Лекции по квантовой механике

Суханов Л.П.

Сборка от 11.12.2013

Оглавление

Глава 1

Введение в квантовую механику

§1. Волна де Бройля

Альберт Эйнштейн (1905 г.) — связь корпускулярных $(E, \mathbf{p})$ и волновых $(\omega, \mathbf{k})$ свойств света:

$$\begin{aligned} E &= \hbar\omega \\ \mathbf{p} &= \hbar\mathbf{k} \end{aligned} \tag{1.1.1}$$

$\hbar = 1{,}05 \cdot 10^{-27}$ эрг·с — постоянная Планка (1900 г.)

Луи де Бройль (1923 г.) — обобщение волновой теории на материальные частицы (волны вещества). Длина волны де Бройля:

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{h}{mv} \tag{1.1.2}$$

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = Ae^{i(\mathbf{kr} - \omega t)} \tag{1.1.3}$$

Подставляя (1.1.1) в (1.1.3), получим:

$$\boxed{\Psi(\mathbf{r}, t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{pr} - Et)}} \tag{1.1.4}$$

§2. Волновой пакет. Фазовая групповая скорость волн, соответствующих свободной частице

Свободная частица характеризуется энергией E и импульсом $\mathbf{p} \parallel Ox$. Волна де Бройля для одномерного случая:

$$\Psi(x, t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)} \tag{1.2.1}$$

Выделим в пространстве поверхность постоянной фазы:

$$\alpha = kx - \omega t = \frac{1}{\hbar}(px - Et) = \mathrm{const}$$

Тогда фазовая скорость запишется в виде:

$$v_{\text{ф}} = \frac{dx}{dt} = \frac{w}{k} = \frac{E}{p} \tag{1.2.2}$$

Сравним её с действительной скоростью частицы в двух случаях:

- Нерелятивистский случай: $E = p^2/2m$:

$$v_{\text{ф}} = \frac{p}{2m} = \frac{v}{2}$$

- Релятивистский случай: $E = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4}$:

$$p = \frac{E}{c^2}v \quad \to \quad v_{\text{ф}} = \frac{E}{p} = \frac{c^2}{v} > c$$

Таким образом, плоская монохроматическая волна принципиально не может описывать свободную частицу. Для этого необходимо использовать волновое образование с пространственной локализацией.

Волновой пакет:

$$\Psi(x,t) = \int_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k} A(k) e^{i(\mathbf{kr}-\omega(k)t)} dk,\ \Delta k \ll k_0 \tag{1.2.3}$$

$$\omega(k) = \omega(k_0) + \left(\frac{d\omega}{dk}\right)\bigg|_{k_0}(k-k_0) + \ldots \approx \omega_o + \left(\frac{d\omega}{dk}\right)\bigg|_{k_0}(k-k_0) \tag{1.2.4}$$

Подставляя (1.2.4) в (1.2.3):

$$\psi(x,t) \approx e^{i(k_0x-\omega_0t)} \int_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k} dk A(k) e^{i(k-k_0)\left[x-\left(\frac{d\omega}{dk}\right)\big|_{k_0}t\right]} \tag{1.2.5}$$

— плоская волна с амплитудой, зависящей от координаты и времени.

Постоянство амплитуды волнового пакета: (???)

$$x - \left(\frac{d\omega}{dk}\right)\bigg|_{k_0} t = const \tag{1.2.6}$$

Групповая скорость:

$$v_{\text{гр}} = \frac{dx}{dt} = \left(\frac{d\omega}{dk}\right)\bigg|_{k_0} = \left(\frac{dE}{dp}\right)\bigg|_{p_0} \tag{1.2.7}$$

Сравним её с действительной скоростью частицы в двух случаях:

- Нерелятивистский случай: $E = p^2/2m$:

$$v_{\text{гр}} = \frac{p_0}{m} = v$$

- Релятивистский случай $E = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4}$

$$v_{\text{гр}} = \frac{c^2 2p}{2E} = \frac{c^2 \frac{E}{c^2} v}{E} = v$$

Таким образом, групповая скорость движения пакета как целого, совпадает со скоростью отвечающей ему частицы

Обозначим: $\xi = k - k_0$

$A(k) \approx A(k_0)$ — пусть амплитуда является слабоменяющейся функцией от k

Подставляя (1.2.7) в (1.2.5), получим:

$$\Psi(x,t) \approx A(k_0) e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \int_{-\Delta k}^{+\Delta k} e^{i(x - v_{\text{гр}} t)\xi} d\xi$$

Окончательно:

$$\Psi(x,t) = 2A(k_0) \frac{\sin[(x - v_{\text{гр}} t)\Delta k]}{x - v_{\text{гр}} t} e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \tag{1.2.8}$$

Обозначим:

$$B(x - v_{\text{гр}} t) = 2A(k_0) \frac{\sin[(x - v_{\text{гр}} t)\Delta k]}{x - v_{\text{гр}} t}$$

— огибающая волнового пакета, движущаяся с групповой скоростью

$B(x - v_{\text{гр}} t)$ максимальна, если $x = v_{\text{гр}} t$

картинка с волновым пакетом . жпг

$$k_o \gg \Delta k$$

Длина волны много раз укладывается на длине локализации:

$$\lambda = \frac{2\pi}{k_0} \ll \frac{2\pi}{\Delta k} = \Delta x$$

$$\Delta x \cdot \Delta k \approx 1 \tag{1.2.9}$$

Соотношение неопределенностей Гейзенберга

$$\boxed{\Delta x \cdot \Delta p \approx \hbar} \tag{1.2.10}$$

Понятие траектории частицы теряет смысл в квантовой механике!

§3. Уравнение Шрёдингера

Уравнение Шрёдингера — постулат квантовой механики, описывающий эволюцию волновой функции.

Временное (нестационарное) уравнение Шрёдингера:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r}, t) \right\} \Psi(\mathbf{r}, t)} \tag{1.3.1}$$

Оператор Гамильтона (гамильтониан, оператор полной энергии):

$$\widehat{H} = -\frac{p^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r}, t) \tag{1.3.2}$$

Рассмотрим случай, когда потенциальная энергия не зависит от времени:

$$\frac{\partial \widehat{H}}{\partial t} = \frac{\partial U}{\partial t} = 0$$

Тогда:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) \cdot \varphi(t) \tag{1.3.3}$$

Подставим (1.3.3) в уравнение Шрёдингера:

$$i\hbar\psi(\mathbf{r})\frac{\partial}{\partial t}\varphi(t)=\varphi(t)\widehat{H}\psi(\mathbf{r})$$

Поделим на $\psi(\mathbf{r})\varphi(t)$:

$$i\hbar\frac{\partial\varphi/\partial t}{\varphi(t)}=\frac{\widehat{H}\psi(\mathbf{r})}{\psi(\mathbf{r})}=E$$

$$i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t}=E\varphi(t) \tag{1.3.4}$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi(t)=E\varphi(t) \tag{1.3.5}$$

Стационарное уравнение Шрёдингера:

$$\boxed{\widehat{H}\psi(\mathbf{r})\equiv\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(\mathbf{r})\right\}\psi(\mathbf{r})=E\psi(\mathbf{r})} \tag{1.3.6}$$

$$\varphi(t)=Ce^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

где $C=\varphi(0)$

Решение уравнения Шрёдингера представляет собой задачу Штурма-Лиувилля на пары собственных значений и собственных функций: $\{E_k,\psi_k(\mathbf{r})\}$

Стационарное состояние — состояние с определённой энергией

§4. Статистическая интерпритация волновой функции. Стационарные состояния

1926 г., Макс Борн:

Определение 1. *Вероятность нахождения частицы в момент времени t в элементе объёма dv в окрестности точке $\mathbf{r}$:*

$$dP=\Psi^*(\mathbf{r},t)\Psi(\mathbf{r},t)dv\equiv|\Psi(\mathbf{r},t)|^2dv \tag{1.4.1}$$

Определение 2. *Плотность вероятности обнаружить частицу в точке $\mathbf{r}$ в момент времени t:*

$$|\Psi(\mathbf{r},t)|^2=\frac{dP}{dv}=\rho(\mathbf{r},t) \tag{1.4.2}$$

$\Psi(\mathbf{r},t)$ — *амплитуда плотности вероятности (амплитуда вероятности)*

Из (1.4.1) следует условие нормировки волновой функции:

$$\int|\Psi(\mathbf{r},t)|^2dv=1 \tag{1.4.3}$$

Таким образом, волновая функция должна быть квадратично интегрируемой.

Пример 1. *Волновой пакет* (1.2.3) *подчиняется условию нормировки.*

Пример 2. *Волна де Бройля* (1.1.4)*:*

$$\int |\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r},t)|^2 dv = |A|^2 \int dv$$

расходится, поскольку интегрирование проводится по всему пространству

Упражнение 1. *Считая, что* $\Psi(\mathbf{r},t)$ *удовлетворяет волновому уравнению* (1.3.1)*, доказать:*

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \rho(\mathbf{r},t) dv = 0$$

Свойства волновой функции

1. однозначность
2. конечность
3. *как правило (исключение: задача 4 из 1-го задания)*, непрерывная дифференцируемость $\Psi(\mathbf{r},t) \in C^1(\Omega)$

Эти же свойства справедливы и для $|\Psi(\mathbf{r},t)|^2$

Анализ стационарного уравнения Шрёдингера

- $\psi(\mathbf{r})$ также удовлетворяет вышеперечисленным свойствам волновой функции
- Нормированность:
$$||\psi|| = \int |\psi(\mathbf{r})|^2 dv = 1 \tag{1.4.4}$$
- Граничные условия: $\psi(\mathbf{r})|_{r\to\infty} = 0$

Временной множитель: $|\varphi(t)|^2 = |C|^2$
Из (1.4.3) и (1.4.4): $|C|^2 = 1$, для удобства выберем $C = 1$
Таким образом, в квантовой механике волновая функция определена с точностью до постоянного фазового множителя.

Общий вид волновой функции стационарного состояния

$$\boxed{\Psi_E(\mathbf{r},t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\psi_E(\mathbf{r})}$$

где $\widehat{H}\psi_E(\mathbf{r}) = E\psi_E(\mathbf{r})$
Стоит заметить, что волновая функция зависит от времени (через фазовый множитель).

Общий вид $\Psi(\mathbf{r},t)$ для стационарной системы следует рассматривать как синтез волновых, корпускулярных и статистических представлений о микрообъектах.

Статистическая интерпретация волновой функции относится в том числе и к отдельно взятой частице (1949 г. — экспериментальное доказательство, советские физики Биберман, Сушкин, Фабрикант)

Глава 2

Операторы физических величин

§1. Условие нормировки волн де Бройля

$$\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r},t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{pr}-Et)} \tag{2.1.1}$$

Применим условие нормировки (1.4.3):

$$\int \Psi^*_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r},t)\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r},t)dv = |A|^2 e^{\frac{i}{\hbar}(E'-E)t}\int e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\mathbf{r}}\,dv$$

Основные свойства δ-функции:

1. $\delta\mathbf{r} = \delta(x)\cdot\delta(y)\cdot\delta(z)$
2. $\delta(\alpha x) = \frac{1}{|\alpha|}\delta(x),\ (a \neq 0)$
3. $f(x)\delta(x-a) = f(a)\delta(x-a)$

Применяя эти свойства, получим:

$$\int e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\mathbf{r}}\,dv \equiv (2\pi)^3\delta\left(\frac{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}{\hbar}\right) = (2\pi\hbar)^3\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}')$$

$$\int \Psi^*_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r},t)\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r},t)dv = |A|^2 e^{\frac{i}{\hbar}(E'-E)t}(2\pi\hbar)^3\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}') = |A|^2(2\pi\hbar)^3\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}')$$

Отсюда:

$$A = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}$$

Из (2.1.1) получим выражение для волны де Бройля с учётом нормировки:

$$\boxed{\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r},t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{pr}-Et)}} \tag{2.1.2}$$

Условие нормировки волны де Бройля на δ-функцию:

$$\boxed{\int \Psi^*_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r},t)\,\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r},t)\,dv = \delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}')} \tag{2.1.3}$$

Волновой пакет:

$$\Psi(\mathbf{r},t) = \int d^3p\, c(\mathbf{p})\,\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r},t) \tag{2.1.4}$$

где $c(\mathbf{p})$ — весовая функция

$$\int \Psi^*_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r},t)\,\Psi(\mathbf{r},t)\,dv\Big|_{(2.1.4)} = \int d^3p\,c(p)\int \Psi^*_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r},t)\,\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r},t)dv\Big|_{(2.1.3)} = \int d^3p\,c(\mathbf{p})\cdot\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}') = c(\mathbf{p}')$$

Таким образом:

$$c(\mathbf{p}) = \int \Psi^*_{\mathbf{p}}(\mathbf{r},t)\,\Psi(\mathbf{r},t)\,dv \tag{2.1.5}$$

$$\int |\Psi(\mathbf{r},t)|^2\,dv = \int |c(\mathbf{p})|^2\,d^3p \tag{2.1.6}$$

Упражнение 1. *Доказать равенство* (2.1.6)

$$\int |c(\mathbf{p})|^2\,d^3p = 1 \tag{2.1.7}$$

Здесь подынтегральное выражение равно вероятности обнаружить импульс частицы в интервале $(\mathbf{p},\mathbf{p}+d\mathbf{p})$

$c(\mathbf{p})$ — амплитуда вероятности (синоним волновой функции в импульсном пространстве).

§2. Среднее значение координаты и импульса. Операторы координаты и импульса.

$\langle F\rangle \to \widehat{F}$ — оператор, действующий в пространстве состояний $\Psi(\mathbf{r},t)$

Определение 1. *Оператор физической величины:*

$$\widehat{F} = \langle\widehat{F}\rangle_\Psi \equiv \int \Psi^*(\mathbf{r},t)\widehat{F}\Psi(\mathbf{r},t)dv \tag{2.2.1}$$

где $\langle\widehat{F}\rangle_\Psi$ понимается в смысле квантово-механического среднего.

$$\begin{aligned}\langle F(\mathbf{r})\rangle &= \int F(\mathbf{r})\,dp = \int F(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r},t)\,dv\Big|_{(1.4.1)\text{ и }(1.4.2)} = \\ &= \int F(\mathbf{r})\,|\Psi(\mathbf{r},t)|^2\,dv = \int \Psi^* F(\mathbf{r})\Psi\,dv\end{aligned} \tag{2.2.2}$$

$$\langle F(\mathbf{p})\rangle = \int F(\mathbf{p})\,|c(\mathbf{p})|^2\,d^3p = \int c^*(\mathbf{p})F(\mathbf{p})c(\mathbf{p})d^3p \tag{2.2.3}$$

$F(\mathbf{r}) = \mathbf{r}$ — координатный радиус-вектор

$$\langle\mathbf{r}\rangle|_{(2.2.2)} = \int \Psi^*(\mathbf{r},t)\,\mathbf{r}\,\Psi(\mathbf{r},t)\,dv\Big|_{(2.2.1)} = \langle\widehat{\mathbf{r}}\rangle_\Psi \equiv \int \Psi^*(\mathbf{r},t)\langle\widehat{\mathbf{r}}\rangle\Psi(\mathbf{r},t)\,dv$$

Следовательно:

$$\widehat{\mathbf{r}} = \mathbf{r} \tag{2.2.4}$$

В координатном пространстве (в координатном представлении) оператор координаты совпадает со своим значением координаты частицы.

$$\widehat{F}(\mathbf{r}) = F(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r}) \quad \Rightarrow \quad \widehat{U}(r) = U(r) \tag{2.2.5}$$

$$\langle\mathbf{p}\rangle\big|_{(2.2.3)} = \int d^3p\; |c(\mathbf{p})|^2\, \mathbf{p}\Big|_{(2.2.1)} = \int dv\; \Psi^*(\mathbf{r},t)\widehat{\mathbf{p}}\Psi(\mathbf{r},t) \tag{2.2.6}$$

$$\langle\mathbf{p}\rangle = \int d^3p\, c^*(\mathbf{p})\, \mathbf{p}\, c(\mathbf{p})\Big|_{(2.1.5)} = \int d^3p\, c^*(\mathbf{p}) \left(\int dv\, \mathbf{p}\Psi^*_{\mathbf{p}}(\mathbf{r},t)\Psi(\mathbf{r},t)\right)$$

Из (2.1.2):

$$\mathbf{p}\Psi^*_{\mathbf{p}}(\mathbf{r},t) = i\hbar\nabla\Psi^*_{\mathbf{p}}(\mathbf{r},t)$$

$$\langle\mathbf{p}\rangle = \int d^3p\, c^*(\mathbf{p}) \left(i\hbar\int dv\, \Psi(\mathbf{r},t)\nabla\Psi^*_{\mathbf{p}}(\mathbf{r},t)\right)$$

$$\int dv\, \Psi(\mathbf{r},t)\nabla\Psi^*_{\mathbf{p}}(\mathbf{r},t) = \int dv\, \nabla\left(\Psi(\mathbf{r},t)\Psi^*_{\mathbf{p}}(\mathbf{r},t)\right) - \int dv\, \Psi^*_{\mathbf{p}}(\mathbf{r},t)\nabla\Psi(\mathbf{r},t)$$

$$\langle\mathbf{p}\rangle = \int d^3p\, c^*(\mathbf{p}) \left(\int dv\, \Psi^*_{\mathbf{p}}(\mathbf{r},t)(-i\hbar\nabla)\Psi(\mathbf{r},t)\right) = \int dv \underbrace{\int d^3p\, c^*(\mathbf{p})\Psi^*_{\mathbf{p}}(\mathbf{r},t)}_{\Psi^*(\mathbf{r},t)\text{ из }(2.1.4)}(-i\hbar\nabla)\Psi(\mathbf{r},t) =$$

$$= \int dv\, \Psi^*(\mathbf{r},t)(-i\hbar\nabla)\Psi(\mathbf{r},t)$$

Сравнивая полученное выражение с правой частью (2.2.6):

$$\boxed{\widehat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla} \tag{2.2.7}$$

§3. Постановка задачи на собственные функции и собственные значения операторов

$$\widehat{\mathbf{p}}\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r},t) = \mathbf{p}\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r},t) \tag{2.3.1}$$

Пусть $\mathbf{q} \equiv (q_1, ..., q_n)$ означает вектор конфигурационного пространства.

