«Кванты» за ночь?

конспект – справочник, версия 0.2

Абрикосов А. А., мл.

Вступление

— Слыхали?
Говорят, ректор приказал всем
немедленно выучить китайский!
— Когда сдавать?

Бородатый анекдот

Эта рукопись — сценарий курса лекций, которые я читаю студентам ФМХФ и ФБМФ. Пока только незавершенный черновик. Однако уже можно судить, насколько он нужен и каких требует изменений.

Он адресован студентам, слушавшим и не слушавшим мои лекции, сидевшим и не сидевшим на моих семинарах. Я буду искренне рад всем, кто к нам присоединится.

Все началось с шутки. Идея написать микроучебник «„Кванты“ за ночь!» была встречена аудиторией на ура. Я решил попробовать. И потерпел неудачу. «Спасательного круга» не получилось.

За образец была взята подборка формул, которые раньше включали в сборники заданий. Чтобы сделать из справочника учебник, пришлось добавить пояснения, родившиеся при подготовке лекций и в ходе занятий.

В результате возник неожиданный формат: конспект – справочник. Своего рода «Рабочая тетрадь по квантовой механике», которая всегда под рукой. Когда надо, ее можно пролистать и найти формулу, которая где-то уже встречалась.

Если вам понравится, есть шанс, что удалось и другое. В ночь перед экзаменом бесполезно читать учебники, нужен конспект. Желательно свой. Некоторые специально делают пометки в учебнике[1].

Я предлагаю разметить конспект – справочник. Затертый и исчерканный экземпляр может здорово сэкономить время на повторение.

Единственное условие — к нему нужно привыкнуть. Если накануне экзамена вы впервые его увидели, отложите. Ясности не добавится. «Нельзя объять необъятное», — учил Козьма Прутков. Даже недельный заряд кофе не позволит освоить годовой курс за ночь.

Последнее применение — это жест отчаяния:

Распечатать бисерным шрифтом и сунуть в карман. Знаний это заведомо не прибавит, но чем черт не шутит?

К сожалению, времени не хватило, и пришлось закончить на теории возмущений. Но уже сейчас конспект охватывает почти две трети курса и может оказаться полезен.

Вы будете первыми, кто выскажет свое мнение. Я буду искренне благодарен любым советам и замечаниям. Прежде всего, скажите, оправдан ли сжатый формат, и нужно ли продолжение?

Если да, то наша работа пригодится еще многим и многим. Если нет, тоже,
... но только в качестве шпаргалки.

Удачи вам, – *А. А.*

«Мартобря 86 числа,
Между днем и ночью»

[1] Порой в библиотечном...

ОСНОВНЫЕ ФОРМУЛЫ КУРСА

Содержание

1 Основные физические величины

Даны округленные значения в гауссовой системе единиц и во внесистемных единицах.
Постоянная Планка

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.05 \cdot 10^{-27}\,\text{эрг} \cdot \text{с} = 6.58 \cdot 10^{-16}\,\text{эВ} \cdot \text{с}. \tag{1a}$$

Скорость света

$$c = 3.00 \cdot 10^{10}\,\text{см/с}. \tag{1b}$$

Заряд электрона

$$e = 4.80 \cdot 10^{-10}\,\text{СГСЭ}. \tag{1c}$$

Массы электрона, протона и мюона

$$m_e = 9.11 \cdot 10^{-28}\,\text{г} = 0.511\,\text{МэВ}/c^2; \tag{1d}$$

$$m_p = 1.67 \cdot 10^{-24}\,\text{г} = 0.938\,\text{ГэВ}/c^2 \approx 1836\,m_e; \tag{1e}$$

$$m_\mu = 1.88 \cdot 10^{-25}\,\text{г} = 106\,\text{МэВ}/c^2 \approx 207\,m_e. \tag{1f}$$

Постоянная тонкой структуры

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137} = 7.30 \cdot 10^{-3}. \tag{1g}$$

Характерные расстояния: боровский радиус (a_B), комптоновская длина волны ($\lambdabar_c = \alpha \cdot a_B$) и классический радиус ($r_0 = \alpha^2 \cdot a_B$) электрона:

$$a_B = \hbar^2/me^2 = 0.529 \cdot 10^{-8}\,\text{см} = 0.529\,\text{Å}; \tag{1h}$$

$$\lambdabar_c = \frac{\lambda_c}{2\pi} = \frac{\hbar}{m_e c} = 3.86 \cdot 10^{-11}\,\text{см} = 3.86 \cdot 10^{-3}\,\text{Å}; \tag{1i}$$

$$r_0 = \frac{e^2}{m_e c^2} = 2.82 \cdot 10^{-13}\,\text{см} = 2.82 \cdot 10^{-5}\,\text{Å}. \tag{1j}$$

Атомная единица энергии (энергия Хартри):

$$1\,\mathrm{E_h} = 1\,\mathrm{Ha} = 2\,\mathrm{Ry} = e^2/a_B = me^4/\hbar^2 = 2 \cdot 13.6\ \text{эВ}. \tag{1k}$$

Магнетон Бора.

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c} = 9.27 \cdot 10^{-21}\,\text{эрг/Гс} = 5.80 \cdot 10^{-9}\,\text{эВ/Гс}. \tag{1l}$$

Орбитальное гиромагнитное отношение электрона γ_e

$$\vec{\mu}_e = \gamma_e \vec{L}_e, \qquad \text{где} \qquad \gamma_e = \frac{e}{2m_e c} = \frac{\mu_B}{\hbar} = 8.80\,\text{МГц/Гс}. \tag{1m}$$

Спиновый магнитный момент электрона ($g_e = 2.00$ — аномальное гиромагнитное отношение)

$$\vec{\mu}_s = g_e\,\gamma_e\,\vec{S}; \qquad \text{и для проекций} \qquad \mu_e\big|_z = \frac{g_e}{2}\,\mu_B\,s_z. \tag{1n}$$

Частота прецессии орбитального углового момента электрона в магнитном поле (частота Лармора)

$$\Omega_L = \frac{eB}{2m_e c} = \gamma_e B. \tag{1o}$$

Аномальные гиромагнитные отношения электрона, мюона, протона и нейтрона

$$\gamma_e = 2; \qquad \gamma_\mu = 2; \qquad \gamma_p = 2 \cdot 2.79; \qquad \gamma_n = 2 \cdot (-1.91). \tag{1p}$$

Энергия кванта с данной длиной волны

$$E(\lambda) = \frac{hc}{\lambda} = \frac{\hbar c}{\lambdabar}, \qquad \text{где} \qquad hc = 12.4\,\text{кэВ} \cdot \text{Å}. \tag{1q}$$

2 Основные понятия

2.1 Векторы состояния и линейные операторы

2.1.1 Общие свойства операторов

Связь между бра- и кет- векторами. Пусть α — комплексное число.

$$\text{Если} \qquad |\,\alpha \cdot \psi\,\rangle = \alpha\,|\,\psi\,\rangle; \qquad \text{то} \qquad \langle\,\alpha \cdot \psi\,| = \alpha^*\,\langle\,\psi\,|. \tag{2}$$

Скалярное произведение состояний (α, β — комплексные числа, $\langle\,\psi\,|$, $|\,\chi\,\rangle$, $|\,\eta\,\rangle$ — бра- и кет-векторы состояний).

$$\langle\,\psi\,|\,\chi\,\rangle = \langle\,\chi\,|\,\psi\,\rangle^* \quad \text{и} \quad \langle\,\psi\,|\,(\alpha|\,\chi\,\rangle + \beta|\,\eta\,\rangle) = \alpha\langle\,\psi\,|\,\chi\,\rangle + \beta\langle\,\psi\,|\,\eta\,\rangle. \tag{3}$$

Норма состояния:

$$||\psi|| = \sqrt{\langle\,\psi\,|\,\psi\,\rangle}. \tag{4}$$

Линейные операторы:

$$\hat{\mathrm{A}} : |\,\psi\,\rangle \to |\,\hat{\mathrm{A}}\,\psi\,\rangle \qquad \text{и} \qquad \hat{\mathrm{A}} : (\alpha|\,\chi\,\rangle + \beta|\,\eta\,\rangle) \to \alpha|\,\hat{\mathrm{A}}\,\chi\,\rangle + \beta|\,\hat{\mathrm{A}}\,\eta\,\rangle. \tag{5}$$

Коммутатор $[\ldots,\ldots]$ и антикоммутатор $\{\ldots,\ldots\}$ операторов:

$$[\hat{\mathrm{A}},\,\hat{\mathrm{B}}] = \hat{\mathrm{A}}\,\hat{\mathrm{B}} - \hat{\mathrm{B}}\,\hat{\mathrm{A}} \qquad \text{и} \qquad \{\hat{\mathrm{A}},\,\hat{\mathrm{B}}\} = \hat{\mathrm{A}}\,\hat{\mathrm{B}} + \hat{\mathrm{B}}\,\hat{\mathrm{A}}\,. \tag{6}$$

Единичный оператор:

$$\forall|\,\psi\,\rangle,\,|\,\chi\,\rangle, \qquad \hat{\mathbb{1}}\;|\,\psi\,\rangle = |\,\psi\,\rangle \qquad \text{и} \qquad \langle\,\psi\,|\,\hat{\mathbb{1}}\,|\,\chi\,\rangle = \langle\,\psi\,|\,\chi\,\rangle. \tag{7}$$

Обратный оператор $\hat{\mathrm{A}}^{-1}$, (если он существует):

$$\hat{\mathrm{A}}^{-1}\,\hat{\mathrm{A}} = \hat{\mathrm{A}}\,\hat{\mathrm{A}}^{-1} = \hat{\mathbb{1}}\,. \tag{8}$$

Средние значения оператора и его матричные элементы:

$$\langle\,A\,\rangle_\psi \triangleq A_{\psi\,\psi} = \langle\,\psi\,|\,\hat{\mathrm{A}}\;\psi\,\rangle; \qquad A_{\psi\,\chi} \triangleq \langle\,\psi\,|\,\hat{\mathrm{A}}\;\chi\,\rangle. \tag{9}$$

Если функцию можно разложить в ряд Тейлора, то *функция от оператора* определяется как

$$f(\hat{\mathrm{A}}) \triangleq \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} f^{(n)}(0)\,\hat{\mathrm{A}}^n, \quad \text{где} \quad f^{(n)} = \frac{d^n f}{dx^n}, \quad \text{и} \quad \hat{\mathrm{A}}^n = \underbrace{\hat{\mathrm{A}}\cdot\hat{\mathrm{A}}\cdot\ldots\cdot\hat{\mathrm{A}}}_{n\ \text{раз}}. \tag{10}$$

Эрмитово сопряжение операторов:

$$\langle\,\hat{\mathrm{A}}^+\,\psi\,|\,\chi\,\rangle = \langle\,\psi\,|\;\hat{\mathrm{A}}\,\chi\,\rangle, \qquad \text{причем} \qquad (\hat{\mathrm{A}}^+)^+ = \hat{\mathrm{A}}, \qquad \text{и} \qquad \langle\,\hat{\mathrm{A}}\,\psi\,| = \langle\,\psi\,|\,\hat{\mathrm{A}}^+\,. \tag{11}$$

Матричные элементы эрмитово сопряженных операторов:

$$\left(A^+\right)_{\psi\,\chi} = \langle\,\psi\,|\,\hat{\mathrm{A}}^+\;\chi\,\rangle = \Big(\langle\,\chi\,|\;\hat{\mathrm{A}}\,\psi\,\rangle\Big)^* = (A_{\chi\,\psi})^*\,. \tag{12}$$

Оператор называется *эрмитовым*, или *самосопряженным*, если $\hat{\mathrm{A}}^+ = \hat{\mathrm{A}}$. Его матричные элементы равны,

$$\langle\,\psi\,|\,\hat{\mathrm{A}}\,|\,\chi\,\rangle \triangleq \langle\,\hat{\mathrm{A}}\,\psi\,|\,\chi\,\rangle = \langle\,\psi\,|\;\hat{\mathrm{A}}\,\chi\,\rangle, \qquad \text{и} \qquad \langle\,\psi\,|\,\hat{\mathrm{A}}\,|\,\chi\,\rangle = \langle\,\chi\,|\,\hat{\mathrm{A}}\,|\,\psi\,\rangle^*. \tag{13}$$

Унитарными называются операторы, для которых $\hat{\mathrm{S}}^+ = \hat{\mathrm{S}}^{-1}$. Такие операторы сохраняют скалярное произведение:

$$\hat{\mathrm{S}}^+\cdot\hat{\mathrm{S}} = \hat{\mathrm{S}}\cdot\hat{\mathrm{S}}^+ = \hat{\mathbb{1}}, \quad \text{тогда} \quad \langle\,\hat{\mathrm{S}}\,\psi\,|\;\hat{\mathrm{S}}\,\chi\,\rangle = \langle\,\psi\,|\;\hat{\mathrm{S}}^+\cdot\hat{\mathrm{S}}\,\chi\,\rangle = \langle\,\psi\,|\,\chi\,\rangle. \tag{14}$$

2.1.2 Собственные состояния и спектры операторов

Пусть $|\,\hat{\mathrm{A}}\ a\,\rangle = a|\,a\,\rangle$, где a — число. Тогда $|\,a\,\rangle$ — *собственное состояние* оператора $\hat{\mathrm{A}}$, и a — соответствующее ему *собственное значение.*

Спектр оператора — это множество его собственных значений. Спектр может содержать непрерывную и дискретную части C и D.
Непрерывная часть может состоять из несколько подмножеств: $C = \cup_i C_i$.
Обобщение δ - функции на множества со сложной структурой

$$\delta(a,\, b) \triangleq \begin{cases} \delta_{a\,b} & \text{при } a,\, b \in D; \\ \delta(a-b) & \text{при } a,\, b \in C \\ 0 & \text{в других случаях.} \end{cases} \tag{15}$$

Нормировка состояний в дискретной D и непрерывной C частях спектра эрмитова оператора (*ортонормированная система* собственных состояний)[2]:

$$\hat{\mathrm{A}}\,|\,a\,\rangle = a\,|\,a\,\rangle \quad \text{и} \quad \hat{\mathrm{A}}\,|\,b\,\rangle = b\,|\,b\,\rangle; \quad \text{тогда} \quad \langle\, a\,|\,b\,\rangle = \delta(a,\, b). \tag{16}$$

Сверткой по a называется сумма по всем собственным числам $a \in C \cup D$:

$$\underbrace{A(a)\, B(a)}_{\text{свертка}} \triangleq \sum_{a\in D} A(a)\, B(a) + \int_{a\in C} A(a)\, B(a)\, da; \quad \delta(a,\, \underbrace{b)\, F(b}) = F(a). \tag{17}$$

Условие полноты[3] ортонормированной системы состояний $|\,a\,\rangle$:

$$\hat{\mathbb{1}} = |\,\underbrace{a\,\rangle\langle\, a}\,| = \sum_{a\in D} |\,a\,\rangle\langle\, a\,| + \int_{a\in C} |\,a\,\rangle\langle\, a\,|\, da. \tag{18}$$

Полнота системы гарантирует, что по базису можно разложить произвольный вектор. Поскольку проекция $|\,\psi\,\rangle$ на состояние $\langle\, a\,|$ равна $\langle\, a\,|\,\psi\,\rangle$,

$$|\,\psi\,\rangle = |\,\underbrace{a\,\rangle\langle\, a}\,|\,\psi\,\rangle. \tag{19}$$

Разложение оператора $\hat{\mathrm{V}}$ по полному ортонормированному базису:

$$\hat{\mathrm{V}} = |\,\underbrace{a\,\rangle\langle\, a}_{\hat{\mathbb{1}}}\,|\,\hat{\mathrm{V}}\,|\,\underbrace{b\,\rangle\langle\, b}_{\hat{\mathbb{1}}}\,|, = |\,\underbrace{a\,\rangle\, \hat{\mathrm{V}}_a}\underbrace{{}_b\langle\, b}\,|, \qquad \text{где} \qquad a,\, b \in C \cup D. \tag{20}$$

Разложение функции от оператора по его собственным состояниям:

$$f(\hat{\mathrm{A}}) = |\,\underbrace{a\,\rangle\, f(a)\,\langle\, a}\,|, \qquad \text{где} \qquad \hat{\mathrm{A}}\,|\,a\,\rangle = a\,|\,a\,\rangle, \quad a \in C \cup D. \tag{21}$$

2.1.3 Независимые состояния

Независимые состояния — это состояния не взаимодействующих между собой систем, либо состояния одной и той же системы в независимых экспериментах. При вычислении статистических средних, полных вероятностей, времен жизни и других величин бывает необходимо найти вклад нескольких независимых состояний. Амплитуды таких состояний не интерферируют, поэтому их вклады вычисляют по отдельности, а затем выполняют суммирование, усреднение и т. п.

[2] Состояния в C и D отличаются по размерности. Интеграл по C компенсирует это различие.
[3] Согласованное с условием нормировки (16).

