

## КИНЕМАТИЧЕСКИЙ ПОСТУЛАТ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

1. Первая формула современной квантовой теории была опубликована в 1895 году, когда Бальмер показал, что частоты линий излучения водорода можно перечислить парой целых чисел

$$\omega = \omega(m, n) = R\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right).$$

Правда, сам Бальмер проверил эту формулу лишь для четырех линий, соответствующих значениям  $m = 2$  и  $n = 3, 4, 5, 6$ , и даже сомневался в том, можно столь же просто описать излучение сложных атомов. Однако, уже в 1908 году Ритц, обобщая огромный экспериментальный материал, сформулировал известный *комбинационный принцип*, из которого, в частности следовало, что *частоту любой линии излучения любого атома можно представить как разность значений некоторой функции, вычисленной в целочисленных точках*:

$$\omega(m, n) = F(m) - F(n) = \omega_m - \omega_n.$$

Удобнее всего представить эту формулу как *закон композиции частот*:

$$\omega(m, l) + \omega(l, n) = \omega(m, n), \quad \omega(n, n) = 0. \quad (1)$$

Справедливость комбинационного принципа как точного закона природы означает, что экспериментальное изучение излучения атомов предоставляет в распоряжение физиков набор функций  $A_{mn}e^{i\omega(mn)t}$ . Это обстоятельство позволяет связать с каждой величиной  $A$ , относящейся к электромагнитному полю, *представляющий ее набор*

$$A \iff \{\hat{A} = (A_{mn}), \quad \omega(m, n)\}, \quad (2)$$

в котором частоты удовлетворяют условию (1).

Если считать, что этот набор сопоставлен с величиной  $A$  в начальный момент времени  $t = 0$ , то величине  $A(t)$  соответствует набор

$$A(t) \iff \{\hat{A}(t) = (A_{mn}e^{i\omega(m, n)t}), \quad \omega(m, n)\}. \quad (3)$$

Однако одного только сопоставления физических величин с их представителями для теории недостаточно. Задачей физики является выявление функциональных связей между наблюдаемыми величинами. При этом естественно возникает следующая задача: пусть в момент  $t = 0$  измерены величины  $G$  и  $F$ , и оказалось, что  $G$  зависит от  $F$  вполне определенным образом:

$$G = g(F).$$

Как связаны друг с другом величины  $G(t)$  и  $F(t)$ ? Поскольку эволюция не должна изменять вида функциональной зависимости, должно выполняться соотношение

$$G(t) = g(F(t)).$$

На языке представителей это означает следующее. Если

$$F \iff \{\hat{F} = (F_{mn}), \quad \omega(m, n)\},$$

$$G \iff \{\hat{G} = (g(F)_{mn}), \quad \omega(m, n)\},$$

то должны выполняться соотношения

$$F(t) \iff \{\hat{F}(t) = (F_{mn}e^{i\omega(m, n)t}), \quad \omega(m, n)\},$$

$$G(t) \iff \{\hat{G}(t) = (g(F(t))_{mn}) = (g(F)_{mn}e^{i\omega(m, n)t}), \quad \omega(m, n)\}.$$

Эти условия будут выполнены, если под совокупностью величин

$F_{mn}, F_{mn}(t)$  и  $G_{mn}, G_{mn}(t)$  понимать матрицы, связанные равенствами

$$\hat{G}_{mn} = g(\hat{F})_{mn}, \quad \hat{G}(t)_{mn} = g(\hat{F}(t))_{mn}.$$

Рассмотрим, например, простейшую функцию, когда  $G = F^2$ . В этом случае

$$G_{mn} = \sum_l F_{ml} F_{ln},$$

а

$$G_{mn}(t) = \sum_l F_{ml}(t) F_{ln}(t) = \sum_l F_{ml} e^{i\omega(m,l)t} F_{ln} e^{i\omega(l,n)t}.$$

Поскольку

$$\omega(m, l) + \omega(l, n) = \omega(m, n),$$

то

$$G_{mn}(t) = \left( \sum_l F_{ml} F_{ln} \right) e^{i\omega(m,n)t} = G_{mn} e^{i\omega(m,n)t}.$$

Итак, справедливость комбинационного принципа требует пересмотра кинематических понятий классической физики, точнее говоря, если считать комбинационный принцип точным законом природы, то в математическом аппарате, описывающем электромагнитные явления, физическим величинам должны ставиться в соответствие матрицы, а функциям этих величин – соответствующие матричные функции.

**2.** Что изменится в наших рассуждениях, если в рассматриваемую систему будут включены, кроме электромагнитного поля, и взаимодействующие с ним частицы?

Одним из главных достоинств электродинамики Максвелла-Лоренца было понятие об ускоренном движении заряженных частиц, как причине электромагнитного излучения. Это означает, в частности, что исследуя излучение системы финитно движущихся зарядов можно сделать вполне определенные выводы о характере движения порождающих электромагнитное поле частиц. В 1925 году Гайзенберг сформулировал утверждение о том, что на атомном уровне излучение является единственным источником знаний о движении электронов. Поэтому математический аппарат, описывающий поведение электронов в атомах, должен быть основан на тех же кинематических понятиях, которые определены при описании электромагнитного поля. Итак, если справедлив закон композиции частот (1), то с каждой динамической переменной физической системы следует сопоставить некоторую матрицу, а функции, связывающие различные величины должны пониматься как матричные функции.

## УРАВНЕНИЯ ГАЙЗЕНБЕРГА

Для дальнейшего существенно, что матрицы  $\hat{F}(t)$ , определяющие зависимость переменной  $F$  от времени, можно получить как решение некоторого дифференциального уравнения. Для этого вернемся к формуле

$$F_{mn}(t) = F_{mn} e^{i\omega(m,n)t} = e^{i\omega_m t} F_{mn} e^{-i\omega_n t}$$

и продифференцируем обе ее части по времени:

$$\frac{dF_{mn}(t)}{dt} = i\omega_m F_{mn}(t) - iF_{mn}(t)\omega_n.$$

Если определить диагональную матрицу

$$\mathcal{H}_{mn} = \hbar\omega_m \delta_{mn},$$

то предыдущую формулу можно записать в форме

$$\frac{dF_{mn}}{dt} = \frac{i}{\hbar} \sum_l (\mathcal{H}_{ml} F_{ln} - F_{ml} \mathcal{H}_{ln}).$$

Удобно определить коммутатор матриц  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$ :

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}. \quad (4)$$

Тогда выражению для производной матрицы  $\hat{F}$  можно придать вид:

$$\frac{d\hat{F}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}, \hat{F}(t)]. \quad (5)$$

Если матрица  $\hat{\mathcal{H}}$  задана, то выражение (5) можно считать уравнением движения переменной  $F$ . Поскольку (5) – уравнение первого порядка по времени, то его решение полностью определяется начальным условием  $\hat{F}(0)$ .

Матричные элементы матрицы  $\hat{\mathcal{H}}$  имеют размерность энергии, поэтому в дальнейшем она будет отождествляться с энергией системы и называться гамильтонианом.

Правда, пока эта величина мало напоминает функцию Гамильтона классической механики. В классической механике функция Гамильтона позволяет найти важнейшую характеристику системы – энергию – по начальным данным. Здесь же для задания гамильтониана требуются значения возможных частот системы  $\{\omega_n\}$ , т.е. то, что предстоит узнать. Чтобы приблизить квантовый гамильтониан к функции Гамильтона, нужно, прежде всего, снять условие диагональности матрицы  $\hat{\mathcal{H}}$ . Для этого возьмем неособенную матрицу  $\hat{S}$ , т.е. такую, для которой существует обратная матрица  $\hat{S}^{-1}$ :

$$\hat{S}\hat{S}^{-1} = \hat{S}^{-1}\hat{S} = \hat{E}.$$

Определив величины

$$\hat{F}'(t) = \hat{S}\hat{F}(t)\hat{S}^{-1}, \quad \hat{\mathcal{H}}' = \hat{S}\hat{\mathcal{H}}\hat{S}^{-1},$$

найдем, что они удовлетворяют уравнению, повторяющему уравнение (5):

$$\frac{d\hat{F}'}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}', \hat{F}'(t)].$$

Поскольку справедливы равенства

$$\hat{F} = \hat{S}^{-1}\hat{F}'\hat{S}, \quad \hat{\mathcal{H}} = \hat{S}^{-1}\hat{\mathcal{H}}'\hat{S},$$

то штрихованные и нештрихованные матрицы взаимно однозначно определяют друг друга. Уравнения для штрихованных величин отличаются от уравнений для нештрихованных лишь тем, что  $\hat{\mathcal{H}}'$  не обязательно диагональная матрица.

Удобно не оговаривать заранее, с какими именно величинами мы имеем дело, а просто писать уравнения движения в форме (5), заметив, что они ковариантны относительно преобразования всех матриц

$$\hat{A} \Rightarrow \hat{A}' = \hat{S}^{-1}\hat{A}\hat{S}.$$

После этого в качестве гамильтониана можно взять нужную функцию динамических переменных системы –  $\hat{\mathcal{H}}(\hat{Q})$ . Уравнения (5) были получены в 1925 году Гайзенбергом и называются уравнениями Гайзенберга.

В классической механике материальная точка с одной степенью свободы описывается, например, каноническими переменными – импульсом  $P$  и координатой  $Q$ . Сохраняя понятие о степенях свободы в квантовой механике, определим материальную точку как систему, свойства которой описываются соответствующими матрицами  $\hat{q}$  и  $\hat{p}$ . Однако, эти величины еще надо определить. Это сделал Гайзенберг в 1925 году. Правда, в своей классической работе он даже не упоминал о матрицах, однако, мы будем придерживаться современных (но пока не самых современных) обозначений. Определим координату и импульс как эрмитовы матрицы

$$\hat{q} = \hat{q}^+, \quad \hat{p} = \hat{p}^+, \quad (6a)$$

удовлетворяющие перестановочным соотношениям

$$[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar\hat{E}. \quad (6b)$$

Из соотношений (6b) немедленно вытекают формулы

$$[\hat{q}, \hat{p}^n] = i\hbar n\hat{p}^{n-1}, \quad [\hat{q}^n, \hat{p}] = i\hbar n\hat{q}^{n-1}$$

и более общие равенства

$$[\hat{q}, F(\hat{p})] = i\hbar F'(\hat{p}), \quad [G(\hat{q}), \hat{p}] = i\hbar G'(\hat{q}).$$

Взяв гамильтониан в виде

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

получим такие уравнения движения

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{q}}{dt} &= \frac{i}{\hbar}[\hat{\mathcal{H}}, \hat{q}] = \frac{1}{m}\hat{p} = \frac{\partial\hat{\mathcal{H}}}{\partial\hat{p}}, \\ \frac{d\hat{p}}{dt} &= \frac{i}{\hbar}[\hat{\mathcal{H}}, \hat{p}] = V'(\hat{q}) = -\frac{\partial\hat{\mathcal{H}}}{\partial\hat{q}}. \end{aligned}$$

Формально уравнения Гайзенберга выглядят как матричная версия уравнений Гамильтона. Приведем два примера решения уравнений Гайзенберга.

### 1. Свободная частица.

Гамильтониан в этом случае равен

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2,$$

поэтому

$$\frac{d\hat{q}}{dt} = \frac{1}{m}\hat{p}, \quad \frac{d\hat{p}}{dt} = 0.$$

Решения уравнений Гайзенберга имеют вид

$$\hat{p} = \hat{A}, \quad \hat{q} = \frac{1}{m}\hat{A}t + \hat{B},$$

где  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  – постоянные интегрирования. Чтобы удовлетворить начальным условиям, их следует выбрать в форме

$$\begin{aligned} \hat{A} &= \hat{q}, & \hat{B} &= \hat{p}, \\ \hat{q}^+ &= \hat{q}, & \hat{p}^+ &= \hat{p}, & [\hat{q}, \hat{p}] &= i\hbar\hat{E}. \end{aligned}$$

Таким образом решения уравнений Гайзенберга повторяют классические формулы с заменой классических переменных на соответствующие матрицы:

$$\hat{p}(t) = \hat{p}, \quad \hat{q}(t) = \frac{1}{m}\hat{p}t + \hat{q}.$$

Матрицы  $\hat{q}(t)$ ,  $\hat{p}(t)$  удовлетворяют перестановочным соотношениям:

$$[\hat{q}(t), \hat{p}(t)] = i\hbar \hat{E}.$$

## 2. Гармонический осциллятор.

Гамильтониан гармонического осциллятора равен

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{q}^2,$$

поэтому

$$\frac{d\hat{q}}{dt} = \frac{1}{m} \hat{p}, \quad \frac{d\hat{p}}{dt} = -m\omega^2 \hat{q}.$$

Эту систему можно, как обычно, свести к уравнению второго порядка:

$$\frac{d^2 \hat{q}}{dt^2} + \omega^2 \hat{q} = 0.$$

Решением этого уравнения является матрица

$$\hat{q}(t) = \hat{C}_1 \cos \omega t + \hat{C}_2 \sin \omega t,$$

а  $\hat{p}(t)$  получаются из  $\hat{q}(t)$  дифференцированием:

$$\hat{p}(t) = m \frac{d\hat{q}}{dt} = -m\omega \hat{C}_1 \sin \omega t + m\omega \hat{C}_2 \cos \omega t.$$

В этих формулах  $\hat{C}_1$ ,  $\hat{C}_2$  – постоянные матрицы, определяемые начальными условиями:

$$\hat{C}_1 = \hat{q}(0), \quad \omega \hat{C}_2 = (\hat{p} dt)_0 = \frac{1}{m} \hat{p}, \quad [\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar \hat{E}.$$

Это приводит к формулам

$$\begin{aligned} \hat{q}(t) &= \hat{q} \cos \omega t + \frac{1}{m\omega} \hat{p} \sin \omega t, \\ \hat{p}(t) &= -m\omega \hat{q} \sin \omega t + \hat{p} \cos \omega t. \end{aligned}$$

Коммутатор матриц  $\hat{q}(t)$ ,  $\hat{p}(t)$  не изменяется во времени.

## 3. Уровни энергии гармонического осциллятора.

В 1925 году Гайзенберг использовал уравнения движения для вычисления уровней энергии гармонического осциллятора. Ниже будут, с некоторыми изменениями обозначений, воспроизведены соответствующие формулы.

Удобно перейти к матрицам, аналогичным классическим комплексным амплитудам. Выберем постоянные  $q_0$ ,  $p_0$ , связанные соотношениями

$$q_0 p_0 = \hbar,$$

и определим матрицы

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{\hat{q}}{q_0} + i \frac{\hat{p}}{p_0} \right), \quad \hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{\hat{q}}{q_0} - i \frac{\hat{p}}{p_0} \right).$$

Коммутатор этих матриц равен

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = \hat{E}.$$

В случае гармонического осциллятора в качестве  $q_0$  и  $p_0$  можно взять величины

$$q_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \quad p_0 = \sqrt{\hbar m \omega}.$$

Подставляя в формулы для  $\hat{a}, \hat{a}^+$  зависящие от времени матрицы  $\hat{q}(t), \hat{p}(t)$ , нетрудно получить уравнения

$$\frac{d\hat{a}}{dt} = -i\omega\hat{a}, \quad \frac{d\hat{a}^+}{dt} = i\omega\hat{a}^+,$$

решения которых имеют вид

$$\hat{a}(t) = \hat{a}e^{-i\omega t}, \quad \hat{a}^+(t) = \hat{a}^+e^{i\omega t}.$$

Соотношения

$$\hat{q} = \frac{q_0}{\sqrt{2}}(\hat{a} + \hat{a}^+), \quad \hat{p} = \frac{p_0}{i\sqrt{2}}(\hat{a} - \hat{a}^+)$$

позволяют представить гамильтониан гармонического осциллятора в форме

$$\hat{\mathcal{H}} = \omega\hbar(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2}\hat{E}).$$

После этого уравнения Гайзенберга для матриц  $\hat{a}, \hat{a}^+$

$$\frac{d\hat{a}}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{\mathcal{H}}, \hat{a}], \quad \frac{d\hat{a}^+}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{\mathcal{H}}, \hat{a}^+]$$

можно превратить в систему линейных однородных уравнений для матричных элементов этих матриц.

Прежде чем заниматься вычислениями, примем более удобные обозначения матриц. Матричные элементы матрицы  $\hat{A}$ , которые обычно обозначаются как  $A_{mn}$  теперь будут обозначаться другим символом:

$$A_{mn} \Rightarrow \langle m|\hat{A}|n\rangle.$$

После этого вычисления с матрицами приобретают автоматизм, например, формула произведения матриц выглядит так:

$$\langle m|\hat{A}\hat{B}|n\rangle = \sum_l \langle m|\hat{A}|l\rangle \langle l|\hat{B}|n\rangle.$$

В новых обозначениях матричное равенство

$$-\hbar\omega\hat{a} = [\hat{\mathcal{H}}, \hat{a}]$$

в покомпонентной записи принимает форму

$$-\omega\hbar\langle m|\hat{a}|n\rangle = \langle m|[\hat{\mathcal{H}}, \hat{a}]|n\rangle$$

Если матрица  $\hat{\mathcal{H}}$  диагональна:

$$\langle m|\hat{\mathcal{H}}|n\rangle = E_m\delta_{mn},$$

то справедливы соотношения

$$\langle m|[\hat{\mathcal{H}}, \hat{a}]|n\rangle = (E_m - E_n)\langle m|\hat{a}|n\rangle.$$

Таким образом получаются уравнения

$$-\omega\hbar\langle m|\hat{a}|n\rangle = (E_m - E_n)\langle m|\hat{a}|n\rangle.$$

Полученные равенства могут быть удовлетворены в двух случаях:

$$E_n = E_m + \hbar\omega \quad \langle m|\hat{a}|n\rangle = 0.$$

Договоримся нумеровать уровни энергии так, чтобы их значения монотонно возрастали с увеличением номера уровня. В этом случае уровни энергии осциллятора можно перечислить формулой

$$E_n = E_0 + \hbar\omega n, \quad n = 0, 1, 2, \dots,$$

где  $E_0$  пока произвольно. Отличные от нуля матричные элементы матрицы  $\hat{a}$  равны

$$\langle n-1|\hat{a}|n\rangle = a_n, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Аналогично, отличные от нуля матричные элементы  $\hat{a}^+$  равны

$$\langle n|\hat{a}^+|n-1\rangle = a_n^*, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Значения чисел  $a_n$  можно получить, учитывая явно перестановочное соотношение между  $\hat{a}$  и  $\hat{a}^+$ :

$$\langle m|\hat{E}|n\rangle = \langle m|[\hat{a}, \hat{a}^+]|n\rangle = |a_{m+1}|^2 \delta_{m+1, n+1} - |a_m|^2 \delta_{m-1, n-1} = (|a_{m+1}|^2 - |a_m|^2) \delta_{mn}.$$

Это приводит к уравнениям в конечных разностях

$$|a_{m+1}|^2 = |a_m|^2 + 1$$

с начальным условием  $a_0 = 0$ . Если считать числа  $a_n$  действительными, то

$$a_n = \sqrt{n}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

В результате получается такая формула для отличных от нуля матричных элементов матриц  $\hat{a}, \hat{a}^+$ :

$$\langle m|\hat{a}|n\rangle = \delta_{m, n-1} \sqrt{n}, \quad \langle m|\hat{a}^+|n\rangle = \delta_{m, n+1} \sqrt{n+1}.$$

Теперь можно найти значение  $E_0$ :

$$E_0 = \langle 0|\hat{\mathcal{H}}|0\rangle = \hbar\omega\left(\frac{1}{2} + \sum_l^{\infty} \langle 0|\hat{a}^+|l\rangle \langle l|\hat{a}|0\rangle\right).$$

Поскольку матричные элементы  $\langle 0|\hat{a}^+|l\rangle, \langle l|\hat{a}|0\rangle, l \geq 0$  равны нулю, то уровни энергии гармонического осциллятора перечисляются формулой

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right).$$

## КАНОНИЧЕСКИЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ. ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ

Оба примера решений уравнений Гайзенберга демонстрируют неизменность во времени перестановочных соотношений между импульсом и координатой. Это является прямым следствием структуры решений уравнения Гайзенберга: если гамильтониан системы не зависит от времени явно, то решения уравнений Гайзенберга имеют вид:

$$\hat{F}(t) = \hat{S}(t) \hat{F} \hat{S}^{-1},$$

где

$$\hat{S}(t) = \exp\left(i \frac{\hat{\mathcal{H}}t}{\hbar}\right).$$

Эрмитово сопряженная матрица  $\hat{S}(t)^+$  совпадает с матрицей  $\hat{S}(t)^{-1}$ :

$$\hat{S}(t)^+ \hat{S}(t) = \hat{S}(t) \hat{S}(t)^+ = \hat{E}.$$

Матрицы с таким свойством называют **унитарными**.