Задача на собственые значения f и отвечающие им собственные функции оператора $\widehat{F}$

$$\Psi_f(\mathbf{q}): \quad \widehat{F}\Psi_f(\mathbf{q}) = f\Psi_f(\mathbf{q}) \tag{2.3.2}$$

Определение 1. $\{f\}$ *называется <u>спектром</u> оператора* $\widehat{F}$.

<u>Дискретный спектр</u>:

$$\{f\} = f_1, f_2, ..., f_n, ...$$
$$\psi_{f_n}(\mathbf{q}) \equiv \psi_n(\mathbf{q})$$

Задача на собственные пары в дискретном спектре:

$$\widehat{F}\psi_n(\mathbf{q}) = f_n\psi_n(\mathbf{q}) \tag{2.3.3}$$

<u>Непрерывный спектр</u>: $p \in (-\infty, +\infty)$

Глава 3

Математический аппарат квантовой механики

§1. Состояние и волновая функция. Принцип суперпозиции состойний. Дираковская формулировка квантовой механики. Вектор состояния.

1938 г. – символика Дирака для описания состояний
$|\cdots\rangle$ – вектор состояний
$|\mathbf{r}\rangle$, $|\mathbf{p}\rangle$, $|E\rangle$, $|nlm_l\rangle$
Сформулируем **принцип суперпозиции состояний**:

Утверждение 1 (Второй постулат квантовой механики)**.** *Если квантовая система может находиться в состояниях, описываемых волновыми функциями ψ_1 и ψ_2, то она может находиться и в состоянии ψ, описываемой их линейной комбинацией:*

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 \quad \textit{где } c_1, c_2 \in \mathbb{C}$$

[рисунок]

$$\lambda_{\text{д.б.}} = \frac{\hbar}{p} \lesssim d$$

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \left[\psi_1(\mathbf{r}_1) + \psi_2(\mathbf{r}_2)\right] e^{-iEt/\hbar} \tag{3.1.1}$$

$$\frac{E}{\hbar} = \omega$$

$$\begin{aligned} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = |\psi_1(\mathbf{r}_1) + \psi_2(\mathbf{r}_2)|^2 = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + \underbrace{(\psi_1^*\psi_2 + \psi_1\psi_2^*)}_{2\,\mathrm{Re}(\psi_1\psi_2^*)} = \\ = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + 2\,|\psi_1|\,|\psi_2| \cos\varphi_1 - \varphi_2 \end{aligned} \tag{3.1.2}$$

$$\Delta\varphi = \varphi_1 - \varphi_2 \qquad |\psi_1| = |\psi_2|$$

$$|\Psi|^2 = 4\,|\psi_1|^2 \cos\frac{\Delta\varphi}{2}^2 \tag{3.1.3}$$

При этом $|\Psi|^2_{max} = 4\,|\psi_1|^2$

Свойство **линейности** пространства состояний:

$$|\psi\rangle = c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle \quad \text{где } c_1, c_2 \in \mathbb{C} \tag{3.1.4}$$

Утверждение 2 (Первый постулат квантовой механики)**.** *Квантовое состояние системы полность. определяется вектором состояния $|\psi\rangle$. Векторы $|\psi\rangle$ и $c|\psi\rangle$ $(c \neq 0)$ определяют одно и то же состояние*

Свойства пространства состояний:

1. $|\psi\rangle + |\varphi\rangle = |\varphi\rangle + |\psi\rangle$ (аксиома коммутативности)
2. $[|\psi\rangle + |\varphi\rangle] + |\chi\rangle = |\psi\rangle + [|\varphi\rangle + |\chi\rangle]$ (аксиома ассоциативности)
3. $c\,(|\varphi\rangle + |\psi\rangle) = c|\varphi\rangle + c|\psi\rangle$ (аксиома дистрибутивности)
4. $(c_1 + c_2|\psi\rangle = c_1|\psi\rangle + c_2|\psi\rangle$ (аксиома дистрибутивности)
5. $0 \cdot |\psi\rangle \equiv |0\rangle = 0$ (отсутствие квантового объекта)

Векторное просранство состояний наделено скалярным произведением:

$$\langle\varphi|\psi\rangle \in \mathbb{C}$$

Определение 1. *Пусть $\mathbf{q} = (q_1, ..., q_n)$ – конфигурационное пространство. Тогда скалярное произведение определяется следующим образом:*

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \int \varphi^* \underbrace{(q_1, ..., q_n)}_{\mathbf{q}} \psi \underbrace{(q_1, ..., q_n)}_{\mathbf{q}} \underbrace{dq_1...dq_n}_{d\mathbf{q}} \tag{3.1.5}$$

Если $\langle\varphi|\psi\rangle = 0$, то φ и ψ **взаимно ортогональны**.

Свойства скалярного произведения:

1. Из (3.1.5): $\langle\varphi|\psi\rangle = \langle\psi|\varphi\rangle^*$
2. Если $|\tilde{\varphi}\rangle = \lambda_1|\varphi\rangle$ и $|\tilde{\psi}\rangle = \lambda_2|\psi\rangle$, то $\langle\tilde{\varphi}|\tilde{\psi}\rangle = \lambda_1^*\lambda_2\langle\varphi|\psi\rangle$
3.
   - $\langle\psi|\psi\rangle \geqslant 0$
   - $\langle\psi|\psi\rangle = 0 \;\Rightarrow\; |\psi\rangle = 0$
   - $\|\psi\| = \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}$

Пространство состояний обладает свойством полноты, а значит является **пространством Гильберта** (обозначается буквой $\mathbb{H}$)

$|\psi\rangle$ можно понимать как столбец: $\left(\psi = \begin{matrix}\psi_1 \\ \psi_2\end{matrix}\right)$

$$\langle\varphi|\psi\rangle = (\varphi_1^*, \varphi_2^*) \begin{matrix}\psi_1 \\ \psi_2\end{matrix} = \varphi_1^*\psi_1 + \varphi_2^*\psi_2$$

Т.е. состоянию $|\psi\rangle$ соответствует элемент дуального (сопряжённого) по отношению к $\mathbb{H}$ пространства $\mathbb{H}^*$, обозначаемый как $\langle\psi|$ (или в виде строки: (ψ_1^*, ψ_2^*)).

Сопряжённые состояния связаны операцией **эрмитового сопряжения**, обозначаемой символом †. На матричном языке эта операция состоит в выполнении транспонирования и комплексного сопряжения.

$$\langle\psi| = |\psi\rangle^\dagger$$

$$\forall|\psi\rangle \in \mathbb{H} \;\; \exists\langle\varphi| \in \mathbb{H}^* : \langle\varphi|\psi\rangle \in \mathbb{C}$$

$|\psi\rangle$ – **кет-вектор**
$\langle\psi|$ – **бра-вектор**

Из (3.1.4):

$$|\psi\rangle = c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle$$
$$\langle\psi| = c_1^*\langle\psi_1| + c_2^*\langle\psi_2|$$

Нормировка:

$$\langle\psi|\psi\rangle = \langle\psi_1|\psi_1\rangle = \langle\psi_2|\psi_2\rangle = 1$$
$$\langle\psi|\psi\rangle = |c_1|^2 + |c_2|^2 + 2\,\mathrm{Re}\, c_1^* c_2 \langle\psi_1|\psi_2\rangle = 1$$

Если $\langle\psi_1|\psi_2\rangle = 0$ (ортогональные состояния), то $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$

Вероятностная интерпретация: $|c_1|^2$ ($|c_2|^2$) – вероятность обнаружить систему в состоянии 1 (в состоянии 2)

Утверждение 3 (Второй постулат квантовой механики[1]). *Если измерение в состоянии 1 даёт результат 1, а измерение в состоянии 2 даёт результат 2, то измерение в суперпозиции этих состояний даёт либо результат 1, либо результат 2*

§2. Наблюдаемые и операторы физических величин. Линейные и эрмитовые операторы

F – физическая (или, в терминологии Дирака, **наблюдаемая**) величина.

F соответствует $\widehat{F}$:

$$\widehat{F} : D_{\widehat{F}} \to R_{\widehat{F}}$$
$$|\varphi\rangle = \widehat{F}|\psi\rangle \in R_{\widehat{F}} \;\; \text{где} \;\; |\varphi\rangle \in D_{\widehat{F}}$$

Определение 1. *Оператор $\widehat{F}$ называется **линейным**, если для него выполняется:*

$$\begin{gathered}\widehat{F}(c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle) = c_1\widehat{F}|\psi_1\rangle + c_2\widehat{F}|\psi_2\rangle \\ \textit{где } |\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in D_{\widehat{F}} \;;\; c_1, c_2 \in \mathbb{C}\end{gathered} \tag{3.2.1}$$

и соблюдается принцип суперпозиции состояний:[2]

$$c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle \xrightarrow{\widehat{F}} c_1|\varphi_1\rangle + c_2|\varphi_2\rangle$$

[1] опять второй?
[2] не уверен, относится ли это к определению

Алгебра линейных операторов:

1. Умножение на комплексное число:

$$(c\widehat{F})|\psi\rangle \equiv \underbrace{c(\widehat{F}|\psi\rangle)\Big|_{(3.2.1)} = \widehat{F}(c|\psi\rangle)}_{\text{свойство однородности } \widehat{F}}$$

2. Коммутативность операции сложения:

$$(\widehat{F}+\widehat{G})|\psi\rangle \equiv \widehat{F}|\psi\rangle + \widehat{G}|\psi\rangle\Big|_{\text{из 1.}} = \widehat{G}|\psi\rangle + \widehat{F}|\psi\rangle = (\widehat{G}+\widehat{F})|\psi\rangle \Rightarrow \ \widehat{F}+\widehat{G} = \widehat{G}+\widehat{F}$$

3. Произведение операторов:

$$\widehat{P} = \widehat{F}\widehat{G} \quad \Rightarrow \quad \widehat{P}|\psi\rangle = \widehat{F}(\widehat{G}|\psi\rangle)$$

В общем случае операция произведения некоммутативна: $\widehat{F}\widehat{G}|\psi\rangle \neq \widehat{G}\widehat{F}|\psi\rangle$

Определение 2. *Выражение $\widehat{F}\widehat{G} - \widehat{G}\widehat{F}$ называется* ***коммутатором*** *операторов $\widehat{F}$ и $\widehat{G}$ и обозначается квадратными скобками:*

$$\left[\widehat{F},\widehat{G}\right] \equiv \widehat{F}\widehat{G} - \widehat{G}\widehat{F} \tag{3.2.2}$$

Говорят, что операторы ***коммутируют****, если* $\left[\widehat{F},\widehat{G}\right] = 0$

Свойства коммутаторов:

1. Любой оператор коммутирует с константой:

$$\left[\widehat{F},c\right] = 0, \quad c = \text{const}$$

2. Если между двумя пространствами состояний есть взаимно-однозначное соответствие, т.е.:

$$|\varphi\rangle = \widehat{F}|\psi\rangle \quad \to \quad |\psi\rangle = \widehat{G}|\varphi\rangle$$

то $\widehat{F}$ и $\widehat{G}$ являются **обратными друг к другу операторами**:

$$\widehat{F}\widehat{G} = \widehat{G}\widehat{F} = 1 \tag{3.2.3}$$

Оператор, обратный к данному обозначается $\widehat{F}^{-1}$

$$\widehat{F}\widehat{F}^{-1} = \widehat{F}^{-1}\widehat{F} = 1 \tag{3.2.3$'$}$$

Обратный оператор произведения:

$$(\widehat{F}\widehat{G})^{-1} = \widehat{G}^{-1}\widehat{F}^{-1} \tag{3.2.4}$$

Упражнение 1. *Доказать* (3.2.4) *используя* (3.2.3′)

Рассмотри действие $\widehat{F}$ в гильбертовом пространстве $\mathbb{H}$ (и, соответственно, оператора $\widehat{F}^\dagger$ в $\mathbb{H}^*$):

$$|\chi\rangle = \widehat{F}|\psi\rangle \ \rightarrow \ |\chi\rangle^\dagger = (\widehat{F}|\psi\rangle)^\dagger\Big|_{(\widehat{A}\widehat{B})^\dagger=\widehat{B}^\dagger\widehat{A}^\dagger} = \langle\psi|\widehat{F}^\dagger$$

$$\boxed{\langle\chi| = \langle\psi|\widehat{F}^\dagger} \tag{3.2.5}$$

Из (3.2.5):

$$\langle\chi|\varphi\rangle = \langle\psi|\widehat{F}^\dagger|\varphi\rangle = \langle\varphi|\chi\rangle^* = \langle\varphi|\widehat{F}|\psi\rangle^*$$

Определение 3. *Эрмитово-сопряжённым к $\widehat{F}$ называется следующий оператор:*

$$\boxed{\langle\psi|\widehat{F}^\dagger|\varphi\rangle = \langle\varphi|\widehat{F}|\psi\rangle^*} \tag{3.2.6}$$

Свойства эрмитово-сопряжённых операторов:

- $(c\widehat{F})^\dagger = c^*\widehat{F}^\dagger$
- $(\widehat{F}^\dagger)^\dagger = \widehat{F}$
- $(\widehat{F}+\widehat{G})^\dagger = \widehat{F}^\dagger + \widehat{G}^\dagger$
- $(\widehat{F}\widehat{G})^\dagger = \widehat{G}^\dagger\widehat{F}^\dagger$

Упражнение 2. *Доказать приведённые выше свойства*

Определение 4. *Если $\widehat{F}^\dagger = \widehat{F}$ или выполняется следующее равенство:*

$$\forall|\psi\rangle, |\varphi\rangle \in D_{\widehat{F}} \quad \rightarrow \quad \langle\psi|\widehat{F}\psi\rangle = \langle\varphi|\widehat{F}|\psi\rangle^* \tag{3.2.7}$$

то оператор $\widehat{F}$ называется ***эрмитовым*** *или* ***самосопряжённым****.*

Для состояний $|\psi\rangle$ и $|\varphi\rangle$:

$$\widehat{F}|\psi\rangle \equiv |\widehat{F}\psi\rangle$$

Альтернативное определение эрмитового сопряжения: $\widehat{F}^\dagger$ эрмитово-сопряжённый, если:

$$\boxed{\langle\varphi|\widehat{F}\psi\rangle = \langle\widehat{F}^\dagger\varphi|\psi\rangle} = \langle\psi|\widehat{F}^\dagger\varphi\rangle^* \tag{3.2.6$'$}$$

или

$$\boxed{\langle\psi|\widehat{F}^\dagger\varphi\rangle = \langle\widehat{F}\psi|\varphi\rangle} \tag{3.2.6$''$}$$

что эквивалентно:

$$\int \psi^*(\mathbf{q})\widehat{F}^\dagger\varphi(\mathbf{q})d\mathbf{q} = \int \left(\widehat{F}\psi(\mathbf{q})\right)^* \varphi(\mathbf{q})d\mathbf{q}$$

Определение 5. *$\widehat{F}$ называется* ***эрмитовым*** *(самосопряжённым), если $\widehat{F}^\dagger = \widehat{F}$, т.е.:*

$$\forall|\psi\rangle, |\varphi\rangle \in D_{\widehat{F}} \ \rightarrow \ \boxed{\langle\psi|\widehat{F}\varphi\rangle = \langle\widehat{F}\psi|\varphi\rangle} \tag{3.2.7$'$}$$

или

$$\int \psi^*(\mathbf{q})\widehat{F}^\dagger\varphi(\mathbf{q})d\mathbf{q} = \int \left(\widehat{F}\psi(\mathbf{q})\right)^* \varphi(\mathbf{q})d\mathbf{q}$$

Замечание:

1. $\|\psi\| < \infty$, $\|\varphi\| < \infty$
2. $\|\widehat{F}\psi\| < \infty$, $\|\widehat{F}\varphi\| < \infty$

Определение 6. *Выражение:*

$$\langle\varphi|\widehat{F}\psi\rangle \equiv \langle\varphi|\widehat{F}|\psi\rangle = \int \varphi^*(\mathbf{q})\widehat{F}\psi(\mathbf{q})d\mathbf{q}$$

*называется **матричным элементом** оператора $\widehat{F}$ на функциях φ и ψ, или матричным элементом $\widehat{F}$ **в обкладках** $\langle\varphi|$ и $|\psi\rangle$*

*Величина $\langle\psi|\widehat{F}\psi\rangle \equiv \langle\psi|\widehat{F}|\psi\rangle$ называется **диагональным матричным элементом**.*

Из (2.2.1), среднее значение физической величины:

$$\boxed{\langle F\rangle = \langle\psi|\widehat{F}\psi\rangle = \langle\psi|\widehat{F}|\psi\rangle} \tag{3.2.8}$$

Для величины, принимающей действительные значения, $\langle F\rangle = \langle F\rangle^*$

Из (3.2.8):

$$\langle\psi|\widehat{F}|\psi\rangle = \langle\psi|\widehat{F}|\psi\rangle^*\Big|_{(3.2.6)} = \langle\psi|\widehat{F}^\dagger|\psi\rangle \tag{3.2.9}$$

Следовательно: $\widehat{F} = \widehat{F}^\dagger$

Таким образом, физическим (наблюдаемым) величинам соответствуют **эрмитовы операторы**.

