Математические основы Квантовой Механики (осень 2020)

$\boxed{\text{Лекция № 8}}$

Мы рассмотрели несколько моделей одномерной квантовой механики: свободную частицу, гармонический осциллятор, частицу в потенциальном поле.

Все эти модели были получены каноническим (операторным) квантованием соответствующих классических механических моделей с одной степенью свободы.

Гильбертово пространство состояний этих моделей $L_2[\mathbb{R}] = \mathcal{H}$ (точнее, оснащённое Гильбертово пространство $\mathcal{S} \subset \mathcal{H} \subset \mathcal{S}^*$) снабжалось базисом (вообще говоря обобщённых) собственных векторов самосопряжённых операторов:

$$\left.\begin{aligned} |p\rangle \in \mathcal{S}^* &: \hat{p}\,|p\rangle = p\,|p\rangle \\ |x\rangle \in \mathcal{S}^* &: \hat{q}\,|x\rangle = x\,|x\rangle \end{aligned}\right\} \text{ Свободная частица}$$

$$|n\rangle \in \mathcal{S} \qquad \hat{H}\,|n\rangle = \hbar\omega\left(n + \tfrac{1}{2}\right) \; -$$

$$n = 0, 1, \ldots$$

— гармонический осциллятор.

Характерной особенностью этих примеров была невырожденность спектра операторов $\hat{p}$, $\hat{q}$, $\hat{H}$, применявшихся для построения базиса, то есть, каждому собственному значению отвечало одномерное собственное подпространство, в котором можно было выбрать один базисный собственный вектор тем или иным условием нормировки.

Теперь мы рассмотрим многомерные модели, пространство состояний которых более сложное. И теперь уже нельзя выбрать один самосопряжённый оператор и характеризовать базис его собственными значениями. Спектр оказывается вырожденным и каждому собственному значению отвечает, вообще говоря, многомерное подпространство в пространстве состояний.

В этом случае мы будем =3=
<u>предполагать</u>, что среди наблюдаемых нашей системы можно выделить так называемый <u>полный набор</u> одновременно измеримых (или совместно измеримых) наблюдаемых со следующим <u>фундаментальным свойством</u>:

$\boxed{О}$ Полный набор одновременно измеримых наблюдаемых $A_1, A_2, \ldots, A_n$ это такое множество наблюдаемых системы, что $\forall$ состояние $|a_1, a_2, \ldots a_n\rangle$ в котором $A_1, A_2, \ldots, A_n$ принимают <u>точные</u> значения $a_1, \ldots, a_n$, является <u>вектором</u> (вообще говоря обобщённым) в пространстве состояний системы. Другими словами, измерение точных значений наблюдаемых из полного набора однозначно фиксирует состояние квантово-механической системы.

Из ~~[illegible]~~ постулатов кв. механики следует, что полному набору отвечают самосопряжённые операторы $\hat{A}_1, \ldots, \hat{A}_n$ из алгебры наблюдаемых системы, которые взаимно коммутируют друг с другом: $[\hat{A}_i, \hat{A}_j] = 0 \ \forall i, j$.

Как следствие, гильбертово пространство состояний квантовой системы может быть снабжено базисом из общих собственных векторов операторов полного набора:

$$\hat{A}_i |a_1 \ldots a_n\rangle = a_i |a_1 \ldots a_n\rangle.$$

Задание собственных чисел $\{a_i\}$ фиксирует одномерное подпространство в $\mathcal{H}$.

Особенно удобны полные наборы, которые включают в себя гамильтониан системы. Тогда все операторы набора – интегралы движения и базисные вектора такого набора – стационарные состояния: с течением времени они умножаются на фазовый множитель:

$$U(t) |E, a_2, a_3, \ldots\rangle = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} |E, a_2, a_3, \ldots\rangle.$$

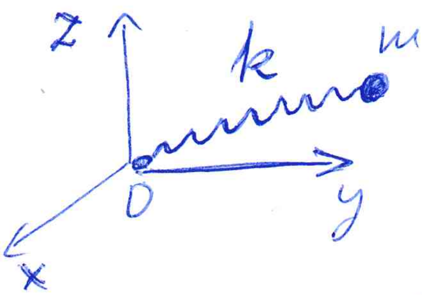
$$\hat{H} |E, \vec{a}\rangle = E |E, \vec{a}\rangle.$$

При этом выполнена <u>спектральная</u> <u>теорема:</u> $\forall\ |\psi\rangle \in \mathcal{H}$:

$$|\psi\rangle = \int d\mu(a_1, \dots, a_n)\, |a_1 \dots a_n\rangle \langle a_1 \dots a_n | \psi\rangle,$$

где $d\mu(a_1, \dots, a_n)$ обозначает суммирование по дискретному спектру и интегрирование по непрерывному.

Рассмотрим <u>пример</u> трехмерного гармонического осциллятора <u>(изотропного)</u>:



Частица m соединена пружиной жесткости k с началом координат O и может двигаться в пространстве $\mathbb{R}^3$. Классический гамильтониан такой системы:

$$H = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + \frac{k\,\vec{r}^{\,2}}{2} \qquad \vec{p} = \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \end{pmatrix} \ -$$

$$\vec{r} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

– импульс и радиус-вектор частицы. Каноническое квантование:

$$[\hat{q}_k, \hat{p}_j] = i\hbar\, \delta_{kj}\, \hat{\mathbb{1}}.$$

$$[\hat{q}_i, \hat{q}_j] = [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0$$

Квантовая система "живет" в Гильбертовом пространстве $\mathcal{H} = L_2(\mathbb{R}^3)$.