2.1.4 Непрерывный предел и плотность состояний

Иногда, если дискретный спектр достаточно частый, в вычислениях удобно приблизить суммы интегралами. Такой спектр называют *квазинепрерывным.*

Пусть в области $M \subset D$ функция $f(a)$ меняется не слишком быстро. Тогда в суммах по состояниям $a \in M$ можно перейти к *непрерывному пределу:*

$$\sum_{a \in M} f(a) \approx \int_M f(a)\, \rho(a)\, da. \tag{22}$$

Плотность состояний $\rho(a)$ определяет число состояний (число собственных значений) в интервале $(a,\, a + da)$:

$$dN(a,\, a + da) = \rho(a)\, da, \qquad \text{где, по предположению,} \qquad dN \gg 1. \tag{23}$$

Обратите внимание, что в отличие от свертки здесь суммирование может идти не по всему спектру. Кроме того, в интеграле нужно учитывать плотность состояний.

2.2 Соотношение неопределенностей

Дисперсия (среднее квадратичное отклонение) величины для состояния $|\,\psi\,\rangle$:

$$\langle\, (\Delta V)^2\, \rangle_\psi = \langle\, \psi\, |\, \Big(\hat{\mathrm{V}} - \langle\, V\, \rangle_\psi\Big)^2\, |\, \psi\, \rangle = \langle\, V^2\, \rangle_\psi - \langle\, V\, \rangle_\psi^2. \tag{24}$$

Принцип неопределенностей Гейзенберга. Если $[\hat{\mathrm{A}},\, \hat{\mathrm{B}}] = i\, \hat{\mathrm{C}} \neq 0$, то $\forall |\, \psi\, \rangle$,

$$\langle\, (\Delta A)^2\, \rangle_\psi \langle\, (\Delta B)^2\, \rangle_\psi \geqslant \frac{1}{4} \langle\, C\, \rangle_\psi^2. \tag{25a}$$

В частности, координата и импульс не коммутируют, $[\hat{\mathrm{p}}_i,\, \hat{\mathrm{x}}_j] = -i\hbar\, \delta_{ij}$, поэтому $\forall |\, \psi\, \rangle$

$$\langle\, (\Delta p_i)^2\, \rangle_\psi \langle\, (\Delta x_j)^2\, \rangle_\psi \geqslant \frac{\hbar^2}{4}\, \delta_{ij}. \tag{25b}$$

2.3 Волновая функция, вероятности и средние

2.3.1 Общий случай

Пусть собственные состояния $|\, a\, \rangle$ эрмитова оператора $\hat{\mathrm{A}}$ образуют полный базис. Волновая функция $\psi(a)$ состояния $|\, \psi\, \rangle$ в a-представлении определена на спектре $\hat{\mathrm{A}}$. Связь состояния с волновой функцией, см. (19):

$$\psi(a) = \langle\, a\, |\, \psi\, \rangle \qquad \text{и} \qquad \psi^*(a) = \langle\, \psi\, |\, a\, \rangle, \qquad \text{причем} \qquad a \in C \cup D. \tag{26}$$

Вероятности наблюдения значения $a \in D$ или значений в интервале $(a,\, a + da) \subset C$, для состояния $|\, \psi\, \rangle$ равны

$$W(a) = |\psi(a)|^2, \qquad \text{для} \qquad a \in D; \tag{27a}$$

$$dW(a,\, a + da) = |\psi(a)|^2\, da, \qquad \text{для} \qquad a \in C. \tag{27b}$$

Волновая функция $\psi(a)$ однозначно определяет состояние $|\,\psi\,\rangle$, см. (17):

$$|\,\psi\,\rangle = |\,\underbrace{a\,\rangle\langle\,a}_{\hat{\mathbb{1}}}\,|\,\psi\,\rangle = |\,\underbrace{a\,\rangle\,\psi(a)} \quad \text{и} \quad \langle\,\psi\,| = \langle\,\psi\,|\,\underbrace{a\,\rangle\langle\,a}_{\hat{\mathbb{1}}}\,| = \psi^*\underbrace{(a)\langle\,a}\,|. \tag{28}$$

Скалярное произведение состояний выражается через волновые функции,

$$\langle\,\psi\,|\,\chi\,\rangle = \langle\,\psi\,|\,\underbrace{a\,\rangle\langle\,a}_{a}\,|\,\chi\,\rangle = \psi^*\underbrace{(a)\,\chi(a)}. \tag{29}$$

Действие оператора на волновую функцию в a-представлении:

$$\hat{\mathrm{V}}\,\psi(a) \triangleq \langle\,a\,|\,\hat{\mathrm{V}}\,\psi\,\rangle = \langle\,a\,|\,\hat{\mathrm{V}}\,|\,\underbrace{\tilde{a}\,\rangle\,\langle\,\tilde{a}}_{\hat{\mathbb{1}}}\,|\,\psi\,\rangle = \langle\,a\,|\,\hat{\mathrm{V}}\,|\,\underbrace{\tilde{a}\,\rangle\,\psi(\tilde{a})}. \tag{30}$$

Среднее от оператора для состояния, заданного волновой функцией:

$$\langle\,V\,\rangle_\psi = \langle\,\psi\,|\,\hat{\mathrm{V}}\,\psi\,\rangle = \langle\,\psi\,|\,\underbrace{a\,\rangle\langle\,a}_{\hat{\mathbb{1}}}\,|\,\hat{\mathrm{V}}\,\psi\,\rangle = \psi^*\underbrace{(a)\,\hat{\mathrm{V}}\,\psi(a)}. \tag{31}$$

2.3.2 Дискретный спектр: матричное представление

Если система имеет только дискретный спектр, $C = \varnothing$, свертки превращаются в суммы. Волновые функции кет-векторов становятся (возможно, бесконечными) вектор-столбцами:

$$|\,\psi\,\rangle \to \boldsymbol{\psi} = \begin{pmatrix} \psi^1 \\ \psi^2 \\ \vdots \end{pmatrix}; \quad \psi^i = \langle\,i\,|\,\psi\,\rangle, \quad \text{где } |\,i\,\rangle \text{ — } i\text{-е состояние.} \tag{32a}$$

Бра-векторам соответствуют эрмитово-сопряженные вектор-строки:

$$\langle\,\psi\,| \to \boldsymbol{\psi}^\dagger = (\psi_1^*,\, \psi_2^*,\, \ldots)\,, \qquad \text{где} \qquad \psi_i^* = \langle\,\psi\,|\,i\,\rangle. \tag{32b}$$

Обратный переход (по повторяющимся индексам идет суммирование):

$$\langle\,\psi\,| = \psi_i^*\langle\,i\,|; \qquad |\,\psi\,\rangle = |\,i\,\rangle\psi^i; \qquad \langle\,\psi\,|\,\chi\,\rangle = \boldsymbol{\psi}^\dagger\,\boldsymbol{\chi} = \psi_i^*\,\chi^i. \tag{32c}$$

Операторам соответствуют матрицы, составленные из матричных элементов оператора $\hat{\mathrm{V}}$ (отсюда название):

$$\hat{\mathrm{V}} \to \mathcal{V} = \begin{pmatrix} V_1^1 & V_2^1 & \ldots \\ V_1^2 & V_2^2 & \ldots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \qquad \text{где} \qquad V_k^i = \langle\,i\,|\,\hat{\mathrm{V}}\cdot k\,\rangle. \tag{33}$$

Матрицы действуют на вектор-столбцы по обычным правилам:

$$(\mathcal{V}\boldsymbol{\psi})^i = V_k^i\psi^k \qquad \text{и} \qquad \langle\,\psi\,|\,\hat{\mathrm{V}}\;\chi\,\rangle = \boldsymbol{\psi}^\dagger\mathcal{V}\boldsymbol{\chi} = \psi_i^* V_k^i \chi^k. \tag{34}$$

Матрица произведения операторов равна произведению соответствующих матриц:

$$\hat{\mathrm{A}}\,\hat{\mathrm{B}} \to \mathcal{AB} = \begin{pmatrix} A_i^1 B_1^i & A_i^1 B_2^i & \ldots \\ A_i^2 B_1^i & A_i^2 B_2^i & \ldots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \tag{35}$$

2.3.3 Непрерывный спектр: интегральные операторы (*)

Если, напротив, оператор $\hat{\mathrm{A}}$ имеет только непрерывный спектр, $D = \varnothing$, то свертку следует понимать как интегрирование (см. (26), (29)):

$$\langle\, \psi \,|\, \chi \,\rangle = \langle\, \psi \,|\, \underbrace{a \,\rangle\langle\, a}_{\hat{\mathbb{1}}} \,|\, \chi \,\rangle = \psi^*(\underbrace{a)\, \chi(a}) = \int_C da\, \psi^*(a)\chi(a). \tag{36}$$

При этом роль матриц переходит к интегральным операторам — «матрицам с непрерывными индексами».

Интегральный оператор $\hat{\mathcal{V}}$ определяется своим *ядром* $\mathcal{V}(a,\, b)$. Он действует на функции следующим образом, см. (29):

$$\forall f(a), \quad (\hat{\mathcal{V}}\, f)(a) = \mathcal{V}(a,\, \underbrace{b)\, f(b}_{b}) = \int_C db\, \mathcal{V}(a,\, b)\, f(b), \quad \text{где} \quad \mathcal{V}(a,\, b) = \langle\, a \,|\; \hat{\mathrm{V}} \cdot b \,\rangle. \tag{37}$$

Матричные элементы операторов между произвольными состояниями

$$V_{\psi\chi} = \langle\, \psi \,|\, \hat{\mathrm{V}}\; \chi \,\rangle = \psi^*(\underbrace{a)\, \mathcal{V}(a}_{a},\, \underbrace{b)\, \chi(b}_{b}) = \int_C da\, db\, \psi^*(a)\, \mathcal{V}(a,\, b)\, \chi(b). \tag{38}$$

Пример: К счастью, иногда операторы «забывают» об интегральном характере. Интегральные ядра операторов $\hat{\mathrm{x}}$ и $\hat{\mathrm{p}}$ в координатном представлении выглядят необычно:

$$\mathcal{X}(x,\, y) = x\delta(x-y), \qquad (\hat{\mathrm{x}}\, \psi)(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dy\, \mathcal{X}(x,\, y)\, \psi(y); \tag{39a}$$

$$\mathcal{P}(x,\, y) = -i\hbar\delta'(x-y), \qquad (\hat{\mathrm{p}}\, \psi)(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dy\, \mathcal{P}(x,\, y)\, \psi(y). \tag{39b}$$

Однако на волновые функции они действуют привычным образом, см. раздел 3.3:

$$(\hat{\mathrm{x}}\, \psi)(x) \;=\; \int_{-\infty}^{\infty} dy\, x\delta(x-y)\psi(y) = x\psi(x). \tag{40a}$$

$$(\hat{\mathrm{p}}\, \psi)(x) \;=\; -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} dy\, \delta'(x-y)\psi(y) = -i\hbar\psi'(x). \tag{40b}$$

2.3.4 Преобразование волновых функций непрерывной переменной

Пусть две физические величины связаны формулой $b = f(a)$ (например кинетическая энергия $T = \frac{p^2}{2m}$ однозначно зависит от импульса). Переход из a- в b-представление сохраняет вероятность. Поэтому согласно (27) в непрерывном спектре (т. е. когда $a \in C_a$ и $b \in C_b$):

$$dW = |\psi(a)|^2\, |da| = |\psi(b)|^2\, |db|, \qquad \text{причем} \qquad db = f'(a)\, da. \tag{41}$$

Преобразования волновой функции $\psi(a)$ при переопределении непрерывной переменной:

$$\psi(b) = \frac{1}{\sqrt{|f'(a)|}}\, \psi(a). \tag{42}$$

2.3.5 Оператор пространственной инверсии, четность

Оператор инверсии $\hat{\mathrm{I}}$ (или $\hat{\mathrm{P}}$) изменяет компоненты радиус – вектора (координаты точки) на противоположные. При этом часть векторов (истинные, или полярные) также меняет знак[4].

Действие $\hat{\mathrm{I}}$ на собственные состояния операторов координаты $\hat{\mathbf{r}}$, импульса $\hat{\mathbf{p}}$ и произвольного *истинно векторного* оператора $\hat{\mathbf{g}}$:

$$\hat{\mathrm{I}}\,|\,\mathbf{r}\,\rangle = |\,-\mathbf{r}\,\rangle, \qquad \hat{\mathrm{I}}\,|\,\mathbf{p}\,\rangle = |\,-\mathbf{p}\,\rangle, \qquad \hat{\mathrm{I}}\,|\,\mathbf{g}\,\rangle = |\,-\mathbf{g}\,\rangle. \tag{43a}$$

Действие $\hat{\mathrm{I}}$ на волновые функции в $\mathbf{r}$-, $\mathbf{p}$- и $\mathbf{g}$-представлениях:

$$\hat{\mathrm{I}}\,\psi(\mathbf{x}) = \psi(-\mathbf{x}); \qquad \hat{\mathrm{I}}\,\psi(\mathbf{p}) = \psi(-\mathbf{p}); \qquad \hat{\mathrm{I}}\,\psi(\mathbf{g}) = \psi(-\mathbf{g}); \tag{43b}$$

Свойства оператора инверсии:

$$\hat{\mathrm{I}}^{\,2} = \hat{\mathbb{1}}; \qquad \{\hat{\mathrm{I}},\,\hat{\mathbf{r}}\} = \hat{\mathrm{I}}\,\hat{\mathbf{r}} + \hat{\mathbf{r}}\,\hat{\mathrm{I}} = 0; \qquad \text{и} \qquad \{\hat{\mathrm{I}},\,\hat{\mathbf{p}}\} = 0; \quad \{\hat{\mathrm{I}},\,\hat{\mathbf{g}}\} = 0. \tag{44}$$

Из $\hat{\mathrm{I}}^{\,2} = \hat{\mathbb{1}}$ следует, что собственные числа оператора инверсии (*четность* состояния) принимают значения $P_{1,\,2} = \pm 1$.

3 Уравнение Шредингера

3.1 Общий случай

3.1.1 Зависимость состояний от времени

Эволюция состояний определяется *нестационарным* уравнением Шредингера

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\,\psi(t)\,\rangle = \hat{\mathrm{H}}(t)|\,\psi(t)\,\rangle \quad \text{откуда следует, что} \quad -\,i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle\,\psi(t)\,| = \langle\,\psi(t)\,|\,\hat{\mathrm{H}}(t). \tag{45}$$

Разложение состояний по не зависящему от времени базису $|\,a\,\rangle$ дает уравнение Шредингера для волновых функций, см. (26),

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\,\langle\,a\,|\,\psi(t)\,\rangle = \langle\,a\,|\,\hat{\mathrm{H}}(t)|\,\psi(t)\,\rangle, \qquad \text{и} \qquad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(a,\,t) = \hat{\mathrm{H}}(t)\,\psi(a,\,t). \tag{46a}$$

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\,\langle\,\psi(t)\,|\,a\,\rangle = \langle\,\psi(t)\,|\,\hat{\mathrm{H}}(t)|\,a\,\rangle, \qquad \text{и} \qquad -i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^{*}(a,\,t) = \Big(\hat{\mathrm{H}}(t)\,\psi(a,\,t)\Big)^{*}. \tag{46b}$$

3.1.2 Зависимость физических величин от времени

Оператор скорости изменения физической величины $\hat{\dot{\mathrm{A}}}$, определение и вид:

$$\frac{d}{dt}\langle\,A(t)\,\rangle_{\psi} \triangleq \langle\,\hat{\dot{\mathrm{A}}}(t)\,\rangle_{\psi}, \qquad \text{где} \qquad \hat{\dot{\mathrm{A}}}(t) = \frac{\partial\hat{\mathrm{A}}(t)}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}[\hat{\mathrm{H}},\,\hat{\mathrm{A}}(t)]. \tag{47}$$

[4] Векторное произведение полярных векторов является аксиальным вектором (псевдовектором), то есть не изменяется при инверсии.