Рассмотрим среднеквадратичное отклонение (дисперсию):

$$\langle(\Delta F)^2\rangle \equiv \langle(F - \langle F\rangle^2)\rangle \tag{3.2.10}$$

Из (2.2.1):

$$\langle(\Delta F)^2\rangle = \langle\psi|(\widehat{F} - \langle F\rangle)^2|\psi\rangle \tag{3.2.11}$$

Заметим, что $\widehat{F} - \langle F\rangle$ – эрмитов оператор.

$$\langle(\Delta F)^2\rangle\big|_{(3.2.7')} = \langle(F - \langle F\rangle)\psi|(F - \langle F\rangle)\psi\rangle = \int |(F - \langle F\rangle)\,\psi|^2\,d\mathbf{q} \geqslant 0 \tag{3.2.12}$$

Если $\langle(\Delta F)^2\rangle = 0$, т.е. величина не имеет разброса, то из §3 гл. 2:

$$\widehat{F}|\psi\rangle = \langle F\rangle|\psi\rangle \tag{3.2.13}$$

Примем $\langle F\rangle = f$ – собственное значение оператора $\widehat{F}$.

Можно переписать формулу (2.3.2):

$$\widehat{F}|\psi_f\rangle = f|\psi_f\rangle \tag{3.2.14}$$

Утверждение 1 (Третий постулат квантовой механики)**.** *физическая величина F в любом квантовом состоянии может принимать только те значения, которые принадлежат спектру её оператора $\widehat{F}$*

Теорема 1. *если оператор $\widehat{F}$ эрмитов, то он имеет вещественные собственные значения*

Доказательство. Левая часть (3.2.14):

$$\langle\psi_f|\widehat{F}|\psi_f\rangle^*\Big|_{(3.2.7)} = \langle\psi_f|\widehat{F}|\psi_f\rangle$$

Правая часть (3.2.14):

$$f^*\langle\psi_f|\psi_f\rangle^* = f^*\langle\psi_f|\psi_f\rangle = f\langle\psi_f|\psi_f\rangle$$

Следовательно $\boxed{f^* = f}$ ■

Утверждение 2. *Эрмитовы операторы изображают вещественные (наблюдаемые) величины*

§3. Условие ортогональности и полноты для собственных функций операторов физических величин

Уравнение (2.3.3) на собственные значения $\widehat{F}$ в векторном виде:

$$\widehat{F}|\psi_n\rangle = f_n|\psi_n\rangle \quad \text{или} \quad \widehat{F}|n\rangle = f_n|n\rangle \tag{3.3.1}$$

где $\psi_n \equiv |n\rangle$, $n = 0, 1, 2, ...$
$f_n \to |\psi_n\rangle$ – невырожденный (простой) спектр
$f_n \to \left\{|\psi_n^{(1)}\rangle, |\psi_n^{(2)}\rangle, ..., |\psi_n^{(g)}\rangle\right\}$ – вырожденный спектр

Определение 1. *Максимальное количество линейно-независимых собственных векторов (собственных функций), отвечающих данному собственному значению, называется* ***кратностью вырождения*** *этого собственного значения.*

Утверждение 1. *Собственные векторы эрмитового оператора, соответствующие различным собственные значениям, взаимно ортогональны.*

Доказательство.

$$\begin{gathered}\langle\psi_m| : \widehat{F}|\psi_n\rangle = f_n|\psi_n\rangle \\ \langle\psi_n| : \widehat{F}|\psi_m\rangle = f_m|\psi_m\rangle \\ f_n \neq f_m\end{gathered} \tag{3.3.2}$$

$$\langle\psi_m|\widehat{F}|\psi_n\rangle - \langle\psi_n|\widehat{F}|\psi_m\rangle^\dagger\Big|_{(3.2.7)} = 0 = f_n\langle\psi_m|\psi_n\rangle - \underbrace{f_m^*}_{=f_m}\langle\psi_n|\psi_m\rangle^*$$

$$(f_n - f_m)\langle\psi_m|\psi_n\rangle = 0 \tag{3.3.3}$$

$$f_m \neq f_n \quad \to \quad \boxed{\langle\psi_m|\psi_n\rangle = 0}$$

■

$$\langle\psi_n|\psi_n\rangle = 1 \tag{3.3.4}$$

Из (3.3.3) и (3.3.4):

$$\boxed{\langle\psi_m|\psi_n\rangle = \delta_{mn}} \tag{3.3.5}$$

$$f_n \;\to\; \{|\psi_n^{(i)}\rangle\} \quad i = \overline{1, g}$$

$$f_n \;\to\; |\psi_n^s\rangle = \sum_{i=1}^{g} c_i^{(s)}|\psi_n^{(i)}\rangle \tag{3.3.6}$$

Посредством ортогонализации методом Грамма-Шмидта, коэффициенты $c_i^{(s)}$ возможно подобрать так, что $\langle\psi_n^{(t)}|\psi_n^{(s)}\rangle = \delta_{ts}$

Ортонормированная система – базис в гильбертовом пространстве состояний.

$$\forall|\psi\rangle \in \mathbb{H} \quad \widehat{F}: \quad |\psi\rangle = \sum_n c_n|\psi_n\rangle \tag{3.3.7}$$

$$\langle\psi_m|\psi\rangle = \sum_n c_n \underbrace{\langle\psi_m|\psi_n\rangle}_{=\delta mn \text{ (из (3.3.5))}} = \sum_n c_n\delta_{mn} = c_m$$

$c_n = \langle\psi_n|\psi\rangle$ – коэффициенты – проеции вектора на соответствеющие орты.

Для векторов-состояний $|\psi\rangle$ и $\langle\varphi|$ выполняется $\langle\varphi|\psi\rangle \in \mathbb{C}$

$$\widehat{P}_\psi = |\psi\rangle\langle\varphi| \tag{3.3.8}$$

$$\widehat{P}_\psi|\chi\rangle = |\psi\rangle\underbrace{\langle\varphi|\chi\rangle}_{=c} = c|\psi\rangle \tag{3.3.9}$$

Следовательно, $\widehat{P}_\psi$ – **оператор проектирования**.

Из (3.3.7):

$$|\psi\rangle = \sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n|\psi\rangle = \left(\sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n|\right)|\psi\rangle \tag{3.3.10}$$

Итого, получаем **условие полноты** (операторное разложение единицы) системы собственных векторов оператор $\widehat{F}$:

$$\boxed{\sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| = \mathbb{1}} \tag{3.3.11}$$

$$|\psi_n\rangle\underbrace{\langle\psi_n|\psi\rangle}_{=c_n} \equiv \widehat{P}_n|\psi\rangle = c_n|\psi_n\rangle \tag{3.3.12}$$

где $|\psi_n\rangle\langle\psi_n| = \widehat{P}_n$ – проектор на n-е базисное состояние.

$\{|\psi_n\rangle\}$ – условие полноты [3]

Свойства проекторов:

1. $\widehat{P}_n$ – эрмитов
2. $\widehat{P}_n^2 = \widehat{P}_n$
3. собственные значения $\widehat{P}_n$: $\lambda = \{0, 1\}$

[3] ЧТО?

Упражнение 1. *Доказать вышеперечисленные свойства.*

$$|\psi\rangle|_{(3.3.7)} = \sum_n c_n|\psi_n\rangle$$
$$\langle\psi| = \sum_m c_m^*\langle\psi_m|$$
$$\langle\psi|\psi\rangle = \sum_m\sum_n c_m^* c_n \underbrace{\langle\psi_m|\psi_n\rangle}_{\delta_{mn}} = \boxed{\sum_n |c_n|^2 = 1} \tag{3.3.13}$$

Подставляя (3.3.7) в (3.2.8):

$$\langle F\rangle = \langle\psi|\widehat{F}|\psi\rangle = \sum_m\sum_n c_m^* c_n \underbrace{\langle\psi_m|F|\psi_n\rangle}_{\langle\psi_m|f_n|\psi_n\rangle \text{ из } (3.3.1)} = \sum_m\sum_n c_m^* c_n f_n \underbrace{\langle\psi_m|\psi_n\rangle}_{\delta mn} = \\ = \boxed{\sum_n f_n |c_n|^2 = \langle F\rangle} \tag{3.3.14}$$

$|c_n|^2 = |\langle\psi_n|\psi\rangle|^2$ – вероятность обнаружить $F = f_n$ при измерении.
При большом количестве измерений:

$$\boxed{P_{|\psi\rangle}(F = f_n) = |\langle\psi_n|\psi\rangle|^2}$$

$$P_{|\psi\rangle}(F = f_n) = \langle\psi|\underbrace{\psi_n\rangle\langle\psi_n}_{\widehat{P}_n}|\psi\rangle \equiv \langle\widehat{P}_n\rangle_{|\psi\rangle}$$

§4. Нормировка собственных функций на единицу и дельта-функцию

Пример непрерывного спектра:
Из (2.3.1):

$$\widehat{\mathbf{p}}\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{p}\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) \tag{3.4.1}$$

где $\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{(i/\hbar)(\mathbf{pr}-Et)}$ ((2.1.2))

$$\int \Psi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r}, t)\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t)dv \equiv \langle\mathbf{p}'|\mathbf{p}\rangle = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \tag{3.4.2}$$

Введём **оснащённое** гильбертово пространство (т.е. имеющее [4] обобщённые собственные векторы)

$$\boxed{\widehat{F}|f\rangle = f|f\rangle, \quad \text{где } \langle f|f'\rangle = \delta(f - f')} \tag{3.4.3}$$

где $|f\rangle$ – векторы непрерывного спектра.

Теорема 1. *Самосопряжённый оператор обладает в оснащённом гильбертовом пространство* ***полной*** *системой обобщённых собственных векторов, отвечающих вещественным собственным значениям*

Рассмотрим возможные варианты спектра:

[4]уточнить

1. $\widehat{F}$ имеет дискретный спектр

$$|\psi\rangle|_{(3.3.7)} = \sum_n c_n|\psi_n\rangle \equiv \sum_n c_n|n\rangle \tag{3.4.4}$$

2. $\widehat{F}$ имеет непрерывный спектр

$$|\psi\rangle = \int c(f)|f\rangle df \tag{3.4.5}$$

где $c_n\langle\psi_n|\psi\rangle \equiv \langle n|\psi\rangle$

$$\langle f'|\psi\rangle = \int c(f) \underbrace{\langle f'|f\rangle}_{\delta(f-f') \text{ из } (3.4.3)} df = c(f')$$

или

$$\boxed{c(f) = \langle f|\psi\rangle}$$

3. $\widehat{F}$ имеет смешанный спектр (задача 5 из 1-го задания)

$$\boxed{|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\psi\rangle + \int df|f\rangle\langle f|\psi\rangle} \tag{3.4.6}$$

– разложение произвольного $|\psi\rangle$ по **полному** базису оператора $\widehat{F}$

Из (3.4.5):

$$|\psi\rangle = \int \langle f|\psi\rangle \cdot |f\rangle df = \int df \cdot |f\rangle\langle f|\psi\rangle$$

Отсюда получаем условие полноты в непрерывном спектре:

$$\boxed{\int df|f\rangle\langle f| = \mathbb{1}}$$

Обобщённое словие полноты:

$$\boxed{\sum_n |n\rangle\langle n| + \int df|f\rangle\langle f| = \mathbb{1}} \tag{3.4.7}$$

Рассмотрим физический смысл $c_n = \langle n|\psi\rangle$ и $c(f) = \langle f|\psi\rangle$ в разложении (3.4.6). Обобщённые условия ортонормировки (из (3.3.5) и (3.4.3)):

$$\langle n|m\rangle = \delta_{nm}, \quad \langle f|f'\rangle = \delta(f-f') \quad \langle n|f\rangle = 0$$

Из (3.4.6):

$$\boxed{\langle\psi|\psi\rangle = \sum_n |c_n|^2 + \int |c(f)|^2 df = 1} \tag{3.4.8}$$

Упражнение 1. *Доказать* (3.4.8)

Подставляя (3.4.8) в (3.2.8) и используя задачи на собственные значения (3.3.1) и (**??**), получим:

$$\boxed{\langle F\rangle = \langle\psi|\widehat{F}|\psi\rangle = \sum_n f_n |c_n|^2 + \int f \underbrace{|c(f)|^2 df}_{dp}} \tag{3.4.9}$$

Из (3.4.8) и (3.4.9) следует, что $|c_n|^2 = \langle n|\psi\rangle$ – вероятность обнаружить F и состоянии $|\psi\rangle$, ($F = f_n$ [5])

[5] разобраться

Если f_n – вырожденное собственное значение, такое, что кратность его вырождения равна g, то:

$$P_{|\psi\rangle}(F = f_n) = \sum_{i=1}^{g} \left| c_n^{(i)} \right|^2 \equiv \sum_{i=1}^{g} \left| \langle n^{(i)} | \psi \rangle \right|^2 \tag{3.4.10}$$

Плотность вероятности получить значение, лежащее в окрестности $(f, f + df)$ точке непрерывного спектра f равна:

$$\boxed{\rho_{|\psi\rangle}(f) = \frac{dP}{df} = |c(f)|^2} = |\langle f | \psi \rangle|^2 \tag{3.4.11}$$

Глава 4

Совместная измеримость физических величин

§1. Условия одновременной измеримости физических величин. Коммутаторы

$$\widehat{F},\widehat{G}: \quad \begin{aligned} F \to \widehat{F} \to \{f_n\},\ n = 0,1,2,\dots \\ G \to \widehat{G} \to \{g_m\},\ m = 0,1,2,\dots \end{aligned}$$

$|\varphi\rangle$ — общий собственный вектор операторов $\widehat{F}$ и $\widehat{G}$.

$$\begin{cases} \widehat{F}|\varphi\rangle = f_n|\varphi\rangle \\ \widehat{G}|\varphi\rangle = g_m|\varphi\rangle \end{cases} \tag{4.1.1}$$

Обозначим $F = f_n$, $G = g_n$, тогда

$$|\varphi\rangle \equiv |f_n g_n\rangle \equiv |nm\rangle$$

$|nm\rangle$ — полная система собственных веторов
Тогда:

$$\forall|\psi\rangle \in \mathcal{H} \ \to \ |\psi\rangle = \underbrace{\sum_{n,m} |nm\rangle\langle nm|}_{=\mathbb{1}} \psi\rangle \tag{4.1.2}$$

$$P_{|\psi\rangle}(F = f_n, G = g_m) = |\langle nm|\psi\rangle|$$

Определение 1. *Физические величины F и G одновременно (совместно) измеримы, если их операторы $\widehat{F}$ и $\widehat{G}$ обладают общей полной системой собственных векторов (собственных функций).*

Теорема 1. *Для того, чтобы физические велчины F и G были совместно измеримы необходимо и достаточно, чтобы операторы $\widehat{F}$ и $\widehat{G}$ коммутировали, то есть:*

$$[\widehat{F},\widehat{G}] \equiv \widehat{F}\widehat{G} - \widehat{G}\widehat{F} = 0$$

Доказательство. 1) Необходимость. Пусть F и G совместно измеримы, тогда:

$$\{|nm\rangle\} \in \mathcal{H}, \ \ \forall|\psi\rangle \in \mathcal{H} \ \rightarrow$$
$$(\widehat{F}\widehat{G} - \widehat{G}\widehat{F})|\psi\rangle = \sum_{n,m}(\widehat{F}\widehat{G} - \widehat{G}\widehat{F})|nm\rangle\langle nm|\psi\rangle = \sum_{n,m}(f_n g_m - g_m f_n)|nm\rangle\langle nm|\psi\rangle = 0$$

Что и требовалось доказать

2) Достаточность.