## СООТНОШЕНИЯ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТЕЙ

Хотя уравнения Гайзенберга для систем, динамические переменные которых имеют классический, пока трудно судить о степени близости новой теории и классической, хотя бы потому что пока мы не знаем как можно связать с квантовыми динамическими переменными числа, которые можно было бы сравнивать с экспериментальными данными.

Иначе говоря, пока мы имеем дело с такой цепочкой сопоставлений:

$$\text{Величина } F \Rightarrow \text{матрица } \hat{F},$$

а для построения законченной физической теории ее нужно дополнить до цепочки

$$\text{Величина } F \Rightarrow \text{матрица } \hat{F} \Rightarrow \text{число } f.$$

В 1927 году фон-Нейман заметил, что для сравнения теории с экспериментом эту цепочку можно заменить, более определенной и менее обременительной:

$$\text{Величина } F \Rightarrow \text{матрица } \hat{F} \Rightarrow \text{число } \langle F \rangle - \text{среднее значение } F.$$

Чтобы реализовать эту программу, нужно определить чисто математическую **процедуру вычисления**

**средних значений.** Фон-Нейман потребовал, чтобы она удовлетворяла четырем условиям.

1) Среднее значение постоянной величины должно быть равно значению этой величины. В частности, среднее значение единицы должно быть равно единице.

Это условие можно сформулировать так:

$$\langle \hat{E} \rangle = 1.$$

2) Среднее значение суммы равно сумме средних:

$$\langle \sum_i \hat{F}_i \rangle = \sum_i \langle \hat{F}_i \rangle.$$

3) Средние значения комплексно сопряженных величин комплексно сопряжены.

Это условие следует дополнить соглашением о том, как связать в математическом аппарате квантовой механике комплексно сопряженные величины. Считают, что если величине  $F$  соответствует матрица  $\hat{F}$ , то величине  $F^*$  соответствует эрмитово сопряженная матрица  $\hat{F}^+$ :

$$F \Rightarrow \hat{F} \Leftrightarrow F^* \Rightarrow \hat{F}^+.$$

Очевидно, что с действительной величиной сопоставляется самосопряженная матрица.

С учетом этого соглашения условие фон-Неймана можно выразить формулой

$$\langle \langle \hat{F} \rangle \rangle^* = \langle \hat{F}^+ \rangle.$$

4) Среднее значение неотрицательной величины неотрицательно.

$$F \geq 0 \Rightarrow \langle \hat{F} \rangle \geq 0.$$

Фон-Нейман показал, что приведенные выше условия позволяют получить явную формулу вычисления средних значений любой величины, связанной с квантово механической системой.

Полезно, отложив реализацию программы фон-Неймана, рассмотреть принципиальные следствия предложенной им процедуры.

Вспомним, что степень размытости значений произвольной величины в теории вероятностей характеризуется значением **дисперсией этой величины.**

$$D(\hat{F}) = \langle \hat{F}^2 \rangle - \left( \langle \hat{F} \rangle \right)^2 = \langle (\hat{F} - \langle \hat{F} \rangle \hat{E})^2 \rangle.$$



Поскольку средние значения действительной величины действительны, то дисперсия действительной величины неотрицательна. Формула для дисперсии подсказывает полезность приведенных величин вида  $\hat{F} - \langle \hat{F} \rangle \hat{E}$ , которые удовлетворяют тем же перестановочным соотношениям, что и первоначальные.

В случае материальной точки с одной степенью свободы удобно определить матрицы

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

Эти матрицы эрмитовы, а коммутатор их пропорционален единичной матрице:

$$[\hat{Q}, \hat{P}] = i\hbar \hat{E}.$$

Если при произвольном действительном  $\alpha$  (заметим, что  $\alpha$  – размерная величина) определить переменную

$$\hat{T} = \alpha \hat{Q} + i\hat{P},$$

то произведение  $\hat{T}^+ \hat{T}$  будет неотрицательной величиной, поэтому должно выполняться неравенство

$$G(\alpha) = \langle \hat{T}^+ \hat{T} \rangle \geq 0.$$

Раскрывая скобки в произведении, получим

$$G(\alpha) = \alpha^2 \langle \hat{Q}^2 \rangle + \langle \hat{P}^2 \rangle + i\alpha \langle (\hat{Q}\hat{P} - \hat{P}\hat{Q}) \rangle = \alpha^2 \langle \hat{Q}^2 \rangle + \langle \hat{P}^2 \rangle - \alpha \hbar \langle \hat{E} \rangle \geq 0.$$

Функция  $G(\alpha)$  достигает минимума в точке

$$\alpha_0 = \frac{\hbar}{2\langle \hat{Q}^2 \rangle},$$

поэтому справедливо неравенство

$$G(\alpha_0) = \langle \hat{P}^2 \rangle - \frac{\hbar^2}{4\langle \hat{Q}^2 \rangle} \geq 0.$$

Остается заметить, что

$$\langle \hat{Q}^2 \rangle = D(\hat{q}), \quad \langle \hat{P}^2 \rangle = D(\hat{p})$$

и записать наше неравенство в форме

$$D(\hat{q})D(\hat{p}) \geq \frac{\hbar^2}{4}.$$

Удобно пользоваться величинами, которые называют **неопределенностями импульса и координаты**:

$$\Delta q = \sqrt{D(\hat{q})}, \quad \Delta p = \sqrt{D(\hat{p})}.$$

Получающееся неравенство,

$$\Delta q \Delta p \geq \frac{\hbar}{2},$$

называют **соотношением неопределенностей для импульса и координаты**. Это соотношение (несколько иным способом) получил Гейзенберг в 1927 году.

Чтобы лучше понять физический смысл соотношения неопределенностей, полезно непосредственно обратиться к работе Гейзенберга. В ней, в духе работы 1925 года говорится, что переходя в квантовую область, необходимо дать точные определения общепринятых в классической физике терминов как "положение", "энергия"..., и предлагается такое определение "положения":

... если мы хотим уяснить, что следует понимать под словом "положение объекта", например, электрона (по отношению к заданной системе отсчета),

необходимо указать определенные эксперименты, при помощи которых намереваются определить "положение электрона", в противном случае это не имеет смысла.

В качестве прибора, который в некотором мысленном эксперименте, определяет положение электрона, был предложен знаменитый ныне **микроскоп Гайзенберга**.

Мы освещаем электрон и рассматриваем его в микроскоп. При таком способе максимально достижимая точность определения положения в основном задается длиной волны используемого света. Но в принципе можно построить, например,  $\gamma$ -лучевой микроскоп и с его помощью определить положение с желаемой точностью. Однако в этом измерении существенно побочное обстоятельство – эффект Комптона. В то мгновение, когда определяется положение, иначе говоря, в мгновение, когда квант света отклоняется электроном, последний прерывно изменяет свой импульс. Это изменение тем сильнее, чем меньше длина волны исследуемого света, иначе говоря, чем выше точность определения положения. Поэтому в то мгновение, когда известно положение электрона, импульс может быть определен лишь с точностью до величины, соответствующей такому прерывному изменению. Итак, чем точнее определяется положение, тем менее точно известен импульс, и наоборот.

Микроскоп Гайзенберга можно представить примерно следующим образом. Расположим линзу микроскопа так, чтобы электрон, расположенный в точке  $O$ , оказался под центром линзы. По (волновой) теории Аббе разрешающая сила микроскопа (т.е. точность измерения  $x$ -координаты электрона) дается выражением

$$\Delta x = \frac{\lambda}{2\sin(\frac{\phi}{2})},$$

где  $\lambda$  – длина волны падающего на электрон света. Наблюдатель увидит вспышку, свидетельствующую о наличии электрона в точке  $O$ , если квант света после столкновения будет двигаться внутри конуса с раствором угла  $\phi$ . Если  $p$  – абсолютное значение импульса фотона после рассеяния, тогда неопределенность  $x$ -составляющей импульса фотона, попавшего в микроскоп, будет равна

$$\Delta p = 2\frac{\hbar}{\lambda}\sin(\frac{\phi}{2}).$$

Таким образом, микроскоп Гайзенберга позволяет отдельно измерить импульс и координату электрона с произвольной точностью, но при одновременном измерении этих величин неточности результатов будут связаны соотношением

$$\Delta q \Delta p \sim \hbar.$$

Далее Гайзенберг утверждает, что

говорить об энергии атома в определенный момент времени так же бессмысленно, как говорить о частоте световой волны в данное мгновение.

К такому выводу приводит, например, анализ опыта по определению энергии атома, в котором регистрируется отклонение атома во внешнем поле (опыт Штерна-Герлаха). Пусть атом, первоначально перемещающийся вдоль оси  $x$ , попадает в область, где существует магнитное поле, направленное вдоль оси  $z$ , причем напряженность поля зависит от  $z$ :  $H = H(z)$ . Энергия атома в этом случае также зависит от  $z$ , поэтому на атом действует сила, отклоняющая вдоль этой оси. Приращение импульса атома за время  $\Delta t$  равно. Если координаты двух таких атомов в момент вхождения в

$$\Delta p = F\Delta t = \frac{\Delta E}{\Delta z}\Delta t,$$

т.е.

$$\Delta z \Delta p = \Delta E \Delta t.$$

Поскольку невозможно следить за траекторией отдельного атома, в реальном эксперименте создается цилиндрический пучок атомов с диаметром цилиндра равным, например,  $d$ .

Это означает, что  $\Delta p$ ,  $\Delta z$  имеют смысл неопределенностей  $z$ -составляющих импульса радиуса-вектора атома, поэтому их произведение – величина порядка  $\hbar$ . Таким образом неопределенность энергии  $\Delta E$ , связана с длительностью эксперимента  $\Delta t$  соотношением

$$\Delta E \Delta t \sim \hbar.$$

### ФОРМУЛА ВЫЧИСЛЕНИЯ СРЕДНИХ. ВОЗМОЖНЫЕ СОСТОЯНИЯ СИСТЕМЫ.

Явный вид формулы, по которой вычисляются средние, немедленно получается после следующего наблюдения: что любую матрицу можно представить в форме

$$\hat{F} = \sum_{m,n} F_{mn} \hat{P}_{mn},$$

где  $\hat{P}_{mn}$  – матрицы, у которых все элементы, кроме одного, равны нулю, а единственный ненулевой элемент равен единице и стоит на пересечении  $m$ -той строки и  $n$ -того столбца. Поэтому среднее значение любой величины  $F$  можно представить следующим образом:

$$\langle \hat{F} \rangle = \sum_{m,n} F_{mn} \rho_{nm},$$

где

$$\rho_{nm} = \langle \hat{P}_{mn} \rangle.$$

Если считать, что числа  $\rho_{mn}$  определяют матрицу  $\hat{\rho} = (\rho_{mn})$ , то среднее значение  $F$  можно представить в форме

$$\langle \hat{F} \rangle = Tr(\hat{F} \hat{\rho}).$$

Среднее значение произвольной динамической переменной  $F$  определяется двумя величинами – матрицей  $\hat{F}$ , которая сопоставляется с интересующей нас переменной, и некоторой другой матрицей, которая строится из средних значений вполне определенных величин  $\hat{P}_{mn}$ , не имеющих отношения к величине  $F$ . Матричные элементы этой матрицы связаны со свойствами системы, т.е. с ее **состоянием**.

Таким образом получен способ математического описания состояний квантовой системы системы:

$$\text{состояние системы} \iff \text{матрица } \hat{\rho}.$$

Поскольку  $\hat{\rho}$  естественным образом возникает при вычислении среднего значения, называют **матрицей плотности**.

Заметим, что пока из условий, определяющих процедуру вычисления средних, было использовано лишь условие **2)**. Остальные можно сформулировать как условия, которым должна удовлетворять матрица плотности.

Поскольку матрицы  $\hat{P}_{mn}$  и  $\hat{P}_{nm}$  эрмитово сопряжены:

$$\hat{P}_{mn} = (\hat{P}_{nm})^+,$$

то в силу условия **3)** числа  $\rho_{mn}$  и  $\rho_{nm}$  должны быть комплексно сопряжены:

$$\rho_{mn} = (\rho_{nm})^*.$$

Это означает, что матрица  $\hat{\rho}$  должна быть эрмитовой.

Условие 1) требует, чтобы след матрицы  $\hat{\rho}$  был равен единице:

$$Tr \hat{\rho} = 1.$$

Остается сформулировать следствие условия положительной определенности средних.

Для этого достаточно вычислить среднее значение некоторой положительно определенной величины. Выберем ее следующим образом. Возьмем некоторую последовательность чисел  $\{c_n\}$ , удовлетворяющих условию  $\sum_n |c_n|^2 = 1$ , и определим матрицу

$$(\hat{Q})_{mn} = c_m c_n^*.$$

Она обладает свойствами

$$\hat{Q}^+ = \hat{Q}, \quad \hat{Q} = \hat{Q}^2.$$

Первое из этих равенств означает, что величина  $Q$  действительна, а второе – что она равна квадрату действительной величины. Ее среднее значение должно быть неотрицательным. Поэтому должно выполняться неравенство

$$Tr(\hat{\rho}\hat{Q}) = \sum_{mn} c_m^* \rho_{mn} c_n \geq 0.$$

Матрицы, обладающие такими свойствами, называются **положительно определенными**.

Таким образом, возможные состояния системы в аппарате квантовой механики связываются с **матрицами плотности**:

$$\iff \hat{\rho},$$

которая обладает следующими свойствами:

1. Матрица плотности эрмитова:

$$\hat{\rho}^+ = \hat{\rho}.$$

2. Матрица плотности положительно определена:

$$\langle c | \hat{\rho} c \rangle \geq 0, \forall c.$$

3. След матрицы плотности равен единице:

$$Tr \hat{\rho} = 1.$$

Среднее значение любой величины  $F$  в состоянии  $\rho$  равно

$$\langle F \rangle_\rho = Tr(\hat{F}\hat{\rho}).$$

Нетрудно убедиться в том, что вычисленные по этой формуле средние значения комплексно сопряженных величин комплексно сопряжены и средние действительных величин действительны:

$$\langle F^* \rangle = Tr(\hat{F}^+ \hat{\rho}) = \sum_{m,n} F_{mn}^+ \rho_{nm} =$$

$$\sum_{m,n} F_{nm}^* \rho_{mn}^* = Tr(\hat{F}\hat{\rho})^* = \langle F \rangle^*.$$

#### ПРИМЕР МАТРИЦЫ ПЛОТНОСТИ.

Рассмотрим простейшую физическую систему, переменным которой соответствуют двухрядные матрицы

$$F \Rightarrow \hat{F} = \begin{pmatrix} f_{11} & f_{12} \\ f_{21} & f_{22} \end{pmatrix}$$

с комплексными матричными элементами. Если  $\hat{F}$  – эрмитова матрица, справедливы соотношения

$$\hat{F}^+ = \hat{F} \Rightarrow f_{11}^* = f_{11}, \quad f_{22}^* = f_{22}, \quad f_{12}^* = f_{21},$$

означающие, что двухрядные эрмитовы матрицы определяют четыре действительные параметра. Чтобы явно выделить эти величины, представим произвольную эрмитову матрицу в терминах единичной матрицы и **матриц Паули**

$$\hat{\sigma}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Перечислим важнейшие свойства этих матриц:

$$\hat{\sigma}_\alpha^+ = \hat{\sigma}_\alpha, \quad \hat{\sigma}_\alpha \hat{\sigma}_\alpha = \delta_{\alpha\beta} \hat{E} + i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{\sigma}_\gamma.$$

Из этих соотношений следует, в частности, полезная формула

$$(\vec{a}\vec{\sigma})(\vec{a}\vec{\sigma}) = (\vec{a}\vec{b}) + i\vec{\sigma}(\vec{a} \times \vec{b}).$$

Произвольную эрмитову матрицу можно представить в форме

$$\hat{F}^+ = \hat{F} \Rightarrow \hat{F} = \frac{1}{2}(b\hat{E} + \vec{a}\vec{\sigma}),$$

где параметр  $b$  равен следу матрицы  $\hat{F}$ :

$$b = \text{Tr} \hat{F}.$$

Поскольку след матрицы плотности равен единице, то ее представить так:

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}(\hat{E} + \vec{a}\vec{\sigma}).$$

Выясним, к чему приводит условие положительной определенности матрицы плотности. Заметим, что если  $\vec{n}$  – единичный вектор:  $\vec{n}^2 = 1$ , то матрицы

$$\hat{P}_\pm = \frac{1}{2}(\hat{E} \pm \vec{n}\vec{\sigma})$$

обладают свойствами:

$$\hat{P}_\pm^+ = \hat{P}_\pm, \quad \hat{P}_\pm^2 = \hat{P}_\pm,$$

т.е. они соответствуют положительно определенным величинам. Поэтому должны выполняться неравенства

$$\langle \hat{P}_\pm \rangle = \text{Tr}(\hat{P}_\pm \hat{\rho}) \geq 0.$$

Вычисляя средние значения явно, получим неравенства

$$\langle \hat{P}_\pm \rangle = \frac{1}{2}(1 \pm \vec{a}\vec{n}) \geq 0,$$

означающие, что длина вектора  $\vec{a}$  не должна превосходить единицы. Удобно выделить явно длину вектора и его направление. Матрица плотности после этого примет вид

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}(\hat{E} + r\vec{m}\vec{\sigma}), \quad 0 \leq r \leq 1, \quad \vec{m}^2 = 1.$$

Пока наши рассуждения были применимы к любой системе, переменные которой представляются двухрядными матрицами. Рассмотрим случай, когда эти величины можно связать со спином частицы.