3.1.3 Оператор эволюции

Решения уравнения Шредингера линейно зависят от начальных условий, и могут быть выражены через *оператор эволюции* $\hat{\mathrm{S}}$:

$$|\,\psi(t)\,\rangle = \hat{\mathrm{S}}(t,\,t_0)\,|\,\psi(t_0)\,\rangle \qquad \text{и} \qquad \langle\,\psi(t)\,| = \langle\,\psi(t_0)\,|\;\hat{\mathrm{S}}^{+}(t,\,t_0). \tag{48}$$

Он удовлетворяет уравнениям:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\,\hat{\mathrm{S}}(t,\,t') = \hat{\mathrm{H}}(t)\,\hat{\mathrm{S}}(t,\,t'), \qquad i\hbar\frac{\partial}{\partial t'}\,\hat{\mathrm{S}}(t,\,t') = -\,\hat{\mathrm{S}}(t,\,t')\,\hat{\mathrm{H}}(t'). \tag{49}$$

(*) Из (48) следует закон эволюции волновой функции в a-представлении:

$$\psi(a,\,t) = \langle\,a\,|\,\hat{\mathrm{S}}(t,\,t_0)|\,\underbrace{a'\,\rangle\langle\,a'}\,|\,\psi(t_0)\,\rangle = \mathcal{S}(a,\,t;\,\underbrace{a',\,t_0)\,\psi(a'}_{},\,t_0). \tag{50}$$

3.2 Стационарное уравнение Шредингера, $\hat{\mathrm{H}} = const$

При $\hat{\mathrm{H}} = const$ собственные состояния и собственные числа Гамильтониана не зависят от времени. Они определяются стационарным уравнением Шредингера:

$$\hat{\mathrm{H}}\,|\,\psi_E\,\rangle = E|\,\psi_E\,\rangle, \qquad \text{и} \qquad \langle\,\psi_E\,|\,\hat{\mathrm{H}} = E\langle\,\psi_E\,|. \tag{51}$$

Оператор эволюции при $\hat{\mathrm{H}} = const$:

$$\hat{\mathrm{S}}(t,\,t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\,\hat{\mathrm{H}}(t-t_0)\right), \quad \text{причем} \quad \forall\tau, \quad \hat{\mathrm{S}}(t,\,\tau)\,\hat{\mathrm{S}}(\tau,\,t_0) = \hat{\mathrm{S}}(t,\,t_0). \tag{52}$$

(*) В силу (49) последнее верно при $\hat{\mathrm{H}} \neq const$.
Если начальное состояние чистое (собственное), $|\,\psi(t_0)\,\rangle = |\,\psi_E\,\rangle$, то

$$\begin{aligned}
|\,\psi_E(t)\,\rangle &= \hat{\mathrm{S}}(t,\,t_0)\,|\,\psi_E(t_0)\,\rangle = \exp-\frac{iE(t-t_0)}{\hbar}|\,\psi_E\,\rangle; \\
\langle\,\psi_E(t)\,| &= \langle\,\psi(t_0)\,|\;\hat{\mathrm{S}}^{+}(t,\,t_0) = \langle\,\psi_E\,|\;\exp\frac{iE(t-t_0)}{\hbar}.
\end{aligned}$$

Если начальное состояние смешанное, $|\,\psi(t_0)\,\rangle = c\underbrace{(E)\,|\,\psi_E}\,\rangle$, то

$$\begin{aligned}
|\,\psi(t)\,\rangle &= c\underbrace{(E)\;\exp-\frac{iE(t-t_0)}{\hbar}|\,\psi_E}\,\rangle, \\
\langle\,\psi(t)\,| &= c^{*}\underbrace{(E)\;\exp\quad\frac{iE(t-t_0)}{\hbar}\,\langle\,\psi_E\,|}
\end{aligned}$$

3.3 Координатное представление

Операторы координаты и импульса (сравните с (40)):

$$\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{x} \quad \text{и} \quad \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\boldsymbol{\nabla}; \qquad \text{причем} \qquad [\hat{\mathrm{p}}_j,\,\hat{\mathrm{x}}_k] = -i\hbar\delta_{jk}. \tag{53}$$

Гамильтониан и уравнение Шредингера для частицы (U — потенциал).

$$\hat{\mathrm{H}} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(\mathbf{x},\, t), \qquad\qquad i\hbar\frac{d}{dt}\,\psi(\mathbf{x},\, t) = -\frac{\hbar^2\Delta}{2m}\,\psi(\mathbf{x},\, t) + U(\mathbf{x},\, t)\,\psi(\mathbf{x},\, t). \tag{54}$$

Волновая функция свободной частицы с импульсом $\mathbf{p}$ (в d – мерном пространстве):

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}) = \langle\, \mathbf{x} \,|\, \mathbf{p} \,\rangle = \frac{e^{i\mathbf{p}\,\mathbf{x}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{\frac{d}{2}}}. \tag{55}$$

Связь волновых функций частицы в x- и p-представлениях:

$$\psi(\mathbf{x},\, t) = \langle\, \mathbf{x} \,|\, \psi(t) \,\rangle \;=\; \langle\, \mathbf{x} \,|\, \underbrace{\mathbf{p}\,\rangle\langle\, \mathbf{p}}_{\iiint d^3\mathbf{p}} \,|\, \psi(t) \,\rangle = \iiint\limits_{\mathbb{R}^3_p} e^{i\mathbf{p}\,\mathbf{x}/\hbar}\psi(\mathbf{p},\, t)\,\frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}; \tag{56a}$$

$$\psi(\mathbf{p},\, t) = \langle\, \mathbf{p} \,|\, \psi(t) \,\rangle \;=\; \langle\, \mathbf{p} \,|\, \underbrace{\mathbf{x}\,\rangle\langle\, \mathbf{x}}_{\iiint d^3\mathbf{x}} \,|\, \psi(t) \,\rangle = \iiint\limits_{\mathbb{R}^3_x} e^{-i\mathbf{p}\,\mathbf{x}/\hbar}\psi(\mathbf{x},\, t)\,\frac{d^3\mathbf{x}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}. \tag{56b}$$

3.3.1 Операторы сдвигов в координатном и импульсном пространствах

Операторы трансляции $\hat{\mathrm{T}}_{\mathbf{a}}$ и буста $\hat{\mathrm{B}}_{\mathbf{q}}$ сдвигают состояние частицы, как целое, в координатном или импульсном пространстве. Первый отвечает сдвигу начала отсчета на вектор $-\mathbf{a}$, а второй — переходу в систему, движущуюся со скоростью $\mathbf{v} = -\frac{\mathbf{q}}{m}$. На собственные векторы операторов $\hat{\mathbf{x}}$ и $\hat{\mathbf{p}}$ они действуют так:

$$|\, \hat{\mathrm{T}}_{\mathbf{a}} \cdot\mathbf{x} \,\rangle = |\, \mathbf{x}+\mathbf{a} \,\rangle; \qquad \text{и} \qquad |\, \hat{\mathrm{B}}_{\mathbf{q}} \cdot\mathbf{p} \,\rangle = |\, \mathbf{p}+\mathbf{q} \,\rangle. \tag{57}$$

Операторы сдвигов выражаются через операторы импульса и координаты $\hat{\mathbf{x}}$ и $\hat{\mathbf{p}}$:

$$\hat{\mathrm{T}}_{\mathbf{a}} = \exp -\frac{i}{\hbar}(\mathbf{a},\, \hat{\mathbf{p}}), \qquad \text{и} \qquad \hat{\mathrm{B}}_{\mathbf{q}} = \exp \frac{i}{\hbar}(\mathbf{q},\, \hat{\mathbf{x}}); \tag{58}$$

Эти операторы не эрмитовы, однако унитарны, поскольку $\hat{\mathrm{T}}^+_{\mathbf{a}} = \hat{\mathrm{T}}_{-\mathbf{a}}$ и $\hat{\mathrm{B}}^+_{\mathbf{q}} = \hat{\mathrm{B}}_{-\mathbf{q}}$.

На волновые функции в x- и p-представлениях они действуют следующим образом:

$$\hat{\mathrm{T}}_{\mathbf{a}}\,\psi(\mathbf{x}) \triangleq \langle\, \mathbf{x} \,|\, \hat{\mathrm{T}}_{\mathbf{a}} \cdot\psi \,\rangle \;=\; \langle\, \hat{\mathrm{T}}^+_{\mathbf{a}} \cdot\mathbf{x} \,|\, \psi \,\rangle = \langle\, \mathbf{x}-\mathbf{a} \,|\, \psi \,\rangle = \psi(\mathbf{x}-\mathbf{a}); \tag{59a}$$

$$\hat{\mathrm{B}}_{\mathbf{q}}\,\psi(\mathbf{p}) \triangleq \langle\, \mathbf{p} \,|\, \hat{\mathrm{B}}_{\mathbf{q}} \cdot\psi \,\rangle \;=\; \langle\, \hat{\mathrm{B}}^+_{\mathbf{q}} \cdot\mathbf{p} \,|\, \psi \,\rangle = \langle\, \mathbf{p}-\mathbf{q} \,|\, \psi \,\rangle = \psi(\mathbf{p}-\mathbf{q}). \tag{59b}$$

3.3.2 Теорема Эренфеста

Применим формулу (47) к операторам координаты и импульса отдельной частицы:

$$\dot{\hat{\mathrm{x}}} \;=\; \frac{i}{\hbar}\left[\frac{\hat{\mathbf{p}}^{\,2}}{2m},\, \mathbf{x}\right] = \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m}; \tag{60a}$$

$$\dot{\hat{\mathrm{p}}} \;=\; \frac{i}{\hbar}\,[U(\mathbf{x},\, t),\, \hat{\mathbf{p}}] = -\boldsymbol{\nabla} U(\mathbf{x},\, t). \tag{60b}$$

Это значит, что в квантовой механике для средних верны уравнения Гамильтона:

$$\frac{d}{dt}\langle\, \mathbf{p} \,\rangle = -\langle\, \boldsymbol{\nabla} U(\mathbf{x},\, t) \,\rangle, \qquad \text{и} \qquad \frac{d}{dt}\langle\, \mathbf{x} \,\rangle = \frac{1}{m}\langle\, \mathbf{p} \,\rangle. \tag{61}$$

3.3.3 Сохранение вероятностей

Полная вероятность обнаружить квантовую систему определяется нормой состояния, $W = ||\psi||^2 = \langle\, \psi \,|\, \psi \,\rangle$. Для изолированной системы $W = const$.

Оператор эволюции (48) унитарный, то есть $\hat{\mathrm{S}}\,\hat{\mathrm{S}}^{+} = \hat{\mathrm{S}}^{+}\,\hat{\mathrm{S}} = \hat{\mathbb{1}}$. Это гарантирует сохранение вероятности в квантовой механике:

$$W(t) = \langle\, \psi(t) \,|\, \psi(t) \,\rangle = \langle\, \psi(t_0) \,|\, \hat{\mathrm{S}}^{+}(t,\, t_0)\; \hat{\mathrm{S}}(t,\, t_0) \,|\, \psi(t_0) \,\rangle = \langle\, \psi(t_0) \,|\, \psi(t_0) \,\rangle. \tag{62}$$

В координатном представлении сохранение вероятности выражается уравнением непрерывности:

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{x},\, t)}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j}(\mathbf{x},\, t) = 0. \tag{63}$$

Где пространственные плотность и поток вероятности определены так:

$$\rho(\mathbf{x},\, t) \;=\; |\psi(\mathbf{x},\, t)|^2, \tag{64a}$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{x},\, t) \;=\; -\frac{i\hbar}{2m}\left[\psi^{*}(\mathbf{x},\, t)\boldsymbol{\nabla}\psi(\mathbf{x},\, t) - \psi(\mathbf{x},\, t)\boldsymbol{\nabla}\psi^{*}(\mathbf{x},\, t)\right]. \tag{64b}$$

3.4 Представление Гейзенберга

Представление Гейзенберга $(\ldots_H)$ отличается от представления Шредингера $(\ldots_S)$ тем, что в Гейзенберговском представлении состояния не зависят от времени[5]. Зато, как наблюдаемые в классике, зависят от времени операторы.

Связь между представлениями определяет оператор эволюции (раздел 3.1.3)

$$|\, \psi(t) \,\rangle_H \;=\; |\, \psi(t_0) \,\rangle_S = const. \tag{65a}$$

$$\hat{\mathrm{A}}_H(t) \;=\; \hat{\mathrm{S}}^{+}(t,\, t_0)\, \hat{\mathrm{A}}_S(t)\, \hat{\mathrm{S}}(t,\, t_0), \tag{65b}$$

Зависимость Гейзенберговских операторов от времени задается уравнением (сравните с соотношением (47), выведенным в представлении Шредингера):

$$\frac{d\,\hat{\mathrm{A}}_H(t)}{dt} = \frac{\partial \hat{\mathrm{A}}_H(t)}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}\,[\hat{\mathrm{H}}_H(t),\, \hat{\mathrm{A}}_H(t)], \qquad \text{где} \qquad \hat{\mathrm{A}}_H(t_0) = \hat{\mathrm{A}}_S(t_0). \tag{66}$$

В классическом пределе это равенство переходит в известный в механике закон изменения величины $A(p,\, q,\, t)$:

$$\frac{dA(p,\, q,\, t)}{dt} = \frac{\partial A(p,\, q,\, t)}{\partial t} + \{H(p,\, q,\, t),\, A(p,\, q,\, t)\}\,. \tag{67}$$

Здесь $\{\ldots,\, \ldots\}$ — скобки Пуассона.

4 Гармонический осциллятор

Гамильтониан и обезразмеренные операторы длины и импульса:

$$\hat{\mathrm{H}} = \frac{\hat{\mathrm{p}}^2}{2m} + \frac{m\omega^2\, \hat{\mathrm{x}}^2}{2} = \frac{\hbar\omega}{2}\left(\frac{\hat{\mathrm{P}}^2}{2} + \frac{\hat{\mathrm{Q}}^2}{2}\right), \quad \text{где} \quad \hat{\mathrm{P}} = \hat{\mathrm{p}}\,/p_0 \quad \text{и} \quad \hat{\mathrm{Q}} = \hat{\mathrm{x}}\,/x_0. \tag{68}$$

[5] Два представления эквивалентны и дают одинаковые предсказания, причем каждое имеет свои преимущества.

Осцилляторные единицы — характерные масштабы длины и импульса:

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \qquad \text{и} \qquad p_0 = \sqrt{\hbar m\omega}; \qquad x_0 \cdot p_0 = \hbar. \tag{69}$$

Поскольку $U(\pm\infty) = \infty$, спектр дискретный. Собственные состояния гамильтониана $|\,\mathfrak{n}\,\rangle$ и их энергия определяются номером уровня $n = 0,\, 1,\, \ldots$

$$\hat{\mathrm{H}}\,|\,\mathfrak{n}\,\rangle = \hbar\omega\left(\hat{\mathrm{n}} + \frac{1}{2}\right)|\,\mathfrak{n}\,\rangle = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)|\,\mathfrak{n}\,\rangle, \qquad \text{причем} \qquad \langle\,\mathfrak{m}\,|\,\mathfrak{n}\,\rangle = \delta_{mn}. \tag{70}$$

Повышающий и понижающий операторы $\hat{\mathrm{a}}^+$, $\hat{\mathrm{a}}$:

$$\hat{\mathrm{a}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\mathrm{Q}} + i\,\hat{\mathrm{P}}), \qquad \hat{\mathrm{a}}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\mathrm{Q}} - i\,\hat{\mathrm{P}}), \qquad \text{причем} \qquad [\hat{\mathrm{a}}^+,\, \hat{\mathrm{a}}] = 1. \tag{71}$$

Оператор номера уровня $\hat{\mathrm{n}} = \hat{\mathrm{a}}^+\,\hat{\mathrm{a}}$ и его коммутационные свойства:

$$\hat{\mathrm{n}}\;|\,\mathfrak{n}\,\rangle = n|\,\mathfrak{n}\,\rangle; \qquad [\hat{\mathrm{n}},\, \hat{\mathrm{a}}] = -\,\hat{\mathrm{a}}, \qquad [\hat{\mathrm{n}},\, \hat{\mathrm{a}}^+] = \hat{\mathrm{a}}^+\,. \tag{72}$$

Матричные элементы повышающего и понижающего операторов,

$$\langle\,\mathfrak{m}\,|\,\hat{\mathrm{a}}\cdot\,\mathfrak{n}\,\rangle = \delta_{m\,n-1}\sqrt{n} \qquad \text{и} \qquad \langle\,\mathfrak{m}\,|\,\hat{\mathrm{a}}^+\cdot\,\mathfrak{n}\,\rangle = \delta_{m\,n+1}\sqrt{n+1}. \tag{73}$$

Понижающий оператор «уничтожает» основное состояние, $|\,\hat{\mathrm{a}}\cdot 0\,\rangle = 0$. Поэтому волновая функция в Q-представлении удовлетворяет уравнению

$$\hat{\mathrm{a}}\,\psi_0(Q) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(Q + \frac{d}{dQ}\right)\psi_0(Q) = 0, \qquad \text{откуда} \qquad \psi_0(Q) \propto e^{-Q^2/2}. \tag{74}$$

Волновые функции выражаются через полиномы Эрмита $H_n(Q)$:

$$\psi_n(Q) = \langle\,Q\,|\,\mathfrak{n}\,\rangle = (2^n n!\sqrt{\pi})^{-1/2}\,H_n(Q)\,e^{-Q^2/2}, \tag{75}$$

где

$$H_n(Q) = (-1)^n e^{Q^2}\frac{d^n}{dx^n}e^{-Q^2}; \quad H_0(Q) = 1, \quad H_1(Q) = 2Q,\, \ldots \tag{76}$$

Гамильтониан коммутирует с оператором инверсии, $\left[\hat{\mathrm{H}},\, \hat{\mathrm{I}}\right] = 0$; состояния и волновые функции имеют определенную четность:

$$\hat{\mathrm{I}}\,|\,\mathfrak{n}\,\rangle = (-1)^n|\,\mathfrak{n}\,\rangle, \qquad \text{и} \qquad \hat{\mathrm{I}}\,\psi_n(Q) = (-1)^n\psi_n(Q). \tag{77}$$

5 Орбитальный момент

5.1 Основные уравнения

Оператор углового момента частицы:

$$\hat{\mathbf{L}} = [\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}] = \hbar\cdot\hat{\mathbf{l}}; \qquad \text{или, в } x\text{-представлении,} \qquad \hat{\mathrm{l}}_j = -i\varepsilon_{jkl}\,r_k\,\partial_l. \tag{78}$$