а) Пусть $[\widehat{F}, \widehat{G}] = 0$ и $\widehat{F}$ имеет невырожденный спектр.

$$f_n \rightarrow |n\rangle : \quad \widehat{F}|n\rangle = f_n|n\rangle \tag{4.1.3}$$

$$\widehat{G}(\widehat{F}|n\rangle) = \widehat{F}(\widehat{G}|n\rangle)\Big|_{(4.1.3)} = f_n(\widehat{G}|n\rangle)$$

$\widehat{G}|n\rangle$ — собственный вектор оператора $\widehat{F}$ с собственным значением f_n

Собственные векторы $\widehat{G}|n\rangle$ и $|n\rangle$ соответствуют одному собственному значению, а значит коллинеарны: $\widehat{G}|n\rangle = g_m|n\rangle$

$$|n\rangle \equiv |f_n g_m\rangle \equiv |nm\rangle$$

(полная система)

б) Случай вырожденного спектра $\widehat{F}$ доказан в гл.6

Таким образом, если $[\widehat{F}, \widehat{G}] \neq 0$, то $\widehat{F}$ и $\widehat{G}$ могут иметь общий собственный вектор. Но из теоремы следует, что из малого числа собственных векторов нельзя построить полную систему. ■

Определение 2. *Число f, входящее в собственные значения оператора физической величины $\widehat{F}$, называют квантовым числом, характеризующим состояние системы $|\psi_f\rangle \equiv |f\rangle$*

Набор взаимно коммутирующих операторов $(\widehat{G}_1, \widehat{G}_2 ...)$ коммутирующих с $\widehat{F}$ даёт полный набор квантовых чисел в случае вырожденного спектра

$\psi_{fg_1g_2...}(\mathbf{q})$ или собственные векторы $|fg_1g_2...\rangle$ дают полное описание квантового состояния системы

Определение 3. *Набор взаимно коммутирующих операторов, собственные значения (квантовые числа) которых однозначно определяют квантовое состояние системы, называют <u>полным набором собственных наблюдаемых</u>.*

§2. Соотношение неопределённостей

Пусть $\widehat{F}$ и $\widehat{G}$ — операторы физических величин F и G, то есть $\widehat{F}^+ = \widehat{F}$, $\widehat{G}^+ = \widehat{G}$ и $[\widehat{F}, \widehat{G}] = i\widehat{K}$.

Теорема 1. *В произвольном квантовом состоянии выполняется соотношение неопределённостей:*

$$\boxed{\left\langle \left(\widehat{F} - \langle\widehat{F}\rangle\right)^2 \right\rangle \left\langle \left(\widehat{G} - \langle\widehat{G}\rangle\right)^2 \right\rangle \geqslant \frac{\langle\widehat{K}\rangle^2}{4}}$$

Доказательство. 1) Если $[\widehat{F},\widehat{G}] = i\widehat{K}$, то $\widehat{K}^+ = \widehat{K}$

$$[\widehat{F},\widehat{G}]^+ = -i\widehat{K}^+ \tag{4.2.1}$$

С другой стороны:

$$[\widehat{F},\widehat{G}]^+ = (\widehat{F}\widehat{G} - \widehat{G}\widehat{F})^+ = \widehat{G}^+\widehat{F}^+ - \widehat{F}^+\widehat{G}^+ = -[\widehat{F}^+,\widehat{G}^+] = -[\widehat{F},\widehat{G}] = -i\widehat{K} \tag{4.2.2}$$

Сравнивая правые части (4.2.1) и (4.2.2), получаем $\widehat{K}^+ = \widehat{K}$

2) В состоянии $|\psi\rangle$: $\langle F\rangle = \langle\psi|\widehat{F}|\psi\rangle$, то есть:

$$\left.\begin{aligned} \Delta\widehat{F} &= \widehat{F} - \langle\widehat{F}\rangle\cdot\mathbb{1} \\ \Delta\widehat{G} &= \widehat{G} - \langle\widehat{G}\rangle\cdot\mathbb{1} \end{aligned}\right\} \text{операторы отклоления от среднего}$$

$$[\Delta\widehat{F},\Delta\widehat{G}] = i\widehat{K}$$

3) $|\varphi\rangle = (\Delta\widehat{F} - i\gamma\Delta\widehat{G})|\psi\rangle$, где γ — вещественный параметр.
Проведём сопряжение:

$$\langle\varphi| = \langle\psi|(\Delta\widehat{F} - i\gamma\Delta\widehat{G})^+ = \langle\psi|(\Delta\widehat{F} + i\gamma\Delta\widehat{G})$$

4) $\langle\varphi|\varphi\rangle = \||\varphi\rangle\| = \langle\psi|(\Delta\widehat{F} + i\gamma\Delta\widehat{G})(\Delta\widehat{F} - i\gamma\Delta\widehat{G})|\psi\rangle = \langle\psi|\Delta\widehat{F}^2|\psi\rangle + \gamma^2\langle psi|\Delta\widehat{G}^2|\psi\rangle + \gamma\langle\psi|\widehat{K}|\psi\rangle \geqslant 0$

$$\langle\widehat{K}\rangle^2 - 4\langle\Delta\widehat{F}^2\rangle\langle\Delta\widehat{G}^2\rangle \leqslant 0$$

Общее соотношение неопределённостей:

$$\boxed{\langle\Delta\widehat{F}^2\rangle\langle\Delta\widehat{G}^2\rangle \geqslant \frac{\langle\widehat{K}\rangle^2}{4}}$$

Дисперсия:

$$\left\langle\Delta\widehat{F}^2\right\rangle = \left\langle(\widehat{F} - \langle\widehat{F}\rangle)^2\right\rangle = \left\langle\widehat{F}^2\right\rangle - \left\langle\widehat{F}\right\rangle^2$$

■

Пример 1. *Выведем соотношение неопределённостей для координаты и импульса:*

$$\widehat{F} = \widehat{x} = x$$
$$\widehat{G} = \widehat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

$$[\widehat{x},\widehat{p}_x]\psi(x) = x(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})\psi(x) - (-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})x\psi(x) = i\hbar\psi(x) \ \rightarrow\ \widehat{K} = \hbar$$

$$\boxed{\left\langle(\Delta\widehat{x})^2\right\rangle\left\langle(\Delta\widehat{p}_x)^2\right\rangle \geqslant \frac{\hbar^2}{4}}$$

Глава 5

Квантовая динамика частицы

§1. Уравнение непрерывности для плотности вероятности. Плотность тока вероятностей. Коэффициенты прохождения и отражения

$U(\mathbf{r})$ — стационарное потенциальное поле

$$\widehat{H} = \frac{\widehat{\mathbf{p}^2}}{2m} + U(\mathbf{r})\Bigg|_{\widehat{\mathbf{p}}=-i\hbar\nabla} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\mathbf{r})$$

См. (1.3.1) и (1.3.2):

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r},t) = \widehat{H}\Psi(\mathbf{r},t)$$

— временное (нестационарное) уравнение Шрёдингера, 4-й постулат квантовой механики

$$i\hbar\Psi^*\frac{\partial}{\partial t}\Psi = \Psi^*\widehat{H}\Psi$$

$$-i\hbar\Psi\frac{\partial}{\partial t}\Psi^* = \Psi(\widehat{H}\Psi)^*$$

Складывая, получим:

$$i\hbar\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t} + \Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\right) = \Psi^*(\widehat{H}\Psi) - \Psi(\widehat{H}\Psi)^* \tag{5.1.1}$$

Преобразуем левую часть (5.1.1) с помощью выражений (1.4.1) и (1.4.2):

$$\frac{\partial}{\partial t}\Psi^*(\mathbf{r},t)\Psi(\mathbf{r},t)\Bigg|_{\rho(\mathbf{r},t)=|\Psi(\mathbf{r},t)|^2} = \frac{\partial\rho}{\partial t}$$

Правая часть (5.1.1):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\psi^*\Delta\psi - \psi\Delta\psi^*)\Bigg|_{\Delta=\nabla\cdot\nabla} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) = i\hbar\frac{\hbar}{2m}\nabla(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*)$$

Отсюда (5.1.1) переходит в:

$$\boxed{\frac{\partial\rho}{\partial t} + \operatorname{div}\mathbf{j} = 0}$$

— **уравнение непрерывности для плотности вероятности**

где $\boxed{\mathbf{j} = -\frac{i\hbar}{2m}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*)}$ — **плотность потока (тока) вероятности**.

$$-\frac{\partial}{\partial t}\int\limits_v \rho(\mathbf{r},t)\,dv = \int\limits_v \operatorname{div}\mathbf{j}\,dv\Bigg|_{\text{т. Гаусса}} = \oint\limits_S \mathbf{j}\,d\mathbf{S}$$

Размерность плотности потока вероятности: $[\mathbf{j}] = \left[\frac{1}{\text{с}\cdot\text{см}^2}\right]$

Упражнение 1. *Доказать, что* $\mathbf{j} = \frac{p}{m}$

Коэффициент прохождения:

$$\boxed{T(E) = \frac{|\mathbf{j}_{\text{прош}}|}{|\mathbf{j}_{\text{пад}}|}} \tag{5.1.2}$$

Коэффициент отражения:

$$\boxed{R(E) = \frac{|\mathbf{j}_{\text{отр}}|}{|\mathbf{j}_{\text{пад}}|}} \tag{5.1.3}$$

В одномерном случае $\Psi(\mathbf{r},t) \to \Psi(x,t)$, $U(\mathbf{r}) \to U(x)$

$$j_x = -\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} - \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right) = \frac{1}{m}\operatorname{Re}\left[\psi^*(\widehat{p}_x\psi)\right] \tag{5.1.4}$$

§2. Оператор изменения во времени физической величины. Интегралы движения. Коммутаторы. Скобки Пуассона

В общем случае $\widehat{F} = \widehat{F}(t)$

$$\langle F\rangle \equiv \left\langle\psi(t)\left|\widehat{F}(t)\right|\psi(t)\right\rangle$$

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \widehat{H}|\psi(t)\rangle} \tag{5.2.1}$$

Пользуясь формулой (5.2.1), а также тем, что $\widehat{H}^+ = \widehat{H}$, получим:

$$\begin{gathered}\frac{d}{dt}\langle F\rangle = \left\langle\frac{\partial\psi}{\partial t}\left|\widehat{F}\right|\psi\right\rangle + \left\langle\psi\left|\frac{\partial\widehat{F}}{\partial t}\right|\psi\right\rangle + \left\langle\psi\left|\widehat{F}\right|\frac{\partial\psi}{\partial t}\right\rangle = \\ = \frac{i}{\hbar}\left\langle\psi\left|\widehat{H}\widehat{F}\right|\psi\right\rangle + \left\langle\psi\left|\frac{\partial\widehat{F}}{\partial t}\right|\psi\right\rangle - \frac{i}{\hbar}\left\langle\psi\left|\widehat{F}\widehat{H}\right|\psi\right\rangle = \left\langle\psi\left|\frac{\partial\widehat{F}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}[\widehat{H},\widehat{F}]\right|\psi\right\rangle\end{gathered} \tag{5.2.2}$$

$$\left[\begin{array}{l} \langle F\rangle = \sum\limits_n F_n P_n \ \rightarrow\ \dfrac{d}{dt}\langle F\rangle = \sum\limits_n \dfrac{dF_n}{dt} P_n \equiv \left\langle \dfrac{dF}{dt} \right\rangle \\ \langle F\rangle = \displaystyle\int F\,dP \ \rightarrow\ \dfrac{d}{dt}\langle F\rangle = \displaystyle\int \dfrac{dF_n}{dt}\,dP \equiv \left\langle \dfrac{dF}{dt} \right\rangle \end{array}\right.$$

Следовательно:

$$\frac{d}{dt}\langle F\rangle \equiv \left\langle \frac{dF}{dt} \right\rangle \tag{5.2.3}$$

Из (2.2.1):

$$\left\langle \frac{dF}{dt} \right\rangle = \left\langle \frac{d\widehat{F}}{dt} \right\rangle_{\psi} = \left\langle \psi \left| \frac{d\widehat{F}}{dt} \right| \psi \right\rangle \tag{5.2.4}$$

Сравнивая (5.2.3) и (5.2.4) с (5.2.2):

$$\boxed{\frac{d}{dt}\langle F\rangle = \left\langle \psi \left| \frac{d\widehat{F}}{dt} \right| \psi \right\rangle} \tag{5.2.5}$$

где

$$\boxed{\frac{d\widehat{F}}{dt} = \frac{\partial \widehat{F}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}[\widehat{H}, \widehat{F}]} \tag{5.2.6}$$

— оператор изменения физической величины во времени (уравнение движения оператора $\widehat{F}$)

Таким образом:

$$\left.\begin{array}{r} \dfrac{\partial \widehat{F}}{\partial t} = 0 \\ {[\widehat{H}, \widehat{F}] = 0} \end{array}\right\} \langle F\rangle = const$$

Определение 1. *Величина, сохранающая свое значение во времени, называется интегралом движения.*

Примеры интегралов движения:

1. $\widehat{F} = \widehat{H}$ — гамильтониан замкнутой системы. $\frac{\partial \widehat{H}}{\partial t} = 0$, т.е. полная энергия сохраняется.

2. $\widehat{F} = \widehat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$. Если $\widehat{H} = \dfrac{\widehat{\mathbf{p}}^2}{2m}$ (свободное движение), то $\mathbf{p}$ — интеграл движения.

Частица в потенциальном поле:

$$[\widehat{H}, \widehat{\mathbf{p}}] = [\frac{\widehat{\mathbf{p}}^2}{2m}, \widehat{\mathbf{p}}] + [\mathbf{U}(r), \mathbf{p}] = i\hbar\nabla U(\mathbf{r}) \neq 0 \tag{5.2.7}$$

то есть $\mathbf{p}$ не сохраняется.

Обобщённые координаты:

$$\mathbf{q} = (q_1, ..., q_n), \qquad \mathbf{p} = (p_1, ..., p_n), \qquad F(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$$

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_{i=1}^{s} \left(\frac{\partial F}{\partial q_i}\dot{q}_i + \frac{\partial F}{\partial p_i}\dot{p}_i \right)$$

См §40 т.1 Л.Л.: уравнения Гамильтона

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \qquad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$$

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \underbrace{\sum_{i=1}^{s} \left(\frac{\partial H}{\partial p_i}\frac{\partial F}{\partial q_i} - \frac{\partial H}{\partial q_i}\frac{\partial F}{\partial p_i} \right)}_{\{H,F\}} = \frac{\partial F}{\partial t} + \{H,F\} \tag{5.2.8}$$

$\{H,F\}$ – скобка Пуассона для H и F
Принцип соответствия (между классической и квантовой механикой):

$$|\Delta F| = |F - \langle F \rangle| \ll |\langle F \rangle|$$

(5.2.8) $\sim$ (5.2.5), (5.2.6):

$$\begin{aligned} F \quad &\leftrightarrow \quad \langle F \rangle \\ \frac{\partial F}{\partial t} \quad &\leftrightarrow \quad \left\langle \psi \middle| \frac{\partial \widehat{F}}{\partial t} \middle| \psi \right\rangle \\ \{H,F\} \quad &\leftrightarrow \quad \frac{i}{\hbar} \left\langle \psi \middle| \left[\widehat{H}, \widehat{F}\right] \middle| \psi \right\rangle \end{aligned}$$

Выражение $i\left[\widehat{H}, \widehat{F}\right]$ иногда называют **квантовой скобкой Пуассона**
При $\hbar \to 0$:

$$i\left[\widehat{H}, \widehat{F}\right] \to \hbar \{H, F\}$$

§3. Производная по времени операторов координаты и импульсов частицы в потенциальном поле. Теоремы Эренфеста

Из (5.2.6):

$$\widehat{\mathbf{v}} \equiv \frac{d\widehat{\mathbf{r}}}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left[\widehat{H}, \widehat{\mathbf{r}}\right] = \frac{i}{\hbar}\left[\widehat{T}, \widehat{\mathbf{r}}\right] + \frac{i}{\hbar}\left[U(\widehat{\mathbf{r}}), \widehat{\mathbf{r}}\right]$$

$$U(\widehat{\mathbf{r}}) \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{U^n(0)}{n!}\widehat{\mathbf{r}}^n \quad \to \quad U(\widehat{\mathbf{r}}) = 0$$

$$\left[\widehat{T}, \widehat{\mathbf{r}}\right] = \left[\frac{\widehat{\mathbf{p}}^2}{2m}, \widehat{\mathbf{r}}\right] = -i\hbar\frac{\widehat{\mathbf{p}}}{m}$$

Оператор скорости в квантовой механике:

$$\widehat{\mathbf{v}} = \frac{\widehat{\mathbf{p}}}{m} \tag{5.3.1}$$

$$\widehat{\mathbf{F}} \equiv \left.\frac{d\widehat{\mathbf{p}}}{dt}\right|_{(5.2.6)} = \left.\frac{i}{\hbar}\left[\widehat{H}, \widehat{\mathbf{p}}\right]\right|_{(5.2.7)} = -\nabla U(\mathbf{r}) \tag{5.3.2}$$

Из (5.2.5):

$$\boxed{\left.\frac{d}{dt}\langle\widehat{\mathbf{r}}\rangle\right|_{(5.3.1)}=\frac{\langle\mathbf{p}\rangle}{m}} \tag{5.3.3}$$

$$\boxed{\left.\frac{d}{dt}\langle\widehat{\mathbf{p}}\rangle\right|_{(5.3.2)}=-\langle\nabla U(\widehat{\mathbf{r}})\rangle} \tag{5.3.4}$$

Из (5.3.3), (5.3.4) получается квантово-механический аналог уравнения Ньютона:

$$m\frac{d^2}{dt^2}\langle\widehat{\mathbf{r}}\rangle=\langle\widehat{\mathbf{F}}\rangle \tag{5.3.5}$$

Уравнения (5.3.3) - (5.3.5) – **теоремы Эренфеста** (принцип соответствия между квантовой и классической механикой). Уравнения классической механики – предельный случай квантовых уравнений.