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2 + \hat{p}_2^2 + \hat{p}_3^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\left(\hat{q}_1^2 + \hat{q}_2^2 + \hat{q}_3^2\right)$$

$$\omega^2 = \frac{k}{m} > 0.$$

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}_3, \quad \hat{H}_k = \frac{\hat{p}_k^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{q}_k^2 -$$

– сумма 3х независимых осцилляторов.

Вводим 3 пары операторов рождения и уничтожения:

$$\underline{1 \leq k \leq 3:} \quad \hat{a}_k = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left(\sqrt{m\omega}\,\hat{q}_k + \frac{i}{\sqrt{m\omega}}\hat{p}_k\right)$$

$$\hat{a}_k^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left(\sqrt{m\omega}\,\hat{q}_k - \frac{i}{\sqrt{m\omega}}\hat{p}_k\right)$$

$$[\hat{a}_k, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{kj}\hat{\mathbb{1}}$$

$$\Downarrow$$

$$\boxed{\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1 + \hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2 + \hat{a}_3^\dagger a_3 + \frac{3}{2}\hat{\mathbb{1}}\right)}$$

Собственные вектора:

$$|n_1, n_2, n_3\rangle = |n_1\rangle \otimes |n_2\rangle \otimes |n_3\rangle$$

$$\hat{H}\,|n_1, n_2, n_3\rangle = E_{n_1 n_2 n_3}\,|n_1, n_2, n_3\rangle$$

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \hbar\omega\left(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2}\right)$$

Мы видим, что задание значения <u>энергии</u> E <u>не фиксирует</u> однозначно состояние квантового осциллятора в $\mathbb{R}^3$: одну и ту же энергию имеют вектора состояний E: $|n_1 n_2 n_3\rangle$, для которых

$$n_1 + n_2 + n_3 = \frac{E}{\hbar\omega} - \frac{3}{2}.$$

Спектр сильно вырожден (кроме основного состояния $|0\rangle$: $n_1 = n_2 = n_3 = 0$) и для формирования полного набора нужны еще операторы, <u>коммутирующие</u> с $\hat{H}$ и функционально независимые с $\hat{H}$.

Вспомним, что в классической механике показывается, что в любом центрально-симметричном потенциале $U(|\vec{r}|)$ сохраняется <u>момент импульса</u> частицы относительно начала координат:

$$\vec{J} = \vec{r} \times \vec{p},$$ или, в компонентах

$$J_i = \sum_{k,j} \varepsilon_{ijk} x_j p_k: \quad \begin{aligned} J_1 &= x_2 p_3 - x_3 p_2 \\ J_2 &= x_3 p_1 - x_1 p_3 \\ J_3 &= x_1 p_2 - x_2 p_1. \end{aligned}$$

Трём сохраняющимся величинам $\mathcal{J}_i$ =8= после квантования отвечают три самосопряжённых оператора:

$$\hat{\mathcal{J}}_i = \sum_{jk=1}^{3} \varepsilon_{ijk} \hat{q}_j \hat{p}_k \quad \text{или} \quad \hat{\vec{\mathcal{J}}} = \hat{\vec{q}} \times \hat{\vec{p}}.$$

Квантовые выражения $\hat{\mathcal{J}}_i$ операторов углового момента легко получаются из своих классических аналогов путем простой замены классических наблюдаемых x_i и p_i их квантовыми аналогами. Здесь не возникает произвола, связанного с упорядочением, так как все $\hat{\mathcal{J}}_i$ строятся из $\hat{q}_j$ и $\hat{p}_k$ с разными номерами, которые коммутируют друг с другом:

$$\hat{\mathcal{J}}_1 = \hat{q}_2 \hat{p}_3 - \hat{q}_3 \hat{p}_2 \quad \text{и} \quad \hat{q}_2 \hat{p}_3 = \hat{p}_3 \hat{q}_2 \quad \text{и т. д.}$$

Легко проверяются соотношения:

$$[\hat{\mathcal{J}}_i, \hat{\mathcal{J}}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{\mathcal{J}}_k, \quad [\hat{\mathcal{J}}_k, \hat{q}_j] = i\hbar \varepsilon_{kjr} \hat{q}_r,$$

$$[\hat{\mathcal{J}}_k, \hat{p}_j] = i\hbar \varepsilon_{kjr} \hat{p}_r \Rightarrow \boxed{[\hat{\mathcal{J}}_k, \hat{\vec{p}}^{\,2}] = [\hat{\mathcal{J}}_k, \hat{\vec{q}}^{\,2}] = 0.}$$

Поэтому операторы $\hat{\mathcal{J}}_k$ — тоже интегралы движения: $i\hbar \dfrac{d\hat{\mathcal{J}}_k}{dt} = [\hat{\mathcal{J}}_k, \hat{H}] = 0.$

Однако из трёх интегралов движения $\hat{J}_i$ мы можем включить в полный набор с гамильтонианом $\hat{H}$ только какой-то <u>один</u> из них, поскольку операторы полного набора должны попарно <u>коммутировать</u> друг с другом.

$\boxed{\text{Зам.}}$ Вектор состояния $|n_1, n_2, n_3\rangle$ нумеруется собственными значениями трёх операторов "числа частиц":

$$\hat{N}_k = \hat{a}_k^+ \hat{a}_k, \quad 1 \le k \le 3.$$

Это, однако, не удобный набор с точки зрения экспериментальной реализации измерений отдельных $\hat{N}_k$. Кроме того, сохранение $\hat{N}_k$ по отдельности может нарушаться при включении взаимодействия осциллятора с другими системами.