Основные коммутаторы:

$$\left[\hat{\mathbf{l}}^2,\, \hat{\mathbf{l}}\right] = 0; \quad \left[\hat{\mathrm{l}}_i,\, \hat{\mathrm{l}}_j\right] = i\varepsilon_{ijk}\,\hat{\mathrm{l}}_k; \quad \left[\hat{\mathrm{l}}_i,\, \hat{\mathrm{x}}_j\right] = i\varepsilon_{ijk}\,\hat{\mathrm{x}}_k; \quad \left[\hat{\mathrm{l}}_i,\, \hat{\mathrm{p}}_j\right] = i\varepsilon_{ijk}\,\hat{\mathrm{p}}_k\,. \tag{79}$$

Полный набор включает две одновременно измеримые величины: $\mathbf{l}^2$ и $m = l_z$. Полный набор собственных состояний операторов момента $\hat{\mathbf{l}}^2$ и $\hat{\mathrm{l}}_z$:

$$\left\{ \begin{array}{rclcl} \hat{\mathbf{l}}^2|\,l,\, m\,\rangle &=& l(l+1)|\,l,\, m\,\rangle, & \text{где} & l = 0,\, 1,\, \ldots \\ \hat{\mathrm{l}}_z\,|\,l,\, m\,\rangle &=& m|\,l,\, m\,\rangle, & \text{и} & m = 0,\, \pm 1,\, \ldots,\, \pm l. \end{array} \right. \tag{80a}$$

Оператор $\hat{\mathbf{l}}$ — аксиальный вектор (см. сноску на стр. 11), т. е. $[\hat{\mathbf{l}},\, \hat{\mathrm{I}}] = 0$. Четность собственных состояний зависит от величины l:

$$\hat{\mathrm{I}}\,|\,l,\, m\,\rangle = (-1)^l|\,l,\, m\,\rangle. \tag{81}$$

Повышающий и понижающий операторы: $\hat{\mathrm{l}}_\pm = \hat{\mathrm{l}}_x \pm i\,\hat{\mathrm{l}}_y$;

$$\hat{\mathrm{l}}_x = \frac{1}{2}(\hat{\mathrm{l}}_+ + \hat{\mathrm{l}}_-), \qquad \text{и} \qquad \hat{\mathrm{l}}_y = \frac{1}{2i}(\hat{\mathrm{l}}_+ - \hat{\mathrm{l}}_-); \tag{82a}$$

$$\hat{\mathbf{l}}^2 = \hat{\mathrm{l}}_z^2 + \hat{\mathrm{l}}_\mp\,\hat{\mathrm{l}}_\pm \pm \hat{\mathrm{l}}_z = \hat{\mathrm{l}}_z^2 + \frac{\hat{\mathrm{l}}_+\,\hat{\mathrm{l}}_+ + \hat{\mathrm{l}}_-\,\hat{\mathrm{l}}_+}{2}. \tag{82b}$$

Коммутационные соотношения:

$$\left[\hat{\mathrm{l}}_z,\, \hat{\mathrm{l}}_\pm\right] = \pm\,\hat{\mathrm{l}}_\pm; \qquad \left[\hat{\mathrm{l}}_+,\, \hat{\mathrm{l}}_-\right] = 2\,\hat{\mathrm{l}}_z; \qquad \hat{\mathrm{l}}_+ = (\hat{\mathrm{l}}_-)^+. \tag{83}$$

5.2 Матричные элементы операторов момента

Состояния $|\,l,\, m\,\rangle$ являются собственными для операторов $\hat{\mathbf{l}}^2$ и $\hat{\mathrm{l}}_z$; повышающий и понижающий оператор $\hat{\mathrm{l}}_\pm$ изменяют значение m на единицу: $\hat{\mathrm{l}}_\pm\,|\,l,\, m\,\rangle \propto |\,l,\, m \pm 1\,\rangle$.

$$\langle\, l',\, m'\,|\,\hat{\mathbf{l}}^2\,|\,l,\, m\,\rangle = l(l+1)\delta_{l',l}\,\delta_{m,m'}; \tag{84a}$$

$$\langle\, l',\, m'\,|\,\hat{\mathrm{l}}_z\,|\,l,\, m\,\rangle = m\,\delta_{l',l}\,\delta_{m,m'}; \tag{84b}$$

$$\langle\, l',\, m'\,|\,\hat{\mathrm{l}}_+\,|\,l,\, m\,\rangle = \sqrt{l(l+1) - m(m+1)}\,\delta_{l',l}\,\delta_{m',m+1}; \tag{84c}$$

$$\langle\, l',\, m'\,|\,\hat{\mathrm{l}}_-\,|\,l,\, m\,\rangle = \sqrt{l(l+1) - m(m-1)}\,\delta_{l',l}\,\delta_{m',m-1}. \tag{84d}$$

5.3 Сферические функции

Сферические функции $Y_l^{(m)}(\theta,\, \varphi) = \langle\, \theta,\, \varphi\,|\,l,\, m\,\rangle$ — это представление собственных состояний операторов $\hat{\mathbf{l}}^2$, $\hat{\mathrm{l}}_z$ в сферических координатах[6]. Они являются собственными функциями операторов (здесь $\mathbf{r} = (r\sin\theta\cos\phi,\, r\sin\theta\sin\phi,\, r\cos\theta)$):

$$\hat{\mathbf{l}}^2_{Sph} = -\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}; \qquad \hat{\mathrm{l}}_z^{Sph} = -i\frac{\partial}{\partial\varphi}. \tag{85a}$$

$$\hat{\mathbf{l}}^2_{Sph}\,Y_l^{(m)}(\theta,\, \varphi) = l(l+1)\,Y_l^{(m)}(\theta,\, \varphi); \qquad \hat{\mathrm{l}}_z^{Sph}\,Y_l^{(m)}(\theta,\, \varphi) = m\,Y_l^{(m)}(\theta,\, \varphi). \tag{85b}$$

Четность сферических функций определяется значением l, см. (81):

$$\hat{\mathrm{I}}\,Y_l^{(m)}(\theta,\, \varphi) = Y_l^{(m)}(-\mathbf{n}) = (-1)^l\,Y_l^{(m)}(\theta,\, \varphi), \qquad \text{где } \mathbf{n} = \tfrac{\mathbf{r}}{r}. \tag{86}$$

[6]Определения сферических функций в разных источниках могут отличаться знаками или фазовыми множителями.

5.3.1 Сферические функции для $l = 0,\, 1$.

Угловые зависимости сферических функций разделяются: $Y_l^{(m)}(\theta,\,\varphi) = e^{im\varphi}\,\Theta_l^{(m)}(\theta)$. При $l = 0,\, 1$, сферические функции равны:

$$Y_0^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \qquad Y_1^{(0)} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta, \qquad Y_1^{(\pm1)} = \pm\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{\pm i\varphi}. \tag{87}$$

5.3.2 Построение сферических функций (*)

Соотношения (84) позволяют найти сферические функции для любых l и m Вначале нужно решить систему уравнений, аналогичную соотношению (74) для гармонического осциллятора. Поскольку $\hat{\mathrm{l}}_-\,|\,l,\,-l\,\rangle = 0$, в координатном пространстве функция $Y_l^{(-l)}(\theta,\,\varphi)$ удовлетворяет уравнениям:

$$\hat{\mathrm{l}}_-^{Sph}\, Y_l^{(-l)}(\theta,\,\varphi) \;=\; -e^{-i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} - i\cot\theta\,\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) Y_l^{(-l)}(\theta,\,\varphi) = 0; \tag{88a}$$

$$\hat{\mathrm{l}}_z^{Sph}\, Y_l^{(-l)}(\theta,\,\varphi) \;=\; -i\frac{\partial}{\partial\varphi}\, Y_l^{(-l)}(\theta,\,\varphi) = -l\, Y_l^{(-l)}(\theta,\,\varphi). \tag{88b}$$

Далее, последовательно действуя оператором $\hat{\mathrm{l}}_+^{Sph} = e^{i\varphi}\,(\partial_\theta + i\cot\theta\,\partial_\varphi)$, получаем функции для других m.

5.4 Оператор конечных вращений

Этот оператор отвечает за изменения состояний и всех наблюдаемых векторных и тензорных величин при пространственных поворотах системы. Он очень похож на операторы сдвига и буста из раздела 3.3.1.

Оператор $\hat{\mathrm{R}}_{\mathbf{n}}(\alpha)$ поворота вокруг оси $\mathbf{n}$ на угол α можно выразить через оператор углового момента $\hat{\mathbf{l}}$. Так же как операторы сдвигов, он не эрмитов:

$$\hat{\mathrm{R}}_{\mathbf{n}}(\alpha) = \exp -i\alpha(\mathbf{n},\,\hat{\mathbf{l}}), \qquad \text{причем} \qquad \hat{\mathrm{R}}^+{}_{\mathbf{n}}(\alpha) = \hat{\mathrm{R}}_{\mathbf{n}}(-\alpha). \tag{89}$$

В координатном представлении оператор поворота вокруг оси z действует на волновую функцию так:

$$\hat{\mathrm{R}}_{0z}(\alpha)\,\psi(\varphi) = \langle\,\varphi\,|\;\hat{\mathrm{R}}_{0z}(\alpha)\cdot\psi\,\rangle = \langle\,\hat{\mathrm{R}}^+{}_{0z}(\alpha)\cdot\varphi\,|\,\psi\,\rangle = \langle\,\varphi-\alpha\,|\,\psi\,\rangle = \psi(\varphi-\alpha). \tag{90}$$

6 Теория спина Паули

6.1 Матрицы Паули

Матрицы Паули и единичная матрица $\mathbf{1}$:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{91}$$

Произведение, коммутатор и антикоммутатор матриц Паули:

$$\sigma_i\sigma_j = \delta_{ij}\cdot\mathbf{1} + i\,\varepsilon_{ijk}\,\sigma_k; \qquad [\sigma_i,\,\sigma_j] = 2i\,\varepsilon_{ijk}\,\sigma_k; \qquad \{\sigma_i,\,\sigma_j\} = 2\delta_{ij}\cdot\mathbf{1}. \tag{92}$$

Формула Эйлера для матриц Паули ($\mathbf{n}$ — единичный вектор):

$$\exp(i\,\varphi\,(\mathbf{n},\,\boldsymbol{\sigma})) = \cos\varphi\cdot\mathbf{1} + i\sin\varphi\cdot(\mathbf{n},\,\boldsymbol{\sigma}). \tag{93}$$

Соотношения ортогональности для матриц Паули. Для любых a, b,

$$\frac{1}{2}\,\mathrm{tr}\,\sigma_a\sigma_b = \delta_{ab} \qquad \text{и} \qquad \frac{1}{2}\,\mathrm{tr}\,\mathbf{1}\cdot\sigma_a = 0; \quad \text{очевидно, что} \quad \frac{1}{2}\,\mathrm{tr}\,\mathbf{1} = 1. \tag{94}$$

6.2 Оператор спина

Коммутационные соотношения для операторов спина такие же, как для операторов углового момента:

$$\left[\hat{\mathbf{S}}_i,\,\hat{\mathbf{S}}_j\right] = i\varepsilon_{ijk}\,\hat{\mathbf{S}}_k, \qquad \text{и} \qquad \left[\hat{\mathbf{S}}^2,\,\hat{\mathbf{S}}_i\right] = 0. \tag{95}$$

Полный набор коммутирующих операторов состоит из $\hat{\mathbf{S}}_z$ и $\hat{\mathbf{S}}^2$ Их собственные числа равны соответственно $\pm\frac{1}{2}\hbar$ и $\frac{3}{4}\hbar^2$.
Общие собственные состояния операторов $\hat{\mathbf{S}}_z$, $\hat{\mathbf{S}}^2$ для $s_z = \pm\frac{1}{2}$ обозначаются

$$|\,\frac{1}{2}\,\rangle = |\,+\,\rangle = |\,\uparrow\rangle \qquad \text{и} \qquad |\,-\frac{1}{2}\,\rangle = |\,-\,\rangle = |\,\downarrow\rangle, \qquad \text{причем} \qquad \langle\,\alpha\,|\,\beta\,\rangle = \delta_{\alpha\beta}. \tag{96}$$

Матричное представление оператора спина ($\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x,\,\sigma_y,\,\sigma_z)$):

$$\hat{\mathbf{S}} = \hbar\cdot\hat{\mathbf{s}} = \frac{\hbar}{2}\cdot\boldsymbol{\sigma}, \qquad \text{причем} \qquad \hat{\mathbf{S}}^2 = \frac{3\,\hbar^2}{4}\cdot\mathbf{1}. \tag{97}$$

Спиновые функции *(спиноры)*:

$$\chi_{+1/2} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \alpha, \qquad \text{для} \qquad s_z = \frac{1}{2}; \tag{98a}$$

$$\chi_{-1/2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \beta, \qquad \text{для} \qquad s_z = -\frac{1}{2}. \tag{98b}$$

Вектор поляризации (направление спина)

$$\mathbf{P} = \langle\mathbf{P}\rangle_\chi = \langle\,\chi\,|\boldsymbol{\sigma}|\,\chi\,\rangle; \qquad \text{причем} \qquad \forall\langle\,\chi\,|, \quad \mathbf{P}^2 = 1. \tag{99}$$

Оператор конечных вращений $\hat{\mathrm{R}}_{\mathbf{n}}^{Spin}(\alpha)$, действуя на состояние $|\,\chi\,\rangle$, поворачивает вектор поляризации вокруг направления $\mathbf{n}$ на угол α. Формула аналогична (89):

$$\hat{\mathrm{R}}_{\mathbf{n}}^{Spin}(\alpha) = \exp(-i\,\alpha\,(\mathbf{n},\,\hat{\mathbf{s}})) = \exp(-\frac{i\,\alpha}{2}\,(\mathbf{n},\,\boldsymbol{\sigma})), \qquad \text{см. (93).} \tag{100}$$

7 Задача двух тел.

7.1 Разделение переменных

В задаче о свободном движении двух тел с парным взаимодействием $U(\mathbf{r}_1,\,\mathbf{r}_2) = U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$ переменные разделяются так же, как в классическом случае:

$$\hat{\mathrm{H}} = -\frac{\hbar^2\Delta_1}{2m_1} - \frac{\hbar^2\Delta_2}{2m_2} + U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) = \hat{\mathrm{H}}_R + \hat{\mathrm{H}}_r\,. \tag{101}$$

Центр масс (ЦМ) движется свободно ($\mathbf{R}$ — координата ЦМ, M — полная масса):

$$\hat{\mathrm{H}}_R = -\frac{\hbar^2\Delta_R}{2M}, \quad \text{где} \quad \mathbf{R} = \frac{m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2}{m_1+m_2}, \quad \text{и} \quad M = m_1 + m_2. \tag{102}$$

Задача об относительном движении тел в системе ЦМ эквивалентна задаче о движении частицы в поле неподвижного центра

$$\hat{\mathrm{H}}_r = \frac{\hbar^2\Delta_r}{2\mu} + U(r), \quad \text{где} \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \quad \text{и} \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1+m_2}; \tag{103}$$

Величина μ называется *приведенной массой.*

7.2 Центральное поле

В центральном поле (103) сохраняется орбитальный момент вращения:

$$\left[\hat{\mathrm{H}}_r,\,\hat{\mathbf{L}}\right] = 0, \qquad \text{и} \qquad \left[\hat{\mathrm{H}}_r,\,\hat{\mathbf{L}}^2\right] = 0. \tag{104}$$

Состояния определяются набором 3-х квантовых чисел: $|\,E,\,l,\,m\,\rangle$, где $m = l_z$. Они нормированы условием

$$\langle\,E,\,l,\,m\,|\,E',\,l',\,m'\,\rangle = \delta_{l\,l'}\,\delta_{m\,m'}\,\delta(E,\,E'). \tag{105}$$

При $E \geqslant U(\infty)$ спектр непрерывный, а при $E < U(\infty)$ — дискретный.

В сферических координатах Гамильтониан (103) имеет вид:

$$\hat{\mathrm{H}}_r = -\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\underbrace{\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)}_{-\hat{\mathrm{l}}^2,\ \text{см. (85).}} + U(r); \tag{106}$$

или, что то же, ($\hat{\mathrm{U}}_{cf}$ — так называемый центробежный барьер):

$$\hat{\mathrm{H}}_r = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + U(r) + \hat{\mathrm{U}}_l, \qquad \text{очевидно, что} \qquad \hat{\mathrm{U}}_l = \frac{\hbar^2\,\hat{\mathbf{l}}^2}{2\mu r^2} \geqslant 0. \tag{107}$$

Граничные условия на волновую функцию ($M > 0$ — число),

$$|\psi(r\to 0)| < M, \qquad \text{и} \qquad \psi(r\to\infty) = 0. \tag{108}$$

В сферических координатах переменные разделяются, и собственные функции имеют вид:

$$\psi_{E\,l\,m}(r,\,\theta,\,\varphi) = \langle\, r,\,\theta,\,\varphi\,|\,E,\,l,\,m\,\rangle = \frac{1}{r}\chi_{E\,l}(r)\,Y_l^{(m)}(\theta,\,\varphi), \tag{109}$$

причем *радиальная часть* $\chi_{E\,l}(0) = 0$ и $|\chi_{E\,l}(r\to\infty)| < M'$. Уравнение для радиальной части:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial r^2}\chi_{E\,l}(r) + \left[U(r) + \frac{\hbar^2\,l(l+1)}{2\mu r^2}\right]\chi_{E\,l}(r) = E\chi_{E\,l}(r) \tag{110}$$

При $r\to 0$ в физических задачах волновая функция $\chi_{E\,l}\propto r^{l+1}$.