Из (5.3.5):

$$\langle\widehat{\mathbf{F}}(\mathbf{r})\rangle\neq\mathbf{F}(\langle\widehat{\mathbf{r}}\rangle) \tag{5.3.6}$$

$$\langle\widehat{\mathbf{F}}(\mathbf{r})\rangle=\left\langle\widehat{F}(\langle\mathbf{r}\rangle)+(\widehat{\mathbf{r}}-\langle\widehat{\mathbf{r}}\rangle)\,\nabla\mathbf{F}(\langle\widehat{\mathbf{r}}\rangle)+\frac{1}{2}(\widehat{r}_\alpha-\langle\widehat{r}_\alpha\rangle)(\widehat{r}_\beta-\langle\widehat{r}_\beta\rangle)\cdot\frac{\partial^2\mathbf{F}(\langle\widehat{\mathbf{r}}\rangle)}{\partial r_\alpha\partial r_\beta}+...\right\rangle \tag{5.3.7}$$

$$\langle\widehat{\mathbf{F}}(\mathbf{r})\rangle\approx\mathbf{F}(\langle\widehat{\mathbf{r}}\rangle)+\frac{1}{2}\left\langle(\widehat{r}_\alpha-\langle\widehat{r}_\alpha\rangle)(\widehat{r}_\beta-\langle\widehat{r}_\beta\rangle)\right\rangle\times\frac{\partial^2\mathbf{F}(\langle\widehat{\mathbf{r}}\rangle)}{\partial r_\alpha\partial r_\beta} \tag{5.3.8}$$

Если $\mathbf{F}\equiv 0$ – свободное движение
Если $\mathbf{F}=\mathrm{const}$ – движение в однорожном поле
$\mathbf{F}=-m\omega^2\mathbf{r}$ – движение в поле упругой силы

Тогда:

$$\left.\left\langle\widehat{\mathbf{F}}(\mathbf{r})\right\rangle\right|_{(5.3.5)}=m\frac{d^2}{dt^2}\langle\widehat{\mathbf{r}}\rangle=\mathbf{F}(\langle\widehat{\mathbf{r}}\rangle) \tag{5.3.9}$$

Пусть Δr – размер области локализации частицы, а L – размер области существенного изменения силы. Тогда условие «классичности» движения состоит в том, что:

$$\Delta r\ll L \tag{5.3.10}$$

(т.е. $|\psi|^2$ существенно отличен от нуля)

Глава 6

Теория представлений

§1. Матричное представление

$\widehat{G} g_n |n\rangle$, где $|n\rangle \equiv |\psi_n\rangle,\ n \in \mathbb{Z}$

Из (3.3.11) (условие полноты):

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = \mathbb{1}$$

Разложим по базису оператора $\widehat{G}$:

$$|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\psi\rangle$$

В g-представлении:

$$\langle n|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \langle 1|\psi\rangle \\ \langle 2|\psi\rangle \\ ... \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} \langle n|\widehat{F}\psi\rangle = \left\langle n|\widehat{F}\left(\sum_{n'}|n'\rangle\langle n'|\right)\psi\right\rangle = \sum_{n'}\langle n|\widehat{F}|n'\rangle\langle n'|\psi\rangle = \\ = \begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} & \cdots \\ F_{21} & F_{22} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \langle 1|\psi\rangle \\ \langle 2|\psi\rangle \\ ... \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{6.1.1}$$

$F_{nn'} = \langle n|\widehat{F}|n'\rangle$ — матричное представление $\widehat{F}$ в базисе состояний $\{|n\rangle\}$ собственных векторов $\widehat{G}$ ($\widehat{G} = \widehat{H}$, E-представление)

Матричное представление эрмитово-сопряжённого оператора:

$$\langle n'|\widehat{F}^\dagger|n\rangle\Big|_{(3.2.6)} = \langle n|\widehat{F}|n'\rangle^*$$

т.е. $\left(F^\dagger\right)_{n'n} = F^*_{nn'}$

Эрмитово сопряжение := транспонирование + комплексное сопряжение.

Если $\widehat{F}^\dagger = \widehat{F}$, то $F^*_{nn'}$ — эрмитова матрица

В случае $n' = n$: $F_{nn} = F^*_{nn}$ (т.е. диагональные матричные элементы эрмитовой матрицы вещественны)

$$\langle n|\widehat{A}\widehat{B}|n''\rangle = \sum_{n'}\langle n|\widehat{A}|n'\rangle\langle n'|\widehat{B}|n''\rangle = \sum_{n'} A_{n'}B_{n'n''}(\text{произведение матриц})$$

Задача на собственные значения и векторы:

$$\widehat{F}|f\rangle = f|f\rangle \xrightarrow{(6.1.1)} \sum_{n'} F_{nn'}\langle n'|f\rangle = f\langle n|f\rangle = f\delta_{nn'}\langle n'|f\rangle$$

$$\sum_{n'} \left(F_{nn'} - f\delta_{nn'}\right)\langle n'|f\rangle = 0$$

Корни f характеристического уравнения являются собственными значениями оператора:

$$\det \|F_{nn'} - f\delta_{nn'}\| = 0$$

В f-представлении оператора $\widehat{F}$:

$$\langle f'|\widehat{F}|f\rangle = f\langle f'|f\rangle = f\delta_{f'f}$$

т.е. F — диагональная матрица

§2. Унитарное преобразование векторов-состояний и операторов

$$\widehat{L}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle,\ |\lambda\rangle = |\chi_\lambda\rangle$$
$$\widehat{M}|\mu\rangle = \mu|\mu\rangle,\ |\mu\rangle = |\varphi_\mu\rangle$$
$$|\psi\rangle = \sum_\lambda |\lambda\rangle\langle\lambda|\psi\rangle = \sum_\mu |\mu\rangle\langle\mu|\psi\rangle$$

Обозначим:

$$\langle\lambda|\psi\rangle = \langle\chi_\lambda|\psi\rangle = \psi_\lambda$$
$$\langle\mu|\psi\rangle = \langle\varphi_\mu|\psi\rangle = \psi'_\mu$$

(волновая функция в λ и μ представлениях)

$$\psi'_\mu = \langle\mu|\psi\rangle = \sum_\lambda \underbrace{\langle\mu|\lambda\rangle}_{U_{\mu\lambda}}\langle\lambda|\psi\rangle = \sum_\lambda U_{\mu\lambda}\psi_\lambda \tag{6.2.1}$$

$$\langle\mu| = \sum_\lambda \underbrace{\langle\mu|\lambda\rangle}_{U_{\mu\lambda}}\langle\lambda| = \sum_\lambda U_{\mu\lambda}\langle\lambda|$$

$$|\mu\rangle = \sum_\lambda |\lambda\rangle\langle\lambda|\mu\rangle = \sum_\lambda U^*_{\mu\lambda}|\lambda\rangle$$

Условия ортонормировки:

$$\langle\mu|\mu'\rangle = \delta_{\mu\mu'}$$
$$\langle\lambda|\lambda'\rangle = \delta_{\lambda\lambda'}$$

$$\delta_{\mu\mu'} = \langle\mu|\mu'\rangle = \sum_\lambda\sum_{\lambda'} \underbrace{\langle\mu|\lambda\rangle}_{U_{\mu\lambda}}\underbrace{\langle\lambda|\lambda'\rangle}_{\delta_{\lambda\lambda'}}\underbrace{\langle\lambda'|\mu'\rangle}_{\left(U^\dagger\right)_{\lambda'\mu'}} = \sum_\lambda U_{\mu\lambda}\left(U^\dagger\right)_{\lambda\mu'}$$

Определение 1. $\widehat{U}$ *называется* <u>*унитарным*</u>, *если* $\widehat{U}^\dagger = \widehat{U}^{-1}$, *т.е.* $\widehat{U}^\dagger\widehat{U} = \widehat{U}^\dagger\widehat{U} = \mathbb{1}$

Если $\widehat{U}^\dagger \widehat{U} = \mathbb{1}$, то:

$$\sum_{n'} U_{nn'} \left(U^\dagger\right)_{n'n''} = \delta_{nn''} \ \Rightarrow \ U^\dagger = U^{-1}$$

(т.е. U — унитарная матрица)

$$|\psi'\rangle = \widehat{U}|\psi\rangle \tag{6.2.2}$$

Преобразование вектора-состояния из одного представления в другое является унитарным.

Пусть $\widehat{F}$ — оператор физической величины в λ-представлении, а $\widehat{F'}$ — в μ-представлении.

$$\langle\mu'|\lambda'\rangle^* = U^*_{\mu'\lambda'} = \left(U^\dagger\right)_{\lambda'\mu'}$$

$$F_{\mu\mu'} = \langle\mu|\widehat{F}|\mu'\rangle = \sum_\lambda \sum_{\lambda'} \underbrace{\langle\mu|\lambda\rangle}_{U_{\mu\lambda}} \underbrace{\langle\lambda|\widehat{F}|\lambda'\rangle}_{F_{\lambda\lambda'}} \langle\lambda'|\mu'\rangle = \sum_\lambda \sum_{\lambda'} U_{\mu\lambda} F_{\lambda\lambda'} \left(U^\dagger\right)_{\lambda'\mu'} \tag{6.2.3}$$

$$\boxed{F' = UFU^\dagger} \tag{6.2.4}$$

$$\boxed{F = U^\dagger F' U} \tag{6.2.5}$$

$$\boxed{\widehat{F} = \widehat{U}\widehat{F}\widehat{U}^\dagger} \tag{6.2.4$'$}$$

$$\boxed{\widehat{F} = \widehat{U}^\dagger \widehat{F'} \widehat{U}} \tag{6.2.5$'$}$$

В классе унитарных преобразований векторов и операторов справедливы следующие утверждения:

1. Скалярное произведение любых двух векторов инвариантно к унитарным преобразованиям:
$$\langle\psi_1'|\psi_2'\rangle = \langle\psi_1|\psi_2\rangle$$

2. Унитарные преобразования не меняют собственные значения эрмитовых операторов: если $\widehat{F}|f\rangle = f|f\rangle$, то $\boxed{\widehat{F'}|f'\rangle = f|f'\rangle}$

3. Унитарные преобразования не нарушают эрмитовости операторов: если $\widehat{F}^\dagger = \widehat{F}$, то $(\widehat{F'})^\dagger = \widehat{F'}$

4. Унитарные преобразования сохраняют коммутационные соотношения: если $[\widehat{F}, \widehat{G}] = \widehat{K}$, то $[\widehat{F'}, \widehat{G'}] = \widehat{K'}$

5. $\boxed{\langle\psi_1|\widehat{F}|\psi_2\rangle = \langle\psi_1'|\widehat{F'}|\psi_2'\rangle}$

Упражнение 1. *Доказать утверждения 1-5.*

Физическое содержание теории при унитарных преобразованиях не меняется.

Аналогия в классической механике — канонические преобразования (см. Л.-Л. т.I Теоретическая механика, §45)

Из предыдущей лекции: $[\widehat{F}, \widehat{G}] = 0$, $\widehat{F}$ — вырожденный

Соответствующие собственные значения $f_n \to \{|\psi_n^{(i)}\rangle\} \equiv |n^{(i)}\rangle,\ i = 1..k$

$$\{|n^{(i)}\rangle\} = \{|n'^{(i)}\rangle\}$$
$$|n'^{(i)}\rangle = \sum_j U_{ij}|n^{(j)}\rangle$$
$$G' = UGU^\dagger$$

Подходящим унитарным преобразованием любая эрмитовая матрица приводится к диагональному виду:

$$G'_{ij} = g_i\delta_{ij} \quad \text{или} \quad \widehat{G}|n'^{(i)}\rangle = g_i|n'^{(i)}\rangle$$

$|n'^{(1)}\rangle, |n'^{(2)}\rangle ... |n'^{(1k)}\rangle$ — собственные векторы

Следовательно, величины совместно измеримы. (доказана достаточность теоремы)

§3. Координатное и импульсное представления

Пусть $\mathbf{r} \to |\mathbf{r}\rangle$ (а значит $\mathbf{r} \to \widehat{\mathbf{r}}$)
тогда $\mathbf{p} \to |\mathbf{p}\rangle$

Задача на собственные значения:

$$\widehat{\mathbf{r}}|\mathbf{r}'\rangle = \mathbf{r}'|\mathbf{r}'\rangle \tag{6.3.1}$$

$$\widehat{\mathbf{p}}|\mathbf{p}'\rangle = \mathbf{p}'|\mathbf{p}'\rangle \tag{6.3.2}$$

Подействуем справа $\langle\mathbf{p}''|$:

$$\langle\mathbf{p}''|\widehat{\mathbf{p}}|\mathbf{p}'\rangle = \mathbf{p}'\langle\mathbf{p}''|\mathbf{p}'\rangle$$

Из (3.4.3):

$$\langle\mathbf{p}''|\mathbf{p}'\rangle = \delta(\mathbf{p}'' - \mathbf{p}')$$

Таким образом, «матрица» оператора импульса в импульсном (p-) представлении:

$$\boxed{\langle\mathbf{p}''|\widehat{\mathbf{p}}|\mathbf{p}'\rangle = \mathbf{p}'\delta(\mathbf{p}'' - \mathbf{p}')} \tag{6.3.3}$$

Аналогично:

$$\boxed{\langle\mathbf{r}''|\widehat{\mathbf{r}}|\mathbf{r}'\rangle = \mathbf{r}'\delta(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}')} \tag{6.3.4}$$

Из гл.3 §3:

$$\widehat{p}_{\mathbf{r}} = |\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}| \tag{6.3.5}$$

$$\widehat{p}_{\mathbf{r}}|\psi\rangle = |\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}|\psi\rangle = \langle\mathbf{r}|\psi\rangle|\mathbf{r}\rangle \tag{6.3.6}$$

$$\langle\mathbf{r}|\psi\rangle \equiv \psi(\mathbf{r}) \tag{6.3.7}$$

Из гл.3 §4:

$$\forall|\psi\rangle \in \mathcal{H} \quad \{|\mathbf{r}\rangle\}$$

$$|\psi\rangle = \int |\mathbf{r}\rangle \langle\mathbf{r}|\psi\rangle \; d\mathbf{r} \tag{6.3.8}$$

$$|\Phi\rangle = \int |\mathbf{r}\rangle \langle\mathbf{r}|\Phi\rangle \; d\mathbf{p} \tag{6.3.8$'$}$$

$$\boxed{\langle\mathbf{p}|\Phi\rangle \equiv \Phi(\mathbf{p})} \tag{6.3.7$'$}$$

$|\Phi(\mathbf{p})|^2 \, d\mathbf{p}$ — вероятность обнаружить частицу с импульсом в интервале $[\mathbf{p}, \mathbf{p} + d\mathbf{p}]$
Пусть $|\psi\rangle \equiv |\mathbf{p}\rangle$, тогда из равенства (6.3.6):

$$\widehat{P}_{\mathbf{r}}|\mathbf{p}\rangle = \langle\mathbf{r}|\mathbf{p}\rangle|\mathbf{r}\rangle \tag{6.3.6$'$}$$

Волна де Бройля:

$$\boxed{\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t)\big|_{(2.1.2)} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{(3/2)}} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{pr} - Et)}\Big|_{(6.3.6')} = \langle\mathbf{r}|\mathbf{p}\rangle e^{\frac{-iEt}{\hbar}}} \tag{6.3.9}$$

$$\psi(\mathbf{r}) \equiv \langle\mathbf{r}|\psi\rangle = \int \underbrace{\langle\mathbf{r}|\mathbf{p}\rangle}_{\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})} \underbrace{\langle\mathbf{p}|\psi\rangle}_{\psi(\mathbf{p})} \; d\mathbf{p} = \int \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})\psi(\mathbf{p}) \, d\mathbf{p} \tag{6.3.10}$$