Спин частицы – это ее собственный момент количества движения в состоянии, при котором импульс частицы равен нулю. В классической механике эта величина тождественно

равна нулю. Таким образом спин имеет чисто кантовую природу. В квантовой теории – это частный случай общего понятия момента количества движения.

Чтобы осознать смысл этих выражений, выясним как можно определить в квантовой механике момент импульса.

В классической механике момент импульса частицы – это векторное произведение ее импульса и радиус-вектора:

$$\vec{M} = \vec{r} \times \vec{p}.$$

В покомпонентной записи это равенство выглядит так:

$$M_1 = x_2 p_3 - x_3 p_2, \quad M_2 = x_3 p_1 - x_1 p_3, \quad M_3 = x_1 p_2 - x_2 p_1,$$

или

$$M_\alpha = \epsilon_{\alpha\beta\gamma} x_\beta p_\gamma.$$

Чтобы получить соответствующие формулы квантовой теории, нужно определить величины  $\hat{x}_\alpha, \hat{p}_\alpha$ . Эти определения даются в терминах коммутаторов.

$$\hat{x}_\alpha = \hat{x}_\alpha^+, \quad \hat{p}_\alpha = \hat{p}_\alpha^+, \quad [\hat{x}_\alpha, \hat{x}_\beta] = 0, \quad [\hat{p}_\alpha, \hat{p}_\beta] = 0, \quad [\hat{x}_\alpha, \hat{p}_\beta] = i\hbar \hat{E}.$$

Приведенные формулы определяют составляющие импульса и радиус-вектора частицы как действительные величины. Кроме того, все три составляющие радиус-вектора (а также и составляющие ее импульса) можно одновременно измерить с произвольной точностью. Для соответствующих друг другу составляющих импульса и радиус-вектора справедливы соотношения неопределенностей Гайзенберга.

Составляющие момента импульса определяются равенствами

$$\hat{M}_1 = \hat{x}_2 \hat{p}_3 - \hat{x}_3 \hat{p}_2, \quad \hat{M}_2 = \hat{x}_3 \hat{p}_1 - \hat{x}_1 \hat{p}_3, \quad \hat{M}_3 = \hat{x}_1 \hat{p}_2 - \hat{x}_2 \hat{p}_1,$$

или

$$\hat{M}_\alpha = \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{x}_\beta \hat{p}_\gamma.$$

Нетрудно проверить, что составляющие момента импульса эрмитовы:

$$\hat{M}_\alpha^+ = \hat{M}_\alpha.$$

Если измерять момент импульса в единицах  $\hbar$ :

$$\vec{\hat{M}} = \hbar \vec{\hat{l}},$$

то основной нашей величиной станет безразмерный момент импульса

$$\hat{l}_\alpha = \frac{1}{\hbar} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{x}_\beta \hat{p}_\gamma.$$

Найдем перестановочные соотношения между составляющими момента импульса.

Удобно начать с коммутаторов между координатами и моментом:

$$[\hat{l}_1, \hat{x}_1] = \frac{1}{\hbar} [\hat{x}_2 \hat{p}_3 - \hat{x}_3 \hat{p}_2, \hat{x}_1].$$

Поскольку  $\hat{x}_1$  коммутирует со всеми остальными величинами, входящими в коммутатор, то в результате получается нуль. Иначе обстоит дело с другим выражением:

$$[\hat{l}_1, \hat{x}_2] = \frac{1}{\hbar} [\hat{x}_2 \hat{p}_3 - \hat{x}_3 \hat{p}_2, \hat{x}_2] = -\frac{1}{\hbar} [\hat{x}_3 \hat{p}_2, \hat{x}_2] = -\frac{1}{\hbar} \hat{x}_3 [\hat{p}_2, \hat{x}_2] = i\hat{x}_3.$$

Аналогично вычисляется коммутатор

$$[\hat{l}_1, \hat{x}_3] = -i\hat{x}_2.$$

Коммутаторы между остальными составляющими момента и координаты получаются из приведенных после циклической перестановки индексов. Результат всех вычислений подводит формула:

$$[\hat{l}_\alpha, \hat{x}_\beta] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{x}_\gamma.$$

Аналогично выглядят коммутаторы между составляющими импульса и момента:

$$[\hat{l}_\alpha, \hat{p}_\beta] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{p}_\gamma.$$

Теперь несложно вычислить коммутатор между составляющими момента импульса:

$$[\hat{l}_1, \hat{l}_1] = 0$$

Вычисление коммутатора

$$[\hat{l}_1, \hat{l}_2] = \frac{1}{\hbar}[\hat{l}_1, \hat{x}_3\hat{p}_1 - \hat{x}_1\hat{p}_3]$$

сводится к вычислению пары

$$[\hat{l}_1, \hat{x}_3\hat{p}_1] = [\hat{l}_1, \hat{x}_3]\hat{p}_1 + \hat{x}_3[\hat{l}_1, \hat{p}_1] = -i\hbar\hat{x}_2\hat{p}_1,$$

и

$$[\hat{l}_1, \hat{x}_1\hat{p}_3] = [\hat{l}_1, \hat{x}_1]\hat{p}_3 + \hat{x}_1[\hat{l}_1, \hat{p}_3] = -i\hbar\hat{x}_1\hat{p}_2.$$

Это дает

$$[\hat{l}_1, \hat{l}_2] = i\hat{l}_3.$$

Аналогично вычисляется и коммутатор

$$[\hat{l}_1, \hat{l}_3] = -i\hat{l}_2.$$

Продолжение вычислений приводит к формуле

$$[\hat{l}_\alpha, \hat{l}_\beta] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{l}_\gamma.$$

Теперь можно забыть о том, как были получены эти коммутаторы и определить **составляющие момента количества движения**

$$\hat{M}_\alpha = \hbar\hat{J}_\alpha,$$

$$\hat{J}_\alpha^+ = \hat{J}_\alpha, \quad [\hat{J}_\alpha, \hat{J}_\beta] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{J}_\gamma.$$

Постулированным соотношениям удовлетворяет подстановка

$$\hat{J}_\alpha = \hat{l}_\alpha + \hat{F}_\alpha,$$

где  $\hat{F}_\alpha$  обладают свойствами:

$$\hat{F}_\alpha^+ = \hat{F}_\alpha, \quad [\hat{F}_\alpha, \hat{F}_\beta] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{F}_\gamma.$$

Если  $\hat{F}_\alpha$  не равны тождественно нулю, то эти переменные можно связать с **внутренним моментом количества движения частицы**.

В качестве  $\hat{F}_\alpha$  можно взять матрицы  $\hat{s}_\alpha$ , пропорциональные матрицам Паули:

$$\hat{s}_\alpha = \frac{1}{2}\sigma_\alpha.$$

Они удовлетворяют требуемым перестановочным соотношениям и, кроме того, выполняется тождество

$$\hat{s}^2 = \frac{1}{4}\sum_\alpha \hat{\sigma}^2 = \frac{3}{4}\hat{E} = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2} + 1\right)\hat{E}.$$

Это обстоятельство связывается с тем, что матрицы  $\hat{s}_\alpha$  описывают частицы со спином фиксированной величины, равной  $\frac{1}{2}$ .

Систему, которая описывается переменными, сводящимся к двухрядным матрицам, можно определить как систему с двумя независимыми состояниями. Чтобы пояснить это утверждение, предположим, что эта система описывается спиновыми переменными.

В этом случае величина

$$Q(\vec{n}) = \vec{n}\vec{s}, \quad \vec{n}^2 = 1,$$

имеет смысл проекции спина на ось  $\vec{n}$ .

Если система находится с некотором состоянии  $\rho$ , то то среднее значение  $Q(\vec{n})$  равно

$$\langle Q(\vec{n}) \rangle = Tr(\hat{Q}\hat{\rho}) = \frac{1}{4}Tr(\vec{n}\hat{\sigma}(\hat{E} + r\vec{m}\hat{\sigma})) = \frac{r}{4}n_\alpha m_\beta Tr(\hat{\sigma}_\alpha \hat{\sigma}_\beta) = \frac{r}{2}(\vec{n}\vec{m}).$$

Поскольку

$$\hat{Q}^2 = \frac{1}{4}\hat{E},$$

то дисперсия  $\hat{Q}$  в состоянии  $\rho$  равна

$$D_\rho(Q) = \langle \hat{Q}^2 - \frac{r^2}{4}(\vec{m}\vec{n})^2 \hat{E} \rangle = \frac{1}{4}(1 - r^2(\vec{m}\vec{n})^2).$$

Таким образом

**если  $r < 1$ , то дисперсия  $Q$  всегда положительна, т.е. проекция спина в этом случае не может иметь точного значения.**

Если  $r = 1$ , то дисперсия  $Q$  может быть равна нулю в том случае, если  $\vec{m} = \pm\vec{n}$ .

**Проекция спина на ось  $\vec{n}$  имеет точное значение  $\frac{1}{2}$**

**в состоянии  $\hat{\rho} = \frac{1}{2}(\hat{E} + \vec{n}\hat{\sigma})$ .**

**Проекция спина на ось  $\vec{n}$  имеет точное значение  $-\frac{1}{2}$**

**в состоянии  $\hat{\rho} = \frac{1}{2}(\hat{E} - \vec{n}\hat{\sigma})$ .**

Полученный результат можно сформулировать так:

Проекция спина на произвольную ось может иметь точное значение только в одном из двух состояний системы, причем эти состояния однозначно определяются выбранной осью.

Эти факты можно было предсказать до явного вычисления средних значений, анализируя структуру матрицы  $\hat{Q}(\vec{n})$ . Ее можно представить в форме

$$\hat{Q}(\vec{n}) = \frac{1}{2}\hat{P}_+(\vec{n}) + (-\frac{1}{2})\hat{P}_-(\vec{n}),$$

где

$$\hat{P}_\pm(\vec{n}) = \frac{1}{2}(\hat{E} \pm \vec{n}\hat{\sigma}).$$

Матрицы  $\hat{P}_\pm(\vec{n})$  удовлетворяют соотношениям

$$\hat{P}_\pm^+ = \hat{P}_\pm, \quad \hat{P}_\pm^2 = \hat{P}_\pm, \quad \hat{P}_+\hat{P}_- = \hat{P}_-\hat{P}_+ = 0,$$

$$\hat{P}_+ + \hat{P}_- = \hat{E}.$$

Представление матрицы  $\hat{Q}$  в виде суммы проекционных матриц является примером общей формулы **спектрального разложения эрмитовой матрицы**.

Двухрядную эрмитову матрицу

$$\hat{F} = \frac{1}{2}(b\hat{E} + a\vec{a}\hat{\sigma}), \quad \vec{a}^2 = 1$$

всегда можно представить как сумму

$$\hat{F} = f_+\hat{F}_+ + f_-\hat{F}_-,$$



$$\hat{F}_{\pm} = \frac{1}{2}(\hat{E} \pm \hat{a}\hat{\sigma}), \quad f_{\pm} = \frac{1}{2}(b \pm a),$$

в которой матрицы  $\hat{F}_{\pm}$  удовлетворяют тем же соотношениям, что и матрицы  $\hat{P}_{\pm}$ .

Полезно заметить, что в терминах спектрального разложения матрицы легко представить любую ее функцию:

$$g(\hat{F}) = g(f_{-})\hat{F}_{+} + g(f_{+})\hat{F}_{-}.$$

Среднее значение  $\langle F \rangle$  в состоянии  $\rho$  равно

$$\langle F \rangle = f_{+}p_{+} + f_{-}p_{-},$$

где числа  $p_{\pm}$  равны средним значениям величин  $\hat{F}_{\pm}$ :

$$p_{\pm} = \langle \hat{F}_{\pm} \rangle.$$

Они удовлетворяют условиям

$$p_{\pm} \geq 0, \quad p_{+} + p_{-} = 1,$$

поэтому с ними можно связать некоторое распределение вероятностей, именно:

$$p_{\pm} = \langle \hat{F}_{\pm} \rangle - \text{вероятность того, что значение величины } F \text{ в состоянии } \rho \text{ равно } f_{\pm}.$$

Дисперсия величины  $F$  в состоянии  $\rho$  представляет собой сумму двух неотрицательных величин

$$D_{\rho}(F) = f_{+}^2 p_{+} + f_{-}^2 p_{-} - (f_{+} p_{+} + f_{-} p_{-})^2 = \\ (f_{+} - \langle F \rangle)^2 p_{+} + (f_{-} - \langle F \rangle)^2 p_{-}.$$

Таким образом  $F$  может принимать точное значение только в том случае, если

$$(f_{+} - \langle F \rangle)^2 p_{+} = 0 \quad (f_{-} - \langle F \rangle)^2 p_{-} = 0.$$

Это возможно лишь в таких случаях

$$(f_{+} = \langle F \rangle \quad p_{+} = 0) \quad (f_{-} = \langle F \rangle \quad p_{-} = 0).$$

Если числа  $f_{+}$  и  $f_{-}$  различны, то из двух равенств  $f_{+} = \langle F \rangle$  и  $f_{-} = \langle F \rangle$  справедливым может быть только одно. Таким образом, если в результате измерения наблюдаемой с невырожденным спектром выяснилось, что она принимает точное значение, то возможны два случая

$$\langle F \rangle = f_{+}, \quad p_{-} = 0 \quad \langle F \rangle = f_{-}, \quad p_{+} = 0.$$

Это утверждение можно сформулировать следующим образом

$$D_{\rho}(F) = 0 \Rightarrow \langle F \rangle = f_{+}, \quad \rho = \frac{1}{2}(\hat{E} + \hat{a}\hat{\sigma}), \quad \hat{\rho}^2 = \hat{\rho},$$

или

$$D_{\rho}(F) = 0 \Rightarrow \langle F \rangle = f_{-}, \quad \rho = \frac{1}{2}(\hat{E} - \hat{a}\hat{\sigma}), \quad \hat{\rho}^2 = \hat{\rho}.$$

Таким образом, измеряя наблюдаемую с невырожденным спектром, можно выяснить, в каком состоянии находится система.

Если наблюдаемая  $\hat{F}$  с невырожденным спектром принимает точное значение, то оно равно  $f_{\pm}$  — одному из значений спектра этой величины. Матрица плотности системы совпадает в этом случае с матрицей  $\hat{F}_{\pm}$ , входящей в спектральное разложение  $\hat{F}$ .

Состояние, в котором некоторая наблюдаемая с невырожденным спектром принимает точное значение, называют **чистым**.

Матрицы плотности чистых состояний  $\hat{F}_{\pm}$  обладают особой структурой, выделяющей их среди произвольных матриц плотности. Если представить вектор  $\vec{a}$  в форме

$$\vec{a} = (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta),$$

то явное вычисление матрицы  $\hat{F}_{+}$  приводит к выражению

$$\hat{F}_{+} = \begin{pmatrix} \cos^2(\frac{\theta}{2}) & \cos(\frac{\theta}{2})\sin(\frac{\theta}{2})e^{-i\phi} \\ \cos(\frac{\theta}{2})\sin(\frac{\theta}{2})e^{i\phi} & \sin^2(\frac{\theta}{2}) \end{pmatrix}.$$

Если определить числа

$$a_1 = \cos\frac{\theta}{2}e^{-i\frac{\phi}{2}}, \quad a_2 = \sin\frac{\theta}{2}e^{i\frac{\phi}{2}}, \quad |a_1|^2 + |a_2|^2 = 1,$$

то  $\hat{F}_{+}$  можно представить в форме

$$\hat{F}_{+} = \begin{pmatrix} a_1 a_1^* & a_1 a_2^* \\ a_2 a_1^* & a_1 a_2^* \end{pmatrix}.$$

Это – частный случай **прямого произведения матриц**:

прямым произведением матриц  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  называют матрицу  $\hat{A} \otimes \hat{B}$ , элементы которой получаются попарным перемножением элементов соответствующих матриц:

$$\hat{A} \otimes \hat{B} = \begin{pmatrix} a_{11}\hat{B} & \dots & a_{1n}\hat{B} \\ \dots & \dots & \dots \\ a_{m1}\hat{B} & \dots & a_{mn}\hat{B} \end{pmatrix}.$$

Заметим, что матрицы  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  – не обязательно квадратные, и размерности этих матриц не обязаны совпадать.

Пусть  $\hat{A}$  – это столбец

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix},$$

а  $\hat{B}$  – матрица, эрмитово сопряженная  $\hat{A}$ , т.е. строка

$$\hat{A}^+ = (a_1^* \quad a_2^*).$$

В этом случае

$$\hat{F}_{+} = \hat{A} \otimes \hat{A}^+ = \begin{pmatrix} a_1 \hat{A}^+ \\ a_2 \hat{A}^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 a_1^* & a_1 a_2^* \\ a_2 a_1^* & a_2 a_2^* \end{pmatrix}.$$

Аналогичным образом можно представить и матрицу  $\hat{F}_{-}$ :

$$\hat{F}_{-} = \hat{B} \otimes \hat{B}^+ = \begin{pmatrix} b_1 \hat{B}^+ \\ b_2 \hat{B}^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 b_1^* & b_1 b_2^* \\ b_2 b_1^* & b_2 b_2^* \end{pmatrix},$$

где  $\hat{B}$  – это столбец

$$\hat{B} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix},$$

а числа  $b_t$  равны

$$b_1 = -\sin(\frac{\theta}{2})e^{-i\frac{\phi}{2}}, \quad b_2 = \cos(\frac{\theta}{2})e^{-i\frac{\phi}{2}}, \quad |b_1|^2 + |b_2|^2 = 1.$$

Чистое состояние (т.е. соответствующая матрица плотности) определяется **столбцом комплексных чисел**.

## ГИЛЬБЕРТОВЫ ПРОСТРАНСТВА

На прошлой лекции мы выяснили на простом примере, что возможные состояния квантовой системы можно разделить на два класса – **чистые** и **смешанные**. Чистые состояния – это состояния, в которых имеет точное значение величина вполне определенного типа – **наблюдаемая с чисто дискретным невырожденным спектром**. Все остальные состояния – смешанные.

С формальной точки зрения чистые состояния можно определить как состояния, матрица плотности которых удовлетворяет условию

$$\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}.$$

Матричные элементы таких матриц имеют вид

$$\hat{\rho}_{st} = \phi_s \phi_t^*, \quad \sum_s |\phi_s|^2 = 1.$$

Среднее значение любой величины  $F$  в чистом состоянии равно

$$\langle F \rangle = \text{Tr}(\hat{F}\hat{\rho}) = \sum_{st} F_{st}\rho_{ts} = \sum_s \phi_s^* \phi'_s,$$

где

$$\phi'_s = \sum_t F_{st}\phi_t.$$

Таким образом при работе с чистыми состояниями естественным образом возникают последовательности  $\phi = \{\phi_s\}$  и числовые функции таких последовательностей

$$\langle \phi | \phi \rangle = \sum_s \phi_s^* \phi_s.$$

Возникает соблазн принять такого рода последовательности как основу математического аппарата квантовой механики.