Четность решений определяется функцией $Y_l^{(m)}(\theta,\,\varphi)$ и зависит только от l, см. (86):

$$\hat{\mathrm{I}}\,\psi_{E\,l\,m}(r,\,\theta,\,\varphi) = (-1)^l\,\psi_{E\,l\,m}(r,\,\theta,\,\varphi). \tag{111}$$

8 Кулоново поле.

Кулоново взаимодействие — основа атомной физики. Уровни энергии и волновые функции заряда в кулоновом поле можно найти точно.

8.1 Масштабы величин

Гамильтониан частицы массы m в кулоновом потенциале $U(r) = -\frac{C}{r}$ равен

$$\hat{\mathrm{H}}_C = -\frac{\hbar^2\Delta}{2m} - \frac{C}{r}. \tag{112}$$

В водородоподобных ионах $m = \mu \approx m_e$, а $C = Ze^2$, где Ze — заряд ядра.
Характерные масштабы величин таковы (a_B — Боровский радиус, см. раздел 1):

- расстояния
$$r_C = \frac{\hbar^2}{mC} \approx \frac{\hbar^2}{Zm_e e^2} = \frac{a_B}{Z}. \tag{113}$$
- импульса
$$p_C = \frac{\hbar}{r_C} = \frac{mC}{\hbar} \approx \frac{Zm_e e^2}{\hbar}; \tag{114}$$
- скорости:
$$v_C = \frac{\hbar}{mr_C} = \frac{C}{\hbar} = Z\alpha c \approx \frac{Zc}{137}; \tag{115}$$
- энергии:
$$E_C = \frac{C}{r_C} = \frac{mC^2}{\hbar^2} \approx \frac{Z^2e^2}{a_B} = \frac{Z^2 m_e e^4}{\hbar^2} = 2Z^2\,\mathrm{Ry}. \tag{116}$$

8.2 Волновые функции связанных состояний

8.2.1 Уравнение Шредингера, дискретный спектр

Гамильтониан в сферических координатах, см. (106):

$$\hat{\mathrm{H}}_C = -\frac{\hbar^2}{2mr^2}\,\Delta - \frac{C}{r} = \frac{\hbar^2}{2mr^2}\left(-\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} + \hat{\mathbf{l}}^2\right) - \frac{C}{r}. \tag{117}$$

Стационарное уравнение Шредингера в безразмерных переменных:

$$-\frac{1}{2}\Delta_\rho\,\psi(\vec{\rho}) - \frac{1}{\rho}\,\psi(\vec{\rho}) = \varepsilon\,\psi(\vec{\rho}), \quad \text{где} \quad \vec{\rho} = \frac{\vec{r}}{r_C} \quad \text{и} \quad \varepsilon = \frac{E}{E_C} < 0. \tag{118}$$

Уравнение для радиальной части $\chi(\rho) = \frac{\psi(\rho)}{\rho}$ и асимптотики волновой функции:

$$\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}\,\chi_{\varepsilon\,l}(\rho) + \left[\frac{2}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]\chi_{\varepsilon\,l}(r) + 2\varepsilon\chi_{\varepsilon\,l}(\rho) = 0. \tag{119}$$

$$\chi_{\varepsilon\,l}(\rho\to 0) \sim \rho^{l+1} \qquad \text{и} \qquad \chi_{\varepsilon\,l}(\rho\to\infty) \sim e^{\pm\sqrt{2|\varepsilon|}\rho}.$$

Чтобы выделить в явном виде асимптотики, делаем подстановку $\chi(\rho) \to (\ldots)w(z)$ и подгоняем коэффициенты перед производными заменой переменной $(\ldots)\rho \to z$:

$$\chi_{\varepsilon\,l}(\rho) = \rho^{l+1}e^{-\sqrt{2|\varepsilon|}\rho}w_{\varepsilon\,l}(z) \propto z^{l+1}e^{-\frac{z}{2}}w_{\varepsilon\,l}(z), \qquad \text{и} \qquad z = 2\sqrt{2|\varepsilon|}\rho. \tag{120}$$

После этого уравнение принимает канонический вид:

$$z\frac{d^2}{dz^2}w_{\varepsilon\,l}(z) + (2l+2-z)\,\frac{d}{dz}w_{\varepsilon\,l}(z) + \left(\frac{1}{\sqrt{2|\varepsilon|}} - l - 1\right)w_{\varepsilon\,l}(z) = 0. \tag{121}$$

Это гипергеометрическое уравнение с $\alpha = l + 1 - (2\varepsilon)^{-\frac{1}{2}}$ и $\gamma = 2l+2$, см. раздел 8.3.
В силу свойства (132) решения уравнения (119), как правило, экспоненциально растут при $\rho\to\infty$. Они ограничены только для неположительных целых $\alpha = -n_r \leqslant 0$, при которых ряд (130) обрывается.
Число $n_r = 0,\,1,\,\ldots$ — это число нулей радиальной волновой функции[7]. Оно называется *радиальным квантовым числом.*

Главное квантовое число (номер уровня) $n = n_r + l + 1 \geqslant 1$ тоже целое.

Зависимость уровней энергии от главного квантового числа n:

$$\varepsilon_n = -\frac{1}{2n^2}, \quad \text{или в размерных единицах} \quad E_n(Z) = -\frac{E_C}{2n^2} = -\frac{Z^2}{n^2}\,\mathrm{Ry}. \tag{122}$$

8.2.2 Волновые функции

Явный вид решения уравнения (119) для данных l и n_r $(n = n_r + l + 1)$:

$$\chi_{\varepsilon\,l}(\rho) \propto \rho^{l+1}\exp -\left(\frac{\rho}{n}\right)\cdot F(-n_r,\,2l+2,\,\frac{2\rho}{n}), \quad \text{где} \quad \varepsilon = \varepsilon_n = -\frac{1}{2n^2}. \tag{123}$$

[7]Это следует из осцилляционной теоремы, примененной к радиальному уравнению (118).

Координатное представление волновой функции:

$$\psi_{nlm}(\rho,\,\theta,\,\varphi), = R_{nl}(\rho)\,Y_l^{(m)}(\theta,\,\varphi), \qquad \text{где} \qquad R_{nl}(\rho) = \frac{1}{\rho}\,\chi_{\varepsilon\,l}(\rho). \tag{124}$$

Радиальную компоненту $R_{nl}(\rho)$ можно также выразить через обобщенные полиномы Лагерра (131)

$$R_{nl}(\rho) = C_{nl}\,\rho^l\,e^{-\rho/n}F(-n_r,\,2l+2,\,\frac{2\rho}{n}) = C'_{nl}\,\rho^l\,e^{-\rho/n}L_{n_r}^{2l+1}(2\rho/n). \tag{125}$$

Связь между нормировочными постоянными C_{nl} и C'_{nl} задается равенством (131a). Вычислить их можно, исходя из условия нормировки в дискретном спектре:

$$\iiint d^3\mathbf{r}\,\psi^*_{n\,l\,m}(\mathbf{r})\,\psi_{n'\,l'\,m'}(\mathbf{r}) \,= \delta_{n\,n'}\,\delta_{l\,l'}\,\delta_{m\,m'}. \tag{126}$$

Четность решений зависит только от величины момента и равна $(-1)^l$.

8.2.3 Волновые функции низших состояний

Ниже приведены явные выражения для волновых функция состояний с $n = 1,\,2$. Сферические функции $Y_l^{(m)}$ можно найти в (87). Восстановлены размерности физических переменных, см. раздел 8.1 и (118).

$$\psi_{100}(r,\,\theta,\,\phi) = \frac{2}{\sqrt{r_C^3}}\,e^{-\frac{r}{r_C}}\,Y_0^{(0)}(\theta,\,\phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi r_C^3}}\,e^{-\frac{r}{r_C}}; \tag{127a}$$

$$\psi_{200}(r,\,\theta,\,\phi) = \frac{1}{\sqrt{2r_C^3}}\left(1-\frac{r}{2r_C}\right)\,e^{-\frac{r}{2r_C}}\,Y_0^{(0)}(\theta,\,\phi); \tag{127b}$$

$$\psi_{21m}(r,\,\theta,\,\phi) = \frac{1}{\sqrt{6r_C^3}}\,\frac{r}{2r_C}\,e^{-\frac{r}{2r_C}}\,Y_1^{(m)}(\theta,\,\phi). \tag{127c}$$

8.3 Вырожденная гипергеометрическая функция

Вырожденное гипергеометрическое уравнение (уравнение Куммера):

$$zy'' + (\gamma - z)\,y' - \alpha y = 0, \tag{128}$$

имеет два решения:

$$y_1 = F(\alpha,\,\gamma,\,z), \qquad \text{и при нецелых } \gamma \qquad y_2 = z^{1-\gamma}\,F(\alpha-\gamma+1,\,2-\gamma,\,z). \tag{129}$$

Здесь $F(\alpha,\,\gamma,\,z)$ — вырожденная гипергеометрическая функция:

$$F(\alpha,\,\gamma,\,z) = 1 + \frac{\alpha}{\gamma}\frac{z}{1!} + \frac{\alpha(\alpha+1)}{\gamma(\gamma+1)}\frac{z^2}{2!} + \dots\,. \tag{130}$$

При целых отрицательных $\alpha = -n$ ряд обрывается, и $F(-n,\,\gamma,\,z)$ выражается через обобщенный полином Лагерра $L_n^{(\gamma-1)}(z)$ порядка n:

$$L_n^{(\gamma-1)}(z) = \frac{\Gamma(n+\gamma)}{n!\,\Gamma(\gamma)}\,F(-n,\,\gamma,\,z); \tag{131a}$$

$$L_n^{(\gamma-1)}(z) = x^{1-\gamma}e^x\,\frac{1}{n!}\left(\frac{d}{dx}\right)^n(x^{n+\gamma-1}e^{-x}). \tag{131b}$$

В общем случае, то есть при $\alpha \neq -n$ ($n \geqslant 0$ — целое), гипергеометрическая функция экспоненциально растет при больших z:

$$F(\alpha,\, \gamma,\, z \to \infty) \sim \exp z. \qquad (132)$$

9 Квазиклассическое (WKB) приближение

Классический импульс частицы с энергией E в потенциале $U(x)$:

$$p(x,\,E) = \sqrt{2m|E - U(x)|}. \tag{133}$$

Точки поворота разграничивают классически разрешенные и запрещенные области. Они определяются условием $U(x) = E$.

Критерий применимости квазиклассического приближения:

$$\left|\frac{d\lambda\!\!\!^{-}}{dx}\right| = \left|\frac{\hbar p'}{p^2}\right| \ll 1, \qquad \text{где} \qquad \lambda\!\!\!^{-}(x) = \frac{\hbar}{p(x)}. \tag{134}$$

Очевидно, что в точках поворота $p(x,\,E) = 0$, и это неравенство не выполняется.

9.1 Волновые функции (общее решение)

Волновые функции в классически разрешенной, $E > U(x)$, области (произвол в выборе x_0 компенсируется зависимостью постоянных $C^{\pm}$ от x_0):

$$\psi(x,\,E) = \frac{C^+}{\sqrt{p(x,\,E)}} \exp \frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^{x} p(y,\,E)\,dy + \frac{C^-}{\sqrt{p(x,\,E)}} \exp -\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^{x} p(y,\,E)\,dy. \tag{135a}$$

Волновые функции в классически запрещенной, $E < U(x)$, области (постоянные C_{left}, C_{right} определяются значениями x_0^l и x_0^r):

$$\psi(x,\,E) = \frac{C_{\text{left}}}{\sqrt{p(x,\,E)}} \exp \frac{1}{\hbar} \int_{x_0^l}^{x} p(y,\,E)\,dy + \frac{C_{\text{right}}}{\sqrt{p(x,\,E)}} \exp -\frac{1}{\hbar} \int_{x_0^r}^{x} p(y,\,E)\,dy. \tag{135b}$$

Значения постоянных определяются условиями на границах и в точках поворота и нормировкой волновой функции.

9.2 Финитное движение (частица в потенциальной яме)

Пусть $U(x) \leqslant E$ при $x \in [a,\,b]$, где $a,\,b$ — точки поворота: $U(a) = U(b) = E$. Тогда *волновая функция* внутри ямы равна

$$\psi(x,\,E) = \frac{C_{\text{in}}}{\sqrt{p(x,\,E)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^x p(y,\,E)\,dy + \frac{\pi}{4}\right), \qquad \text{при} \qquad x \in (a,\,b). \tag{135c}$$

Если в соотношениях (135b) $x_0^l = a$ и $x_0^r = b$, то постоянные нормировки в классически разрешенной и запрещенных областях связаны, $C_{\text{left}} = (-1)^n C_{\text{right}} = \frac{1}{2}C_{\text{in}}$.

Правило Бора–Зоммерфельда для финитного движения в потенциальной яме:

$$\Gamma(E_n) = \oint_T p(x,\,E_n)\,dx = 2\int_a^b p(x,\,E_n)\,dx = 2\pi\hbar(n + 1/2), \qquad \text{при} \qquad n \gg 1. \tag{136}$$

Фазовый объем на одно состояние: $\Delta\Gamma = 2\pi\hbar$.

Нормировка волновых функций в потенциальной яме:

$$C_{\text{in}} = \sqrt{\frac{2\omega(E)m}{\pi}}, \quad \text{где} \quad \omega(E) = \frac{2\pi}{T(E)} \text{ — частота классических колебаний.} \tag{137}$$

Расстояние между уровнями энергии в потенциальной яме

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n \approx \hbar\omega(E_n), \qquad \text{при} \qquad \hbar\frac{d\omega}{dE} \ll 1. \tag{138}$$

9.3 Тунеллирование

При энергии $E > U(\pm\infty)$ движение инфинитное, и при $x \to \pm\infty$ волновая функция имеет вид (135a). Вычисленный согласно (64b) *поток вероятности* в каждой из классически доступных областей равен (постоянные $C^{\pm}$ размерные):

$$j(x) = j^{+}(x) - j^{-}(x) = \frac{1}{m}\left(|C^{+}|^{2} - |C^{-}|^{2}\right). \tag{139}$$

Поток сохраняется и одинаков везде, где $E > U$, и справедлива формула (135a).

Задача о тунеллировании потока частиц, падающего слева на классически непроницаемый ($U(x) > E$) потенциальный барьер, задается граничными условиями:

$$j^{+}(-\infty) \geqslant j^{-}(-\infty) \geqslant 0; \quad j^{+}(\infty) = j^{+}(-\infty) - j^{-}(-\infty) \geqslant 0; \quad \text{и} \quad j^{-}(\infty) = 0. \tag{140}$$

Применимость квазиклассического приближения предполагает, что проницаемость потенциального барьера мала, то есть $j^{+}(-\infty) \gg j^{+}(\infty)$ и $j^{+}(-\infty) \approx j^{-}(-\infty)$.

В этом приближении *коэффициент тунеллирования* равен:

$$D = \frac{j^{+}(\infty)}{j^{+}(-\infty)} = \frac{|C^{+}|^{2}(\infty)}{|C^{+}|^{2}(-\infty)} \approx \exp\left\{-\frac{2}{\hbar}\int_{a}^{b} p(x,\,E)\,dx\right\} \ll 1. \tag{141}$$

Здесь $p(x,\,E) = \sqrt{2m(U(x)-E)}$, а a, b — границы классически недоступной области.

Формула (141) применима при $\frac{2}{\hbar}\int_{a}^{b} p(x,\,E)\,dx \gg 1$ и верна с точностью до порядка.

10 Стационарная теория возмущений

Гамильтониан, собственные состояния и уровни энергии невозмущенной задачи.

$$\hat{\mathrm{H}} = \hat{\mathrm{H}}_0, \qquad \text{и} \qquad \hat{\mathrm{H}}_0\,|\,n^{(0)}\,\rangle = E_n^{(0)}|\,n^{(0)}\,\rangle; \qquad \text{где} \qquad \hat{\mathrm{H}}_0 = const. \tag{142}$$

Оператор постоянного возмущения $\hat{\mathrm{V}} = \hat{\mathrm{V}}^{+} = const$. Гамильтониан с учетом возмущения, его уровни энергии и собственные векторы:

$$\hat{\mathrm{H}}(\lambda) = \hat{\mathrm{H}}_0 + \lambda\,\hat{\mathrm{V}}, \qquad \text{и} \qquad (\hat{\mathrm{H}}_0 + \lambda\,\hat{\mathrm{V}})|\,n(\lambda)\,\rangle = E_n(\lambda)|\,n(\lambda)\,\rangle. \tag{143}$$

Безразмерный вещественный параметр λ позволяет провести интерполяцию между исходной и возмущенной задачами.