В качестве третьего оператора полного набора возьмём оператор <u>квадрата углового</u> момента:

$$\hat{\vec{J}}^2 = \hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 + \hat{J}_3^2$$

Он коммутирует с любой компонентой $\hat{J}_i$: $[\hat{\vec{J}}^2, \hat{J}_i] = 0$, $1 \le i \le 3$, и, очевидно, $[\hat{H}, \hat{\vec{J}}^2] = 0$.

Зам. Оператор $\hat{J}^2$ – центральный элемент (оператор Казимира) универсальной обертывающей алгебры алгебры Ли, порождённой генераторами $\hat{J}_i$.

Нашей ближайшей задачей будет построение теории представлений алгебры углового момента эрмитовыми операторами. Мы выясним, какие собственные значения имеют операторы углового момента, какова размерность собственных подпространств и т. п.

Квантовая алгебра углового момента

Удобно перейти к "безразмерным" операторам углового момента $\hat{S}_i$:

$$\hat{J}_i =: \hbar \hat{S}_i \Rightarrow [\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\varepsilon_{ijk}\hat{S}_k.$$

Итак, будем считать, что операторы $\hat{S}_i$ реализованы как ~~эрмитовы~~ самосопряжённые операторы в некотором гильбертовом пространстве $\mathcal{V}$.

Будем считать, что в пространстве $\mathcal{V}$ существует нормируемый собственный вектор $|\lambda\rangle$ (возможно не единственный) оператора $\hat{S}_3$:

$$\boxed{\hat{S}_3|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle.}$$

В силу центральности элемента $\hat{\vec{S}}^2 = \hat{S}_1^2 + \hat{S}_2^2 + \hat{S}_3^2$ (дальше упростим обозначение $\hat{\vec{S}}^2 \equiv \hat{S}^2$), линейная оболочка всех собственных векторов $\hat{S}_3$ с одним и тем же собственным значением λ инвариантна относительно действия $\hat{S}^2$:

$$\hat{S}_3 \hat{S}^2 |\lambda\rangle = \hat{S}^2 \hat{S}_3 |\lambda\rangle = \lambda \hat{S}^2 |\lambda\rangle$$

В силу самосопряжённости $\hat{S}^2$ в этой инвариантной линейной оболочке найдётся собственный вектор оператора $\hat{S}^2$, который, тем самым, будет общим собственным вектором $\hat{S}_3$ и $\hat{S}^2$:

$$S_3 |\lambda, c\rangle = \lambda |\lambda, c\rangle, \quad \hat{S}^2 |\lambda, c\rangle = c\, |\lambda, c\rangle.$$

Введём линейные комбинации операторов $\hat{S}_1$ и $\hat{S}_2$: $\hat{S}_\pm = \hat{S}_1 \pm i \hat{S}_2$.

В силу самосопряжённости $\hat{S}_i$ и соотнош. алгебры углового момента имеем такие свойства:

$$\hat{S}_\pm^\dagger = \hat{S}_\mp, \quad [\hat{S}_3, \hat{S}_\pm] = \pm \hat{S}_\pm, \quad [\hat{S}_+, \hat{S}_-] = 2\hat{S}_3.$$

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_1^2 + \hat{S}_2^2 + \hat{S}_3^2 = \hat{S}_+ \hat{S}_- + \hat{S}_3^2 - \hat{S}_3 = \hat{S}_- \hat{S}_+ + \hat{S}_3^2 + \hat{S}_3.$$

Мы докажем, что в пространстве V существует конечномерное подпространство, инвариантное относительно действия $\hat{S}_3, \hat{S}_\pm, a \Rightarrow$ и относительно действия универсальной обертывающей $U(su(2))$, порожденной компонентами углового момента.

Докажем следующее утверждение.

$\boxed{У}$ Вектора $\hat{S}_\pm|\lambda, c\rangle$ — собственные вектора $\hat{S}_3$ с собств. значениями $\lambda \pm 1$.

Доказательство: $\hat{S}_3 \hat{S}_\pm |\lambda, c\rangle = ([\hat{S}_3, \hat{S}_\pm] + \hat{S}_\pm \hat{S}_3)|\lambda, c\rangle =$

$= (\pm \hat{S}_\pm + \hat{S}_\pm \hat{S}_3)|\lambda, c\rangle = (\lambda \pm 1)\hat{S}_\pm |\lambda, c\rangle$

Кроме того, $\hat{S}^2 \hat{S}_\pm |\lambda, c\rangle = c\,\hat{S}_\pm |\lambda, c\rangle$.

Таким образом, если $\hat{S}_\pm|\lambda, c\rangle \neq 0$, то мы получаем новые собств. вектора $\hat{S}_3$ с другими собственными значениями.

$\boxed{У}$ Собственное значение $c \geq 0$.

Доказательство: $\langle \lambda, c|\hat{S}^2|\lambda, c\rangle = c\,\||\lambda, c\rangle\|^2$

С другой стороны: $\langle \lambda, c|\hat{S}^2|\lambda, c\rangle = \sum_i \langle \lambda, c|\hat{S}_i^2|\lambda, c\rangle =$

$= \sum_i (\hat{S}_i|\lambda, c\rangle, \hat{S}_i|\lambda, c\rangle) = \sum_{i=1}^{3} \|\hat{S}_i|\lambda, c\rangle\|^2 \geq 0$

И т.к. $\||\lambda, c\rangle\|^2 > 0$, получаем $c \geq 0$.