Прежде всего нужно определить класс последовательностей, с которыми мы собираемся работать. Они должны быть такими, чтобы последовательности, определяющие числа  $\langle \phi | \psi \rangle$  всегда были конечными. В силу неравенства Коши-Буняковского

$$|\langle \phi | \psi \rangle|^2 \leq \left( \sum_s |\phi_s|^2 \right) \left( \sum_s |\psi_s|^2 \right).$$

Поэтому в качестве допустимых последовательностей можно взять множество

$$l_2 = \left\{ \psi : \sum_s |\phi_s|^2 < \infty \right\}.$$

В силу неравенства Коши-Буняковского множество  $l_2$  представляет собой **векторное пространство**. Это означает следующее: если последовательности  $\psi_1$  и  $\psi_2$  принадлежат  $l_2$ , то этому же множеству принадлежит и последовательность  $\psi_1 c_1 + \psi_2 c_2$  с произвольными комплексными числами  $c_1$  и  $c_2$ .

Последовательности  $\psi$  будем называть **векторами** пространства  $l_2$ , а числа  $\langle \phi | \psi \rangle$  – **скалярным произведением** векторов  $\phi$  и  $\psi$ .

Скалярное произведение обладает важными для дальнейшего свойствами:

1.  $\langle \psi | \psi_1 c_1 + \psi_2 c_2 \rangle = \langle \psi | \psi_1 \rangle c_1 + \langle \psi | \psi_2 \rangle c_2;$
2.  $\langle \phi | \psi \rangle = (\langle \psi | \phi \rangle)^*;$

$$3. \quad \langle \psi | \psi \rangle \geq 0, \quad \langle \psi | \psi \rangle = 0 \iff \psi = 0.$$

Векторы  $\phi, \psi$ , скалярное произведение которых равно нулю, называют **ортогональными**. Число  $\|\psi\| = \sqrt{\langle \psi | \psi \rangle}$  называют **нормой** или **длиной** вектора  $\psi$ . Вектор, норма которого равна 1, называют **единичным**.

В пространстве  $l_2$  существуют ортонормированные базисы — множества векторов  $\{e_m\}$  со свойствами:

**1** — свойство ортогональности:

$$\langle e_m | e_n \rangle = \delta_{mn}.$$

Векторы базиса попарно ортогональны; длина каждого из этих векторов равна единице.

**2** — свойство полноты:

$$2. \quad \forall \psi \in l_2 \quad \psi = \sum_n e_n c_n$$

Произвольный вектор из  $l_2$  можно представить как суперпозицию векторов базиса. Иногда бывают удобны формулы, выражающие условия ортогональности и полноты в терминах составляющих векторов базиса. Свойство ортогональности:

$$\sum_s e_{ms} e_{ns}^* = \delta_{mn}.$$

Свойство полноты:

$$\sum_n e_{ns} e_{nt}^* = \delta_{st}.$$

Коэффициенты  $c_n$  в этом разложении равны скалярным произведениям

$$c_n = \langle e_n | \psi \rangle.$$

Их называют **координатами** или **коэффициентами Фурье** вектора  $\psi$  в базисе  $\{e_n\}$ .

Если толковать числа  $e_{ns}$  как матричные элементы матрицы  $(\hat{S})_{ns} = e_{ns}$ , то соотношения ортогональности и полноты примут вид условий унитарности матрицы  $\hat{S}$ :

$$\hat{S} \hat{S}^\dagger = \hat{S}^\dagger \hat{S} = \hat{E}.$$

Пространство  $l_2$  — это пример общего **пространства Гильберта**. Не имея возможности вдаваться в изложение полной теории гильбертовых пространств, приведем удобное для нас определение:

гильбертово пространство  $H$  — это линейное пространство со скалярным произведением, в котором существует ортонормированный базис.

## ЛИНЕЙНЫЕ ОПЕРАТОРЫ

В гильбертовом пространстве можно определить **линейный оператор** — линейную функцию векторов пространства  $H$ .

$$\psi \in H \implies \psi' = F(\psi)$$

со свойством

$$F(\psi_1 c_1 + \psi_2 c_2) = F(\psi_1) c_1 + F(\psi_2) c_2.$$

Операторы  $F_1$  и  $F_2$  называют **равными**, если

$$\forall \psi \quad F_1(\psi) = F_2(\psi).$$

Факт равенства операторов отражают формулой

$$F_1 = F_2.$$

В терминах двух операторов  $F_1, F_2$  можно определить **сумму** операторов — оператор

$$F = c_1 F_1 + c_2 F_2,$$

действующий по формуле

$$F(\psi) = F_1(\psi)c_1 + F_2(\psi)c_2.$$

Произведением операторов  $F_1$  и  $F_2$  называют оператор  $F_2 F_1$ :

$$F_2 F_1(\psi) = F_2(F_1(\psi)).$$

Нетрудно показать прямым вычислением, что сумма и произведение линейных операторов — линейные операторы.

Можно определить действие с линейными операторами, аналогичное комплексному сопряжению чисел. Пусть  $F$  — линейный оператор,  $\phi$  — произвольный, а  $\psi$  — некоторый фиксированный вектор из  $H$ . Образует скалярное произведение  $\langle \phi | F(\psi) \rangle$  и попробуем представить его в форме

$$\langle \phi | F(\psi) \rangle = \langle \phi' | \psi \rangle.$$

Отображение  $\phi \Rightarrow \phi'$  определяет **сопряженный оператор**

$$\phi' = F^+(\phi).$$

Из определения сопряженного оператора следует, что выполняется равенство

$$\langle \phi | F\psi \rangle = \langle F^+\phi | \psi \rangle.$$

Переходя к комплексно сопряженным скалярным произведениям нетрудно получить соотношение

$$\langle \phi | F^+\psi \rangle = \langle F\phi | \psi \rangle.$$

Это означает, что повторное сопряжение приводит к первоначальному оператору

$$(F^+)^+ = F.$$

Нетрудно показать, что сопряжение произведения операторов меняет порядок сомножителей:

$$(F_1 F_2)^+ = F_2^+ F_1^+.$$

Пару линейных операторов  $A$  и  $B$  осуществляющих отображения

$$A(\psi) = \phi, \quad B(\phi) = \psi,$$

называют взаимно обратными и обозначают, например, символами  $A$  и  $A^{-1}$ . Условие существования обратного оператора можно записать как два уравнения

$$AA^{-1} = A^{-1}A = E.$$

**Унитарными** операторами называют операторы, сохраняющие скалярные произведения:

$$\langle S(\phi) | S(\psi) \rangle = \langle \phi | \psi \rangle \quad \forall \phi, \psi.$$

Нетрудно убедиться, что оператор  $S$  будет унитарным, его сопряженный оператор совпадет с обратным:

$$S^+ S = S S^+ = E.$$

## МАТРИЦА — КООРДИНАТНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ ОПЕРАТОРА

Действие линейного оператора удобно описать следующим образом. Поскольку каждый вектор  $\psi$  можно представить в форме

$$\psi = \sum_n e_n c_n,$$

то

$$F(\psi) = \sum_n F(e_n) c_n.$$

Векторы  $F(e_n)$  в свою очередь можно представить как

$$F(e_n) = \sum_m e_m d_{mn},$$

где

$$d_{mn} = \langle e_m | F(e_n) \rangle.$$

Удобно использовать обозначения

$$\langle e_m | F(e_n) \rangle = \langle e_m | F | e_n \rangle = \langle F^+(e_m) | e_n \rangle,$$

и

$$F(\psi) = F|\psi\rangle.$$

После этого действие оператора  $F$  будет выглядеть так:

$$F|\psi\rangle = \sum_{mn} e_m \langle e_m | F | e_n \rangle \langle e_n | \psi \rangle.$$

Матрицу  $\langle e_m | F | e_n \rangle$  можно считать представителем оператора  $F$ , его координатной реализацией в базисе  $e_n$ . При этом сумме или произведению операторов будет соответствовать сумма или произведение матриц операторов, сопряженному оператору — эрмитово сопряженная матрица. Функциям операторов — соответствующие функции матриц.

Остается определить след оператора: след оператора — это число

$$Tr(F) = \sum_n \langle e_n | F | e_n \rangle.$$

Хотя в определении следа фигурирует некоторый частный базис, значение следа от выбора базиса не зависит. Пусть  $h_n$  — еще один базис, так что

$$e_n = \sum_s h_s \langle h_s | e_n \rangle.$$

Подставляя это разложение в формулу вычисления следа, получим

$$Tr(F) = \sum_n \langle \sum_s h_s \langle h_s | e_n \rangle | F | \sum_t h_t \langle h_t | e_n \rangle \rangle.$$

Вынося числа из-под знака скалярного произведения и меняя порядок суммирования, получим

$$Tr(F) = \sum_{st} \langle h_s | F | h_t \rangle \sum_n \langle h_t | e_n \rangle \langle e_n | h_s \rangle.$$

Вычисление внутренней суммы приводит к  $\delta_{st}$ , после чего значение следа оказывается равным

$$Tr(F) = \sum_s \langle h_s | F | h_s \rangle.$$

## СПЕКТРАЛЬНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ САМОСОПРЯЖЕННОГО ОПЕРАТОРА

При изучении структуры линейных операторов полезно знать их **собственные векторы**. Не равный нулю вектор  $\psi \in H$  называют собственным вектором линейного оператора  $F$ , принадлежащим собственному значению  $f$ , если выполняется равенство

$$F|\psi\rangle = |\psi\rangle f.$$

Для дальнейшего важно, что **собственные значения самосопряженного оператора действительны**: если  $\psi$  – собственный вектор самосопряженного оператора  $F$ , то

$$\langle\psi|F\psi\rangle = \langle\psi|F|\psi\rangle = \langle F\psi|\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle f = f^* \langle\psi|\psi\rangle.$$

Кроме того, собственные векторы самосопряженного оператора, принадлежащие различным собственным значениям, ортогональны:

$$\langle\psi_1|F|\psi_2\rangle = f_1 \langle\psi_1|\psi_2\rangle = \langle\psi_1|\psi_2\rangle f_2.$$

И наконец: **собственные векторы, принадлежащие одному собственному значению, можно ортогонализировать**. Таким образом, можно считать, что все собственные векторы самосопряженного оператора попарно ортогональны.

Известно, число собственных векторов самосопряженного оператора в конечномерном гильбертовом пространстве равно размерности пространства.

В случае гильбертовых пространств бесконечной размерности возможны три случая.

1. Самосопряженный оператор не имеет ни одного собственного значения.
2. Число собственных векторов  $\psi_s$  самосопряженного оператора  $F = F^+$  таково, что найдется ненулевой вектор  $\psi$ , ортогональный ко всем векторам  $\psi_s$ . Иначе говоря, собственные векторы  $F$  не образуют базиса в гильбертовом пространстве.
3. Собственные векторы оператора —  $\psi_s$  — образуют ортонормированный базис в гильбертовом пространстве. Такие операторы называют **операторы с чисто дискретным спектром**. В этом случае

$$F|\psi\rangle = \sum_s F|\psi_s\rangle \langle\psi_s|\psi\rangle = \sum_s |\psi_s\rangle g_s \langle\psi_s|\psi\rangle.$$

Это означает,  $F$  можно представить как сумму операторов

$$F = \sum_s g_s Q_s.$$

Операторы  $Q_s$  действуют по формуле

$$Q_s|\psi\rangle = |\psi_s\rangle \langle\psi_s|\psi\rangle.$$

Их естественно назвать **операторами проектирования на векторы  $\psi_s$** . Операторы проектирования обладают следующими свойствами:

$$Q_s^+ = Q_s, \quad Q_k Q_l = \delta_{kl} Q_k, \quad \sum_k Q_k = E.$$

Полезно перестроить эту формулу так, чтобы в сумму входили только неравные друг другу числа  $g_s$ .

Пусть числа  $f_s$  на группы

$$g_1 = g_2 = \dots = g_{n_1} = f_1; \quad g_{n_1+1} = g_{n_1+2} = \dots = g_{n_2} = f_2; \dots$$

Сумму, определяющую  $F$ , можно представить в форме

$$F = f_1(Q_1 + Q_2 + \dots + Q_{n_1}) + f_2(Q_{n_1+1} + \dots + Q_{n_2}) + \dots$$

Операторы

$$P_s = Q_{n_{s-1}+1} + \dots + Q_{n_s},$$

как и  $Q_k$  удовлетворяют соотношениям

$$P_s^+ = P_s, \quad P_s P_t = \delta_{st} P_s, \quad \sum_s P_s = E.$$

Операторы  $P_s$  представляют собой операторы проектирования на попарно ортогональные подпространства  $M_s$ , натянутые на векторы  $\{\psi_s, k = 1, 2, \dots, n_s - n_{s-1}\}$ .

Оператор  $F$  можно представить как сумму операторов  $P_s$ :

$$F = \sum_s f_s P_s.$$

Совокупность чисел  $f_s$  называют **спектром** оператора  $F$ , совокупность операторов  $P_s$  — **спектральным разложением единицы**, принадлежащим оператору  $F$ , а само представление  $F$  в терминах операторов  $P_s$  — **спектральным разложением оператора  $F$** .

Отметим полезное применение формулы спектрального разложения. Любую функцию оператора  $F$  можно представить в виде

$$G(F) = \sum_s G(f_s) P_s.$$

Кратность вырождения значений спектра определяется формулой

$$N(f_s) = Tr(P_s).$$

## ИЗМЕРЕНИЯ СООБЩАЮТ ИНФОРМАЦИЮ О СОСТОЯНИИ СИСТЕМЫ

Физика, будучи наукой о природе, развивается анализируя результаты экспериментов, т.е. наборы не совсем точных чисел. В науке о неточных числах — теории вероятностей — мерой размытости распределения набора чисел служит дисперсия — величина равная

$$D(F) = \langle F^2 \rangle - (\langle F \rangle)^2$$

Перенесем соображения теории вероятностей в квантовую механику. Если наблюдаемой  $F$  соответствует самосопряженный линейный оператор  $F = F^+$ , то ее дисперсию можно представить в форме

$$D(F) = \langle T^2 \rangle,$$

где

$$T = F - \langle F \rangle E.$$

Поскольку среднее значение наблюдаемой  $\langle F \rangle$  действительно, то оператор  $T$  самосопряжен:

$$T^+ = T,$$

а среднее значение  $T^2$  неотрицательно.

Зная все это, естественно дать такое определение:

наблюдаемая имеет точное значение в некотором состоянии, если ее дисперсия в этом состоянии равна нулю.

Поскольку матрицу плотности можно представить в форме

$$\rho = \sum_s p_s Q_s,$$



то

$$D_\rho = \sum_s p_s \text{Tr}(T^2 Q_s).$$

Дисперсия равна нулю в том и только в том случае, если

$$\forall s \quad p_s = 0 \quad \text{Tr}(T^2 Q_s) = 0.$$

Можно выбрать такой базис  $\{e_m\}$ , в котором действие операторов  $Q_s$  можно выразить формулой:

$$Q_s |\psi\rangle = \sum_{i \in \Delta_s} |e_i\rangle \langle e_i | \psi\rangle,$$

т.е.

$$Q_s |e_m\rangle = \begin{cases} e_m, & m \in \Delta_s \\ 0, & m \notin \Delta_s \end{cases}$$

Поэтому

$$\text{Tr}(T^2 Q_s) = \sum_{m \in \Delta_s} \langle e_m | T^2 e_m \rangle = \sum_{m \in \Delta_s} \|T e_m\|^2.$$

Таким образом, справедливо следующее:

$$p_s \neq 0, \quad m \in \Delta_s \implies T e_m = 0,$$

или

$$p_s \neq 0, \quad m \in \Delta_s \implies F e_m = e_m \langle F \rangle.$$

Таким образом,

точным значением наблюдаемой  $F$  может быть только одно из собственных значений оператора этой величины.

Заметим, что векторы  $e_m$  появились как собственные векторы матрицы плотности. В том состоянии, когда наблюдаемая  $F$  имеет точное значение, некоторые из них оказываются собственными векторами оператора  $F$ . Это означает, что измерение наблюдаемых снабжает экспериментатора информацией о структуре матрицы плотности.

Очевидно, что

наблюдаемые с чисто непрерывным спектром не могут иметь точного значения ни в одном состоянии.

Это утверждение полностью соответствует основным понятиям классической физики, утверждающей, что любую физическую величину можно измерить лишь некоторой, пусть сколь угодно малой погрешностью. Отличие квантовой физики от классической состоит в том, что в квантовой физике существуют величины с дискретным спектром, которые могут иметь абсолютно точные значения. Измерения таких величин — наблюдаемых с чисто дискретным спектром — снабжают нас максимально возможной информацией о состоянии системы. Чтобы выяснить точный смысл этого утверждения, остановимся на чисто математической теореме:

если наблюдаемая  $F$  имеет в состоянии  $\rho$  точное значение, то операторы  $F$  и  $\rho$  коммутируют.

Действительно, произведение  $F\rho$  можно представить в форме

$$F\rho = F \left( \sum_m |e_m\rangle p_m \langle e_m| \right).$$

Если  $p_m \neq 0$ , справедливо равенство  $F|e_m\rangle = e_m \langle F \rangle$ , поэтому

$$F\rho = \sum_m |e_m\rangle f_m p_m \langle e_m|.$$

Произведение  $\rho F$  представляется суммой

$$\rho F = \sum_m |e_m\rangle p_m \langle e_m| F = \sum_m |e_m\rangle p_m (F|e_m\rangle)^\dagger = \sum_m |e_m\rangle p_m f_m \langle e_m|.$$

Таким образом, справедливо утверждение

$$D_\rho(F) = 0 \implies [F, \rho] = 0.$$

Наконец, сошлемся на еще одну теорему: если операторы  $A$  и  $B$  с чисто дискретным спектром коммутируют, то операторы  $A$  и  $B$  можно представить как функции оператора  $C$  с чисто дискретным невырожденным спектром.

Возвращаясь к вопросу о роли измерений в определении состояния системы, можно сказать следующее:

если наблюдаемая с чисто дискретным невырожденным спектром имеет точное значение, то матрицу плотности системы можно представить как функцию оператора этой величины.

В этом случае лишь один из векторов  $\{e_m\}$  может быть собственным вектором оператора  $F$ :

$$F|e\rangle = |e\rangle f.$$

В спектральном представлении матрицы плотности в этом случае остается лишь одно слагаемое, поэтому матрица плотности оказывается оператором, проецирующим произвольный вектор гильбертового пространства на вектор  $e$ .

$$\rho|\psi\rangle = |e\rangle\langle e|\psi\rangle.$$

В этом случае справедливо соотношение

$$\rho^2 = \rho.$$

Таким образом измерение наблюдаемой с чисто дискретным невырожденным спектром позволяет получить наибольшую информацию о физической системе и она сводится к утверждению, что матрица плотности сводится к проекционному оператору.