Формула (6.3.10) — аналог (2.1.4). Также можно записать:

$$\psi(\mathbf{p}) \equiv \langle\mathbf{p}|\psi\rangle = \int \underbrace{\langle\mathbf{p}|\mathbf{r}\rangle}_{\langle\mathbf{r}|\mathbf{p}\rangle^*}\langle\mathbf{r}|\psi\rangle \, d\mathbf{r} = \int \psi^*_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) \, d\mathbf{r} \tag{6.3.11}$$

Формула (6.3.11) — аналог (2.1.5).

$$\widehat{\mathbf{r}}|\psi\rangle = |\varphi\rangle \tag{6.3.12}$$

$$\begin{aligned} \langle\mathbf{r}|\varphi\rangle \equiv \varphi(\mathbf{r})\big|_{(6.3.12)} &= \langle\mathbf{r}\,|\widehat{\mathbf{r}}|\,\psi\rangle = \langle\mathbf{r}\,|\widehat{\mathbf{r}}\cdot\mathbb{1}_{\mathbf{r}'}|\,\psi\rangle = \left\langle\mathbf{r}\left|\widehat{\mathbf{r}}\int d\mathbf{r}'\right|\mathbf{r}'\right\rangle\langle\mathbf{r}'|\psi\rangle = \\ &= \int d\mathbf{r}' \, \langle\mathbf{r}\,|\widehat{\mathbf{r}}|\,\mathbf{r}'\rangle \, \psi(\mathbf{r}')\Big|_{(6.3.4)} = \int d\mathbf{r}' \, \mathbf{r}'\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}') = \mathbf{r}\psi(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r}) \end{aligned} \tag{6.3.13}$$

$$\widehat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}$$

Упражнение 1. *Следуя схеме (6.3.13), показать, что действие произвольной функции от оператора координаты $U(\widehat{\mathbf{r}}) \equiv \widehat{U}(\mathbf{r})$ на волновую функцию $\psi(\mathbf{r})$ сводится к умножению $\psi(\mathbf{r})$ на вещественную функцию $U(\mathbf{r})$, т.е. что $U(\widehat{\mathbf{r}}) = U(\mathbf{r})$.*
(Аналогия с §2 гл. 2: (2.2.4) $\widehat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}$ и (2.2.5) $U(\widehat{\mathbf{r}}) = U(\mathbf{r})$)

$$\widehat{\mathbf{p}}|\psi\rangle = |\chi\rangle \tag{6.3.14}$$

$$\begin{aligned} \langle\mathbf{p}|\chi\rangle \equiv \chi(\mathbf{p})\big|_{(6.3.14)} &= \langle\mathbf{p}\,|\widehat{\mathbf{p}}|\,\psi\rangle = \langle\mathbf{p}\,|\widehat{\mathbf{p}}\cdot\mathbb{1}_{\mathbf{p}'}|\,\psi\rangle = \left\langle\mathbf{p}\left|\widehat{\mathbf{p}}\int d\mathbf{p}'\right|\mathbf{p}'\right\rangle\langle\mathbf{p}'|\psi\rangle = \\ &= \int d\mathbf{p}' \, \langle\mathbf{p}\,|\widehat{\mathbf{p}}|\,\mathbf{p}'\rangle \, \psi(\mathbf{r}')\Big|_{(6.3.3)} = \int d\mathbf{p}' \, \mathbf{p}'\delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}')\psi(\mathbf{p}') = \mathbf{p}\psi(\mathbf{p}) = \chi(\mathbf{p}) \end{aligned} \tag{6.3.15}$$

$$\widehat{\mathbf{p}} = \mathbf{p}$$

Упражнение 2. *Следуя схеме (6.3.15), показать, что действие произвольной функции от оператора импульса $F(\widehat{\mathbf{p}}) \equiv \widehat{F}(\mathbf{p})$ на волновую функцию $\psi(\mathbf{p})$ сводится к умножению, т.е. что $F(\widehat{\mathbf{p}}) = F(\mathbf{p})$, где $F(\mathbf{p})$ — вещественная функция.*

Стационарное уравнение Шрёдингера в координатном ($\mathbf{r}$-) представлении:

$$\widehat{H}|\psi\rangle = \left(\frac{\widehat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \widehat{U}(\mathbf{r})\right)|\psi\rangle = E|\psi\rangle \tag{6.3.16}$$

$$\langle\mathbf{p}|\widehat{H}|\psi\rangle = \langle\mathbf{p}|\widehat{H}\cdot\mathbb{1}_{\mathbf{p}'}|\psi\rangle = \int d\mathbf{p}'\,\langle\mathbf{p}|\widehat{H}|\mathbf{p}'\rangle\langle\mathbf{p}'|\psi\rangle = \int d\mathbf{p}'\,\left[\left\langle\mathbf{p}\left|\widehat{T}\right|\mathbf{p}'\right\rangle + \left\langle\mathbf{r}\left|\widehat{U}(\mathbf{r})\right|\mathbf{p}'\right\rangle\right]\psi(\mathbf{p}')$$

$$\begin{aligned}\int d\mathbf{p}'\,\left\langle\mathbf{p}\left|\widehat{T}\right|\mathbf{p}'\right\rangle\psi(\mathbf{p}')\Big|_{\text{упр.2}} &= \int d\mathbf{p}'\,\left\langle\mathbf{p}\left|\frac{\mathbf{p}'^2}{2m}\right|\mathbf{p}'\right\rangle\psi(\mathbf{p}') = \\ &= \int d\mathbf{p}'\,\frac{\mathbf{p}'^2}{2m}\underbrace{\langle\mathbf{p}|\mathbf{p}'\rangle}_{\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}')}\psi(\mathbf{p}') = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}\psi(\mathbf{p})\end{aligned} \tag{6.3.17}$$

$$\begin{aligned}\left\langle\mathbf{p}\left|\widehat{U}(\mathbf{r})\right|\mathbf{p}'\right\rangle &= \left\langle\mathbf{p}\left|\mathbb{1}_{\mathbf{r}}\cdot\widehat{U(\mathbf{r})}\cdot\mathbb{1}_{\mathbf{r}'}\right|\mathbf{p}'\right\rangle = \iint d\mathbf{r}d\mathbf{r}'\,\underbrace{\langle\mathbf{p}|\mathbf{r}\rangle}_{\langle\mathbf{r}|\mathbf{p}\rangle^*}\underbrace{\left\langle\mathbf{r}\left|\widehat{U}(\mathbf{r})\right|\mathbf{r}'\right\rangle}_{U(\mathbf{r}')\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}\langle\mathbf{r}'|\mathbf{p}'\rangle = \\ &= \int d\mathbf{r}\,\psi^*_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})U(\mathbf{r})\psi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r})\Big|_{(6.3.9)} = \boxed{\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int d\mathbf{r}e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\mathbf{r}}U(\mathbf{r}) = W(\mathbf{p}-\mathbf{p}')}\end{aligned} \tag{6.3.18}$$

— фурье-образ функции $U(\mathbf{r})$

Объединяя (6.3.19) и (6.3.18), получим стационарное уравнение (интегральное) Шрёдингера в импульсном представлении:

$$\boxed{\frac{p^2}{2m}\psi(\mathbf{p}) + \int W(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\psi(\mathbf{p}')\,d\mathbf{p} = E\psi(\mathbf{p})} \tag{6.3.19}$$

Из упражнения №1 2-го задания:

$$\widehat{\mathbf{r}} = i\hbar\frac{\partial}{\partial\mathbf{p}}$$
$$\widehat{\mathbf{p}} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\mathbf{r}}$$

§4. Оператор эволюции. Представление Шрёдингера и Гайзенберга. Уравнение Гайзенберга для операторов физических величин

В квантовой механике роль уравнений движения играют уравнения эволюции во времени.

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \widehat{H}|\psi(t)\rangle \tag{6.4.1}$$

Введём новый оператор:

$$|\psi(t)\rangle = \widehat{U}(t)|\psi(0)\rangle \tag{6.4.2}$$

$$\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \langle\psi(0)|\widehat{U}^\dagger(t)\widehat{U}(t)|\psi(0)\rangle = \langle\psi(0)|\psi(0)\rangle$$

$$\widehat{U}^\dagger(t)\widehat{U}(t) = \mathbb{1} \quad \text{(см. §2 гл.6)}$$

$\widehat{U}$ — оператор эволюции. Из вышеприведённой формулы видно, что он является унитарным.

Поставим (6.4.2) в (6.4.1):

$$\left\{ i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\widehat{U}(t) - \widehat{H}\widehat{U}(t) \right\} |\psi(0)\rangle = 0$$

где $|\psi(0)\rangle$ — любой ненулевой вектор-состояние.

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\widehat{U}(t) = \widehat{H}\widehat{U}(t) \tag{6.4.3}$$

Положим, что $\frac{\partial\widehat{H}}{\partial t} = 0$, $\widehat{U}(0) = \mathbb{1}$. Тогда:

$$\boxed{\widehat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\widehat{H}t}} \tag{6.4.4}$$

— экспоненциальный оператор (решение (6.4.3))

Определение 1.

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\widehat{H}t} \equiv \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(-\frac{i}{\hbar}\widehat{H}t\right)^n \tag{6.4.5}$$

Определение 2. *Описание временной эволюции квантовой системы, когда вектор-состояние (или волновая функция) зависит от времени, а операторы не зависят от времени, называется представлением Шрёдингера* [1]

Обозначим вектор-состояние в представлении Гайзенберга через $|\psi_H\rangle$, а вектор-состояние в представлении Шрёдингера через $|\psi_S\rangle$

$$|\psi_H\rangle \equiv |\psi_S(0)\rangle|_{(6.4.2)} \equiv \widehat{U}^\dagger(t)|\psi_S(t)\rangle\Big|_{(6.4.4)} = e^{\frac{i}{\hbar}\widehat{H}_S t}|\psi_S(t)\rangle \tag{6.4.6}$$

Упражнение 1. *Доказать, что если* $\widehat{U}(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\widehat{H}t\right)$, *то* $\widehat{U}^\dagger(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\widehat{H}t\right)$, *используя явное определение* (6.4.5).

Согласно (6.2.2) и (6.2.4′):

$$\boxed{\widehat{F_H}(t) = \widehat{U}^\dagger(t)\widehat{F_S}\widehat{U}(t) = e^{(i/\hbar)\widehat{H_S}t}\widehat{F_S}e^{-(i/\hbar)\widehat{H_S}t}} \tag{6.4.7}$$

Упражнение 2. *Доказать:*

$$e^{\xi\widehat{A}}\widehat{B}e^{-\xi\widehat{A}} = \widehat{B} + \xi\left[\widehat{A},\widehat{B}\right] + \frac{\xi}{2!}\left[\widehat{A},\left[\widehat{A},\widehat{B}\right]\right] + \ldots$$

где $\xi = \frac{i}{\hbar}t$, $\widehat{A} = \widehat{H_S}$, $\widehat{B} = \widehat{F_S}$

[1] В некоторой литературе вместо термина «представление» употребляется термин «картина»

$$\widehat{F_H}(t) = \widehat{F_S} + \frac{i}{\hbar}t\left[\widehat{H_S}, \widehat{F_S}\right] - \frac{t^2}{2\hbar^2}\left[\widehat{H_S}, \left[\widehat{H_S}, \widehat{F_S}\right]\right] + ... \tag{6.4.8}$$

Если $\left[\widehat{H_S}, \widehat{F_S}\right] = 0$, т.е. (см §2 гл. 5) $\widehat{F_S}$ является интегралов движения, то

$$\widehat{F_H}(t) = \widehat{F_S}$$

т.е. гайзенберговские операторы интегралов движения не зависят от времени и совпадают с соответствующими в представлении Шрёдингера.

Гамильтониан в обоих представлениях совпадает и не зависит от времени:

$$\widehat{H_H} = \widehat{H_S} = \widehat{H}$$

Из (6.4.7):

$$\widehat{F_H}(t) = e^{(i/\hbar)\widehat{H}t}\widehat{F_S}e^{-(i/\hbar)\widehat{H}t} \tag{6.4.9}$$

Уравнение движения для гайзенберговского оператора $\widehat{F_H}(t)$

$$\boxed{\frac{d}{dt}\widehat{F_H}(t) = \frac{i}{\hbar}\left[\widehat{H}, \widehat{F_H}\right]} \tag{6.4.10}$$

Определение 3. *представление, в котором эволюция во времени переновится на операторы, а векторы-состояния от времени не зависят, называется представлением Гайзерберга*

Из (5.2.6):

$$\frac{d\widehat{F}}{dt} = \frac{\partial \widehat{F}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}\left[\widehat{H}, \widehat{F}\right]$$

Различные представления **унитарно-эквивалентны**, т.к. дают эквивалентные результаты, и переход между ними осуществляется с помощью унитарных преобразований. Таким образом, одна и та же задача может решаться проще в одном из представлений.

Глава 7

Операторные методы в квантовой механике. Метод вторичного квантования

§1. Операторы уничтожения и рождения в теории линейного гармонического осциллятора

[1]

$$\underbrace{\left(\frac{\widehat{p}_x}{2m}+\frac{m\omega^2\widehat{x}^2}{2}\right)}_{\text{гамильтониан ГО}}|n\rangle = E_n|n\rangle \tag{7.1.1}$$

Введём обозначения:

$$\widehat{\xi}=\frac{\widehat{x}}{a_0}=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\widehat{x}$$
$$\widehat{p}_\xi=\frac{\widehat{p}_x}{p_0}=\frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}}\widehat{p}_x$$

Где введены **осцилляторные единицы** длины и импульса:

$$a_0=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$
$$p_0=\frac{\hbar}{a_0}=\sqrt{m\hbar\omega}$$

Поделим (7.1.1) на осцилляторную единицу энергии $\hbar\omega$:

$$\underbrace{\frac{1}{2}\left(\widehat{p_\xi}^{\,2}+\widehat{\xi}^2\right)|n\rangle}_{\widehat{h}\text{ – безразм. гамильтониан}} = \varepsilon_n|n\rangle, \quad \text{где} \quad \varepsilon_n=\frac{E_n}{\hbar\omega}$$

$$\left[\widehat{\xi},\widehat{p}_\xi\right]=\frac{1}{\hbar}\left[\widehat{x},\widehat{p}_x\right]=i \tag{7.1.2}$$

[1] «Линейность» осциллятора понимается в приближении одномерных малых колебаний вблизи положений равновесия

Введём эрмирово-сопряжённые **(но не эрмировые!)** операторы:

$$\begin{cases} \widehat{a} \equiv \dfrac{\widehat{\xi}^2 + i\widehat{p}_\xi}{\sqrt{2}} \\ \widehat{a}^\dagger \equiv \dfrac{\widehat{\xi}^2 - i\widehat{p}_\xi}{\sqrt{2}} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \widehat{\xi} = \dfrac{\widehat{a} + \widehat{a}^\dagger}{\sqrt{2}} \\ \widehat{p}_\xi = \dfrac{\widehat{a} + \widehat{a}^\dagger}{\sqrt{2}} \end{cases}$$

Перепишем гамильтониан через $\widehat{a}$ и $\widehat{a}^\dagger$:

$$\widehat{a}^\dagger\widehat{a} = \frac{1}{2}(\widehat{\xi} - i\widehat{p}_\xi)(\widehat{\xi} + i\widehat{p}_\xi) = \frac{1}{2}(\widehat{\xi}^2 + \widehat{p}_\xi{}^2 + i\left[\widehat{\xi}, \widehat{p}_\xi\right])\Big|_{(7.1.2)} = \frac{1}{2}(\widehat{\xi}^2 + \widehat{p}_\xi{}^2 - 1) \equiv \widehat{h} - \frac{1}{2}$$

$$\widehat{h} = \widehat{a}^\dagger\widehat{a} + \frac{1}{2}$$

$$\widehat{h}|n\rangle = \varepsilon_n|n\rangle \tag{7.1.3}$$

§2. Энергетрический спектр линейного гармонического осциллятора.

