$$\hat{H}_0 \left| \dots, N_n, \dots \right\rangle \;\Rightarrow\; \hat{S}_N \sum_{m=1}^{N} \hat{h}_m \prod_{k=1}^{N} \phi_{n_k}(\eta_k) = \hat{S}_N \sum_{m=1}^{N} \hat{h}_m \phi_{n_m}(\eta_m) \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq m}}^{N} \phi_{n_k}(\eta_k)$$

Воспользуемся соотношением

$$\hat{h} \left| \phi_{n_m} \right\rangle = \sum_{\alpha, \beta = 0} \left| \phi_\alpha \right\rangle \left\langle \phi_\alpha \right| \hat{h} \left| \phi_\beta \right\rangle \left\langle \phi_\beta \right| \phi_{n_m} \rangle \Rightarrow \sum_{\alpha, \beta = 0} h_{\alpha\beta} \delta_{\beta, n_m} \phi_\alpha(\eta_m)$$

и найдем, что

$$\hat{H}_0 \prod_{n \in O} \hat{a}_n^+ |0\rangle \;\Leftarrow\; \hat{H}_0 \left| \dots, N_n, \dots \right\rangle \;\Rightarrow\; \sum_{\alpha, \beta = 0} h_{\alpha\beta} \hat{a}_\alpha^+ \sum_{m=1}^{N} \delta_{\beta, n_m} \prod_{\substack{n \in O \\ n \neq n_m}} \hat{a}_n^+ |0\rangle. \tag{23}$$

Интересная цепочка равенств

$$\hat{a}_\beta \prod_{n\in O} \hat{a}_n^+ = \hat{a}_\beta \hat{a}_{n_1}^+ \hat{a}_{n_2}^+ \dots \hat{a}_{n_N}^+ = \delta_{\beta,n_1} \hat{a}_{n_2}^+ \dots \hat{a}_{n_N}^+ + \hat{a}_{n_1}^+ \hat{a}_\beta \hat{a}_{n_2}^+ \dots \hat{a}_{n_N}^+ =$$

$$= \sum_{m=1}^{N} \delta_{\beta,n_m} \prod_{\substack{n\in O\\ n\neq n_m}} \hat{a}_n^+ + \Big(\prod_{n\in O} \hat{a}_n^+\Big)\hat{a}_\beta.$$

Сравнивая найденное с (23) и используя, что $\hat{a}_\beta \left|0\right\rangle = 0$, получаем

$$\hat{H}_0 \left|\dots, N_n, \dots\right\rangle = \sum_{\alpha,\beta=0} h_{\alpha\beta} \hat{a}_\alpha^+ \hat{a}_\beta \left|\dots, N_n, \dots\right\rangle.$$

Оператор двухчастичного взаимодействия

$$\hat{V} = \sum_{\substack{l,m=1\\ l<m}}^{N} \hat{\nu}_{lm} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{l,m=1\\ l\neq m}}^{N} \hat{\nu}_{lm}$$

переписывается в виде

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2=0\\ \beta_1,\beta_2=0}} \nu_{\alpha_2\alpha_1,\beta_1\beta_2} \hat{a}_{\alpha_2}^+ \hat{a}_{\alpha_1}^+ \hat{a}_{\beta_1} \hat{a}_{\beta_2}.$$

Вывод:

$$\hat{V} \left|\dots, N_n, \dots\right\rangle \;\Rightarrow\; \hat{S}_N \sum_{\substack{l,m=1\\ l\neq m}}^{N} \hat{\nu}_{lm} \prod_{k=1}^{N} \phi_{n_k}(\eta_k) = \hat{S}_N \sum_{\substack{l,m=1\\ l\neq m}}^{N} \hat{\nu}_{lm} \phi_{n_l}(\eta_l)\phi_{n_m}(\eta_m) \prod_{\substack{k=1\\ k\neq l,m}}^{N} \phi_{n_k}(\eta_k),$$