IV Для $\forall$ собственного значения =13=
λ оператора $\hat{S}_3$ выполнено неравенство $\lambda^2 \leq C$

Доказательство:

$$\hat{S}^2 - \hat{S}_3^2 = \frac{1}{\hbar^2}\left(\hat{\mathcal{Y}}_1^2 + \hat{\mathcal{Y}}_2^2\right)$$

$$\langle \lambda, C | \hat{S}^2 - \hat{S}_3^2 | \lambda, C\rangle = (C - \lambda^2)\underbrace{\langle \lambda, C | \lambda, C\rangle}_{\| |\lambda, C\rangle \|^2}$$

$$\frac{1}{\hbar^2}\langle \lambda, C | \hat{\mathcal{Y}}_1^2 + \hat{\mathcal{Y}}_2^2 | \lambda, C\rangle = \frac{1}{\hbar^2}\left(\| \hat{\mathcal{Y}}_1 | \lambda, C\rangle \|^2 + \| \hat{\mathcal{Y}}_2 | \lambda, C\rangle \|^2\right) \geq 0$$

$$\Rightarrow \boxed{C - \lambda^2 \geq 0}$$

Заметим теперь, что действуя последовательно на $|\lambda, C\rangle$ оператором $\hat{S}_+$, мы получим последовательность векторов из $\mathcal{V}$, которые отвечают возрастающими на 1 собственным значением оператора $\hat{S}_3$

$$\hat{S}_+ |\lambda, C\rangle \sim |\lambda + 1, C\rangle$$
$$\hat{S}_+^2 |\lambda, C\rangle \sim |\lambda + 2, C\rangle$$
$$\dots$$

линейно независимые вектора.

$\Downarrow$

Чтобы сохранить неравенство
$$\lambda^2 \leq C$$

нужно потребовать, чтобы в ряду $|\lambda+k, c\rangle$ нашелся ненулевой вектор с максимальным собственным значением σ такой, что:

$$\hat{S}_+ |\sigma, c\rangle = 0$$

$$\hat{S}^2 |\sigma, c\rangle = c |\sigma, c\rangle$$

$$\hat{S}_3 |\sigma, c\rangle = \sigma |\sigma, c\rangle, \; \sigma^2 \leq c$$

Пользуясь связью $\hat{S}^2 = \hat{S}_- \hat{S}_+ + \hat{S}_3^2 + \hat{S}_3$

находим:

$$c |\sigma, c\rangle = \hat{S}^2 |\sigma, c\rangle = (\hat{S}_3^2 + \hat{S}_3) |\sigma, c\rangle = \sigma(\sigma+1) |\sigma, c\rangle$$

$$\boxed{c = \sigma(\sigma+1)} \geq 0$$

Будем теперь действовать на $|\sigma, c\rangle$ оператором $\hat{S}_-$. Аналогично предыдущему получим

$$\hat{S}_3 \hat{S}_-^k |\sigma, c\rangle = (\sigma - k) \hat{S}_-^k |\sigma, c\rangle -$$

– чтобы не было неограниченного роста вниз у собств. значений $\hat{S}_3$ (иначе опять нарушится $\lambda^2 \leq c$), должно существовать целое число $l \geq 0$ такое, что:

$$\hat{S}_-^l |\sigma, c\rangle \neq 0 \quad, \text{а} \quad \underline{\hat{S}_-^{l+1} |\sigma, c\rangle = 0}.$$

Обозначим вектор $\hat{S}_-^l |\sigma, c\rangle = |\mu, c\rangle \neq 0$.

Его свойства: $\hat{S}_3 |\mu, c\rangle = \mu |\mu, c\rangle$, где $\boxed{\mu = \sigma - l}$

Собственное число c оператора $\hat{S}^2$ выражается через μ:

$$c|\mu, c\rangle = \hat{S}^2 |\mu, c\rangle = (\underbrace{\hat{S}_+ \hat{S}_-}_{\to 0} + \hat{S}_3^2 - \hat{S}_3)|\mu, c\rangle =$$

$$= (\mu^2 - \mu)|\mu, c\rangle \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \mu(\mu - 1) = c = \sigma(\sigma + 1) \\ \mu = \sigma - l \end{cases} \Rightarrow \boxed{\boxed{2\sigma = l}} \geq 0. \quad \boxed{\mu = -\tfrac{l}{2}}$$

Таким образом, спектр оператора квадрата углового момента ~~пр~~ параметризуется неотрицательными <u>целыми</u> и <u>полуцелыми</u> числами σ. На соответствующих собственных векторах оператор $\hat{S}_3$ принимает значения от $-\sigma$ до σ с <u>шагом</u> 1, т.е., всего $2\sigma+1$ собственных значений.

Соберём теперь все результаты:

- Собственные значения оператора квадрата углового момента имеют вид

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

$s \in \{0, \frac{1}{2}, 1, \dots\}$ – целые и полуцелые неотрицательные числа.

- Собственные вектора оператора $\hat{S}^2$ с заданным s образуют $(2s+1)$-мерное подпространство $V_s \in V$.

- В подпространстве V_s существует „вектор старшего веса" $|s, s\rangle$ со свойствами

$$\hat{S}_3 |s, s\rangle = s|s, s\rangle$$

$$\hat{S}_+ |s, s\rangle = 0$$

- Вектора $|s-m, s\rangle = \alpha_m \hat{S}_-^m |s, s\rangle$ являются собств. векторами $\hat{S}_3$

$$\hat{S}_3 |s-m, s\rangle = (s-m)|s-m, s\rangle$$

$$0 \le m \le 2s.$$

и образуют ортонормированный базис пространства V_s (при подходящих α_m).