$$\left[\widehat{a}, \widehat{a}^\dagger\right] = \frac{1}{2}\left[\xi + i\widehat{p}_\xi, \xi - i\widehat{p}_\xi\right] = \frac{1}{2}\left(i\left[\widehat{p}_\xi, \widehat{\xi}\right] - i\left[\widehat{\xi}, \widehat{p}_\xi\right]\right) = -\frac{2i}{2}\underbrace{\left[\widehat{\xi}, \widehat{p}_\xi\right]}_{=i} = 1$$

$$\left[\widehat{a}, \widehat{a}^\dagger\right] = 1 \tag{7.2.1}$$

Используя тождество $[\widehat{A}, \widehat{B}\widehat{C}] = [\widehat{A}, \widehat{B}]\widehat{C} + \widehat{B}[\widehat{A}, \widehat{C}]$, получим:

$$\left[\widehat{a}^\dagger, \widehat{h}\right] = \left[\widehat{a}^\dagger, \widehat{a}^\dagger\widehat{a}\right] = \underbrace{\left[\widehat{a}^\dagger, \widehat{a}^\dagger\right]}_{=0}\widehat{a} + \widehat{a}^\dagger\underbrace{\left[\widehat{a}^\dagger, \widehat{a}\right]}_{=-1} = -\widehat{a}^\dagger \tag{7.2.2}$$

$$\left[\widehat{a}, \widehat{h}\right] = \left[\widehat{a}, \widehat{a}^\dagger\widehat{a}\right] = \underbrace{\left[\widehat{a}, \widehat{a}^\dagger\right]}_{=1}\widehat{a} + \widehat{a}^\dagger\underbrace{\left[\widehat{a}, \widehat{a}\right]}_{=0} = -\widehat{a} \tag{7.2.3}$$

Домножим (7.1.3) на $\widehat{a}^\dagger$:

$$\widehat{a}^\dagger\widehat{h}|n\rangle = \varepsilon_n\widehat{a}^\dagger|n\rangle$$

Из (7.2.2):

$$\widehat{h}\left(\widehat{a}^\dagger|n\rangle\right) = (\varepsilon_n + 1)(\widehat{a}^\dagger|n\rangle) \tag{7.2.4}$$

$(\widehat{a}^\dagger|n\rangle)$ – собственный вектор гамильтониана $\widehat{h}$ с собственным значением $(\varepsilon_n + 1)$
Из (7.1.3) и (7.2.4) введём обозначения:

$$\left[\begin{aligned} \varepsilon_{n+1} &\equiv \varepsilon_n + 1 \\ \widehat{a}^\dagger|n\rangle &\equiv c_n|n+1\rangle \end{aligned}\right. \tag{7.2.5}$$

$\widehat{a}^\dagger$ обычно называют **оператором рождения** (повышения) кванта колебаний (увеличивает их число на единицу)

$$|c_n|^2 = \langle \widehat{a}^\dagger n | \widehat{a} n \rangle = \langle n | \widehat{a}\widehat{a}^\dagger | n \rangle \Big|_{(7.2.1)} = \langle n | \widehat{a}^\dagger \widehat{a} + 1 | n \rangle = \left\langle n \left| \widehat{h} + \frac{1}{2} \right| n \right\rangle = \varepsilon_n + \frac{1}{2} \tag{7.2.6}$$

Домножим (7.1.3) на $\widehat{a}$:

$$\widehat{a}\widehat{h}|n\rangle = \varepsilon_n \widehat{a}|n\rangle$$

Из (7.2.3):

$$\widehat{h}(\widehat{a}|n\rangle) = (\varepsilon_n - 1)(\widehat{a}|n\rangle) \tag{7.2.7}$$

Т.е. $(\widehat{a}|n\rangle)$ – собственный вектор гамильтониана $\widehat{h}$, отвечающий собственному значению $(\varepsilon_n - 1)$.

Введём обозначения:

$$\left[\begin{array}{l} \varepsilon_{n-1} \equiv \varepsilon_n + 1 \\ \widehat{a}|n\rangle = c'_n |n-1\rangle \end{array} \right. \tag{7.2.8}$$

$\widehat{a}$ – **оператор уничтожения** кванта колебаний.

$$|c'_n|^2 = \langle \widehat{a} n | \widehat{a} n \rangle = \langle n | \widehat{a}^\dagger \widehat{a} | n \rangle = \left\langle n \left| \hbar - \frac{1}{2} \right| n \right\rangle = \varepsilon_n - \frac{1}{2} \tag{7.2.9}$$

Из (7.2.9): $|c'_n|^2 \geqslant 0 \quad \Rightarrow \quad \varepsilon \geqslant \frac{1}{2}$, т.е. $\varepsilon_0 = \frac{1}{2}$ (основное состояние).

Из (7.2.8) и (7.2.9):

$$\widehat{a}|0\rangle = 0$$

где $|0\rangle$ – собственный вектор, отвечающий собственному значению ε_0

Из (7.2.5) и (7.2.8):

$$\varepsilon_n = n + \frac{1}{2}, \quad n = 0, 1, 2... \tag{7.2.10}$$

Спектр линейного гармонического осциллятора можно записать в виде:

$$\boxed{E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2...}$$

т.е. такой спектр является эквидистантным

[картинка]

При $n = 0$:

$$\frac{\hbar\omega}{2} = \frac{m\omega^2}{2} a_0^2 \quad \to \quad a_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

– амплитуда нулевых колебаний.

Из (7.2.6), (7.2.9) и (7.2.10):

$$\boxed{\widehat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle} \tag{7.2.5$'$}$$

$$\boxed{\widehat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle} \tag{7.2.8$'$}$$

§3. Построение собственных функций осциллятора в координатном представлении с помощью операторов рождения и уничтожения. Связь n-го состояния осциллятора с основным.

Введём обозначение: $|0\rangle \equiv |\psi_0\rangle$:

$$\widehat{a}|0\rangle = 0 \quad \text{или} \quad \frac{1}{\sqrt{2}}(\widehat{\xi} + i\widehat{p_\xi})|\psi_0\rangle = 0$$

В ξ-представлении: $\widehat{p}_\xi = -i\frac{d}{d\xi}$

$$\left(\xi + \frac{d}{d\xi}\right)\psi_0(\xi) = 0$$

Решение этого уравнения (волновая функция основного состояния гармонического осциллятора, нормированная на единицу):

$$\boxed{\psi_0(\xi) = \frac{1}{\pi^{1/4}}e^{-\xi^2/2}}$$

Обозначим $|n\rangle \equiv |\psi_n\rangle$

$$\widehat{a}^\dagger|0\rangle = \sqrt{1}|1\rangle \quad \to \quad |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{1}}\widehat{a}^\dagger|0\rangle$$
$$\widehat{a}^\dagger|1\rangle = \sqrt{2}|2\rangle \quad \to \quad |2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\widehat{a}^\dagger|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\cdot 1}}(\widehat{a}^\dagger)^2|0\rangle$$
$$\widehat{a}^\dagger|2\rangle = \sqrt{3}|3\rangle \quad \to \quad |3\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\widehat{a}^\dagger|3\rangle = \frac{1}{\sqrt{3\cdot 2\cdot 1}}(\widehat{a}^\dagger)^3|0\rangle$$
$$\ldots$$

$$\boxed{|\psi_n\rangle \equiv |n\rangle = \sqrt{\frac{1}{n!}}(\widehat{a}^\dagger)^n|0\rangle}$$

$$\boxed{\psi_n(\xi) = \sqrt{\frac{1}{2^n\cdot n!\cdot\sqrt{\pi}}}\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)^n e^{-\xi^2/2}}$$

Или через полиномы Эрмита:

$$\boxed{\psi_n(\xi) = \sqrt{\frac{1}{2^n\cdot n!\cdot\sqrt{\pi}}}H_n(\xi)e^{-\xi^2/2}}$$

где $H_n(\xi) = e^{\xi^2/2}\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)^n e^{-\xi^2/2}$

$$H_0(\xi) = 1, \quad H_1(\xi) = 2\xi, \quad H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2$$

[картинка]

Теорема 1 (Осцилляторная теорема квантовой механики)**.** *Волновая функция $\psi_n(x)$, соответствующая собственным значениям E_n, имеет при конечных x ровно n нулей.*

Глава 8

Угловой момент

§1. Повороты и оператор углового момента. Изотропность пространства и сохренение глового момента в квантовой механике.

[картинка] (поворот можно осуществлять путём подбора единичного вектора $\mathbf{n}$ и угла поворота $\boldsymbol{\chi}$)

$$|\psi;2\rangle = \widehat{R}(\boldsymbol{\chi})|\psi;1\rangle$$

$\widehat{R}(\boldsymbol{\chi})$ – оператор поворота.

Примем, что $\langle\psi;2|\psi;2\rangle = \langle\psi;1|\psi;1\rangle$, тогда $\widehat{R}^{\dagger}\widehat{R} = \mathbb{1}$, т.е. $\widehat{R}$ – унитарный оператор.

Введём $\widehat{R}$ по аналогии с оператором эволюции (см. (6.4.4)):

$$\boxed{\widehat{R}(\widehat{\boldsymbol{\chi}}) \equiv e^{-(i/\hbar)\widehat{\mathbf{J}}\boldsymbol{\chi}}} \tag{8.1.1}$$

где $\widehat{\mathbf{J}}$ – некоторый векторный эрмитовый оператор, не зависящий от времени.

Из изотропности пространства следует, что оба состояния удовлятворяют уравнению Шрёдингера:

$$i\hbar\frac{\partial|\psi;2\rangle}{\partial t} = i\hbar\widehat{R}(\boldsymbol{\chi})\frac{\partial|\psi;1\rangle}{\partial t} = \widehat{R}(\boldsymbol{\chi})\widehat{H}|\psi;1\rangle$$

$$i\hbar\frac{\partial|\psi;2\rangle}{\partial t} = \widehat{H}|\psi;2\rangle = \widehat{H}\widehat{R}(\boldsymbol{\chi})|\psi;1\rangle$$

Сравнивая правые части, легко видеть, что $\left[\widehat{H},\widehat{R}(\boldsymbol{\chi})\right] = 0$

Распишем экспоненту в (8.1.1) в виде ряда:

$$\widehat{R}(\boldsymbol{\chi}) = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}\left(-\frac{i}{\hbar}\widehat{\mathbf{J}}\boldsymbol{\chi}\right)^k$$

Подставляя её вусловие коммутации, получим:

$$\boxed{\left[\widehat{H},\widehat{\mathbf{J}}\right] = 0} \tag{8.1.2}$$

Упражнение 1. *доказать* (8.1.2)

$\mathbf{J}$ – интеграл движения (см. §9 т.1 Л-Л «Сохранение углового момента»)

$\widehat{\mathbf{J}}$ – **оператор углового момента** ($\widehat{\mathbf{J}} = \left\{\widehat{L}, \widehat{S}, \widehat{L} + \widehat{S}\right\}$, где $\widehat{L}$ – оператор орбитального момента, $\widehat{S}$ –оператор спинового момента, $(\widehat{L} + \widehat{S})$ – полный момент)

§2. Коммутационные соотношения для оператора углового момента. Система собственных векторов операторов $\widehat{\mathbf{j}}^2$ и $\widehat{\mathbf{j}_z}$

Обозначим: $\boxed{\widehat{\mathbf{j}} = \dfrac{\widehat{\mathbf{J}}}{\hbar}}$

Определение 1. *векторный оператор $\widehat{\mathbf{j}} = \left\{\widehat{j}_x, \widehat{j}_y, \widehat{j}_z\right\}$ называют **оператором углового момента**, если все его компоненты являются **наблюдаемыми** (эрмитовыми) и удовлетворяют коммутационным соотношениям:*

$$\boxed{\left[\widehat{j}_i, \widehat{j}_k\right] = ie_{ikl}\widehat{j}_l} \tag{8.2.1}$$

(где e_{ikl} – антисимметричный тензор)

$$\widehat{\mathbf{j}}^2 = \widehat{j_x}^2 + \widehat{j_y}^2 + \widehat{j_z}^2$$

Совместная измеримость $\widehat{j}^2$ возможна только с одной компонентой:

$$\left[\widehat{j}^2, \widehat{j}_i\right] = 0 \tag{8.2.2}$$

Упражнение 1. *Доказать* (8.2.2) *с помощью* (8.2.1)

$|jm\rangle$:

$$\begin{cases} \widehat{\mathbf{j}}^2|jm\rangle = \lambda(j)|jm\rangle \\ \widehat{\mathbf{j}}_m|jm\rangle = m|jm\rangle \end{cases} \tag{8.2.3}$$

Условие ортонормировки:

$$\langle jm|j'm'\rangle = \delta_{jj'}\delta mm'$$

$$\langle\widehat{\mathbf{j}}^2\rangle = \langle\widehat{j_x}^2\rangle + \langle\widehat{j_y}^2\rangle + \langle\widehat{j_z}^2\rangle \geqslant \langle\widehat{j_z}^2\rangle$$

То есть:

$$\lambda(j) \geqslant m^2 \quad \rightarrow \quad \begin{cases} m_{min} \leqslant m \leqslant m_{max} \\ m_{max} = -m_{min} \end{cases}$$

$m_{max} \equiv j$, тогда $m_{min} = -j$

Обозначим:

$$\begin{cases} \widehat{j}_+ = \widehat{j}_x + i\widehat{j}_y \\ \widehat{j}_- = \widehat{j}_x - i\widehat{j}_y = \left(\widehat{j}_+\right)^\dagger \end{cases} \tag{8.2.4}$$

$$\left[\widehat{j}_z, \widehat{j}_\pm\right] = \pm\widehat{j}_\pm \tag{8.2.5}$$

Упражнение 2. *Доказать* (8.2.5) *с использованием* (8.2.4) *и* (8.2.1)

Из (8.2.5):

$$\widehat{j}_z\left(\widehat{j}_\pm|jm\rangle\right) = \left(\widehat{j}_\pm\widehat{j}_z \pm \widehat{j}_\pm\right)|jm\rangle = (m+1)\left(\widehat{j}_\pm|jm\rangle\right)$$

Будем называть $\widehat{j}_+$ **оператором повышения**, а $\widehat{j}_-$ – **оператором понижения**

$$\begin{cases} \widehat{j}_+|j,m-1\rangle = \alpha_m|j,m\rangle \\ \widehat{j}_-|j,m\rangle = \beta_m|j,m-1\rangle \end{cases} \tag{8.2.6}$$

Заметим, что:

$$\widehat{j}_+|jj\rangle = 0, \quad \text{или} \quad \alpha_{j+1} = 0$$
$$\widehat{j}_-|j,-j\rangle = 0, \quad \text{или} \quad \beta_{-j} = 0$$

Цепочка понижения:

$$\begin{aligned} \widehat{j}_-|jj\rangle &\sim |j,j-1\rangle \\ (\widehat{j}_-)^2|jj\rangle &\sim |j,j-2\rangle \\ &\cdots \\ (\widehat{j}_-)^N|jj\rangle &\sim |j,j-N\rangle, \quad N \in \mathbb{N}\cup\{0\} \end{aligned}$$

$j - N = -j$, т.е. $j = \frac{N}{2}$, следовательно j принимает только целые и полуцелые значения:

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

Если j фиксировано:

$$\underbrace{m = -j, -j+1, \cdots, j}_{(2j+1)\ \text{значения}}$$

j – квантовое число момента количества движения частицы
m – матричное квантовое число

Значение $\lambda(j)$ пока неизвестно. При его определении будем считать, что $m_{max} = m_{min} = j$.

$$\widehat{j}_-\widehat{j}_+|jj\rangle = 0$$

$$\widehat{j}_-\widehat{j}_+ = \widehat{\mathbf{j}}^2 - \widehat{j}_z^{\,2} - \widehat{j}_z$$

Упражнение 3. *доказать предыдущее равенство используя* (8.2.4) *и* (8.2.1)

$$\left(\widehat{\mathbf{j}}^2 - \widehat{j}_z^{\,2} - \widehat{j}_z\right)|jj\rangle = 0 \quad \to \quad \lambda(j) = j(j+1)$$

$$\boxed{\widehat{\mathbf{j}}^2|jm\rangle = j(j+1)|jm\rangle} \tag{8.2.7}$$

Из (8.2.6):

$$\alpha_m = \langle jm|\widehat{j}_+|j,m-1\rangle = \langle\widehat{j}_-jm|j,m-1\rangle = \langle j,m-1|\widehat{j}_-|jm\rangle^*\Big|_{(8.2.6)} = \beta_m^*$$

Теперь необходимо найти $\beta_{-j+1}, \beta_{-j+2}, \cdots, \beta_j$

$$\widehat{j}_+\widehat{j}_-|jm\rangle\Big|_{(8.2.6)} = \beta_m\widehat{j}_+|j,m-1\rangle = |\beta_m|^2\,|jm\rangle$$

С другой стороны:

$$\widehat{j}_+\widehat{j}_- = \widehat{j}^2 - \widehat{j}_z^{\,2} + \widehat{j}_z$$

Упражнение 4. *доказать предыдущее равенство используя* (8.2.4) *и* (8.2.1)

$$\widehat{j}_+\widehat{j}_-|jm\rangle = (\widehat{j}^2 - \widehat{j}_z^{\,2} + \widehat{j}_z)|jm\rangle\Big|_{(8.2.7),\ (8.2.3)} = \big(j(j+1) - m^2 + m\big)\,|jm\rangle$$

Фазу $|jm\rangle$ можно подобрать так, чтобы $\alpha_m = \beta_m = |\beta_m|$

$$\beta_m = \sqrt{j^2 + j - m^2 + m} = \sqrt{(j+m)(j-m+1)} = \alpha_m$$

$$\begin{gathered}\widehat{j}_-|jm\rangle = \sqrt{(j+m)(j-m+1)}|j,m-1\rangle \\ \widehat{j}_+|jm\rangle = \beta_{m+1}|j,m+1\rangle = \sqrt{(j-m)(j+m+1)}|j,m+1\rangle \\ \boxed{(\widehat{j}_x \pm i\widehat{j}_y)|jm\rangle = \sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}|j,m\pm 1\rangle}\end{gathered} \tag{8.2.8}$$

§3. Спин частицы. Матрицы Паули.