Справедливо и обратное: если матрица плотности состояния удовлетворяет равенству

$$\rho^2 = \rho,$$

для коэффициентов  $p_s$  в ее спектральном представлении

$$\rho = \sum_s p_s Q_s$$

справедливы соотношения

$$p_s^2 = p_s, \quad \dots \quad p_s = 0 \quad 1.$$

Условие  $Tr\rho = 1$ , приводит к тому, что матрица плотности действует по формуле

$$\rho|\psi\rangle = |e\rangle\langle e|\psi\rangle.$$

Выбрав  $|e\rangle$  в качестве одного из векторов ортогонального базиса  $\{e; e_s, s = 2, 3, \dots\}$  и определив наблюдаемую

$$F = |e\rangle f \langle e| + \sum_{s \geq 2} |e_s\rangle f_s \langle e_s|, \quad f_s \neq f,$$

Найдем, что  $F$  принимает в состоянии  $\rho$  точное значение  $f$ . Таким образом соотношение

$$\rho^2 = \rho$$

необходимое и достаточное условие того, что в состоянии  $\rho$  некоторые наблюдаемые имеют точные значения. Совокупность этих наблюдаемых можно определить как множество функций оператора с чисто дискретным невырожденным спектром, который соответствует той величине,

которая имеет точное значение. Пока представление о чистом состоянии ничем не отличается от соответствующих классических определений.

В классической механике чистое состояние материальной точки с одной степенью свободы – это состояние в котором точно известны ее импульс  $p$  и координата  $q$ . Все остальные характеристики сводятся к той или иной функции  $f(p, q)$ . Однако, если в чистом состоянии классической системы точно известны **все** характеристики частицы, то в квантовом чистом состоянии в силу открытых Гайзенбергом соотношений неопределенностей точные значения могут иметь лишь те величины, операторы которых коммутируют.

Можно привести еще один пример. Состояния одномерного гармонического осциллятора в классической механике можно описать в терминах пары переменных действие–угол. При переходе в квантовую физику эта пара канонических переменных просто исчезает. В математическом аппарате квантовой механики просто нет оператора фазы. Чтобы задать чистое состояние осциллятора достаточно задать его энергию.

Именно это обстоятельство определяет различия в поведении квантовой и классической частиц.

## КВАНТОВАНИЕ ПРОСТЕЙШИХ СИСТЕМ

### 1. Гармонический осциллятор.

Гамильтониан системы имеет вид

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

где самосопряженные операторы  $p$  и  $q$  удовлетворяют перестановочному соотношению

$$[q, p] = i\hbar E.$$

Определив постоянные

$$p_0 = \sqrt{\hbar m\omega}, \quad q_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \quad p_0 q_0 = \hbar,$$

перейдем к операторам

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{q}{q_0} + i\frac{p}{p_0}\right), \quad a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{q}{q_0} - i\frac{p}{p_0}\right),$$

коммутатор которых равен

$$[a, a^+] = E.$$

Поскольку

$$q = \frac{q_0}{\sqrt{2}}(a + a^+), \quad p = \frac{p_0}{i\sqrt{2}}(a - a^+),$$

то гамильтониан в новых переменных приводится к форме

$$\mathcal{H} = \hbar\omega\left(N + \frac{1}{2}E\right),$$

где самосопряженный оператор  $N$  равен

$$N = a^+a.$$

Прежде всего заметим, что  $N$  – неотрицательно определенный оператор:

$$\langle \Psi | N | \Psi \rangle = \langle \Psi | a^+ a | \Psi \rangle = \langle a \Psi | a \Psi \rangle \geq 0.$$

Кроме того, справедливы перестановочные соотношения

$$[N, a] = -a, \quad [N, a^+] = a^+.$$

Чтобы найти спектр оператора  $N$ , решим уравнение

$$N\Psi_\nu = \Psi_\nu\nu.$$

Нетрудно показать, что векторы если вектор  $\Psi$  – собственный вектор оператора  $N$ , принадлежащий собственному значению  $\nu$ , то  $a^+\Psi_\nu, a\Psi_\nu$  – собственные векторы  $N$ , принадлежащие собственным значениям  $\nu \pm 1$ :

$$N\Psi_\nu = \Psi_\nu\nu \implies Na\Psi_\nu = a\Psi_\nu(\nu - 1), \quad Na^+\Psi_\nu = a^+\Psi_\nu(\nu + 1).$$

Чтобы предотвратить появление отрицательных собственных значений неотрицательно определенного оператора  $N$ , следует предположить, что в гильбертовом пространстве содержится базис, состоящий из векторов

$$|\Psi_n\rangle = (a^+)^n|\Psi_0\rangle \frac{1}{\sqrt{n!}},$$

где нормированный на единицу вектор  $|\Psi_0\rangle$  удовлетворяет уравнению

$$a\Psi_0 = 0, \quad \langle\Psi_0|\Psi_0\rangle = 1.$$

Эти векторы удовлетворяют соотношениям

$$N\Psi_n = \Psi_n n,$$

поэтому

$$\mathcal{H}\Psi_n = \Psi_n\left(n + \frac{1}{2}\right).$$

Гамильтониан одномерного гармонического осциллятора – оператор с чисто дискретным невырожденным спектром.

Чтобы с чистой совестью утверждать, что гамильтониан нашей системы – оператор с чисто дискретным спектром – нужно доказать, что система попарно ортогональных векторов

$$|\Psi_n\rangle = (a^+)^n|\Psi_0\rangle \frac{1}{\sqrt{n!}},$$

представляет собой базис, т.е. обладает свойством полноты. Чтобы воспользоваться уже известными математическими формулами, удобно перейти к иной реализации операторов импульса и координаты.

**2. Координатное пространство.** Выберем некоторый класс функций  $\{\Psi(x)\}$  и определим операторы

$$(q\Psi)(x) = x\Psi(x), \quad (p\Psi)(x) = -i\hbar \frac{d\Psi(x)}{dx}.$$

Поскольку

$$\begin{aligned} (qp\Psi)(x) &= \left(q(-i\hbar) \frac{d\Psi(x)}{dx}\right) = -i\hbar x \frac{d\Psi(x)}{dx}, \\ (pq\Psi)(x) &= -i\hbar \frac{d(x\Psi(x))}{dx} = -i\hbar\Psi(x) - i\hbar x \frac{d\Psi}{dx}, \end{aligned}$$

то справедливо равенство

$$[q, p]\Psi(x) = i\hbar\Psi(x).$$

Иначе говоря, операторы  $p$  и  $q$  удовлетворяют перестановочному соотношению, характерному для операторов импульса и координаты. Чтобы сделать  $p$  и  $q$  эрмитовыми, необходимо

должным образом определить скалярное произведение функций. Пусть скалярное произведение функций  $\Psi_1$  и  $\Psi_2$  будет равно

$$\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^*(x) \Psi_2(x) dx.$$

Нетрудно проверить, что оно удовлетворяет требованиям, предъявляемым к скалярному произведению.

Интеграл, определяющий скалярное произведение, конечен, если входящие в него функции квадратично интегрируемы, т.е. если

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi_{1,2}|^2 dx < \infty.$$

У нас практически само собой возникло новое гильбертово пространство – пространство квадратично интегрируемых функций

$$L_2 = \{ \Psi(x), \quad -\infty < x < \infty, \quad \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2 dx < \infty \}$$

со скалярным произведением

$$\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^*(x) \Psi_2(x) dx.$$

Нетрудно показать, операторы  $q$  и  $p$  эрмитовы. Действительно, скалярное произведение

$$\langle \Psi_1 | q \Psi_2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^*(x) (q \Psi_2)(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^*(x) x \Psi_2(x) dx$$

можно представить в форме

$$\langle \Psi_1 | q \Psi_2 \rangle = \langle \Psi_3 | \Psi_2 \rangle,$$

где

$$\Psi_3(x) = x \Psi_1(x) = (q \Psi_1)(x).$$

Это означает, что оператор  $q$  самосопряжен:

$$q^+ = q.$$

Аналогично доказывается самосопряженность оператора импульса:

$$\langle \Psi_1 | p \Psi_2 \rangle = \langle \Psi_4 | \Psi_2 \rangle,$$

где

$$\Psi_4(x) = -i\hbar \frac{d\Psi_1(x)}{dx} = (p \Psi_1)(x),$$

т.е.

$$p^+ = p.$$

Осталось только показать, что в этом пространстве существует ортонормированный базис. Проще всего это сделать, построив его явно. Для этого реализуем в  $L_2$  операторы  $a$  и  $a^+$ . Определив безразмерную переменную

$$\xi = \frac{x}{q_0},$$

найдем, что

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{q}{q_0} + i \frac{p}{p_0} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \xi + \frac{d}{d\xi} \right),$$

$$a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{q}{q_0} - i \frac{p}{p_0} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \xi - \frac{d}{d\xi} \right).$$

Нормированное на единицу решение уравнения

$$a\Psi_0(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \xi\Psi_0(\xi) + \frac{d\Psi_0(\xi)}{d\xi} \right) = 0$$

имеет вид

$$\Psi_0(\xi) = \pi^{-\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right), \quad \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi_0(\xi)|^2 dx = 1.$$

Определим функции  $\Psi_n$  рекуррентной формулой

$$\Psi_n(\xi) = (a^+\Psi_{n-1})(\xi) \frac{1}{\sqrt{n}}.$$

Замечая, что действие оператора  $a^+$

$$(a^+\Psi)(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \xi - \frac{d}{d\xi} \right) \Psi_\xi$$

можно свести к формуле

$$(a^+\Psi)(\xi) = -\frac{1}{\sqrt{2}} e^{\frac{\xi^2}{2}} \frac{d}{d\xi} \left( e^{-\frac{\xi^2}{2}} \Psi(\xi) \right),$$

получим такое представление функций  $\Psi_n$ :

$$\Psi_n(\xi) = \frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n n!}} \pi^{-\frac{1}{4}} e^{\frac{\xi^2}{2}} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}.$$

Вспомогая определение полиномов Эрмита

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2},$$

представим  $\Psi_n$  в форме

$$\Psi_n(\xi) = \frac{\pi^{-\frac{1}{4}}}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi).$$

Хорошо известно, что функции  $\Psi_n(\xi)$  образуют ортонормированный базис в линейном пространстве квадратично интегрируемых функций. Это означает, что линейное пространство  $L_2$  – гильбертово пространство.

Переходя к размерной переменной  $x$  и нормируя функции  $\Psi_n(x)$  на единицу:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi_x|^2 dx = 1,$$

нужно учесть, что функции  $\Psi_n(x)$  приобретают размерность:

$$\Psi_n(x) = \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} H_n \left( x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \right).$$

**3. Гармонический осциллятор с тремя степенями свободы** – это система с гамильтонианом

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} \vec{p}^2 = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} m\omega_{\alpha}^2 x_{\alpha}^2.$$

Переменные системы определяются соотношениями

$$p_{\alpha}^+ = p_{\alpha}, \quad x_{\alpha}^+ = x_{\alpha},$$

$$[x_\alpha, x_\beta] = 0, \quad [p_\alpha, p_\beta] = 0, \quad [x_\alpha, p_\alpha] = i\hbar\delta_{\alpha\beta}.$$

После определений чисел

$$p_{0\alpha} = \sqrt{\hbar m\omega_\alpha}, \quad q_{0\alpha} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_\alpha}}, \quad p_{0\alpha}q_{0\alpha} = \hbar$$

и операторов

$$a_\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{q_\alpha}{q_{0\alpha}} + i\frac{p_\alpha}{p_{0\alpha}}\right), \quad a_\alpha^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{q_\alpha}{q_{0\alpha}} - i\frac{p_\alpha}{p_{0\alpha}}\right),$$

удовлетворяющих перестановочным соотношениям

$$[a_\alpha, a_\beta^+] = \delta_{\alpha\beta},$$

гамильтониан принимает вид

$$\mathcal{H} = \sum_\alpha \hbar\omega_\alpha \left(N_\alpha + \frac{1}{2}E\right),$$

где

$$N_\alpha = a_\alpha^+ a_\alpha.$$

Поскольку справедливы перестановочные соотношения

$$[N_\alpha, a_\beta] = -\delta_{\alpha\beta}a_\alpha, \quad [N_\alpha, a_\beta^+] = \delta_{\alpha\beta}a_\alpha^+,$$

то собственные векторы  $\mathcal{H}$ , принадлежащие собственным значениям

$$E(n_1, n_2, n_3) = \sum_{\alpha=1}^3 \hbar\omega_\alpha \left(n_\alpha + \frac{1}{2}\right),$$

имеют вид

$$\Psi(n_1, n_2, n_3) = (a_1^+)^{n_1} (a_2^+)^{n_2} (a_3^+)^{n_3} \Psi_0 \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! n_3!}},$$

где вектор  $\Psi_0$  удовлетворяет условиям

$$a_\alpha \Psi_0 = 0, \quad \langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle = 1.$$

Эти векторы попарно ортогональны:

$$\langle \Psi(n'_1, n'_2, n'_3) | \Psi(n_1, n_2, n_3) \rangle = \delta_{n'_1 n_1} \delta_{n'_2 n_2} \delta_{n'_3 n_3}.$$

Уровни энергии осциллятора не вырождены, если частоты  $\omega_1, \omega_2, \omega_3$  несоизмеримы, т.е. если не найдется двух различных троек чисел  $n_1, n_2, n_3$  и  $n'_1, n'_2, n'_3$ , для которых было бы справедливо равенство

$$\omega_1 n_1 + \omega_2 n_2 + \omega_3 n_3 = \omega_1 n'_1 + \omega_2 n'_2 + \omega_3 n'_3.$$

Рассмотрим противоположный случай изотропного осциллятора, когда все частоты равны друг другу:

$$\omega_1 = \omega_2 = \omega_3 = \omega.$$

В этом случае гамильтониан принимает вид

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} p^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 r^2.$$

Векторы  $\Psi(n_1, n_2, n_3)$  – попрежнему собственные векторы гамильтониана, принадлежащие собственному значению

$$E(n) = \hbar\omega \left(n + \frac{3}{2}\right), \quad n = n_1 + n_2 + n_3.$$

Уровни энергии вырождены, причем кратность вырождения  $n$ -го уровня равна числу способов представления целого числа  $n$  в виде суммы трех неотрицательных чисел

$$d(n) = \frac{(n+1)(n+2)}{2}.$$

Вырождение уровней, очевидно, связано с тем, что гамильтониан изотропного осциллятора более симметричен, чем гамильтониан осциллятора с несоизмеримыми частотами. В случае изотропного осциллятора гамильтониан не изменяет своей формы при замене переменных

$$a_\alpha = A_{\alpha\beta} a'_\beta, \quad a_\alpha^+ = a'^+_\beta A^+_{\beta\alpha}$$

с унитарной матрицей  $\hat{A}$ :

$$A^+_{\beta\alpha} A_{\alpha\gamma} = \delta_{\beta\gamma}.$$

Действительно, прямая подстановка операторов  $a$  в терминах  $a'$  приводит к выражению

$$\mathcal{H} = \sum_\alpha \hbar\omega(N'_\alpha + \frac{1}{2}E),$$

где

$$N'_\alpha = a'^+_\alpha a'_\alpha.$$

Штрихованные операторы удовлетворяют тем же перестановочным соотношениям, что и первоначальные:

$$[a'_\alpha, a'^+_\beta] = \delta_{\alpha\beta}.$$

Совокупность преобразований, осуществляемых унитарными матрицами третьего порядка, образуют группу  $SU(3)$ .

**4. Изотропный ротатор** – это система, динамические переменные которой – составляющие момента количества движения

$$J_\alpha^+ = J_\alpha, \quad [J_\alpha, J_\beta] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} J_\gamma.$$

Гамильтониан системы определяется формулой

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2I} \bar{J}^2,$$

где оператор **квадрата момента количества движения** равен

$$\bar{J}^2 = \sum_{\alpha=1}^3 J_\alpha^2.$$

Все операторы  $J_\alpha$  коммутируют с  $\bar{J}^2$ . Действительно, вычисление коммутатора приводит к сумме

$$[J_\alpha, \bar{J}^2] = \sum_\beta ([J_\alpha, J_\beta] J_\beta + J_\beta [J_\alpha, J_\beta]) = \sum_{\alpha,\beta} i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} (J_\gamma J_\beta + J_\beta J_\gamma),$$

в которой каждое слагаемое является произведением симметричного и антисимметричного по индексам  $\beta, \gamma$  сомножителей. Таким образом,

$$\forall \alpha \quad [J_\alpha, \bar{J}^2] = 0.$$

Из четырех наблюдаемых  $\bar{J}^2, J_\alpha$  можно выбрать две коммутирующие друг с другом. Обычно предполагают, выбирают пару  $\bar{J}^2$  и  $J_3$ . Эти операторы могут иметь общие собственные векторы. Если нумеровать их парой чисел  $\nu$  и  $\mu$ , то получатся соотношения

$$\bar{J}^2 |\nu, \mu\rangle = |\nu, \mu\rangle f(\nu), \quad f_\nu^* = f_\nu,$$



$$J_3|\nu, \mu\rangle = |\mu, \nu\rangle\phi(\mu), \quad \phi(\mu)^* = \phi(\mu).$$

Поскольку из трех величин  $J_\alpha$  одна уже явно выделена, удобно ввести следующие комбинации двух других:

$$J_+ = J_1 + iJ_2, \quad J_- = J_1 - iJ_2, \quad J_+^+ = J_-.$$

Новые переменные удовлетворяют таким перестановочным соотношениям:

$$[J_3, J_\pm] = \pm J_\pm, \quad [J_+, J_-] = 2J_3.$$

Первая пара коммутаторов приводит к тому, что абсолютная величина собственных значений оператора  $J_3$  неограничена.