Мы будем предполагать, что уровни энергии $E_n(\lambda)$ и собственные вектора $|\,n(\lambda)\,\rangle$ зависят от λ регулярным образом. Кроме того, будем считать, что система собственных состояний $\hat{\mathrm{H}}_0$ остается полной при наложении возмущения:

$$\langle\,\underbrace{n(\lambda)\,|\,n(\lambda)}\,\rangle = \langle\,\underbrace{n^{(0)}\,|\,n^{(0)}}\,\rangle = \hat{\mathbb{1}}\,. \tag{144}$$

Теория возмущений ищет приближения к $E_n(\lambda)$ и $|\,n(\lambda)\,\rangle$ в виде частичных сумм рядов Тейлора в точке $\lambda = 0$. Степень λ определяет порядок приближения:

$$|\,n\,\rangle \;=\; |\,n^{(0)}\,\rangle + |\,\Delta n\,\rangle = |\,n^{(0)}\,\rangle + \lambda|\,n^{(1)}\,\rangle + \lambda^{2}|\,n^{(2)}\,\rangle + \ldots; \tag{145a}$$

$$E_n \;=\; E_n^{(0)} + \Delta E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^{2} E_n^{(2)} + \ldots. \tag{145b}$$

Далее речь пойдет о поправках к состояниям дискретного спектра. При этом базисом будут служить исходные состояния $|\,n^{(0)}\,\rangle$, поэтому везде матричные элементы

$$V_{nk} = V_k^n = \langle\,n^{(0)}\,|\,\hat{\mathrm{V}}\,|\,k^{(0)}\,\rangle. \tag{146}$$

10.1 Невырожденная теория возмущений

Пусть спектр исходного гамильтониана $\hat{\mathrm{H}}_0$ не вырожден. Выделим из $\hat{\mathrm{V}}$ диагональную и недиагональную в собственном базисе $\hat{\mathrm{H}}_0$ части. Пусть $\hat{\mathrm{V}} = \hat{\mathrm{A}} + \hat{\mathrm{B}}$, где

$$\hat{\mathrm{A}} = |\, \underbrace{n^{(0)} \,\rangle\, V_{nn} \,\langle\, n^{(0)}}_{} \,|; \qquad \text{очевидно, что} \qquad \forall n, \quad V_{nn} = A_{nn} \quad \text{и} \quad B_{nn} = 0. \tag{147}$$

10.1.1 Первая поправка к уровням энергии

В первом порядке диагональная компонента возмущения $\hat{\mathrm{A}}$ не влияет на собственные состояния гамильтониана. Она лишь сдвигает собственные значения:

$$E_n^{(1)} = A_{nn} = V_{nn}. \tag{148}$$

Далее диагональная часть сказывается, начиная с $|\, n^{(2)} \,\rangle$ и $E_n^{(3)}$.

10.1.2 Первая поправка к состояниям

Для краткости положим $\hat{\mathrm{A}} = 0$. Уравнение Шредингера (143) можно записать, используя оператор, обратный невозмущенному оператору Шредингера:

$$|\, \psi \,\rangle = |\, \widetilde{\psi} \,\rangle - \frac{\hat{\mathbb{1}}}{\hat{\mathrm{H}}_0 - E}\, \lambda\, \hat{\mathrm{B}}\, |\, \psi \,\rangle, \qquad \text{где} \qquad (\hat{\mathrm{H}}_0 - E)|\, \widetilde{\psi} \,\rangle = 0. \tag{149}$$

Подставим сюда выражения (145) для E и $|\, \psi \,\rangle$. В главном порядке (при $\lambda = 0$) это даст $|\, \widetilde{\psi} \,\rangle = |\, n^{(0)} \,\rangle$, и $E = E_n^{(0)}$, то есть (142).

В следующем, первом, порядке добавки к состояниям равны:

$$|\, n^{(1)} \,\rangle = -\frac{1}{\hat{\mathrm{H}}_0 - E_n^{(0)}} \cdot \hat{\mathrm{B}}\, |\, n^{(0)} \,\rangle = |\, \underbrace{k^{(0)} \,\rangle\langle\, k^{(0)}}_{} \,| \frac{1}{E_n^{(0)} - \hat{\mathrm{H}}_0}\, \hat{\mathrm{B}}\, |\, n^{(0)} \,\rangle = \sum_{k \neq n} |\, k^{(0)} \,\rangle \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}. \tag{150}$$

Поскольку $k \neq n$, поправка ортогональна исходному состоянию: $\langle\, n^{(0)} \,|\, n^{(1)} \,\rangle = 0$. Она влияет на нормировку состояний только во втором порядке:

$$||(\langle\, n^{(0)} \,| + \lambda \,\langle\, n^{(1)} \,|)|| = (\langle\, n^{(0)} + \lambda \cdot n^{(1)} \,|\, n^{(0)} + \lambda \cdot n^{(1)} \,\rangle)^{\frac{1}{2}} = 1 + O(\lambda^2). \tag{151}$$

10.1.3 Вторая поправка к уровням энергии

Поправка второго порядка к энергии уровня может быть выражена через найденную в (150)поправку к состоянию:

$$E_n^{(2)} = \langle\, n^{(0)} \,|\, \hat{\mathrm{B}} \,|\, n^{(1)} \,\rangle = \sum_{k \neq n} \langle\, n^{(0)} \,|\, \hat{\mathrm{B}} \,|\, k^{(0)} \,\rangle\, \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} = \sum_{k \neq n} \frac{|V_{nk}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}. \tag{152}$$

Вторая поправка к основному состоянию всегда отрицательна: $E_0^{(2)} \leqslant 0$.

10.1.4 Критерий применимости теории возмущений

Теория возмущений предполагает, что возмущение незначительно деформирует исходные состояния: $\langle\, \Delta n \,|\, \Delta n \,\rangle \ll 1$, см. (145a). *Необходимым* условием этого в первом приближении является малость всех слагаемых в сумме (150).

$$\forall k \neq n, \qquad \lambda \,|V_{kn}| = \lambda \langle\, k^{(0)} \,|\, \hat{\mathrm{V}} \,|\, n^{(0)} \,\rangle \ll \left| E_k^{(0)} - E_n^{(0)} \right|. \tag{153}$$

Теорема Лагранжа утверждает, что n-кратно дифференцируемую вблизи точки a функцию можно представить в виде конечной суммы:

$$f(x) = \sum_{k=0}^{n-1} \left.\frac{d^k f(x)}{dx^k}\right|_{x=a} \frac{(x-a)^k}{k!} + \left.\frac{d^n f(x)}{dx^n}\right|_{x=a+\xi(x-a)} \frac{(x-a)^n}{n!}, \quad \text{где} \quad 0 < \xi < 1. \tag{154}$$

Это значит, что в общем случае точность найденных по теории возмущений поправок дается первым отброшенным членом ряда по λ.

10.2 Вырожденный случай

Пусть энергетический спектр $\hat{\mathrm{H}}_0$ содержит N-кратно ($N \geqslant 2$) вырожденное значение, $E_1^{(0)} = \ldots = E_N^{(0)}$. Если для двух вырожденных по энергии состояний матричный элемент $V_{n\,k} \neq 0$, то критерий применимости теории возмущений (153) нарушен.

Решить проблему позволяет неоднозначность выбора собственных состояний Гамильтониана в вырожденном секторе.

Правильные состояния основного приближения $|\, \tilde{n}^{(0)} \,\rangle = \sum_{k=1}^{N} c_k^{\tilde{n}} \,|\, k^{(0)} \,\rangle$, где $1 \leqslant \tilde{n} \leqslant N$, диагонализуют оператор возмущения $\hat{\mathrm{V}}$ в вырожденном секторе:

$$\hat{\mathrm{V}} \,|\, \tilde{n}^{(0)} \,\rangle = E_n^{(1)} \,|\, \tilde{n}^{(0)} \,\rangle, \quad \text{где} \quad \langle\, \tilde{n}^{(0)} \,|\, \tilde{k}^{(0)} \,\rangle = \delta_{\tilde{n}\tilde{k}}. \tag{155}$$

Диагональная часть возмущения $\hat{\mathrm{A}}$ определяется при $0 \leqslant n \leqslant N$ собственными числами матрицы, составленной из элементов $V_{\tilde{n}\,\tilde{k}} = \langle\, \tilde{n} \,|^{(0)} \,\hat{\mathrm{V}}\, |\, \tilde{k}^{(0)} \,\rangle$. Они, в свою очередь, удовлетворяют характеристическому уравнению

$$\det \|V_{n\,k} - E_n^{(1)} \delta_{n\,k}\| = 0, \qquad \text{и} \qquad \hat{\mathrm{A}} = \sum_{k=0}^{N} |\, \tilde{k}^{(0)} \,\rangle\, E_k^{(1)} \,\langle\, \tilde{k}^{(0)} \,|. \tag{156}$$

Очевидно, что $B_{\tilde{n}\tilde{k}} \equiv 0$ в вырожденном секторе, то есть при $0 \leqslant n,\ k \leqslant N$.

После перехода к правильному базису основного приближения вычисление поправок $|\, \tilde{n}^{(1)} \,\rangle$ к состояниям и $E_n^{(2)}$ к энергиям выполняется, как в невырожденном случае.

11 Нестационарная теория возмущений

Гамильтониан невозмущенной задачи $\hat{\mathrm{H}}_0 = const$. Он может иметь *как дискретный, так и непрерывный* спектр. В момент $t = 0$ включают возмущение $\lambda\, \hat{\mathrm{V}}(t)$. Полный гамильтониан включает постоянную главную часть и зависящее от времени возмущение:

$$\hat{\mathrm{H}}(t) = \hat{\mathrm{H}}_0 + \lambda\, \hat{\mathrm{V}}(t), \quad \text{причем} \quad \hat{\mathrm{H}}_0 = const, \quad \text{и} \quad \hat{\mathrm{H}}_0 \,|\, n^{(0)} \,\rangle = E_n^{(0)} |\, n^{(0)} \,\rangle. \tag{157}$$

При $\lambda = 0$ нестационарное уравнение Шредингера и его общее решение, см. (48) и (52), выглядят так:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\,\theta(t)\,\rangle = \hat{\mathrm{H}}_0\,|\,\theta(t)\,\rangle, \qquad \text{откуда} \qquad |\,\theta(t)\,\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}_0\,t}|\,\theta(0)\,\rangle. \tag{158}$$

Мы по-прежнему будем вычислять матричные элементы возмущения по не зависящим от времени собственным состояниям $\hat{\mathrm{H}}_0$:

$$V_k^n(t) = \langle\, n^{(0)}\,|\,\hat{\mathrm{V}}(t)|\,k^{(0)}\,\rangle, \qquad \text{где} \qquad \hat{\mathrm{H}}_0\,|\,n^{(0)}\,\rangle = E_n^{(0)}|\,n^{(0)}\,\rangle. \tag{159}$$

11.1 Представление взаимодействия

При $\lambda \neq 0$ будем искать решение нестационарного уравнения (157) в виде

$$|\,\theta(t)\,\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\,\hat{\mathrm{H}}_0\,t\right)\cdot|\,\tilde{\Theta}(t)\,\rangle. \tag{160}$$

Фактически мы варьируем постоянную, как в обычном уравнении (сравните с (158)).

Состояние *в представлении взаимодействия* $|\,\tilde{\Theta}(t)\,\rangle = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\,\hat{\mathrm{H}}_0\,t\right)\cdot|\,\theta(t)\,\rangle$ удовлетворяет уравнению

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\,\tilde{\Theta}(t)\,\rangle = \lambda\,\hat{\tilde{\mathrm{V}}}(t)\,|\,\tilde{\Theta}(t)\,\rangle, \qquad \text{причем} \qquad |\,\tilde{\Theta}(0)\,\rangle = |\,\theta(0)\,\rangle. \tag{161}$$

Оператор возмущения *в представлении взаимодействия* имеет вид:

$$\hat{\tilde{\mathrm{V}}}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}_0\,t}\;\hat{\mathrm{V}}(t)\,e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}_0\,t}. \tag{162}$$

Его матричные элементы равны ($\omega_{nk} = \frac{1}{\hbar}(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})$):

$$\tilde{V}_k^n(t) = \langle\, n^{(0)}\,|\,\hat{\tilde{\mathrm{V}}}(t)|\,k^{(0)}\,\rangle = V_k^n(t)\exp\frac{i}{\hbar}(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}) = V_k^n(t)\exp i\,\omega_{nk}t. \tag{163}$$

Состояние в представлении взаимодействия можно разложить в ряд теории возмущений: $|\,\tilde{\Theta}\,\rangle = |\,\tilde{\Theta}^{(0)}\,\rangle + \lambda|\,\tilde{\Theta}^{(1)}\,\rangle + \ldots$. Согласно (161), его последовательные члены связаны соотношением:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\,\tilde{\Theta}^{(n+1)}(t)\,\rangle = \hat{\tilde{\mathrm{V}}}(t)|\,\tilde{\Theta}^{(n)}(t)\,\rangle, \quad \text{где} \quad |\,\tilde{\Theta}^{(0)}(0)\,\rangle = |\,\theta(0)\,\rangle, \quad \text{и} \quad |\,\tilde{\Theta}^{(n\geqslant 1)}(0)\,\rangle = 0. \tag{164}$$

11.2 Первый порядок

В нулевом порядке по λ уравнение (161) тривиально:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\,\tilde{\Theta}^{(0)}(t)\,\rangle = 0, \qquad \text{то есть} \qquad |\,\tilde{\Theta}^{(0)}(t)\,\rangle = |\,\tilde{\Theta}(0)\,\rangle = |\,\theta(0)\,\rangle. \tag{165}$$

Из уравнения (164) следует, что в первом порядке

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\,\tilde{\Theta}^{(1)}(t)\,\rangle = \hat{\tilde{\mathrm{V}}}(t)|\,\tilde{\Theta}(0)\,\rangle, \qquad \text{с начальным условием} \qquad |\,\tilde{\Theta}^{(1)}(0)\,\rangle = 0. \tag{166}$$

Интегрируя, получаем в первом приближении:

$$|\,\tilde{\Theta}(\tau)\,\rangle = |\,\tilde{\Theta}^{(0)}(\tau)\,\rangle + \lambda\,|\,\tilde{\Theta}^{(1)}(\tau)\,\rangle + \ldots = \left[\hat{\mathbb{1}} - \frac{i\lambda}{\hbar}\int_0^\tau \hat{\tilde{\mathrm{V}}}(t)\,dt + O(\lambda^2)\right]|\,\theta(0)\,\rangle. \tag{167}$$

Эта формула применима при $||\lambda\,\tilde{\Theta}^{(1)}|| \ll ||\tilde{\Theta}^{(0)}|| = 1$.

11.3 Переходы между состояниями. Первый порядок

11.3.1 Общий случай

Амплитуда вероятности перехода за время τ из состояния $|\,\theta_i\,\rangle = |\,\tilde\Theta(0)\,\rangle = |\,\tilde\Theta_i\,\rangle$ в произвольное состояние $|\,\theta_f\,\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}_0\,\tau}|\,\tilde\Theta_f\,\rangle$ равна[8]

$$C_{(i\to f)}(\tau) = \langle\,\theta_f\,|\,\theta(\tau)\,\rangle = \langle\,\theta_f\,|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}_0\,\tau}\,\tilde\Theta(\tau)\,\rangle, \qquad \text{где } |\,\tilde\Theta(\tau)\,\rangle \text{ — решение (161).} \tag{168}$$

В первом приближении, согласно (167), вероятность[9] перехода равна

$$W_{(i\to f)}(\tau) = |C_{(i\to f)}(\tau)|^2 = \left|\langle\,\theta_f\,|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}_0\,\tau}\left[\hat{\mathbb{1}} - \frac{i\lambda}{\hbar}\int_0^\tau \widehat{\widetilde{\mathrm{V}}}(t)\,dt\right]|\,\theta_i\,\rangle\right|^2. \tag{169}$$

Пусть начальное и конечное состояния — собственные состояния гамильтониана $\hat{\mathrm{H}}_0$, то есть$|\,\theta_i\,\rangle = |\,i^{(0)}\,\rangle$ и $|\,\theta_f\,\rangle = |\,f^{(0)}\,\rangle$. В соответствии со (163), $W_{(i\to f)}$ можно выразить через матричный элемент возмущения:

$$W_{(i\to f)}(\tau) = \begin{cases} \left|\frac{\lambda}{\hbar}\int_0^\tau V_i^f(t)\,e^{i\omega_{fi}t}\,dt\right|^2, & \text{при } i \neq f; \\ 1 - O(\lambda^2), & \text{при } i = f. \end{cases} \tag{170}$$

11.3.2 Матричное представление

Если спектр оператора $\hat{\mathrm{H}}_0$ дискретный, $C = \varnothing$, то состояния можно представить вектор-столбцами, а операторы матрицами, см. раздел 2.3.2. Столбец, отвечающий состоянию $|\,\tilde\Theta(t)\,\rangle$, ищут в виде ряда по степеням λ:

$$|\,\tilde\Theta(t)\,\rangle = C\,\underbrace{{}^k(t)|\,k^{(0)}}\,\rangle, \qquad \text{и} \qquad C^k(t) = C^{k\,(0)}(t) + \lambda C^{k\,(1)}(t) + \dots \tag{171}$$

В силу соотношения (161), компоненты $C^k(t)$ подчиняются следующим уравнениям:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}C^k(t) = \lambda\,\widetilde{V}\,\underbrace{{}^k_m(t)\,C^m}(t), \quad \text{где} \quad C^k(0) = \langle\,k^{(0)}\,|\,\Theta(0)\,\rangle. \tag{172}$$

Согласно (163) $\widetilde{V}^k_m = e^{i\omega_{km}t}\,V^k_m(t)$.