Последнее утверждение требует дополнительного доказательства того, что линейная оболочка векторов

$$|m,s\rangle \sim \hat{S}_-^{s-m}|s,s\rangle$$
$$-s \le m \le s$$

инвариантна относительно действия оператора $\hat{S}_+$ (относительно $\hat{S}_-$ и $\hat{S}_3$ она инвариантна по построению векторов $|m,s\rangle$). Кроме того, определим нормировочные множители a_m, чтобы была ортонормированность $\langle m,s|l,s\rangle = \delta_{ml}$.

$\boxed{У}$ Для $\forall m: -s \le m \le s-1$ $\hat{S}_+|m,s\rangle$ пропорционален $|m+1,s\rangle \sim \hat{S}_-^{s-m-1}|s,s\rangle$.

Таким образом, $2s+1$ мерное подпространство $V_s = \mathrm{Span}_{\mathbb{C}}\left(|m,s\rangle\right)_{-s\le m\le s}$ инвариантно относительно универсальной обертывающей алгебры $\mathcal{U}(su(2))$, порожденной операторами $\hat{S}_i$ (или, эквивалентно, $\hat{J}_i$).

<u>Доказательство</u>:

Пользуясь перестановочными соотношениями,

$$[\hat{S}_3, \hat{S}_\pm] = \pm \hat{S}_\pm \qquad [\hat{S}_+, \hat{S}_-] = 2\hat{S}_3$$

можно по индукции доказать ~~ну~~ полезное соотношение:

$$\boxed{[\hat{S}_+, \hat{S}_-^k] = 2k\hat{S}_-^{k-1}\hat{S}_3 - k(k-1)\hat{S}_-^{k-1}}.$$

Теперь мы можем получить нужное свойство инвариантности:

$$\hat{S}_+\hat{S}_-^k|s,s\rangle = \Big([\hat{S}_+, \hat{S}_-^k] + \underbrace{\hat{S}_-^k\hat{S}_+\Big)|s,s\rangle}_{=0} =$$

$\forall\ 0 \le k \le 2s$

$$= \left(2k\hat{S}_-^{k-1}\hat{S}_3 - k(k-1)\hat{S}_-^{k-1}\right)|s,s\rangle = (\star)$$

$$= \left(2ks - k(k-1)\right)\underline{\hat{S}_-^{k-1}|s,s\rangle}.$$

Этот результат означает, что спектр $\hat{S}_3$ в подпространстве V_s — невырожден.

Элементы $|m,s\rangle = \alpha_m\hat{S}_-^{s-m}|s,s\rangle$ ортогональны при разных m как собственные вектора эрмитового оператора $\hat{S}_3$ с разными собственными значениями.

Нормируем на 1 вектор старшего веса: $\langle s,s|s,s\rangle = 1$.

Пусть вектора $|m,s\rangle$ уже нормированы для $m\in\{s, s-1, \dots, m_0+1\}$. Найдём нормировку β_{m_0}: $|m_0, s\rangle = \beta_{m_0}\hat{S}_-|m_0+1, s\rangle$

Учитывая связь $\hat{S}_-^+ = \hat{S}_+$, получаем:

$$\langle m_0, s|m_0, s\rangle = |\beta_{m_0}|^2\langle m_0+1, s|\hat{S}_+\hat{S}_-|m_0+1, s\rangle.$$

Далее, мы знаем: $\hat{S}_+\hat{S}_- = \hat{S}^2 - \hat{S}_3^2 + \hat{S}_3$, поэтому

$$\langle m_0, s|m_0, s\rangle = |\beta_{m_0}|^2\left(s(s+1) - (m_0+1)^2 + (m_0+1)\right)\cdot \underbrace{\langle m_0+1, s|m_0+1, s\rangle}_{=1}$$

Таким образом, требование $\langle m_0, s|m_0, s\rangle = 1 \Rightarrow$

$$\Rightarrow \beta_{m_0} = e^{i\alpha}\frac{1}{\sqrt{(s-m_0)(s+m_0+1)}}$$

Фазы всех нормировочных множителей выберем нулевыми: $e^{i\alpha}\to 1$.

Итак: $|m,s\rangle = \dfrac{1}{\sqrt{(s-m)(s+m+1)}}\hat{S}_-|m+1, s\rangle \Rightarrow$

$\Rightarrow \langle m,s|l,s\rangle = \delta_{ml}$ если старший вектор $|s,s\rangle$ нормирован на единицу.

Кроме того, мы получили явный вид действие $\hat{S}_\pm$ и $\hat{S}_3$ на базисные вектора:

$$\boxed{\begin{aligned} \hat{S}_3|m,s\rangle &= m|m,s\rangle \\ \hat{S}_-|m,s\rangle &= \sqrt{(s+m)(s-m+1)}\,|m-1,s\rangle \end{aligned}}$$

$$\hat{S}_+|m,s\rangle = \hat{S}_+\left(\frac{\hat{S}_-|m+1,s\rangle}{\sqrt{(s-m)(s+m+1)}}\right) =$$

$$= \frac{\left(\hat{S}^2 - \hat{S}_3^2 + \hat{S}_3\right)}{\sqrt{(s-m)(s+m+1)}}|m+1,s\rangle = \frac{\left(s(s+1)-(m+1)^2+m+1\right)}{\sqrt{(s-m)(s+m+1)}}|m+1,s\rangle$$

$$= \sqrt{(s-m)(s+m+1)}\,|m+1,s\rangle$$

$$\boxed{\hat{S}_+|m,s\rangle = \sqrt{(s-m)(s+m+1)}\,|m+1,s\rangle.}$$

Эти формулы согласованы с крайними векторами:

$$\hat{S}_+|s,s\rangle = 0$$

$$\hat{S}_-|-s,s\rangle = 0.$$

Рассмотрим теперь координатное представление для частицы в центральном поле $V(|\vec{r}|)$ (трехмерный гармонический осциллятор как частный случай) и посмотрим, какие представления алгебры углового момента и как реализуются в пространстве $L_2[\mathbb{R}^3]$.