Действительно, из этих соотношений следует, что  $J_\pm|\nu, \mu\rangle$  – собственные векторы  $J_3$ :

$$J_3 J_\pm|\nu, \mu\rangle = (J_\pm J_3 \pm J_\pm)|\nu, \mu\rangle = J_\pm|\nu, \mu\rangle(\phi(\mu) \pm 1).$$

В этом нет ничего удивительного, поскольку каждый из операторов проекции момента не обладает какими-либо особыми свойствами, кроме действительности. Положение меняется, когда вспоминают, что эти операторы должны быть проекциями **одного** вектора фиксированной длины. Оператор квадрата момента количества движения можно представить в форме

$$\vec{J}^2 = J_- J_+ + J_3^2 + J_3$$

или

$$\vec{J}^2 = J_+ J_- + J_3^2 - J_3.$$

При фиксированном значении  $\nu$  справедливы соотношения

$$\langle \mu\nu | \vec{J}^2 | \nu\mu \rangle = f(\nu) = \|J_+|\nu\mu\rangle\|^2 + \phi(\mu)^2 + \phi(\mu) = \|J_-|\nu\mu\rangle\|^2 + \phi(\mu)^2 - \phi(\mu),$$

означающие, что при фиксированном  $\nu$  значения функции  $\phi$  должны быть ограничены. Это означает, что должны существовать такие значения  $\mu_+$  и  $\mu_-$ , для которых справедливы равенства

$$J_+|\nu\mu_+\rangle = 0, \quad J_-|\nu\mu_-\rangle = 0.$$

Поскольку вектор  $|\nu\mu_-\rangle$  можно получить из вектора  $|\nu\mu_+\rangle$  последовательно выполняя операцию  $J_-$ , то должны выполняться равенства

$$\phi(\mu_-) = \phi(\mu_+) - n, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Добавляя к ним соотношения

$$\phi(\mu_+)^2 + \phi(\mu_+) = \phi(\mu_-)^2 - \phi(\mu_-),$$

получим систему уравнений, определяющую значения  $\phi(\mu_\pm)$ :

$$\phi(\mu_+) = \frac{n}{2}, \quad \phi(\mu_-) = -\frac{n}{2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Значения  $f(\nu)$  определяются формулой

$$f(\nu) = \phi(\mu_+)^2 + \phi(\mu_+) = \frac{n}{2}\left(\frac{n}{2} + 1\right).$$

Числа  $f(\nu)$ ,  $\phi(\mu)$  можно использовать для нумерации векторов базиса. Для этого определим последовательность целых и полуцелых чисел

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$$

и  $m$  область изменения которых определяется значениями  $j$ : при заданном  $j$  числа  $m$  принимают  $2j + 1$  значение:

$$m = -j, -j + 1, \dots, j - 1, j.$$

Эти числа будут нумеровать векторы базиса:

$$\mathcal{J}^2|j, m\rangle = |j, m\rangle j(j+1), \quad J_3|j, m\rangle = |j, m\rangle m.$$

Операторы  $J_{\pm}$  действуют на векторы базиса следующим образом:

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

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

Возвращаясь ротатору, заметим, что векторы  $|j, m\rangle$  – это собственные векторы гамильтониана ротатора:

$$\mathcal{H}|j, m\rangle = |j, m\rangle \frac{1}{2I} j(j+1).$$

Значения энергии зависят только от квантового числа  $j$ , а состояния с определенной энергией нумеруются парой чисел. Это означает, что уровни энергии вырождены, причем кратность вырождения уровня энергии  $E(j)$  равна  $2j + 1$ .

**5. Группа  $SU(2)$  и группа вращений.** Чтобы лучше уяснить, какая симметрия определяет вырождение уровней ротатора, выясним, каким преобразованиям можно подвергать составляющие момента количества движения. Для этого удобно воспользоваться особой параметризацией составляющих момента. Пусть операторы  $b_s, s = 1, 2$  удовлетворяют перестановочным соотношениям:

$$[b_s, b_t] = 0, \quad [b_s, b_t^+] = \delta_{st}.$$

В этом случае операторы

$$J_{\alpha} = \frac{1}{2} \sum_{st} b_s^+ \sigma_{st} b_t,$$

(под знаком суммы содержатся матричные элементы матриц Паули) самосопряжены,

$$J_{\alpha}^+ = J_{\alpha},$$

а коммутаторы их равны

$$[J_{\alpha}, J_{\beta}] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} J_{\gamma}.$$

Иначе говоря,  $J_{\alpha}$  – это составляющие момента количества движения.

Операторы  $b_s, b_s^+$  действуют в пространстве с базисом

$$|n_1, n_2\rangle = (b_1^+)^{n_1} (b_2^+)^{n_2} |0\rangle \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2!}}, \quad b_1|0\rangle = b_2|0\rangle = 0.$$

Определим числа

$$j = \frac{1}{2}(n_1 + n_2), \quad m = \frac{1}{2}(n_1 - n_2),$$

т.е.

$$n_1 = j + m, \quad n_2 = j - m.$$

Тогда векторы определенного выше базиса можно будет занумеровать следующим образом:

$$|j, m\rangle = (b_1^+)^{j+m} (b_2^+)^{j-m} |0\rangle \frac{1}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}}.$$

Поскольку

$$J_3 = \frac{1}{2}(b_1^+ b_1 - b_2^+ b_2), \quad J_+ = b_1^+ b_2, \quad J_- = b_2^+ b_1,$$

справедливы равенства

$$J_3|j, m\rangle = |j, m\rangle m,$$

$$J_+|j, m\rangle = |j, m+1\rangle\sqrt{(j-m)(j+m+1)}, \quad J_-|j, m\rangle = |j, m-1\rangle\sqrt{(j+m)(j-m+1)},$$

а поскольку

$$\vec{J}^2 = \frac{1}{2}(J_+J_- + J_-J_+) + J_3^2,$$

то

$$\vec{J}^2|j, m\rangle = |j, m\rangle j(j+1).$$

Операторы  $b_s, b_s^+$  определены с точностью до унитарного преобразования

$$b_s \Rightarrow b'_s = \sum_t A_{st} b_t, \quad b_s^+ \Rightarrow b'^+_s = \sum_t b_t^+ A^+_{ts}, \quad \sum_r A_{sr} A^+_{rt} = \delta_{st}.$$

Составляющие момента количества движения преобразуются в этом случае так:

$$J_\alpha \Rightarrow J'_\alpha = \frac{1}{2} \sum_{st} b'^+_{s\alpha} \sigma_{\alpha st} b'_t \quad \frac{1}{2} \sum_{st} b^+_{s\alpha} \sigma'_{\alpha st} b_t,$$

где матрица  $\sigma'_\alpha$  равна произведению

$$\sigma'_\alpha = A^+ \sigma_\alpha A.$$

Двухрядная унитарная матрица пропорциональна унитарной унимодулярной матрице:

$$A^+ = A^{-1} \Rightarrow A = e^{i\chi} U, \quad U^+ = U^{-1}, \quad \det U = 1.$$

Фазу  $e^{i\chi}$  можно включить в определение операторов  $b$ , а матрицу  $A$ , уже унимодулярную, представить в форме

$$A = A(\xi, \vec{n}) = \exp(i \frac{\xi}{2} \vec{n} \vec{\sigma}). = \exp(i \xi \vec{n} \vec{s}).$$

Вычисление матриц  $\sigma'$  легко свести к решению дифференциального уравнения. Поскольку

$$\frac{d\sigma_\alpha(\xi)}{d\xi} = \frac{d}{d\xi} \exp(-i\xi \vec{n} \vec{s}) \sigma_\alpha \exp(i\xi \vec{n} \vec{s}) = \exp(-i\xi \vec{n} \vec{s}) [\sigma_\alpha, \vec{n} \vec{s}] \exp(i\xi \vec{n} \vec{s}),$$

а

$$[\sigma_\alpha, \vec{n} \vec{s}] = i \epsilon_{\alpha\beta\gamma} n_\beta \sigma_\gamma,$$

то

$$\frac{d\sigma_\alpha(\xi)}{d\xi} = i \epsilon_{\alpha\beta\gamma} n_\beta \sigma_\gamma(\xi).$$

Удобно записать это уравнение в векторной форме:

$$\frac{d\vec{\sigma}(\xi)}{d\xi} = i(\vec{n} \times \vec{\sigma}(\xi)).$$

Очевидно, что составляющая  $\vec{\sigma}$  вдоль вектора  $\vec{n}$  не изменяется:

$$\frac{d\vec{n} \vec{\sigma}(\xi)}{d\xi} = i \vec{n} (\vec{n} \times \vec{\sigma}(\xi)) = 0.$$

Представляя  $\vec{\sigma}$  в форме

$$\vec{\sigma} = \vec{\sigma} - \vec{n}(\vec{n} \vec{\sigma}) + \vec{n}(\vec{n} \vec{\sigma}) = \vec{\sigma}_\perp + \vec{\sigma}_\parallel,$$

получим уравнения

$$\frac{d\vec{\sigma}_{\parallel}}{d\xi} = 0, \quad \frac{d^2\vec{\sigma}_{\perp}}{d\xi^2} = \vec{\sigma}_{\perp}.$$

Таким образом

$$\vec{\sigma}_{\parallel}(\xi) = \vec{n}(\vec{n}\vec{\sigma}), \quad \vec{\sigma}_{\perp} = \vec{C}\cos\xi + \vec{F}\sin\xi.$$

Постоянные интегрирования находятся по начальным условиям:

$$\begin{aligned} \vec{C} &= \vec{\sigma}_{\perp}(0) = \vec{\sigma} - \vec{n}(\vec{n}\vec{\sigma}), \\ \vec{F} &= \frac{d\vec{\sigma}_{\perp}}{d\xi}(0) = (\vec{n} \times \vec{\sigma}). \end{aligned}$$

Окончательная формула выглядит так:

$$\vec{\sigma}(\xi) = \vec{\sigma}\cos\xi + \vec{n}(\vec{n}\vec{\sigma})(1 - \cos\xi) + (\vec{n} \times \vec{\sigma})\sin\xi.$$

### 7. Сферически симметричные системы.

На прошлой лекции нам пришлось иметь дело с преобразованием матриц Паули

$$\hat{\sigma}_{\alpha} \Rightarrow \hat{\sigma}'_{\alpha} = S\hat{\sigma}_{\alpha}S^{+},$$

где

$$S = \exp(-i\xi\vec{n}\vec{s}).$$

Эта формула является прямым следствием справедливости перестановочных соотношений

$$[s_{\alpha}, s_{\beta}] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}s_{\gamma},$$

и

$$[s_{\alpha}, \sigma_{\beta}] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\sigma_{\gamma}.$$

Первая серия коммутаторов означает, что  $s_{\alpha}$  – это операторы момента количества движения. Векторную природу матриц Паули определяет второй набор коммутаторов. Эти наблюдения можно использовать для определения в квантовой механике скалярных и векторных величин.

Если операторы  $J_{\alpha}, \alpha = 1, 2, 3$  – операторы момента количества движения системы, то действующий в этой системе оператор  $V$  называют **скаляром**, если выполняются перестановочные соотношения

$$\forall\alpha [J_{\alpha}, V] = 0.$$

Набор операторов  $A_{\alpha}, \alpha = 1, 2, 3$  образует **вектор** если эти операторы удовлетворяют перестановочным соотношениям

$$[J_{\alpha}, A_{\beta}] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}A_{\gamma}.$$

Заметим, что принятое определение вектора и скаляру приводит к естественному утверждению: скалярное произведение векторов – это скаляр.

$$[J_{\alpha}, A_{\beta}] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}A_{\gamma}, \quad [J_{\alpha}, B_{\beta}] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}B_{\gamma}, \quad \vec{A}\vec{B} = \sum_{\alpha} A_{\alpha}B_{\alpha} \quad \Rightarrow \quad [\vec{A}\vec{B}] = 0.$$

Теперь можно определить сферически симметричный гамильтониан. Гамильтониан  $\mathcal{H}$  называют сферически симметричным, если выполняются перестановочные соотношения

$$[J_{\alpha}, \mathcal{H}] = 0.$$

Операторы  $J_{\alpha}$  – это декартовы составляющие момента количества движения системы. Очевидно, что гамильтониан вида

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m}\vec{p}^2 + V(r), \quad r = \sqrt{\sum_{\alpha} x_{\alpha}^2}, \quad -$$

это скаляр. При изучении сферически симметричных систем удобно определить сферический базис. Его образуют векторы

$$\begin{aligned}\hat{r} &= (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta), \\ \hat{\theta} &= (\cos\theta\cos\phi, \cos\theta\sin\phi, -\sin\theta), \\ \hat{\phi} &= (-\sin\phi, \cos\phi, 0).\end{aligned}$$

Они попарно ортогональны и удовлетворяют соотношениям

$$\begin{aligned}\hat{\theta} \times \hat{\phi} &= \hat{r}, \quad \hat{r} \times \hat{\theta} = \hat{\phi}, \quad \hat{\phi} \times \hat{r} = \hat{\theta}; \\ \frac{\partial \hat{r}}{\partial \theta} &= \hat{\theta}, \quad \frac{\partial \hat{\theta}}{\partial \theta} = -\hat{r}, \quad \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial \theta} = 0; \\ \frac{\partial \hat{r}}{\partial \phi} &= \hat{\phi}\sin\theta, \quad \frac{\partial \hat{\theta}}{\partial \phi} = \hat{\phi}\cos\theta, \quad \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial \phi} = -(\hat{r}\sin\theta + \hat{\phi}\cos\theta).\end{aligned}$$

Поскольку

$$\vec{r} = \hat{r}r,$$

то операторы импульса и момента в импульса сферическом базисе принимают вид

$$\begin{aligned}\hat{p} &= -i\hbar(\hat{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\hat{\theta}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r\sin\theta}\hat{\phi}\frac{\partial}{\partial \phi}). \\ \hat{l} &= -i\hat{\phi}\frac{\partial}{\partial \theta} + i\frac{1}{\sin\theta}\hat{\theta}\frac{\partial}{\partial \phi}\end{aligned}$$

Нетрудно найти декартовы составляющие момента импульса:

$$\vec{e}_3 \vec{l} = l_3 = -i\frac{\partial}{\partial \phi}.$$

Аналогично вычисляются величины

$$\begin{aligned}\hat{l}_+ &= \exp(i\phi)\left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial \phi}\right), \\ \hat{l}_- &= \exp(-i\phi)\left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial \phi}\right)\end{aligned}$$

и квадрат момента импульса

$$\hat{l}^2 = -\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial \theta}\right) - \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial \phi^2}.$$

Поскольку оператор Лапласа в сферических координатах имеет вид

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial \theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial \phi^2}\right),$$

то сферически симметричный гамильтониан сведется в координатном пространстве к оператору

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right)\right) + \frac{\hbar^2}{2mr^2}\hat{l}^2 + V(r).$$

Обозначая символом  $Y_{lm}(\hat{r})$  общее решение уравнений

$$\begin{aligned}l_3 Y_{lm}(\hat{r}) &= m Y_{lm}(\hat{r}), \\ \hat{l}^2 Y_{lm}(\hat{r}) &= l(l+1) Y_{lm}(\hat{r}),\end{aligned}$$

заметим, что в качестве частного решения уравнения

$$\mathcal{H}\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r})$$

можно взять произведение

$$\Psi(\vec{r}) = R(r)Y_{lm}(\hat{r}),$$

если функция  $R(r)$  удовлетворяет уравнению

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} R(r) \right) + \left( \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} l(l+1) + V(r) \right) R(r) = ER(r).$$

Среди индексов, выделяющих частные решения уравнения Шредингера, содержатся величины  $l$  и  $m$ . Уравнение для функции  $R(r)$ , которое определяет значение дискретных уровней энергии  $E$ , индекса  $m$  не содержит. Таким образом

каждое собственное значение сферически симметричного гамильтониана вырождено, по меньшей мере,  $(2l + 1)$ -кратно.

Это свойство уровней является прямым следствием сферической симметрии гамильтониана.

**8. Уровни энергии в центрально-симметричном поле.**

Уровни энергии в центрально симметричном поле определяются квадратично интегрируемыми решениями уравнения

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} R(r) \right) + \left( \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} l(l+1) + V(r) \right) R(r) = ER(r),$$

$$\int_0^\infty |R(r)|^2 r^2 dr < \infty.$$

Чтобы упростить структуру дифференциального оператора уравнения, удобно перейти к функции  $u(r)$ :

$$\Psi(r) = \frac{1}{r} u(r).$$

Условие квадратичной интегрируемости примет вид

$$\int_0^\infty |u(r)|^2 dr < \infty,$$

а само уравнение сведется к

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} u(r) + \left( \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} l(l+1) + V(r) \right) u(r) = Eu(r).$$

Чтобы изучить поведение решения полученного уравнения при асимптотически больших значениях радиуса оставим в уравнении наиболее существенные при больших  $r$  слагаемые. Если потенциал убывает на больших расстояниях, то уравнение сводится к

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} u(r) = Eu(r).$$

Определяя величину

$$k = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar},$$

получим

$$u(r) = C_1 e^{kr} + C_2 e^{-kr}.$$

Убывающее на больших расстояниях решение возможно лишь в том случае, если

$$E < 0, \quad \dots \quad k > 0, \quad C_1 = 0.$$

Заметим, что в классических терминах условие отрицательности энергии выделяет **финитные движения**. Можно сказать, что

возможные дискретные уровни энергии соответствуют классическим финитным движениям.

Если при неограниченном возрастании радиуса потенциал стремится к некоторому положительному пределу,

$$\lim_{r \rightarrow \infty} V(r) = V_{\infty} > 0,$$

то решение уравнения Шредингера на больших расстояниях походит на решение уравнения

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} u(r) + V_{\infty} u(r) = E u(r).$$

Если энергия меньше предельного значения потенциала, то

$$u(r) = C_1 e^{kr} + C_2 e^{-kr}, \quad k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V_{\infty} - E)}.$$

Квадратично интегрируемое решение выделяется условием  $C_1 = 0$ . Если

$$\lim_{r \rightarrow 0} r^2 V(r) = 0,$$

то решения уравнения Шредингера ведут себя на малых расстояниях как решения уравнения

$$-\frac{d^2}{dr^2} u(r) + \frac{1}{r^2} l(l+1) u(r) = 0,$$

т.е. как функции

$$u(r) = C_1 r^{-l} + C_2 r^{l+1}.$$

Функция  $u(r)$  регулярна в начале координат при условии  $C_1 = 0$ . Таким образом, регулярное решение уравнения Шредингера ведет себя на малых расстояниях как

$$\Psi(r) \sim r^l u(r), \quad u(0) \neq 0.$$

Если потенциал стремится к нулю при возрастании радиуса, то решение уравнения Шредингера естественно искать в форме

$$u(r) = r^l e^{\alpha r} w(r), \quad \alpha = \frac{1}{\hbar} \sqrt{-2mE}, \quad E < 0.$$

Функция  $w(r)$  должна удовлетворять уравнению

$$r \frac{d^2 w}{dr^2} + (2(l+1) - 2\alpha r) \frac{dw}{dr} - (2\alpha(l+1) - \frac{2m}{\hbar^2} r V(r)) w(r) = 0.$$

В случае достаточно простых потенциалов решение уравнение удобно представить в форме степенного ряда.