Пусть начальное состояние — чистое: $|\,\Theta_i\,\rangle = |\,i^{(0)}\,\rangle$. В нулевом порядке имеем:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}C_i^{(0)\,k}(t) = 0, \qquad \text{то есть, согласно (172),} \qquad C_i^{(0)\,k}(t) = C_i^k(0) = \delta_{ki} \tag{173}$$

Первый порядок: В первом порядке по λ уравнения (172) принимают вид:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}C_i^{(1)\,k}(t) = \tilde{V}\,\underbrace{{}^k_m(t)\,C_i^{(0)\,m}}(t) = \tilde{V}_i^k(t), \qquad \text{причем} \qquad C_i^{(1)\,k}(0) = 0. \tag{174}$$

Поправка первого порядка к коэффициентам разложения $|\,\tilde\Theta(\tau)\,\rangle$ равна:

$$C_i^k(\tau) = \delta_i^k - \frac{i\lambda}{\hbar}\int_0^\tau e^{i\omega_{ki}t}\,V_i^k(t)\,dt + O(\lambda^2). \tag{175}$$

Это приводит к (170) для вероятности переходов между чистыми состояниями.

[8]Индексы i и f происходят от *initial* и *final* — начальный и конечный.

[9]В непрерывном спектре — плотность вероятности.

11.4 Периодические возмущения. Первый порядок

Речь пойдет о монохроматическом возмущении, которое включается при $t = 0$:

$$\hat{\mathrm{V}}(t) = \theta(t)[\hat{\mathrm{F}}\, e^{-i\omega t} + \hat{\mathrm{F}}^{+}\, e^{i\omega t}], \qquad \text{где} \qquad \omega > 0. \tag{176}$$

11.4.1 Вероятности переходов

В первом порядке амплитуда перехода между собственными состояниями $\hat{\mathrm{H}}_0$ равна,

$$C^{(1)}_{(i\to f)}(t) = -\frac{\lambda}{\hbar}\left[\frac{e^{i(\omega_{fi}-\omega)t}-1}{(\omega_{fi}-\omega)}\, F_i^f + \frac{e^{i(\omega_{fi}+\omega)t}-1}{(\omega_{fi}+\omega)}\,(F^{+})_i^f\right]. \tag{177}$$

При $\omega t \gg 1$ интерференция слагаемых мала, и доминируют *резонансные переходы* с $\omega_{fi} \approx \pm\omega$. Их вероятности определяются первым ($\hat{\mathrm{F}}\, e^{-i\omega t}$) и вторым ($\hat{\mathrm{F}}^{+}\, e^{i\omega t}$) слагаемыми (177) соответственно.

$$W_{(i\to f)}(t) \approx \frac{4\lambda^2}{\hbar^2}\,\frac{\sin^2\frac{1}{2}(\omega_{fi}-\omega)t}{(\omega_{fi}-\omega)^2}\,|F_i^f|^2, \qquad \text{при} \quad \omega_{fi}\approx\omega; \tag{178a}$$

$$W_{(i\to f)}(t) \approx \frac{4\lambda^2}{\hbar^2}\,\frac{\sin^2\frac{1}{2}(\omega_{fi}+\omega)t}{(\omega_{fi}+\omega)^2}\,|(F^{+})_i^f|^2, \quad \text{при} \quad \omega_{fi}\approx-\omega. \tag{178b}$$

Поскольку $E_f^{(0)} \approx E_i^{(0)} + \hbar\omega_{fi}$, первый переход повышает энергию, а второй — понижает. Согласно (178) ширина резонансных пиков $\Delta\omega \sim \frac{2\pi}{t}$. Они не перекрываются, если $\Delta\omega \ll \omega$, то есть, как было сказано, при $\omega t \gg 1$.

11.4.2 «Золотое правило» Ферми

Когда ширина резонансного пика (178) превосходит расстояние между уровнями энергии, происходят переходы во все состояния, близкие к $|\, f^{(0)}\,\rangle$[10]. Если точность не позволяет разделить отдельные каналы, то полная вероятность ухода из начального состояния $|\, i^{(0)}\,\rangle$ — это сумма отдельных вероятностей. Замена суммы интегралом по энергии близких конечных состояний, см. Раздел 2.1.4, дает[11]:

$$C_{(i\to f)}(t)\, C^{*}_{(i\to f)}(t) \Rightarrow \int \frac{4\lambda^2\,\sin^2\frac{1}{2\hbar}(E_f-E_i-\hbar\omega)t}{(E_f-E_i-\hbar\omega)^2}\,|F_i^f(E_f,\,E_i)|^2\,\rho(E_f)\,dE_f. \tag{179}$$

Для регулярных в нуле подынтегральных функций $f(x)$ справедливо предельное соотношение:

$$\lim_{\alpha\to+\infty}\frac{1}{\alpha}\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\frac{\sin^2\frac{1}{2}\alpha x}{x^2}\,dx = \frac{\pi}{2}f(0), \quad \text{то есть} \quad \operatorname*{wlim}_{\alpha\to+\infty}\frac{\sin^2\frac{1}{2}\alpha x}{\alpha x^2} = \frac{\pi}{2}\delta(x). \tag{180}$$

Отсюда при $t\to\infty$ (ограничения см. в разделе 11.4.4) получаем *«золотое правило»*:

$$W_{(i\to f)}(t) \approx t\cdot\int_{-\infty}^{\infty}\frac{2\pi\lambda^2}{\hbar}\,\left|\langle\, f^{(0)}\,|\,\hat{\mathrm{F}}\,|\,i^{(0)}\,\rangle\right|^2\,\delta(E_f-E_i^{(0)}-\hbar\omega)\,\rho(E_f)\,dE_f. \tag{181}$$

[10]Для краткости мы рассматриваем только переходы в состояния с энергией $E_f^{(0)} \approx E_i^{(0)} + \hbar\omega$. Случай $E_f^{(0)} \approx E_i^{(0)} - \hbar\omega$ аналогичен, с точностью до замены $\hat{\mathrm{F}}\to\hat{\mathrm{F}}^{+}$ и $\omega\to-\omega$.

[11]Плотность состояний $\rho(E_f)$ учитывает, что помимо энергии, конечные состояния могут определяться другими квантовыми числами.

Характерное время перехода τ_{if} задает вероятность перехода в единицу времени:

$$\frac{d}{dt}W_{(i\to f)}(t) = \frac{1}{\tau_{if}}, \quad \text{причем} \quad \tau_{if} = \left[\frac{2\pi}{\hbar}\left|\lambda \langle\, f^{(0)} \,|\, \hat{\mathrm{F}} \,|\, i^{(0)} \,\rangle\right|^2 \rho(E_i^{(0)} + \hbar\omega)\right]^{-1}. \tag{182}$$

Переход к непрерывному пределу в (179) возможен, если расстояние между уровнями энергии ΔE много меньше ширины резонансного пика. Это условие ограничивает время наблюдения сверху: $t \ll 2\pi\hbar/\Delta E$.

11.4.3 Экспоненциальный закон распада

Переход $i \to f$ приводит к тому, что под действием возмущения число систем, находящихся в состоянии $|\, i^{(0)} \,\rangle$, убывает со временем:

$$N_i(t + dt) = N_i(t) - dN_{if}, \qquad \text{где} \qquad dN_{if} = N_i(t) \cdot W_{(i\to f)}(dt) = \frac{N_i(t)}{\tau_{if}}\, dt. \tag{183}$$

В отсутствие обратных переходов число систем в состоянии $|\, i^{(0)} \,\rangle$ экспоненциально убывает со временем:

$$N_i(t) = N_i(0) \exp -\frac{t}{\tau}. \tag{184}$$

Время жизни состояния τ под действием возмущения определяется суммарным вкладом всех процессов (F), уводящих систему из состояния $|\, i^{(0)} \,\rangle$:

$$\tau^{-1} = \tau^{-1}_{iF}, \qquad \text{то есть:} \qquad \tau = \left[\sum_F \frac{1}{\tau_{iF}} + \int \frac{1}{\tau_{iF}}\, \rho(F)\, dF\right]^{-1}. \tag{185}$$

11.4.4 Критерии применимости «золотого правила» Ферми

1. Для $\omega \neq 0$ взаимное влияние двух слагаемых в (177) мало при $\omega t \gg 1$. Однако при $\omega = 0$ второго пика нет, и ограничение отсутствует.

2. Поправки теории возмущений малы при $t \ll \tau_{if}$, τ, см. (185).

3. Возможность перехода к непрерывному пределу: $\Delta E \cdot t \ll 2\pi\hbar$ (резонансный пик (178) шире, чем расстояние между уровнями энергии дискретного спектра ΔE).

11.4.5 Соотношение неопределенности для энергии

Как следует из равенств (178), за конечное время Δt можно измерить частоту (или энергию) перехода между уровнями с точностью не превосходящей $\Delta\omega$ (ΔE), причем:

$$\Delta\omega \cdot \Delta t \sim 2\pi, \qquad \text{и, соответственно,} \qquad \Delta E \cdot \Delta t \sim 2\pi\hbar. \tag{186}$$

Время жизни состояния τ накладывает естественное ограничение на точность определения его энергии:

$$\Delta E \sim \hbar \cdot \tau^{-1}. \tag{187}$$

11.5 Старшие порядки (*)

11.5.1 Оператор эволюции

Решение уравнения (161) можно выразить через оператор эволюции в представлении взаимодействия:

$$|\,\tilde{\Theta}(t)\,\rangle = \widehat{\widehat{\mathrm{S}}}(t,\,0)\,|\,\tilde{\Theta}(0)\,\rangle. \tag{188}$$

Оператор $\widehat{\widehat{\mathrm{S}}}(t_1,\,t_2)$ удовлетворяет уравнениям:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t_1}\widehat{\widehat{\mathrm{S}}}(t_1,\,t_2) = \lambda\,\widehat{\widehat{\mathrm{V}}}(t_1)\,\widehat{\widehat{\mathrm{S}}}(t_1,\,t_2), \qquad \text{и} \qquad -i\hbar\frac{\partial}{\partial t_2}\widehat{\widehat{\mathrm{S}}}(t_1,\,t_2) = \widehat{\widehat{\mathrm{S}}}(t_1,\,t_2)\,\widehat{\widehat{\mathrm{V}}}(t_2). \tag{189}$$

Если разложить оператор эволюции в ряд по λ

$$\widehat{\widehat{\mathrm{S}}}(t_1,\,t_2) = \hat{\mathbb{1}} + \lambda\,\widehat{\widehat{\mathrm{S}}}^{\,(1)}(t_1,\,t_2) + \lambda^2\,\widehat{\widehat{\mathrm{S}}}^{\,(2)}(t_1,\,t_2) + \ldots, \tag{190}$$

то поправки теории возмущений к состояниям примут вид:

$$|\,\tilde{\Theta}^{(n)}(t)\,\rangle = \widehat{\widehat{\mathrm{S}}}^{\,(n)}(t,\,0)|\,\tilde{\Theta}(0)\,\rangle \tag{191}$$

11.5.2 Операторная T-экспонента

Оператор эволюции в представлении взаимодействия можно записать в виде:

$$\widehat{\widehat{\mathrm{S}}}(t,\,0) = \mathrm{T}\exp\left[-\frac{i\lambda}{\hbar}\int_0^t \widehat{\widehat{\mathrm{V}}}(t)\,dt\right]. \tag{192}$$

Символ T означает *упорядочение по времени* или T-*упорядочение*. Операторная T-*экспонента* — это предел T-упорядоченного произведения операторов:

$$\mathrm{T}\exp\left[-\frac{i\lambda}{\hbar}\int_0^t \widehat{\widehat{\mathrm{V}}}(t)\,dt\right] = \tag{193}$$
$$= \lim_{n\to\infty}\underbrace{\left(\hat{\mathbb{1}} - \frac{i\lambda}{\hbar}\widehat{\widehat{\mathrm{V}}}(t_{n-1})\,\Delta t\right)\cdot\left(\hat{\mathbb{1}} - \frac{i\lambda}{\hbar}\widehat{\widehat{\mathrm{V}}}(t_{n-2})\,\Delta t\right)\ldots\left(\hat{\mathbb{1}} - \frac{i\lambda}{\hbar}\widehat{\widehat{\mathrm{V}}}(0)\,\Delta t\right)}_{t_{n-1}>t_{n-2}>\ldots>t_1>0}.$$

Здесь $\Delta t = \frac{t}{n}$ и $t_k = k\cdot\Delta t$. Упорядочение по времени означает, что слева стоят операторы, отвечающие более поздним моментам времени, чем справа[12].

Старшие порядки нестационарной теории возмущений получаются разложением в ряд по λ оператора эволюции в представлении взаимодействия (192 – 193).

$$\widehat{\widehat{\mathrm{S}}}^{\,(n)}(t,\,0) = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_0^t d\tau_n \int_0^{\tau_n} d\tau_{n-1}\,\ldots\int_0^{\tau_2} d\tau_1\,\underbrace{\widehat{\widehat{\mathrm{V}}}(\tau_n)\,\widehat{\widehat{\mathrm{V}}}(\tau_{n-1})\ldots\widehat{\widehat{\mathrm{V}}}(\tau_1)}_{\tau_n\geqslant\tau_{n-1}\geqslant\ldots\geqslant\tau_1\geqslant 0}. \tag{194}$$

В первом приближении это приводит к результату (167).

[12] Упорядочение необходимо, потому что, вообще говоря, $\left[\widehat{\widehat{\mathrm{V}}}(t_1),\,\widehat{\widehat{\mathrm{V}}}(t_2)\right] \neq 0$ при $t_1 \neq t_2$.

12 Совместные состояния двух спинов $\frac{1}{2}$

Мы будем пользоваться обозначениями и формулами из Раздела 6. Поскольку спины фиксированы, $S_1 = S_2 = \frac{1}{2}\hbar$, полный набор включает два коммутирующих оператора:

$$\left[\hat{\mathrm{S}}_{1,\,z},\, \hat{\mathrm{S}}_{2,\,z}\right] = 0. \tag{195}$$

Система может находиться в 4 - состояниях:

$$|\, m_1,\, m_2\,\rangle = |\, m_1\,\rangle \otimes |\, m_2\,\rangle, \qquad \text{где} \qquad m_1,\, m_2 = s_{1,\,z},\, s_{2,\,z} = \pm\frac{1}{2}, \quad \text{или} \quad \uparrow, \downarrow. \tag{196}$$

Условие нормировки:

$$\langle\, m_1,\, m_2\,|\, m_1',\, m_2'\,\rangle = \delta_{m_1 m_1'}\, \delta_{m_2 m_2'}. \tag{197}$$

Каждый из операторов спина $\hat{\mathbf{S}}_{1,\,2}$ действует в собственном подпространстве:

$$\hat{\mathbf{S}}_1 \triangleq \hat{\mathbf{S}}_1 \otimes \hat{\mathbb{1}}_2; \qquad \hat{\mathbf{S}}_1^2 = \hat{\mathbf{S}}_1^2 \otimes \hat{\mathbb{1}}_2; \qquad \text{и} \qquad \hat{\mathbf{S}}_2 \triangleq \hat{\mathbb{1}}_1 \otimes \hat{\mathbf{S}}_2; \qquad \hat{\mathbf{S}}_2^2 = \hat{\mathbb{1}}_1 \otimes \hat{\mathbf{S}}_2^2. \tag{198}$$

Операторы полного (суммарного) момента системы двух спинов $\hat{\mathbf{J}}$ и $\hat{\mathbf{J}}^2$ равны:

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2 = \hat{\mathbf{S}}_1 \otimes \hat{\mathbb{1}}_2 + \hat{\mathbb{1}}_1 \otimes \hat{\mathbf{S}}_2; \quad \text{и} \quad \hat{\mathbf{J}}^2 = \hat{\mathbf{S}}_1^2 \otimes \hat{\mathbb{1}}_2 + \hat{\mathbb{1}}_1 \otimes \hat{\mathbf{S}}_2^2 + 2\,\hat{\mathrm{S}}_{1,\,i} \otimes \hat{\mathrm{S}}_{2,\,i}. \tag{199}$$

В нашем случае последнее соотношение упрощается:

$$\hat{\mathbf{J}}^2 = \frac{3}{2}\,\hat{\mathbb{1}}_1 \otimes \hat{\mathbb{1}}_2 + 2\,\hat{\mathrm{S}}_{1,\,z} \otimes \hat{\mathrm{S}}_{2,\,z} + \hat{\mathrm{S}}_1^- \otimes \hat{\mathrm{S}}_2^+ + \hat{\mathrm{S}}_1^+ \otimes \hat{\mathrm{S}}_2^-. \tag{200}$$

Коммутационные соотношения оператора суммарного момента:

$$\left[\hat{\mathbf{J}}^2,\, \hat{\mathbf{J}}\right] = \left[\hat{\mathbf{S}}_1^2,\, \hat{\mathbf{J}}\right] = \left[\hat{\mathbf{S}}_2^2,\, \hat{\mathbf{J}}\right] = 0; \tag{201a}$$

$$\left[\hat{\mathbf{J}}^2,\, \hat{\mathbf{S}}_1^2\right] = \left[\hat{\mathbf{J}}^2,\, \hat{\mathbf{S}}_2^2\right] = 0. \tag{201b}$$