Итак, классической системе с гамильтонианом $$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(|\vec{r}|)$$

Сопоставим стационарное уравнение Шредингера на функции из $L_2(\mathbb{R})$ (на практике, естественно, $\psi(t, \vec{x})$ будет из $\mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$ — ∞ дифференцируемые быстро убывающие при $|\vec{x}| \to \infty$).

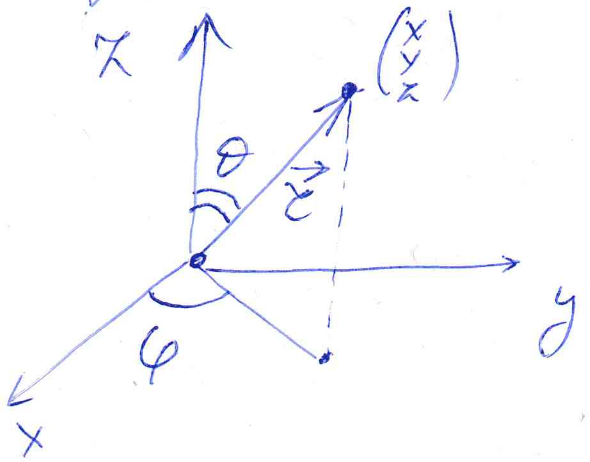
$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle, \quad p_k = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_k} \Rightarrow \hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i}\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix}$$

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi(\cancel{t}, \vec{x}) + V(r)\psi(\cancel{t}, \vec{x}) = E\psi(\cancel{t}, \vec{x})}$$

Здесь мы обозначили $r = |\vec{x}| = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2} = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$

Это дифференциальное уравнение в частных производных на $\psi(t, \vec{x})$.

В силу сферической симметрии потенциала $V(r)$ удобно перейти к сферическим координатам:



$$\begin{cases} x = r\sin\theta\cos\varphi \\ y = r\sin\theta\sin\varphi \\ z = r\cos\theta \end{cases}$$

$$0 \le \theta \le \pi$$
$$0 \le \varphi < 2\pi$$
$$0 \le r < \infty$$

$$r = \sqrt{x^2+y^2+z^2}$$

$$\psi(\vec{x}) \to \psi(r, \theta, \varphi)$$

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\Delta_{\theta,\varphi}$$

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

Вводя обозначение $\frac{2m}{\hbar^2}E = \mathcal{E}$

$$\frac{2m}{\hbar^2}V(r) = U(r),$$

преобразуем стационарное

~~hax~~ уравнение Шредингера к виду

$$\Delta \psi(\vec{x}) + (\mathcal{E} - U(r))\psi(\vec{x}) = 0$$

В сферических координатах:

$$\boxed{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\Delta_{\theta,\varphi}\psi + (\mathcal{E} - U(r))\psi = 0}$$

Зам. На решение уравнения Шредингера в сферических координатах будем накладывать дополнительные граничное условие $\lim\limits_{r \to 0} r\psi(r,\theta,\varphi) = 0$. ($\cancel{\star\star}$)

Можно показать, что уравнение в сферических координатах (определённое при $r > 0$) эквивалентно исходному уравнению Шредингера во всём $\mathbb{R}^3$ (включая начало координат), только с указанным условием в $r = 0$. ($\cancel{\star}$ A).

Это связано с тем, что "радиальная"

часть ~~уров~~ оператора Лапласа может быть представлена в виде квадрата дифференциального оператора

$$\hat{p}_r = \frac{1}{i}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} r = \frac{1}{i}\left(\frac{1}{r} + \frac{\partial}{\partial r}\right) \Rightarrow$$

$$-\hat{p}_r^2 = \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial r^2} = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r}\right)$$

Оператор $\hat{p}_r$ действует на функциях $\varphi(r)$ со скалярным произведением

$$(\varphi, \psi)_r = \int_0^\infty r^2 \bar{\varphi} \psi \, dr$$ ("радиальная" часть меры в сферических коорд. $r^2 \sin\theta \, d\varphi \, d\theta \, dr$)

Условие эрмитовости (симметричности)

$$(\hat{p}_r \varphi, \psi) = (\varphi, \hat{p}_r \psi)$$

приводит к равенству:

$$(\hat{p}_r \varphi, \psi) - (\varphi, \hat{p}_r \psi) = r^2 \bar{\varphi} \psi \Big|_0^\infty = 0.$$

Итак, $\hat{p}_r$ эрмитов на <u>подмножестве</u> функций $\lim\limits_{r \to 0} r\varphi = 0$.

Сопряжённый оператор $\hat{p}_r^+$ определён на более <u>широком</u> классе функций, например, таких, что $\lim\limits_{r\to 0} r\tilde{\varphi} = \mathrm{Const} \neq 0$.

Тогда равенство $(\hat{p}_r^+ \tilde{\varphi}, \psi) = (\tilde{\varphi}, \hat{p}_r \psi)$

выполнено, если ~~φ~~ только ψ удовлетворяет в $r=0$ условию (ΔΔ).