Рассмотрим, например, случай кулонова потенциала притяжения, когда

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r}.$$

После замены переменной

$$r = \frac{1}{2\alpha} x$$

уравнение принимает вид

$$x \frac{d^2 w}{dx^2} + (c - x) \frac{dw}{dx} - aw(x) = 0,$$

где

$$a = l + 1 - \frac{mZe^2}{\alpha \hbar^2}, \quad c = 2(2l + 1).$$

Это – хорошо известное **вырожденное гипергеометрическое уравнение**, которое допускает решение в форме ряда

$$w(x) = \sum_{s=0}^{\infty} b_s x^s.$$

Подстановка ряда в уравнение приводит к рекуррентным соотношениям

$$b_{s+1} = \frac{s+a}{(s+1)(s+c)} b_s.$$

В общем случае при больших  $s$  справедливы соотношения

$$b_{s+1} \sim \frac{1}{s} b_s, \quad \dots \quad b_s \sim \frac{1}{s!},$$

поэтому определяющий функцию  $w(x)$  ряд сходится при всех значениях  $x$ . Однако, этот ряд определяет экспоненциально растущую при больших  $x$  функцию:

$$w(x) \sim e^{Bx}, \quad B > 0.$$

Функция  $w(x)$  может оказаться квадратично интегрируемой только в одном случае: определяющий ее бесконечный ряд превращается в конечную сумму. Это возможно лишь в тех случаях, когда параметр  $a$  принимает целые отрицательные значения:

$$a = -n_r, \quad n_r = 0, 1, 2, \dots$$

где  $n_r$  – **радиальное квантовое число**. Подставляя в это равенство явное значение  $a$ , получим

$$\alpha = \frac{mZe^2}{\hbar^2} \frac{1}{n}, \quad n = n_r + l + 1,$$

$n$  – **главное квантовое число**. Вспоминая, что  $\alpha$  равно  $\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$ , найдем что уровни энергии можно перечислить формулой

$$E_n = -\frac{1}{2n^2} E_0.$$

Энергия  $E_0$  равна

$$E_0 = \frac{Ze^2}{r_a},$$

где постоянная размерности длины  $r_a$  равна

$$r_a = \frac{\hbar^2}{mZe^2}.$$

В случае  $Z = 1$  величина  $r_a$  превращается в **боровский радиус**

$$r_B = \frac{\hbar^2}{me^2} = 0.529117249 \times 10^{-10} m,$$

а энергия  $E_0$  принимает значение

$$E_0 = \frac{me^4}{\hbar^2} = 27.21 eV = 4.36 \times 10^{-11} = 2Ry.$$

Заметим, что приступая к процедуре квантования энергии мы ожидали, что уровни энергии можно будет перечислить парой индексов  $n_r, l$ , поэтому каждый уровень в сферически симметричном поле будет  $2l + 1$ -кратно вырожден. В случае произвольного сферического поля это правильно. Однако, пример кулонова поля показывает, что дело обстоит не так просто. Уровни энергии нумеруются числами

$$n = n_r + l + 1,$$



поэтому при фиксированном значении  $n$  числа  $l$  принимают  $n$  значений

$$l = 0, 1, \dots, n-1,$$

Кратность вырождения уровня  $E_n$  равна

$$d(n) = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2.$$

При выполнении конкретных расчетов причину увеличения кратности вырождения понять довольно трудно. Поэтому соответствующее вырождение иногда называют **случайным**. Однако, мы уже знаем, что всякое вырождение связано с некоторой нетривиальной симметрией. Кажущаяся случайность связана всего лишь с тем, что дополнительная симметрия гамильтониана не сразу бросается в глаза. Между тем, причина и смысл этой симметрии были открыты еще в XXVIII веке Лапласом.

#### Сферические гармоники

Числа  $l$  в этом разделе принимают значения  $l = 0, 1, \dots$ . Векторы  $\Phi(j, m)$  в координатном пространстве будут обозначаться  $Y_{lm}(\theta, \phi)$ . Интеграл по сфере единичного радиуса

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi d\phi \sin\theta d\theta F(\theta, \phi)$$

будет обозначаться символом

$$\int d\hat{r} F(\hat{r}).$$

#### 4. Уравнение

$$\hat{l}_3 F(\theta, \phi) = l F(\theta, \phi)$$

имеет решение

$$F(\theta, \phi) = C \exp(il\phi) g(\theta).$$

#### 5. Функция $F$ из предыдущего раздела будет решением уравнения

$$\hat{l}_+ F(\theta, \phi) = 0,$$

если

$$g(\theta) = \sin^l \theta.$$

#### 6. Вектор $Y_{ll}$ , нормированный условием

$$\int d\hat{r} |Y_{ll}(\hat{r})|^2 = 1,$$

равен

$$Y_{ll} = C \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}} \frac{1}{2^l l!} \exp(il\phi) \sin^l \theta, \quad |C| = 1.$$

Вычисляя нормировочный интеграл, воспользуйтесь формулой

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} dx \sin^{\mu-1} x = 2^{\mu-2} B\left(\frac{\mu}{2}, \frac{\mu}{2}\right).$$

#### 7. Покажите что

$$\hat{l}_-(e^{im\phi} f(\theta)) = e^{i(m-1)\phi} \sin^{1-m} \theta \frac{d \sin^m \theta f}{d \cos \theta}.$$

8. Последовательно действуя на вектор  $Y_{ll}$  оператором  $\hat{l}_-$  покажите что

$$Y_{lm} = B\hat{l}_-^{l-m}(e^{i\phi}\sin^l\theta) = Be^{im\phi}\sin^{-m}\theta\frac{d^{l-m}}{d\cos\theta^{l-m}}\sin^{2l}\theta.$$

9. Используя соотношение

$$Y_{l,m-1} = \hat{l}_- Y_{lm} \frac{1}{\sqrt{(l+m)(l-m+1)}}$$

покажите, что

$$Y_{lm} = \hat{l}_-^{l-m}(Y_{ll})\sqrt{\frac{(l+m)!}{(2l)!(l-m)!}}.$$

10. Вектор  $Y_{lm}$  равен ( $|C| = 1$ ):

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = C\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l+m)!}{(l-m)!}}\frac{1}{2^l l! \sin^m\theta}e^{im\phi}\frac{d^{l-m}}{d\cos\theta^{l-m}}\sin^{2l}\theta.$$

11. Вектор  $Y_{l,-l}$  пропорционален  $e^{-il\phi}\sin^l\theta$ .

12. Справедливо равенство

$$\hat{l}_+^m(e^{-il\phi}\sin^l\theta) = (-1)^m e^{i(m-l)\phi}\sin^{m-l}\theta\frac{d^m}{d\cos\theta^m}\sin^{2l}\theta.$$

13. Начав построение сферических гармоник с вектора  $Y_{l,-l}$ , получите эквивалентное (10) выражение  $Y_{lm}$ :

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = (-1)^m C\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\frac{1}{2^l l!}e^{im\phi}\sin^m\theta\frac{d^{l+m}}{d\cos\theta^{l+m}}\sin^{2l}\theta.$$

Полиномы Лежандра определяются формулой

$$P_l(\cos\theta) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{d\cos\theta^l} (\cos\theta^2 - 1)^l.$$

Справедливо соотношение

$$\int_{-1}^1 P_{l'}(x)P_l(x)dx = \delta_{l'l}\frac{2}{2l+1}.$$

Явный вид первых пяти полиномов Лежандра:

$$P_0(x) = 1, \quad P_1(x) = x, \quad P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1),$$

$$P_3 = \frac{1}{2}(5x^2 - 3x), \quad P_4 = \frac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3).$$

Справедлива формула

$$\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = \frac{1}{r_>} \sum_0^{\infty} \left(\frac{r_<}{r_>}\right)^l P_l(\hat{r}\hat{r}'), \quad r_< = \min(r, r'), r_> = \max(r, r').$$

Присоединенные полиномы Лежандра равны

$$P_l^m = \sin^m \theta \frac{d^m}{d \cos \theta^m} P_l(\cos \theta), m \geq 0,$$

$$P_l^{-m}(\cos \theta) = (-1)^m \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(\cos \theta).$$

$$\int_{-1}^1 P_l^m(x) P_l^m(x) dx = \delta_{l'l} \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!}.$$

14. Если коэффициент  $C$  выбрать равным  $i^l$ , то сферические гармоники определяются формулой

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} i^l \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} e^{im\phi} P_l^{|m|}(\cos \theta)$$

15. Справедливы соотношения

$$Y_{l0}(\theta, \phi) = i^l \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta).$$

$$Y_{l,-m} = (-1)^{l-m} Y_{lm}^+.$$

16. Формулу сложения для полиномов Лежандра:

$$P_l(\cos \gamma) = P_l(\cos \theta) P_l(\cos \theta') + 2 \sum_{m=1}^l \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(\cos \theta) P_l^m(\cos \theta') \cos(m(\phi - \phi')),$$

где

$$\cos \gamma = \cos \theta \cos \theta' + \sin \theta \sin \theta' \cos(\phi - \phi'),$$

можно записать в форме

$$P_l(\hat{r} \hat{r}') = 4\pi \sum_{m=-l}^l Y_{lm}(\hat{r}) Y_{lm}(\hat{r}')^+.$$

17. Применяя формулу сложения для полиномов Лежандра покажите, что формуле

$$e^{ix \cos \phi} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(x) P_l(\cos \phi),$$

$$j_l(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{l+\frac{1}{2}}(x).$$

можно придать вид разложения плоской волны по сферическим гармоникам

$$e^{i \frac{\vec{r} \vec{p}}{\hbar}} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} i^l j_l\left(\frac{pr}{\hbar}\right) \sum_{m=-l}^l Y_{lm}(\hat{r}) Y_{lm}(\hat{p})^+.$$

18. Функции  $Y_{lm}(\theta, \phi) = Y_{lm}(\hat{r})$  образуют ортонормированный базис в пространстве квадратично интегрируемых функций, заданных на единичной сфере:

$$\int Y_{lm}(\hat{r})^+ Y_{l'm'}(\hat{r}) d\hat{r} = \delta_{ll'} \delta_{mm'},$$

$$\sum_{lm} Y_{lm}(\hat{r}) Y_{lm}(\hat{r}')^+ = \delta(\hat{r} - \hat{r}'),$$

$$F(\hat{r}) = \int \delta(\hat{r} - \hat{r}') F(\hat{r}') d\hat{r}'.$$

### Симметрия кулонова потенциала

На прошлой лекции мы получили формулу для уровней энергии в кулоновом поле

$$E_n = -\frac{1}{2n^2} \frac{Ze^2}{r_0}, \quad r_0 = \frac{\hbar^2}{mZe^2}.$$

Мы нашли кратность вырождения уровней энергии. Стационарные состояния в центрально-симметричном поле нумеруются числами  $n_r, l, m$ , а уровни энергии - числами  $n_r, l$ :

$$\mathcal{H}\Psi(n_r, l, m) = \Psi(n_r, l, m)E(n_r, l).$$

Поскольку при заданном  $l$  число  $m$  принимает  $2l + 1$  значений, то уровни энергии в сферически симметричном поле, вообще говоря, вырождены  $(2l+1)$ -кратно. Однако, кулоново поле дает нам пример исключения из правил. Поскольку число  $n$  равно

$$n = n_r + l + 1,$$

то при заданной энергии, т.е. при заданном числе  $n$ , число  $l$  может принимать  $n$  значений:  $l = 0, 1, \dots, n - 1$ . Поэтому энергией  $E_n$  обладают

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2$$

состояний. По ходу решения дифференциального уравнения, приводящего к значениям уровней энергии, трудно объяснить физическую причину столь высокой кратности уровней. Поэтому в некоторых учебниках это вырождение называют "случайным", связанным с особенностями кулонова потенциала. Между тем мы уже знаем, что вырождение уровней энергии связано с наличием некоммутирующих интегралов движения. Чем больше таких интегралов, тем выше кратность вырождения.

С другой стороны, некоммутирующие интегралы движения определяют нетривиальную симметрию гамильтониана.

Таким образом, вырождение уровней энергии связано со свойствами симметрии гамильтониана.

В классической физике траектория точечной частицы, движущейся в центрально симметричном поле, целиком лежит в плоскости, ортогональной к постоянному во времени моменту импульса. Однако, в общем случае она не обязана быть замкнутой. Между тем орбиты вращающихся вокруг Солнца планет замкнуты, что стимулирует поиск физической причины более высокой симметрии траектории частицы, движущейся в поле

$$V(r) = -\frac{G}{r}.$$

Эта задача была решена Лапласом еще в XVIII веке. Лаплас выяснил, что в таком поле сохраняется не только момент импульса  $\vec{L}$ , но и еще один вектор:

$$\vec{A} = \frac{1}{p_0} (\vec{L} \times \vec{p}) + \frac{\vec{r}}{r}.$$

В начале XX века он получил названия вектора **Лапласа-Рунге-Ленца**. В 1925 году Паули приступая решению задачи об уровнях энергии атома водорода определил оператор

$$\vec{A} = \frac{1}{2p_0} ((\vec{l} \times \vec{p}) - (\vec{p} \times \vec{l})) + \frac{\vec{r}}{r}, \quad p_0 = \frac{\hbar}{r_0}.$$

Паули, естественно определил три матрицы, потому что понятие оператора в квантовую механику тогда еще не проникло. Называя три соответствующие оператора вектором, мы подразумеваем пока лишь число операторов. Имя вектора эти операторы с полным правом

могут получить лишь после вычисления коммутаторов наших величин с моментом импульса. Прямой подсчет показывает, что справедливы перестановочные соотношения

$$[l_\alpha, A_\beta] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\gamma,$$

показывающие, что мы действительно имеем дело с квантовым вектором Лапласа-Рунге-Ленца.

Далее, взяв в качестве гамильтониана оператор

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m}\vec{p}^2 - \frac{Ze^2}{r},$$

нетрудно показать, что

$$[\mathcal{H}, A_\alpha] = 0.$$

Таким образом  $\vec{A}$  – интеграл движения. Составляющие вектора  $\vec{A}$  не коммутируют. Прямое вычисление показывает, что

$$[A_\alpha, A_\beta] = -i\frac{2\mathcal{H}}{E_0}\epsilon_{\alpha\beta\gamma}l_\gamma, \quad E_0 = \frac{Ze^2}{r_0}.$$

Наконец, достаточно просто выводится формула

$$\vec{A}^2 = \frac{2\mathcal{H}}{E_0}(\vec{l}^2 + 1) + 1.$$

Именно это соотношение использовал Паули при выводе формулы уровней энергии атома водорода.

Полезно помнить, что в случае связанных состояний электрона, когда энергия отрицательна, оператор  $(-\mathcal{H})$  положительно определен.

Для дальнейшего удобно определить новые переменные

$$k_\alpha = BA_\alpha = A_\alpha B, \quad \frac{1}{B^2} = -\frac{2\mathcal{H}}{E_0}.$$

Операторы  $l_\alpha, k_\alpha$  эрмитовы, а их коммутаторы равны

$$[l_\alpha, l_\beta] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}l_\gamma,$$

$$[l_\alpha, k_\beta] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}k_\gamma,$$

$$[k_\alpha, k_\beta] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}l_\gamma.$$

Кроме того, векторы  $\vec{k}$  и  $\vec{l}$  ортогональны:

$$\vec{k}\vec{l} = \vec{l}\vec{k} = 0.$$

Все эти соотношения имеют чисто кинематическую природу. Равенство

$$\vec{k}^2 + \vec{l}^2 + 1 = -\frac{E_0}{2\mathcal{H}}$$

определяет гамильтониан как функцию  $k_\alpha, l_\alpha$ , причем симметрия гамильтониана связана с возможными каноническими преобразованиями этих переменных. Чтобы прояснить структуру этих преобразований, удобно перейти к новым переменным

$$\vec{J}_1 = \frac{1}{2}(\vec{l} + \vec{k}),$$

$$\vec{J}_2 = \frac{1}{2}(\vec{l} - \vec{k}).$$

Перестановочные соотношения

$$\begin{aligned} [J_{1\alpha}, J_{1\beta}] &= i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} J_{1\gamma}, \\ [J_{2\alpha}, J_{12\beta}] &= i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} J_{2\gamma}, \\ [J_{1\alpha}, J_{2\beta}] &= 0 \end{aligned}$$

показывают, что  $\vec{J}_1, \vec{J}_2$  – два независимых момента количества.

В качестве наблюдаемых, определяющих чистые состояния системы, можно выбрать операторы  $\vec{J}_1^2, J_{1z}, \vec{J}_2^2, J_{2z}$ . Это означает, что базис пространства состояний системы можно выбрать как прямое произведение векторов

$$\Psi(j_1, m_1; j_2, m_2) = \Psi(j_1, m_1) \otimes \Psi(j_2, m_2).$$

Фактически состояния атома водорода будут занимать лишь часть этого пространства, т.к. векторы  $\vec{J}_1$  и  $\vec{J}_2$  должны иметь равную величину:

$$\vec{J}_1^2 = \vec{J}_2^2 = \frac{1}{4}(\vec{k}^2 + \vec{l}^2).$$

Это означает, что базис пространства состояний нумеруется тремя числами:

$$e_{jm_1m_2} = \Psi(j, m_1) \otimes \Psi(j, m_2),$$

где числа  $j, m_1, m_2$  принимают следующие значения:

$$\begin{aligned} j &= 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots \\ m_1, m_2 &= -j, -j+1, \dots, j-1, j. \end{aligned}$$

Учитывая полученные соотношения, можно представить оператор энергии в форме

$$\mathcal{H} = -\frac{E_0}{2(4\vec{J}^2 + 1)},$$

где вместо  $\vec{J}$  может стоять любой из векторов  $\vec{J}_1$  или  $\vec{J}_2$ . Таким образом, задача на собственные значения имеет решение

$$\mathcal{H}e_{jm_1m_2} = e_{jm_1m_2} \left(-\frac{E_0}{2n^2}\right).$$

Числа  $n = 2j + 1$  принимают значения

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

Кратность вырождения уровня определяется числом значений, которое принимает пара индексов  $m_1, m_2$  при заданном значении  $j$ :

$$d(E_n) = (2j+1)(2j+1) = n^2.$$

Поскольку момент импульса равен

$$\vec{l} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2,$$

то, как следует из общей теории сложения моментов, собственные значения оператора  $\vec{l}^2$  принимают при заданном  $j$  равны  $l(l+1)$  при  $l = 0, 1, \dots, 2j = n-1$ .

Прежде чем заняться сложением моментов, займемся вычислением средних значений различных степеней радиуса. Эти величины позволяют составить наглядные представления о строении атома водорода. Нам придется коснуться некоторых более общих тем.

Многие важные результаты классической физики связаны с простым математическим утверждением: средние значения величин, которые сводятся к производным некоторой функции по времени, равны нулю, т.е.

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t \frac{df(t)}{dt} dt = 0.$$

Практическая ценность этого внешне тривиального результата определяется тем, что производную функции  $f$  можно выразить как соотношение между некоторыми динамическими переменными, что позволяет найти связь средних значений этих величин.