§4. Оператор орбитального момента частицы в координатном представлении (декартовы и сферические координаты).

§5. Сферические гармоники

Глава 9

Движение в центрально-симметричном поле

§1. Центрально-симметричное поле. Гамильтониан частицы в сферических координатах. Разделение переменных в центрально-симметричном поле.

Определение 1. *Если поле центрально-симметрично, то* $U(\mathbf{r}) \equiv U(r)$

Произведём переход к координатам (r, θ, φ).
Из (**??**):

$$\widehat{H} = \frac{\widehat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(r) = -\frac{-\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)\right] - \frac{\widehat{\mathbf{l}}^2}{r^2} + U(r) \tag{9.1.1}$$

Интегралы движения (из упр. 5 задания 2 и упр. 6 задания 1):

$$\left[\widehat{H}, \widehat{l}_\alpha\right] = 0 \qquad \left[\widehat{H}, \widehat{\mathbf{l}}^2\right] = 0$$

Из (**??**):

$$\left[\widehat{\mathbf{l}}, \widehat{\mathbf{l}}_\alpha\right] = 0$$

$$\langle \mathbf{r}|nlm\rangle \equiv \psi_{nlm}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r)\cdot Y_{lm}(\theta,\varphi) \tag{9.1.2}$$

где n – главное, l – орбитальное, а m – магнитное квантовые числа.

§2. Уравнение для радиальной функции

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{\widehat{\mathbf{l}}^2}{r^2}\right]\psi(r,\theta,\varphi) + U(r)\psi(r,\theta,\varphi) = E\psi(r,\theta,\varphi)$$

Будем искать решение в виде:

$$\begin{cases} \psi(r,\theta,\varphi)|_{(9.1.2)} = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi) \\ \widehat{\mathbf{l}}^2 Y_{lm}(\theta,\varphi) = l(l+1)Y_{lm}(\theta,\varphi) \end{cases}$$

Подставляем их в уравнение:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}R_{nl}(r)\right)-\frac{l(l+1)}{r^2}R_{nl}(r)\right]+U(r)R_{nl}(r)=ER_{nl}(r)$$

Уравнение для радиальной волновой функции:

$$\boxed{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{d}{dr}R_{nl}(r)\right)-\frac{l(l+1)}{r^2}R_{nl}(r)+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-U(r)\right)R_{nl}(r)=0} \tag{9.2.1}$$

$$\int\left|\psi_{nlm}(\mathbf{r})\right|^2 d\mathbf{r}=\iiint\left|R_{nl}(r)\right|^2\cdot\left|Y_{lm}(\theta,\varphi)\right|^2 r^2drd\Omega=\int_0^\infty\left|R_{nl}(r)\right|^2 r^2dr\underbrace{\oint\left|Y_{lm}(\theta,\varphi)\right|^2 d\Omega}_{=1\text{ из }(\mathbf{??})}=1$$

Отсюда получаем условие нормировки для радиальной части волновой функции:

$$\boxed{\int_0^\infty\left|R_{nl}(r)\right|^2 r^2dr=1} \tag{9.2.2}$$

Глава 10

Атом водорода

§1. Атом водорода

Движение электрона (e, m) в поле $-Ze$:

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

($z > 1$: водородоподобный атом (ион), $z = 1$: атом водорода)

Из упр. 11 2-го задания:

$$\mu = \left.\frac{mM}{m+M}\right|_{M\to\infty} = m$$

где M – масса ядра.

Из (9.2.1):

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right] R(r) + \left\{-\frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\frac{Ze^2}{r} + \frac{2mE}{\hbar^2}\right\} R(r) = 0 \tag{10.1.1}$$

Для упрощение такого рода выражений существует *атомная система единиц* (а.е.), в которой

$$\hbar = m = e = 1$$

В таких единицах боровский радиус (атомная единица длины):

$$a = \frac{\hbar^2}{me^2} = 1 \text{ а.е.} = 0.529 \cdot 10^{-8} \text{ см} = 0.529 \text{ Å}$$

Атомная единица энергии:

$$E_a = \frac{e^2}{a} = \frac{me^4}{\hbar^2} = 1 \text{ а.е.} = 27.21 \text{ эВ}$$

Безразмерные переменные:

$$\rho = \frac{r}{a} \qquad \varepsilon = \frac{E}{E_a}$$

Из (10.1.1) в атомных единицах:

$$\boxed{\left\{\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right\} R(\rho) + \left\{-\frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{2Z}{\rho} - \varkappa^2\right\} R(\rho) = 0} \tag{10.1.2}$$

где $-\varkappa^2 = 2\frac{E}{E_a} = 2\varepsilon < 0$

§2. Энергетический спектр и радиальные волновые функции стационарных состояний атома водорода. Главное и радиальное квантовые числа

В силу условия нормировки (9.2.2) не должно быть неограниченных решений (10.1.2), т.е. на краях области определения $\rho \to 0$ и $\rho \to \infty$ необходимо наложить граничные условия:

1. $R(\rho)|_{\rho\to 0} \to \text{const}$
2. $R(\rho)|_{\rho\to\infty} \to 0$

В пределе $\rho \to 0$ уравнение (10.1.2) принимает форму:

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{d}{d\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right) R_0(\rho) = 0$$

Ищем решение этого уравнения в виде степенной функции $R_0(\rho) \sim \rho^q$, тогда для показателя q получается:

$$\underbrace{q(q-1)+2q}_{q(q+1)} - l(l+1) = 0$$

т.е. возможны два решения: $q_1 = l$, $q_2 = -(l+1)$. Очевидно, второе решение не удовлетворяет поставленному граничному условию: оно обращается в бесконечность при $\rho \to 0$ (напомним, что $l \geqslant 0$). Поэтому:

$$\boxed{R(\rho)|_{\rho\to 0} \sim \rho^l}$$

Найдём теперь асимптотику решения (10.1.2) при $\rho \to \infty$:

$$\frac{d^2}{d\rho^2}R_\infty(\rho) - \varkappa^2 R_\infty(\rho) = 0$$

Отсюда $\boxed{R(\rho)|_{\rho\to\infty} \sim e^{-\varkappa\rho}}$, т.к. другое решение ($\sim e^{\varkappa\rho}$) при $\rho \to \infty$ неограниченно возрастает. Очевидно, что решение уравнения (10.1.2) вр всей области определения ρ следует искать в виде:

$$\boxed{R(\rho) = e^{-\varkappa\rho}\rho^l v(\rho)} \tag{10.2.1}$$

где для искомой функции $v(\rho)$ есть ограничения на её экспоненциальный рост на бесконечности. Имеем:

$$R'(\rho) = e^{-\varkappa\rho}\rho^l\left[v' + \left(\frac{l}{p} - \varkappa\right)v\right]$$

$$R''(\rho) = e^{-\varkappa\rho}\rho^l\left[v'' + \left(\frac{l}{p} - \varkappa\right)v' - \frac{l}{\rho^2}v + \left(\frac{l}{p} - \varkappa\right)\left[v' + \left(\frac{l}{p} - \varkappa\right)v\right]\right] =$$
$$= e^{-\varkappa\rho}\rho^l\left[v'' + 2\left(\frac{l}{p} - \varkappa\right)v' + \left(\frac{l(l-1)}{\rho^2} - \frac{2\varkappa l}{\rho} + \varkappa^2\right)v\right]$$

Из (10.1.2) получаем:

$$v''+2\left(\frac{l}{p} - \varkappa\right)v'+\left(\frac{l(l-1)}{\rho^2} - \frac{2\varkappa l}{\rho} + \varkappa^2\right)v+\frac{2}{\rho}v'+\frac{2}{\rho}\left(\frac{l}{p} - \varkappa\right)v+\left(-\frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{2Z}{\rho} - \varkappa^2\right)v = 0$$

В итоге:

$$\boxed{\rho v'' + v'\left(2(l+1) - 2\varkappa\rho\right) + v\left(2Z - 2\varkappa(l+1)\right) = 0} \tag{10.2.2}$$

Решение (10.2.2) будем искать в виде степенного ряда:

$$v(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k \tag{10.2.3}$$

Отсюда:

$$v'(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k k \rho^{k-1} = \sum_{k=0}^{\infty} a_{k+1}(k+1)\rho^k$$

$$v''(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k k(k-1)\rho^{k-2} = \sum_{k=0}^{\infty} a_{k+1}(k+1)k\rho^{k-1}$$

Подставляя в (10.2.2), получаем:

$$\sum_{k=0}^{\infty} \rho^k \left[a_{k+1}\left(k(k+1) + 2(l+1)(k+1)\right) + a_k\left(2Z - 2\varkappa(l+1) - 2\varkappa k\right)\right] = 0$$

откуда следует рекуррентное соотношение для коэффициентов ряда:

$$\boxed{a_{k+1} = a_k \frac{2\left(\varkappa(l+1+k)\right) - Z}{(k+1)\left(k+2(l+1)\right)}} \tag{10.2.4}$$

Из соотношения (10.2.4) видно, что при $k \gg 1$ все слагаемые будут одного знака. Значит, при $\rho \to \infty$ основной вклад в $v(\rho)$ будут давать слагаемые с большими k. При $k \gg 1$:

$$\left|\frac{a_{k+1}}{a_k}\right|_{k\gg 1} \sim \frac{2\varkappa k}{k^2} = \frac{2\varkappa}{k}$$

однако:

$$e^{2\varkappa\rho} = 1 + \frac{2\varkappa\rho}{1!} + ... + \frac{(2\varkappa\rho)^k}{k!} + ...$$

и для ряда растущей экспоненты:

$$\left|\frac{a_{k+1}}{a_k}\right|_{k\gg 1} \sim \frac{(2\varkappa)^{k+1}k!}{(k+1)!(2\varkappa)^k} \sim \frac{2\varkappa}{k}$$

Таким образом, полученный ряд (10.2.3) для $v(\rho)$ асимптотически ведёт себя как

$$v(\rho)\big|_{\rho\to\infty} \sim e^{2\varkappa\rho}$$

При такой асимптотике, согласно (10.2.1), радиальная волновая функция расходится на бесконечности, т.е.:

$$R(\rho)\big|_{\rho\to\infty} \sim e^{\varkappa\rho}$$

Поэтому суммирование в (10.2.3) может происходить только в конечных пределах, иными словами, ряд (10.2.3) должен «обрываться» и переходить в конечный полином некоторой степени $k = n_r$, т.е. $a_{n_r} \neq 0$, но при любом $k > n_r$ $a_k \equiv 0$.

Из (10.2.4) следует условие «обрыва» ряда (10.2.3):

$$\boxed{\frac{Z}{l} - l - 1 = n_r = 0, 1, 2, ...} \tag{10.2.5}$$

Число $n_r \geqslant 0$ определяет степень полинома (10.2.3) и соответственно число его нулей (или число узлов радиальной волновой функции $R(\rho)$ в (10.2.1), не считая точки $\rho = 0$). Число n_r называют **радиальным квантовым числом**. Здесь мы имеем частный случай *осцилляционной теоремы* одномерного движения (см. конец §3 главы VII).

Следуя (10.2.5), положим по определению:

$$\boxed{n = n_r + l + 1 = 1, 2, \ldots} \tag{10.2.6}$$

натуральное число $n \in \mathbb{N}$, которое называют **главным квантовым числом**. При этом $\boxed{n_r = n - l - 1 \geqslant 0}$ и получается ограничение на возможные значения орбитального момента: $\boxed{0 \leqslant l \leqslant n - 1}$. Тогда из (10.1.2), (10.2.5) и (10.2.6) получается **энергетический спектр водородоподобного атома**:

$$\begin{gathered} \varepsilon_n = \frac{E_n}{E_a} = -\frac{k^2}{2} = \boxed{-\frac{Z^2}{n^2} = \varepsilon_n} \\ \boxed{E_n = -\frac{Z^2 m e^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}} \end{gathered} \tag{10.2.7}$$

Соответственно (10.2.1) радиальная волновая функция имеет вид

$$R_{nl}(\rho) = R_{n_r l}(\rho) = C_{nl} e^{-k\rho} \rho^l v_{n_r l}(\rho)$$

где определяемые рекуррентными соотношениями (10.2.4) полиномы называют **обобщёнными (присоединёнными) полиномами Лагерра**

$$\boxed{v_{n_r l}(\rho) = L_{n_r}^{2l+1}(2kp)}, \text{ где}$$
$$L_s^k(x) = e^x x^{-s} \frac{d^k}{dx^k}(e^{-x} x^{s+k})$$

Коэффициент C_{nl} определяется из условия нормировки (9.2.2) для радиальной волновой функции:

$$\int_0^\infty |R_{nl}(\rho)|^2 \rho^2 d\rho = 1$$

Состояние атома водорода определяется волновой функцией

$$\Psi_{nlm}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

которая, например, для основного $1s$-состояния имеет вид

$$\boxed{\Psi_{100}(\mathbf{r})} = \underbrace{R_{10}(r)}_{\frac{2}{\sqrt{a^3}}e^{-r/a}} \underbrace{Y_{00}(\theta, \varphi)}_{\frac{1}{\sqrt{4\pi}}} \boxed{= \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}}$$

§3. Кратность вырождения уровней. Кулоновское (случайное) вырождение

Из (10.2.7) видно, что спектр водородоподобного атома является **вырожденным**. Энергия определяется только **главным квантовым числом**, а кроме него есть ещё 2 квантовых числа:

- $l = 0, 1, ..., n-1$ – орбитальное
- $m = 0, \pm 1, ..., \pm l$ – магнитное

Уровни энергии не зависят от этих квантовых чисел! Кратность вырождения n–го уровня равна

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

(из суммы арифметической прогрессии).

Дальнейший анализ удобно провести, если воспользоваться утверждением следующей теоремы.

Теорема 1. *Если* $\left[\widehat{A}, \widehat{H}\right] = 0$, $\left[\widehat{B}, \widehat{H}\right] = 0$, *но* $\left[\widehat{A}, \widehat{B}\right] \neq 0$, *то спектр оператора* $\widehat{H}$ *вырожден.*

Упражнение 1. *Доказать теорему 1*

В рамках этой теоремы **вырождение по магнитному квантовому числу** m характерно для **любого** центрально-симметричного поля, т.к.

$$\left[\widehat{H}, \widehat{l}_\alpha\right] = 0 \quad \rightarrow \quad \begin{cases} [\widehat{H}, \widehat{l}_z] = 0 \\ [\widehat{H}, \widehat{l}_\pm] = 0 \end{cases} \quad \textbf{но:}\ \left[\widehat{l}_z, \widehat{l}_\pm\right] \neq 0$$

Поэтому все $2l+1$ состояний, где $m = -l, (-l+1), (-l+2)..., l$, отвечают одному уровню энергии.

Однако, помимо вырождения по магнитному квантовому числу m, **обязательному** *для любого сферически симметричного поля*, **в кулоновом поле** для всех уровней имеет место **дополнительное вырождение по орбитальному квантовому числу** l, которое называют ещё **случайным**. Природа кулоновского вырождения связана с высокой симметрией кулоновского поля и наличием ещё одного интеграла движения – **вектора Рунге–Ленца**:

$$\widehat{\mathbf{A}} = \frac{\widehat{\mathbf{r}}}{r} + \frac{1}{2Z}\left(\widehat{\mathbf{l}} \times \widehat{\mathbf{p}} - \widehat{\mathbf{p}} \times \widehat{\mathbf{l}}\right) \quad \text{(в а.е.)}$$

коммутирующего с $\widehat{H} = \widehat{\mathbf{p}^2}/2 - Z/r$ (в а.е), но не коммутирующего с $\widehat{\mathbf{l}^2}$. Тогда, в соответствии с теоремой, если $\left[\widehat{H}, \widehat{A}_\alpha\right] = 0$ (доказательство приведено в Приложении), $\left[\widehat{H}, \widehat{\mathbf{l}^2}\right] = 0$, но $\left[\widehat{\mathbf{l}^2}, \widehat{A}_\alpha\right] \neq 0$, то это автоматически ведёт к вырождению собственных значений $\widehat{H}$ по l.

Упражнение 2. *Доказать, что* $\left[\widehat{\mathbf{l}^2}, \widehat{A}_\alpha\right] \neq 0$