Обратимся к ~~[illegible]~~ угловой части оператора Лапласа.

Рассмотрим компоненты углового момента:

$$\hat{J}_x = \frac{\hbar}{i}\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right), \quad \hat{J}_y = \frac{\hbar}{i}\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)$$

$$\hat{J}_z = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

Перейдём к сферическим координатам:

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial \varphi} =$$

$$= \sin\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\cos\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin\varphi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \sin\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\sin\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos\varphi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$$\frac{\partial}{\partial z} = \cos\theta\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial}{\partial \theta}$$

Тогда компоненты углового момента записываются в виде:

$$\hat{S}_x = \frac{\hat{\mathcal{J}}_x}{\hbar} = i\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta} + i\cos\varphi\,\mathrm{ctg}\,\vartheta\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

$$\hat{S}_y = \frac{\mathcal{J}_y}{\hbar} = -i\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta} + i\sin\varphi\,\mathrm{ctg}\,\vartheta\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

$$\boxed{\hat{S}_z = \frac{\mathcal{J}_z}{\hbar} = \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}, \quad \hat{S}_\pm = \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y = e^{\pm i\varphi}\left(\pm\frac{\partial}{\partial\vartheta} + i\,\mathrm{ctg}\,\vartheta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)}$$

$\boxed{\text{У}}$ $\hat{S}^2 = \frac{\hat{\mathcal{J}}^2}{\hbar^2} = -\Delta_{\vartheta,\varphi}$ (простое вычисление на основе формул).

Итак, угловая часть $\Delta_{\vartheta,\varphi}$ оператора Лапласа пропорциональна оператору квадрата момента импульса в координатном представлении.

Оператор квадрата углового момента – – интеграл движения для частицы в центральном потенциале: $[\hat{\mathcal{J}}^2, \hat{H}] = 0$.

Поэтому решения стационарного уравнения Шредингера:

$$\hat{H}\Psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r)\right)\Psi = E\Psi$$

$$\left(\hat{P}_r^2 + \frac{\hat{S}^2}{r^2}\right)\Psi + (U(r) - \varepsilon)\Psi = 0$$

будем искать среди собственных функций оператора $\hat{S}^2 = -\Delta_{\vartheta,\varphi}$.

Поскольку $\Delta_{\theta,\varphi}$ зависит только от угловых переменных, то общее решение уравнения Шредингера (см. стр. =23=) будем искать в виде:

$$\Psi(r,\theta,\varphi) = \Phi(r)\, Y_l^m(\theta,\varphi),$$

где $Y_m^l(\theta,\varphi)$ – собственные ф-ции оператора $-\Delta_{\theta,\varphi}$:

$$-\Delta_{\theta,\varphi} Y_l^m = \hat{S}^2 Y_l^m = l(l+1)\, Y_l^m$$

$$\hat{S}_3 Y_l^m(\theta,\varphi) = \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi} Y_l^m(\theta,\varphi) = m\, Y_l^m$$

Функции $Y_l^m(\theta,\varphi)$ должны быть непрерывны в пространстве $\mathbb{R}^3$, а $\Rightarrow$ 2π-периодичны по угловой координате φ:

$$Y_l^m(\theta,\varphi+2\pi) = Y_l^m(\theta,\varphi).$$

Решение уравнения $\hat{S}_3 Y_l^m = m\, Y_l^m$ имеет следующий вид:

$$Y_l^m(\theta,\varphi) = e^{im\varphi} P_l^m(\theta) \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

нормировка по φ.

с пока произвольной функцией $P_l^m(\theta)$.

Условие 2π-периодичности по φ

означает $\exp(im(\varphi+2\pi)) = \exp(im\varphi)$ ~~28~~ = 28 =

$\Rightarrow$ m — <u>целое</u> число $\Rightarrow$ l — <u>тоже</u> <u>целое</u>: $m \in \{-l, -l+1, \dots, l-1, l\}$.

Итак в координатном представлении в $L_2[\mathbb{R}^3]$ для алгебры операторов момента импульса $\hat{J}_i = \varepsilon_{ijk}\hat{q}_j\hat{p}_k$ (так называемый <u>орбитальный</u> угловой момент) реализуются только представления с <u>целым</u> квантовым числом s из спектра $\hat{S}^2$: $s = l \in \{0, 1, 2, \dots\}$.

Нормированные на 1 собственные функции $Y_l^m(\theta,\varphi)$ — квадратично-интегрируемые на сфере единичного радиуса

$$\langle Y_{l_1}^{m_1}, Y_{l_2}^{m_2} \rangle = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta \cdot \overline{Y}_{l_1}^{m_1}(\theta,\varphi) Y_{l_2}^{m_2}(\theta,\varphi) d\theta = \delta_{l_1 l_2} \delta^{m_1 m_2}.$$

называются <u>сферическими функциями</u> и образуют полную ортонормированную систему в пространстве квадратично-интегрируемых функций на единичной сфере.

Для определения вида функции $P_l^m(\theta)$ необходимо решить уравнение

$$-\Delta_{\theta,\varphi} Y_l^m = l(l+1) Y_l^m$$

при $Y_l^m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} P_l^m(\theta)$.

Учитывая явный вид $\Delta_{\theta,\varphi}$, получаем уравнение на $P_l^m(\theta)$:

$$\boxed{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}P_l^m(\theta)\right) + \left(l(l+1) - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)P_l^m(\theta) = 0}$$

Решение этого уравнения — так называемые присоединённые функции Лежандра.