Приведенные рассуждения легко переносятся в квантовую механику. Поскольку производная по времени в силу уравнений Гайзенберга сводится к вычислению коммутатора, то роль классической формулы будет играть такое построение:

$$\mathcal{H}|\Psi\rangle = |\Psi\rangle E \implies \langle \Psi | [\mathcal{H}, F] | \Psi \rangle = (E - E) \langle \Psi | F | \Psi \rangle = 0.$$

Рассмотрим, например величину  $F = \vec{r}\vec{p}$ . Ее коммутатор с гамильтонианом равен

$$[\vec{r}\vec{p}, \mathcal{H}] = 2i\hbar\mathcal{H} - i\hbar\left(2V(r) + x_\alpha \frac{\partial V}{\partial x_\alpha}\right) = i\hbar(2\hat{T} - x_\alpha \frac{\partial V}{\partial x_\alpha}).$$

В состоянии с определенной энергией

$$2\langle T \rangle = \langle x_\alpha \frac{\partial V}{\partial x_\alpha} \rangle.$$

Эта формула особенно проста, если потенциал - однородная функция координат. Например, в случае кулонова потенциала

$$x_\alpha \frac{\partial V}{\partial x_\alpha} = -V(r).$$

В этом случае формула, связывающая средние, принимает вид

$$2\langle \mathcal{H} \rangle = \langle V(r) \rangle.$$

В результате получается соотношение

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{1}{r_0 n^2}.$$

Нетрудно найти среднее значение  $\frac{1}{r^2}$ . Для этого можно воспользоваться формулой Фейнмана-Гельмана, связывающей малые изменения среднего значения энергии с малыми изменениями гамильтониана. Если гамильтониан системы зависит от параметра  $\lambda$ , то от этого же параметра зависят как уровни энергии, так и собственные векторы:

$$\mathcal{H}(\lambda)\Psi(\lambda) = \Psi(\lambda)E(\lambda).$$

Если векторы  $\Psi(\lambda)$  нормированы на единицу при любом значении  $\lambda$ , то

$$\langle \delta\Psi(\lambda) | \Psi(\lambda) \rangle + \langle \Psi(\lambda) | \delta\Psi(\lambda) \rangle = 0.$$

Варьируя обе части уравнения на собственные значения, получим равенство

$$\langle \Psi(\lambda) | \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \lambda} | \Psi(\lambda) \rangle = \frac{\partial E(\lambda)}{\partial \lambda}.$$

Гамильтониан, определяющий радиальное движение в состоянии с определенным моментом импульса зависит от квантового числа  $l$ :

$$\mathcal{H}_r = \mathcal{H}_0 + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2}.$$

Поскольку  $l$  в этой формуле можно считать непрерывным параметром, то можно вычислить среднее

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = -\frac{2m}{\hbar^2(2l+1)} \frac{\partial}{\partial l} E_0 \frac{1}{n^2},$$

что дает

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{1}{r_0^2 n^3 (l + \frac{1}{2})}.$$

Нам уже известны средние значения трех степеней  $r$ :  $r^{-2}$ ,  $r^{-1}$  и  $r^0 = 1$ . Этого достаточно, чтобы вычислить среднее значение любой степени радиуса с помощью рекуррентной формулы Крамерса:

$$\frac{s+1}{n^2} \langle r^s \rangle - (2s+1)r_0 \langle r^{s-1} \rangle + \frac{s(2l+1+s)(2l+1-s)}{4} r_0^2 \langle r^{s-2} \rangle = 0.$$

Формулу Крамерса можно получить, усредняя значения коммутаторов

$$\begin{aligned} [r^s, H] &= i \frac{\hbar s}{\mu} r^{s-2} \vec{r} \vec{p} + \frac{\hbar^2}{2\mu} s(s+1) r^{s-2}, \\ [r^s(\vec{r} \vec{p}), H] &= 2i\hbar r^s H - i\hbar r^s (2V + x_\alpha \frac{\partial V}{\partial x_\alpha}) + \\ &+ i \frac{\hbar s}{\mu} r^{s-2} (\vec{r} \vec{p})^2 + \frac{\hbar^2 s(s+1)}{2\mu} r^{s-2} (\vec{r} \vec{p}). \end{aligned}$$

Приведем важные для дальнейшего формулы:

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle &= \frac{1}{r_0^3 n^3 l(l + \frac{1}{2})(l+1)}, \\ \langle r \rangle &= \frac{r_0}{2} (3n^2 - l(l+1)), \\ \left\langle r^2 \right\rangle &= \frac{r_0^2 n^2}{2} (5n^2 + 1 - 3l(l+1)). \end{aligned}$$

### Сложение моментов

Разберем простой пример задачи, где вычисление уровней энергии требует сложения моментов количества движения.

Известно, что электрон проявляет себя как точечная частица лишь при нерелятивистских энергиях. При измерении значений уровней энергии атома водорода с точностью, которая требует учета релятивистских поправок, необходимо принять во внимание чисто квантовую степень свободы электрона – наличие у него собственного момента количества движения – спина.

Мы уже знаем, что со спином электрона можно связать переменные  $\vec{s} = \frac{1}{2} \vec{\sigma}$ . Наличие спина приводит к существованию у электрона магнитного момента

$$\vec{\mu} = \mu_0 \vec{s}.$$

Из формул релятивистской кинематики известно, что частица с собственным магнитным моментом  $\vec{\mu}$ , движущаяся в лабораторной системе координат, приобретает в ней электрический дипольный момент

$$\vec{d} = \frac{1}{c} (\vec{v} \times \mu).$$

Если такая частица попадает в электрическое поле, то она приобретает энергию

$$\Delta E = \vec{d} \vec{E}, \quad \vec{E} = -\vec{\nabla} \phi(\vec{r}).$$



Если поле обладает сферической симметрией, то

$$\vec{E} = -\vec{r} \frac{\phi'(r)}{r}$$

и приращение энергии сводится к

$$\Delta E = -\frac{\phi'(r)}{r} d\vec{r}.$$

Скалярное произведение в нашем случае сводится смешанному произведению, превращаясь в другое скалярное произведение:

$$d\vec{r} = \frac{\mu_0}{mc} (\vec{r} \times \vec{p}) \vec{s} = \frac{\mu_0 \hbar}{mc} \vec{l} \vec{s}.$$

Скалярное произведение можно представить в виде суммы квадратов векторов

$$\vec{l} \vec{s} = \frac{1}{2} (\vec{J}^2 - \vec{l}^2 - \vec{s}^2),$$

где величину  $\vec{J} = \vec{l} + \vec{s}$  – сумму момента импульса и спина – называют **полным моментом количества движения электрона**. Эта величина определяет одну из релятивистских поправок к энергии атома водорода.

Чтобы иметь возможность систематического изучения подобных задач, полезно развить общую теорию сложения моментов.

Предположим, что среди переменных, выделяющих чистые состояния системы содержатся переменные  $\vec{J}_1^2, J_{13}, \vec{J}_2^2, J_{23}$ , т.е. базис пространства состояний системы можно определить как совокупность собственных векторов уже перечисленных операторов и некоторых операторов  $\Gamma$ :

$$|n\rangle = |\gamma, j_1, m_1, j_2, m_2\rangle,$$

$$\vec{J}_1^2 |n\rangle = |n\rangle j_1(j_1 + 1), \quad J_{13} |n\rangle = |n\rangle m_1, \quad \vec{J}_2^2 |n\rangle = |n\rangle j_2(j_2 + 1), \quad J_{23} |n\rangle = |n\rangle m_2.$$

С помощью унитарного преобразования можно получить новый базис

$$S |n\rangle = \Psi_n = \sum_m |m\rangle S_{mn}.$$

Оператор  $S$  можно подобрать так, чтобы векторы

$$\Psi_n = |\gamma, j_1, j_2, j, m\rangle$$

были собственными векторами операторов

$$\Gamma, \vec{J}_1^2, \vec{J}_2^2, \vec{J}^2, J_3,$$

где  $\vec{J}$  – оператор полного момента:

$$\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2.$$

В этом случае обычно употребляют обозначения

$$\Psi_n = |\gamma, j_1, j_2, j, m\rangle$$

так что формулы преобразования выглядят так:

$$|\gamma, j_1, j_2, j, m\rangle = \sum_{m_1 m_2} |\gamma, j_1, m_1, j_2, m_2\rangle \langle j_1, m_1, j_2, m_2 | j_1, j_2, j, m\rangle,$$

$$|\gamma, j_1, m_1, j_2, m_2\rangle = \sum_{jm} |\gamma, j_1, j_2, j, m\rangle \langle j_1, j_2, j, m | j_1, m_1, j_2, m_2\rangle.$$

Коэффициенты  $\langle j_1, m_1, j_2, m_2 | j_1, j_2, j, m \rangle$ , будучи скалярными произведениями  $\langle n | \Psi_m \rangle$  образуют при фиксированных значениях  $j_1$  и  $j_2$  унитарные матрицы размерности  $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ .

Их называют **коэффициентами Клебша-Гордона**. Нетрудно понять, не вычисляя явно коэффициентов Клебша-Гордона, какие значения принимают числа  $j, m$  при фиксированных значениях  $j_1, j_2$ . При фиксированном  $j$  числа  $m$  принимают  $2j + 1$  значение, максимальное значение  $j$  равно максимально возможной сумме проекций  $m_1 + m_2$ , т.е.  $j_{max} = j_1 + j_2$ . Минимальное значение полного момента определяется числом  $j_{min} = |j_1 - j_2|$ . Иначе говоря, число  $j$  принимает значения

$$j = |j_1 - j_2|, |j_1 - j_2| + 1, \dots, j_1 + j_2.$$

Нетрудно проверить, что

$$\sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} (2j+1) = (2j_1+1)(2j_2+1).$$

5. Покажите, что если определить радиальный импульс

$$P_r = \frac{1}{2}(\hat{r}\vec{p} + \vec{p}\hat{r}),$$

то

$$P_r^2 = -\hbar^2 \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial}{\partial r}) = \frac{1}{r^2} ((\vec{r}\vec{p})^2 - i\hbar(\vec{r}\vec{p})).$$

6. Покажите, что  $P_r$  можно представить в форме

$$P_r = \frac{1}{r}\vec{r}\vec{p} - i\frac{\hbar}{r},$$

а

$$P_r^2 = \frac{1}{r^2} ((\vec{r}\vec{p})^2 - i\hbar(\vec{r}\vec{p})).$$

7. Гамильтониан

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu}\vec{p}^2 + V(r)$$

можно представить в форме

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu r^2} ((\vec{r}\vec{p})^2 - i\hbar(\vec{r}\vec{p}) + \hbar^2 \vec{l}^2) + V(r).$$

8. Справедливы перестановочные соотношения

а)

$$[\vec{r}\vec{p}, \hat{H}] = 2i\hbar\hat{H} - i\hbar(2V(r) + x_\alpha \frac{\partial V}{\partial x_\alpha}),$$

б)

$$[r^s, \hat{H}] = i\frac{\hbar s}{\mu} r^{s-2} (\vec{r}\vec{p}) + \frac{\hbar^2 s(s+1)}{2\mu} r^{s-2},$$

в)

$$[r^s(\vec{r}\vec{p}), \hat{H}] = 2i\hbar r^s \hat{H} - i\hbar r^s (2V(r) + x_\alpha \frac{\partial V}{\partial x_\alpha}) + i\frac{\hbar s}{\mu} r^{s-2} (\vec{r}\vec{p})^2 + \frac{\hbar^2 s(s+1)}{2\mu} r^{s-2} (\vec{r}\vec{p}),$$

г) если потенциал равен  $V(r) = -\frac{Ze^2}{r}$ , то

$$[r^s(\vec{r}\vec{p}), \hat{H}] = 2i\hbar(s+1)r^s \hat{H} + i\hbar Ze^2(2s+1)r^{s-1} -$$

$$i\hbar \frac{\hbar^2 s}{\mu} r^{s-2} \vec{l}^2 - \frac{\hbar^2 s(s-1)}{2\mu} r^{s-2} (\vec{r}\vec{p}).$$

9. Усредняя соотношения 8б и 8г в состоянии с определенными  $n$  и  $l$  получим

$$\begin{aligned} \langle r^{s-2} (\vec{r}\vec{p}) \rangle &= i\hbar \frac{s+1}{2} \langle r^{s-2} \rangle, \\ \frac{s+1}{n^2} \langle r^s \rangle - (2s+1)r_0 \langle r^{s-1} \rangle + \\ \frac{s(2l+1+s)(2l+1-s)}{4} r_0^2 \langle r^{s-2} \rangle &= 0, \quad r_0 = \frac{\hbar^2}{Ze^2\mu}. \end{aligned}$$

Это равенство известно как соотношение Крамерса.

Чтобы найти  $s$  с помощью соотношения Крамерса среднее значение любой степени  $r$ , необходимо независимо найти два из них.

10. Усредняя соотношение 1 в состоянии с определенным значением энергии, получим

$$2 \langle \hat{T} \rangle = \langle x_\alpha \frac{\partial V}{\partial x_\alpha} \rangle.$$

В случае потенциалов, однородных по координатам, это равенство приводит к соотношениям между кинетической, полной и потенциальной энергиям, известным обычно как теоремы вириала.

11. Если гамильтониан, его нормированные на единицу собственные векторы, собственные значения зависят от параметра  $\lambda$ , то справедлива теорема Фейнманна-Гельмана:

$$\langle \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} \rangle = \frac{\partial E(\lambda)}{\partial \lambda}.$$

12. Для кулонова потенциала соотношение (10) приводит к равенству

$$\langle \frac{1}{r} \rangle = \frac{1}{r_0 n^2}.$$

13. Рассматривая в среднем значении гамильтониана (7) величину  $l$  как непрерывную переменную и применяя равенство (11), можно показать, что

$$\langle \frac{1}{r^2} \rangle = \frac{1}{r_0^2 n^3 (l + 1/2)}.$$

14. Из соотношения Крамерса следует, что

$$\begin{aligned} \langle \frac{1}{r^3} \rangle &= \frac{1}{r_0^3 n^3 l (l + 1/2) (l + 1)}, \\ \langle r \rangle &= \frac{1}{2} r_0 (3n^2 - l(l + 1)), \\ \langle r^2 \rangle &= \frac{r_0^2 n^2}{2} (5n^2 + 1 - 3l(l + 1)). \end{aligned}$$

15. Неопределенность радиуса в состоянии с заданными числами  $n$  и  $l$  равна

$$\Delta r = \frac{r_0}{2} \sqrt{n^2(n^2 + 2) - l^2(l + 1)^2}.$$

#### Вектор Лапласа-Рунге-Ленца

В этом разделе операторы не будут снабжаться шляпками.

1. Справедливы соотношения

$$\begin{aligned}(\vec{l} \times \vec{p}) &= -(\vec{p} \times \vec{l}) + 2i\vec{p}, \\(\vec{l} \times \vec{p})\vec{p} &= 0, \quad \vec{p}(\vec{p} \times \vec{l}) = 0, \quad \vec{p}(\vec{l} \times \vec{p}) = 2i\vec{p}^2, \quad (\vec{p} \times \vec{l})\vec{p} = 2i\vec{p}^2, \\(\vec{l} \times \vec{p})\vec{r} &= -\hbar\vec{l}^2, \quad \vec{r}(\vec{p} \times \vec{l}) = \hbar\vec{l}^2, \\ \vec{r}(\vec{l} \times \vec{p}) &= -\hbar\vec{l}^2 + 2i(\vec{r}\vec{p}), \quad (\vec{p} \times \vec{l})\vec{r} = \hbar\vec{l}^2 + 2i(\vec{p}\vec{r}).\end{aligned}$$

Вектор Лапласа-Рунге-Ленца определяется формулой

$$\vec{A} = \frac{1}{2p_0}((\vec{l} \times \vec{p}) - (\vec{p} \times \vec{l})) + \frac{\vec{r}}{r}, \quad p_0 = \frac{\hbar}{r_0}.$$

2. Вектор  $\vec{A}$  можно представить в форме

$$\begin{aligned}\vec{A} &= \frac{1}{p_0}(\vec{l} \times \vec{p}) - \frac{i}{p_0}\vec{p} + \frac{\vec{r}}{r}, \\ \vec{A} &= -\frac{i}{2p_0}[\vec{p}, \vec{l}^2] + \frac{\vec{r}}{r}, \\ \vec{A} &= -\frac{1}{\hbar p_0}(\vec{r}\vec{p}^2 - (\vec{r}\vec{p})\vec{p}) - \frac{i}{p_0}\vec{p} + \frac{\vec{r}}{r}.\end{aligned}$$

3. Момент импульса и вектор Лапласа-Рунге-Ленца ортогональны:

$$\vec{l}\vec{A} = \vec{A}\vec{l} = 0.$$

4. Справедливы перестановочные соотношения

$$\begin{aligned}[x_\alpha \vec{p}^2, x_\beta \vec{p}^2] &= -2i\hbar^2 \epsilon_{\alpha\beta\gamma} l_\gamma \vec{p}^2, \\ [x_\alpha \vec{p}^2, (\vec{r}\vec{p})p_\beta] &= -i\hbar(x_\alpha p_\beta - \delta_{\alpha\beta} \vec{p}^2), \\ [x_\alpha \vec{p}^2 - (\vec{r}\vec{p})p_\alpha, \frac{\vec{r}}{r}] &= \frac{1}{\hbar} x_\alpha p_\beta r^2 - \frac{1}{\hbar} x_\alpha x_\beta (\vec{r}\vec{p}) - i x_\alpha x_\beta.\end{aligned}$$

5. Вектор Лапласа-Рунге-Ленца удовлетворяет перестановочным соотношениям

$$\begin{aligned}[l_\alpha, A_\beta] &= i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} A_\gamma, \\ [H, A_\alpha] &= 0, \quad H = \frac{1}{2\mu} \vec{p}^2 - \frac{Ze^2}{r}, \\ [A_\alpha, A_\beta] &= -i\frac{2H}{E_0} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} l_\gamma, \quad E_0 = \frac{Ze^2}{r_0}.\end{aligned}$$

6. Справедлива формула

$$\vec{A}^2 = \frac{2H}{E_0}(\vec{l}^2 + 1) + 1.$$

В подпространстве состояний, принадлежащих дискретным уровням энергии оператор  $-\frac{2H}{E_0}$  положительно определен, поэтому можно определить операторы

$$k_\alpha = BA_\alpha = A_\alpha B, \quad \frac{1}{B^2} = -\frac{2H}{E_0}.$$

7. Справедливы соотношения

$$[l_\alpha, l_\beta] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} l_\gamma, \quad [l_\alpha, k_\beta] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} k_\gamma, \quad [k_\alpha, k_\beta] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} l_\gamma.$$

$$\vec{k}^2 + \vec{l}^2 + 1 = -\frac{E_0}{2H},$$

$$\vec{l}\vec{k} = \vec{k}\vec{l} = 0.$$

8. Операторы

$$\vec{J}_1 = \frac{1}{2}(\vec{l} + \vec{k}), \quad \vec{J}_2 = \frac{1}{2}(\vec{l} - \vec{k})$$

удовлетворяют соотношениям

$$[J_{a\alpha}, J_{b\beta}] = i\delta_{ab}\epsilon_{\alpha\beta\gamma}J_{a\gamma},$$

$$\vec{J}_1^2 = \vec{J}_2^2 = \frac{1}{4}(\vec{l}^2 + \vec{k}^2).$$

9. Операторы  $J_{a\alpha}$  можно считать динамическими переменными, описывающими поведение частицы в кулоновом поле. В качестве полного набора наблюдаемых можно взять величины  $(J_{a^2}, J_{a3})$ . Это соответствует выбору базиса в пространстве состояний в форме прямого произведения  $\Phi(j_1, m_1)\Phi(j_2, m_2)$ . Поскольку  $J_1 = J_2$ , то векторы базиса нумеруются тремя числами -  $(n = 2j_1 + 1, m_1, m_2)$ .

Кратность вырождения уровней равна

$$d(n) = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1) = n^2.$$

Поскольку момент импульса равен

$$\vec{l} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2,$$

то возможные значения  $l$  находятся по правилам сложения моментов. В нашем случае  $l$  изменяется от  $|\frac{n-1}{2} - \frac{n-1}{2}| = 0$  до  $\frac{n-1}{2} + \frac{n-1}{2} = n - 1$ .

Базис  $\Psi(n, l, m)$  по правилам сложения моментов представляется как линейная комбинация векторов базиса  $\Phi(n, m_1, m_2)$ .