$$\hat{\nu}_{lm}\phi_{n_l}(\eta_l)\phi_{n_m} = \sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2=0\\ \beta_1,\beta_2=0}} \nu_{\alpha_2\alpha_1,\beta_1\beta_2} \phi_{\alpha_1}(\eta_l)\phi_{\alpha_2}(\eta_m) \delta_{n_l,\beta_1}\delta_{n_m,\beta_2},$$

$$\nu_{\alpha_2\alpha_1,\beta_1\beta_2} = \left\langle\alpha_2\right| \otimes \left\langle\alpha_1\right| \hat{\nu} \left|\beta_1\right\rangle \otimes \left|\beta_2\right\rangle,$$

$$\hat{V} \left|\dots, N_n, \dots\right\rangle = \sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2=0\\ \beta_1,\beta_2=0}} \nu_{\alpha_2\alpha_1,\beta_1\beta_2} \hat{a}_{\alpha_1}^+ \hat{a}_{\alpha_2}^+ \sum_{\substack{l,m=1\\ l\neq m}}^{N} \delta_{n_l,\beta_1}\delta_{n_m,\beta_2} \prod_{\substack{n\in O\\ n\neq n_l,n_m}} \hat{a}_n^+ \left|0\right\rangle.$$

$$\hat{a}_{\beta_1}\hat{a}_{\beta_2} \prod_{n\in O} \left|0\right\rangle = \hat{a}_{\beta_1} \sum_{m=1}^{N} \delta_{n_m,\beta_2} \prod_{\substack{n\in O\\ n\neq n_m}} \hat{a}_n^+ \left|0\right\rangle = \sum_{\substack{l=1\\ l\neq m}} \delta_{n_l,\beta_1} \sum_{m=1}^{N} \delta_{n_m,\beta_2} \prod_{\substack{n\in O\\ n\neq n_m,n_l}} \hat{a}_n^+ \left|0\right\rangle.$$

Для фермионов $\underline{\mathcal{H}_F}$ числа заполнения могут принимать только два значения 0 или 1. Пусть $O = \{n_1, n_2, \dots, n_N\}$ - упорядоченное ($n_k < n_{k+1}$) множество занятых одночастичных состояний. Тогда операторы рождения и уничтожения определяются вот так

$$\hat{c}_n^+ |\underbrace{\dots, 1_{n_k}, 0, \dots, 0}_{k \text{ единиц}}, N_n, \dots\rangle = (-1)^k (1 - N_n) \left|\dots, 1_{n_k}, 0, \dots, 0, N_n + 1, \dots\right\rangle,$$

$$\hat{c}_n |\underbrace{\dots, 1_{n_k}, 0, \dots, 0}_{k \text{ единиц}}, N_n, \dots\rangle = (-1)^k N_n \left|\dots, 1_{n_k}, 0, \dots, 0, N_n - 1, \dots\right\rangle.$$

Эти операторы подчиняются антикоммутационным соотношениям

$$[\hat{c}_n, \hat{c}_m^+]_+ = \delta_{nm}, \quad [\hat{c}_n, \hat{c}_m]_+ = [\hat{c}_n^+, \hat{c}_m^+]_+ = 0.$$

Базисное N-частичное состояние

$$|\ldots, 1_{n_1}, \ldots, 1_{n_k}, \ldots, 1_{n_N}, \ldots\rangle = \hat{c}_{n_1}^+ \ldots \hat{c}_{n_k}^+ \ldots \hat{c}_{n_N}^+ |0\rangle = \prod_{\substack{n \in O \\ n_1 < n_2 < \cdots < n_N}} \hat{c}_n^+ |0\rangle,$$

здесь $|0\rangle = |0, \ldots, 0, \ldots\rangle$ - вакуумное состояние.

Гамильтониан с двухчастичным взаимодействием

$$\hat{H} = \sum_{\alpha, \beta = 0} h_{\alpha\beta} \hat{c}_\alpha^+ \hat{c}_\beta + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\alpha_1, \alpha_2 = 0 \\ \beta_1, \beta_2 = 0}} \nu_{\alpha_2 \alpha_1, \beta_1 \beta_2} \hat{c}_{\alpha_2}^+ \hat{c}_{\alpha_1}^+ \hat{c}_{\beta_1} \hat{c}_{\beta_2}.$$