Рассмотрим функцию "старшего веса", когда $m = l$: $Y_l^l = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{il\varphi} P_l^l(\theta)$.

Эту функцию легко найти из более простого условия $\hat{S}_+ Y_l^l = 0$:

$$e^{i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\,\mathrm{ctg}\,\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)Y_l^l = 0$$

$$\Downarrow$$

$$\frac{\partial}{\partial\theta}P_l^l(\theta) = l\,\mathrm{ctg}\,\theta\,P_l^l(\theta)$$

$$\Downarrow$$

$$\boxed{P_l^l(\theta) = C_l \sin^l\theta}$$

Множитель C_l определим из условия нормировки $Y_l^l(\theta,\varphi)$:

$$1 = \langle Y_l^l, Y_l^l \rangle = \int_0^{\pi} \sin\theta\, d\theta \left(\int_0^{2\pi} \bar{Y}_l^l Y_l^l\, d\varphi \right) =$$

$$= |C_l|^2 \int_0^{\pi} \sin\theta \sin^{2l}\theta\, d\theta = \{ x = \cos\theta \} = 2|C_l|^2 \int_0^1 (1-x^2)^l dx =$$

$$= \{ x^2 = t \} = |C_l|^2 \int_0^1 t^{-1/2} (1-t)^l dt = |C_l|^2 B\left(\tfrac{1}{2}, l+1\right)$$

$$B\left(\tfrac{1}{2}, l+1\right) = \frac{\Gamma(1/2)\Gamma(l+1)}{\Gamma(l+\frac{3}{2})} = \frac{l!\, 2^{l+1}}{(2l+1)!!} = \frac{(l!)^2 2^{2l+1}}{(2l+1)!}$$

$$\Rightarrow \boxed{C_l = \frac{1}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{2}}}\,.$$

Остальные ф-ции можно найти последовательным действием $\hat{S}_- = e^{-i\varphi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta} + i\operatorname{ctg}\theta \frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$:

$$\hat{S}_- Y_l^m = \sqrt{(l+m)(l-m+1)}\, Y_l^{m-1}$$

Несколько первых Y_l^m имеют вид:

$l = 0$: $Y_0^0 = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$

$l = 1$: $Y_1^1 = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{i\varphi} \sin\theta$, $Y_1^0 = -\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta$

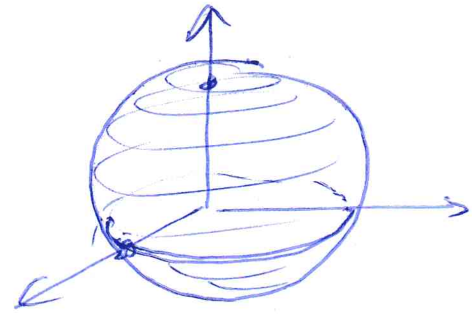
$Y_1^{-1} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{-i\varphi} \sin\theta$

$l = 2$: $Y_2^2 = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} e^{2i\varphi} \sin^2\theta$, $Y_2^1 = -\sqrt{\frac{15}{32\pi}} e^{i\varphi} \sin 2\theta$;

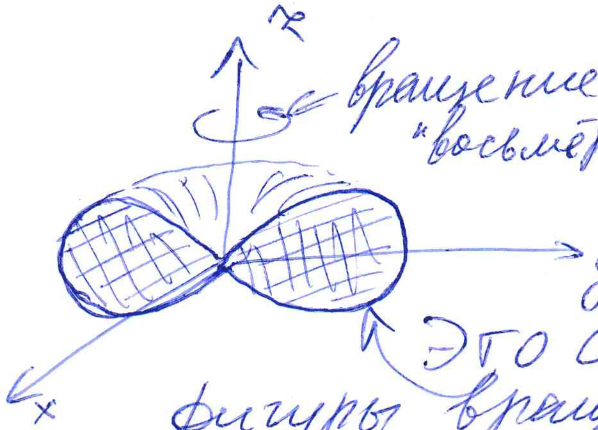
$Y_2^0 = \sqrt{\frac{15 \cdot 3}{16\pi}} \left(\frac{2}{3} - \sin^2\theta\right)$; ......

Нарисуем схематично области в пространстве $\mathbb{R}^3$, задаваемые условием $0 \le |\vec{x}| \le |Y_l^m|$. Для малых l получим следующее:

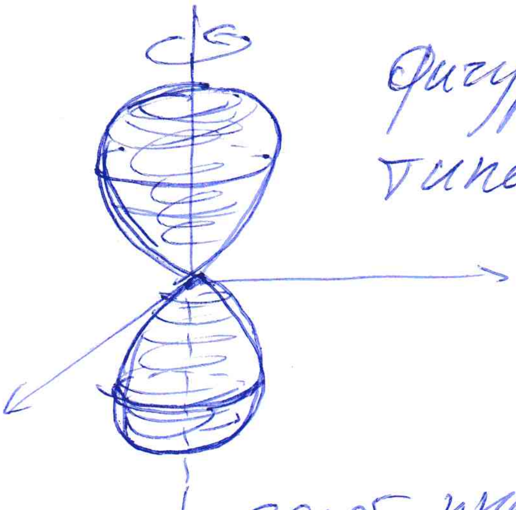
$l=0$, $Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$:



$l=1$ $\quad Y_1^1$ и Y_1^{-1}



Y_1^0:



Зам. Эти фигуры дают представление о конфигурации "электронных облаков" в атомных оболочках.