Из соотношений (201) следует, что операторы $\hat{\mathbf{J}}^2$, $\hat{\mathbf{J}}_z$ также образуют полный набор. Их общие собственные состояния $|\, j,\, m\,\rangle$, где $j = 0,\, 1$, имеют вид:

$$|\,0,\quad 0\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow, \downarrow\rangle - |\downarrow, \uparrow\rangle\right); \tag{202a}$$

$$|\,1,\quad 1\,\rangle = |\uparrow, \uparrow\rangle; \tag{202b}$$

$$|\,1,\quad 0\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow, \downarrow\rangle + |\downarrow, \uparrow\rangle\right); \tag{202c}$$

$$|\,1,\, -1\,\rangle = |\downarrow, \downarrow\rangle. \tag{202d}$$

С помощью представления (200) легко убедиться в том, что для них всех верно

$$\hat{\mathbf{J}}^2\,|\, j,\, m\,\rangle = \hbar^2\, j(j+1)|\, j,\, m\,\rangle, \qquad \text{и} \qquad \hat{\mathrm{J}}_z\,|\, j,\, m\,\rangle = \hbar m|\, j,\, m\,\rangle. \tag{203}$$

13 Тождественные частицы

13.1 Определение

Пусть состояние i-ой из N частиц системы определяется значением a_i наблюдаемой a.
Оператор *парной перестановки* $\hat{\mathrm{P}}(i,\,k)$ действует на состояния системы так:

$$\hat{\mathrm{P}}(i,\,k)|\,a_1,\,\ldots a_i,\,\ldots a_k,\,\ldots a_N\,\rangle = |\,a_1,\,\ldots a_k,\,\ldots a_i,\,\ldots a_N\,\rangle. \quad \text{где} \quad 0 \leqslant i,\,j \leqslant N. \tag{204}$$

Если частицы *тождественные*, то состояния симметричны (или антисимметричны) относительно перестановок, то есть $\forall i,\,k$

$$\hat{\mathrm{P}}(i,\,k)|\,a_1,\,\ldots a_i,\,\ldots a_k,\,\ldots a_N\,\rangle = \alpha\cdot|\,a_1,\,\ldots a_i,\,\ldots a_k,\,\ldots a_N\,\rangle, \quad \text{причем} \quad \alpha^2 = 1. \tag{205}$$

В зависимости знака α частицы называют *бозонами* или *фермионами*:

$$\alpha = \begin{cases} \;\;1 & \text{при } s = 0,\,1,\,\ldots \text{ — бозоны;} \\ -1 & \text{при } s = \frac{1}{2},\,\frac{3}{2},\,\ldots \text{ — фермионы.} \end{cases} \tag{206}$$

Принцип Паули запрещает двум фермионам находиться в одинаковых состояниях. При совпадении квантовых чисел антисимметричные состояния обращаются в нуль.

13.2 Независимые тождественные частицы

В отсутствие взаимодействия каждая из тождественных частиц суть отдельная подсистема. Состояние системы есть прямое произведение состояний подсистем:

$$|\,a,\,b,\,\ldots\rangle_{indep} = |\,a\,\rangle\otimes|\,b\,\rangle\otimes\ldots. \tag{207}$$

Место в строке соответствует номеру частицы. Полная энергия не зависит от перестановок частиц.

При учете взаимодействия правильные состояния нулевого приближения (см. (155)) должны удовлетворять требованиям симметрии (206). Причем построить их нужно из независимых состояний (207).

13.2.1 Бозе - случай

Состояния независимых бозонов ($\alpha = 1$) должны быть симметричны относительно любых парных перестановок. Это достигается путем *симметризации:*

$$|\,a_1,\,a_2,\,\ldots\,a_N\,\rangle \propto \sum_{\{i_1,\,i_2,\,\ldots i_N\}} |\,a_{i_1},\,a_{i_2},\,\ldots\,a_{i_N}\,\rangle_{indep} = \sum_{\{i_1,\,i_2,\,\ldots i_N\}} |\,a_{i_1}\,\rangle\otimes|\,a_{i_2},\rangle\otimes\ldots|\,a_{i_N}\,\rangle. \tag{208}$$

Числа $i_1,\,i_2,\,\ldots i_N$ равны $1,\,2,\,\ldots N$. Суммирование идет по различным перестановкам $\{i_1,\,i_2,\,\ldots i_N\}$, число которых определяет постоянную нормировки. Значения a_i могут совпадать. Для волновых функций в z-представлении получаем:

$$\psi_{a_1\,a_2\,\ldots a_N}(z_1,\,z_2,\,\ldots\,z_N) \propto \sum_{\{i_1,\,i_2,\,\ldots i_N\}} \psi_{a_1}(z_{i_1})\cdot\psi_{a_2}(z_{i_2})\cdot\ldots\psi_{a_N}(z_{i_N}). \tag{209}$$

13.2.2 Ферми - случай

В случае фермионов ($\alpha = -1$) состояния независимых частиц нужно *антисимметризовать*, учитывая *четность перестановки:*

$$P(\{\dots\}) = P(\{i_1,\, i_2,\, \dots i_N\}) = \begin{cases} 1; & \text{для нечетных перестановок;} \\ 0; & \text{для четных перестановок.} \end{cases} \tag{210}$$

С учетом четности формула (208) принимает вид (в силу принципа Паули все a_i различны):

$$|\, a_1,\, a_2,\, \dots\, a_N\, \rangle \propto \sum_{\{i_1,\, i_2,\, \dots i_N\}} (-1)^{P(\{\dots\})} |\, a_{i_1}\, \rangle \otimes |\, a_{i_2,}\, \rangle \otimes \dots |\, a_{i_N}\, \rangle. \tag{211}$$

Волновую функцию N фермионов можно записать в форме *определителя Слэтера*:

$$\psi_{a_1\, a_2\, \dots a_N}(z_1,\, z_2,\, \dots\, z_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{a_1}(z_1) & \psi_{a_1}(z_2) & \dots & \psi_{a_1}(z_N) \\ \psi_{a_2}(z_1) & \psi_{a_2}(z_2) & \dots & \psi_{a_2}(z_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{a_N}(z_1) & \psi_{a_N}(z_2) & \dots & \psi_{a_N}(z_N) \end{vmatrix}. \tag{212}$$

13.3 Две независимые частицы

Если спины частиц $s_1 = s_2 = s \neq 0$, квантовые числа включают проекцию спина. Пусть для i-й частицы полный набор состоит из 2-х операторов: $\left[\hat{\mathrm{A}}_i,\, \hat{\mathbf{s}}_i\right] = 0$.

Перестановка пары частиц действует следующим образом ($m_1,\, m_2 = s_{z,\,1},\, s_{z,\,2}$):

$$\hat{\mathrm{P}}(1,\, 2) |\, a_1,\, m_1;\, a_2,\, m_2\, \rangle = |\, a_2,\, m_2;\, a_1,\, m_1\, \rangle = \alpha\, |\, a_1,\, m_1;\, a_2,\, m_2\, \rangle; \tag{213}$$

Величина $\alpha = \pm 1$ определяется статистикой частиц.

Можно выбрать базисные состояния так, чтобы определенные значения имели квадрат полного момента пары частиц $\mathbf{j}^2 = (\mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2)^2$ и его проекция $j_z = s_{z,\,1} + s_{z,\,2}$.

Квантовые числа a_i, m_i независимы, значит, «координатную» и спиновую части можно разделить:

$$|\, a_2,\, m_2;\, a_1,\, m_1\, \rangle = |\, a_2;\, a_1\, \rangle \otimes |\, m_2;\, m_1\, \rangle, \quad \text{причем} \quad \hat{\mathrm{P}}(1,\, 2) = \hat{\mathrm{P}}_a \otimes \hat{\mathrm{P}}_s\,. \tag{214}$$

Операторы координатной $\hat{\mathrm{P}}_a$ и спиновой $\hat{\mathrm{P}}_s$ перестановок действуют так:

$$\hat{\mathrm{P}}_a\, |\, a_1;\, a_2\, \rangle \;=\; |\, a_2;\, a_1\, \rangle = \alpha_a |\, a_1;\, a_2\, \rangle, \qquad \text{где} \qquad \alpha_a = \pm 1; \tag{215}$$

$$\hat{\mathrm{P}}_s\, |\, m_1;\, m_2\, \rangle \;=\; |\, m_2;\, m_1\, \rangle = \alpha_s |\, m_1;\, m_2\, \rangle, \qquad \text{где} \qquad \alpha_s = \pm 1. \tag{216}$$

Полная четность состояний $\alpha = \alpha_a \alpha_s$. Если полный момент пары равен j, то $\alpha_s = (-1)^{2s+j}$, см. (244). Поэтому для $j_z = m$, в соответствии с (239),

$$|\, a_1,\, a_2; j,\, m\, \rangle = \frac{|\, a_1\, \rangle \otimes |\, a_2\, \rangle + (-1)^j |\, a_2\, \rangle \otimes |\, a_1\, \rangle}{\sqrt{2}} \otimes |\, s_1,\, s_2;\, j,\, m\, \rangle|_{s_1 = s_2 = s}\,. \tag{217}$$

14 Частицы в электромагнитном поле

14.1 Электромагнитное поле

Электромагнитное поле задается 4 – потенциалом A_ν, компонентами которого являются скалярный и векторный потенциалы ϕ и $\mathbf{A}$. Напряженности электрического и магнитного полей $\mathbf{E}(\mathbf{x},\, t)$ и $\mathbf{B}(\mathbf{x},\, t)$ равны

$$A_\nu = (\phi(\mathbf{x},\, t),\, \mathbf{A}(\mathbf{x},\, t)), \qquad \text{причем} \qquad \mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}; \quad \text{и} \quad \mathbf{B} = [\nabla \times \mathbf{A}]\,. \tag{218}$$

Напряженности поля инвариантны относительно калибровочных преобразований:

$$\phi \longrightarrow \phi - \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t} f(\mathbf{x},\, t); \qquad \text{и} \qquad \mathbf{A} \longrightarrow \mathbf{A} + \nabla f(\mathbf{x},\, t), \tag{219}$$

где $f(\mathbf{x},\, t)$ — произвольная функция. Эта свобода позволяет выбрать A_ν в удобной форме.

14.2 Частицы без спина

14.2.1 Обобщенный импульс и Гамильтониан

Для учета взаимодействия заряда с полем необходимо учесть в Гамильтониане потенциал ϕ и учесть, что теперь оператор $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\boldsymbol{\nabla}$ — это оператор *обобщенного* импульса. Кинетическая энергия зависит от *обычного* импульса, поэтому

$$\hat{\mathrm{H}} = \frac{1}{2m}\left[\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c}\mathbf{A}(\mathbf{x},\, t)\right)\right]^2 + q\phi(\mathbf{x},\, t) + U(\mathbf{x},\, t), \qquad \text{где } q \text{ — заряд.} \tag{220}$$

При калибровочных преобразованиях (219) вид нестационарного уравнения Шредингера (45) не изменится, если изменив поля, изменить также фазу волновой функции:

$$\psi(\mathbf{x},\, t) \longrightarrow \psi(\mathbf{x},\, t) \cdot \exp\frac{iq}{\hbar c}\, f(\mathbf{x},\, t). \tag{221}$$

Это свойство называется *ковариантностью.*

В нерелятивистских задачах удобно пользоваться *калибровкой Кулона:*

$$(\nabla,\, \mathbf{A}) = \operatorname{div}\mathbf{A} = 0; \qquad \text{благодаря чему} \qquad (\hat{\mathbf{p}},\, \mathbf{A}) = (\mathbf{A},\, \hat{\mathbf{p}}). \tag{222}$$

В Кулоновой калибровке Гамильтониан принимает вид:

$$\hat{\mathrm{H}} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \underbrace{\frac{q}{mc}(\mathbf{A},\, \hat{\mathbf{p}})}_{\hat{\mathrm{H}}_{BL}} + \underbrace{\frac{q^2\mathbf{A}^2}{2mc^2}}_{\hat{\mathrm{H}}_D} + q\phi + U. \tag{223}$$

Слагаемые $\hat{\mathrm{H}}_{BL}$ и $\hat{\mathrm{H}}_D$ описывают взаимодействие заряда с магнитным полем. Калибровочная инвариантность требует учитывать оба. Однако на практике роль $\hat{\mathrm{H}}_{BL}$ часто бывает важнее.

14.2.2 Орбитальный магнитный момент и диамагнетизм

Пусть на заряженную частицу, помещенную в центральное поле $U(r)$, действует однородное магнитное поле $\mathbf{B} = const$. Обсудим роль слагаемых $\hat{\mathrm{H}}_{BL}$ и $\hat{\mathrm{H}}_D$.

Вектор-потенциал в Кулоновой калибровке (222) равен

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}\,[\mathbf{B}\times\mathbf{r}]\,; \qquad \text{легко видеть, что} \qquad \operatorname{div}\mathbf{A} = 0. \tag{224}$$

• Если у заряда есть момент импульса, то вихревой ток создает *орбитальный магнитный момент.* Слагаемое $\hat{\mathrm{H}}_{BL}$ описывает его взаимодействие с полем.

$$\hat{\mathrm{H}}_{BL} = -\frac{q}{mc}(\mathbf{A},\,\hat{\mathbf{p}}) = -\frac{q}{2mc}\left([\mathbf{B}\times\mathbf{r}]\,,\,\hat{\mathbf{p}}\right) = -\left(\mathbf{B},\,\hat{\boldsymbol{\mu}}_L\right), \quad \text{где} \quad \hat{\boldsymbol{\mu}}_L = \frac{q\hbar}{2mc}\,\hat{\mathbf{l}}\,. \tag{225}$$

Оператор $\hat{\mathbf{l}} = \frac{\hat{\mathbf{L}}}{\hbar}$ — это угловой момент частицы относительно начала координат, $\hat{\boldsymbol{\mu}}_L$ — орбитальный магнитный момент. Величина $\gamma = \frac{q}{2m_ec}$ называется *гиромагнитным отношением.*

• Второе слагаемое, $\hat{\mathrm{H}}_D = \frac{q^2\mathbf{A}^2}{2mc^2}$ строго положительно. Благодаря нему, заряженные частицы выталкиваются из областей с большим вектор-потенциалом. Это явление называется *диамагнетизмом.*

Для достижимых полей вклад $\hat{\mathrm{H}}_D$ заметен только при $\left\langle \hat{\mathrm{H}}_{BL} \right\rangle \to 0$.

14.3 Частицы со спином $\frac{1}{2}$

Частицы со спином $\frac{1}{2}$ — это электроны, мюоны, протоны и т.д. В нерелятивистском случае их описывает *уравнение Паули.* Волновая функция таких частиц — двухкомпонентный спинор (необходимые формулы введены в Разделе 6):

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{x},\,t) = \hat{\mathrm{H}}_P\,\Psi(\mathbf{x},\,t), \qquad \text{где} \qquad \Psi(\mathbf{x},\,t) = \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{x},\,t) \\ \psi_2(\mathbf{x},\,t) \end{pmatrix} \tag{226}$$

Гамильтониан Паули $\hat{\mathrm{H}}_P$ — это матрица 2×2. Помимо зарядовой части (220) он содержит слагаемое, описывающее взаимодействие спина с магнитным полем:

$$\hat{\mathrm{H}} = \left[\frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c}\mathbf{A}(\mathbf{x},\,t)\right)^2 + q\phi(\mathbf{x},\,t) + U(\mathbf{x},\,t)\right]\cdot\mathbf{1} + \hat{\mathrm{H}}_{BS}\,. \tag{227}$$

Оно равно

$$\hat{\mathrm{H}}_{BS} = -(\mathbf{B},\,\hat{\boldsymbol{\mu}}) = -g\,\frac{q\hbar}{2mc}(\mathbf{B},\,\hat{\mathbf{s}}). \tag{228}$$

Здесь $\hat{\mathbf{s}} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}$ — оператор спина (97); величина $\mu = \frac{|q|\hbar}{2mc}$ называется магнетоном частицы; безразмерную величину g иногда называют *гиромагнитным отношением*, см. (1p), или *фактором Ланде.* Слагаемое $\hat{\mathrm{H}}_{BS}$, очевидно, калибровочно инвариантно.

Для электрона величина $\mu_e = \mu_B = \frac{e\hbar}{2m_ec}$ называется магнетоном Бора, (1l).

Вместо заключения

«Но тут застигло Шахерезаду утро, и она прекратила дозволенные речи. И сестра ее воскликнула: „О сестрица, как твой рассказ прекрасен, хорош, и приятен, и сладок!“»

15 Приложение 1. Сложение моментов

15.1 Пространство состояний двух независимых моментов

15.1.1 Пространство состояний углового момента

Для краткости мы будем называть спином и обозначать S вращательный момент произвольной природы. Полный набор состоит из двух коммутирующих операторов $\hat{\mathbf{S}}^2$ и $\hat{\mathrm{S}}_z$ (см. Разделы 5, 6). Их собственные вектора удовлетворяют соотношениям

$$\hat{\mathbf{S}}^2\,|\,s,\,m\,\rangle = \hbar^2\,s(s+1)|\,s,\,m\,\rangle \qquad \text{и} \qquad \hat{\mathrm{S}}_z\,|\,s,\,m\,\rangle = \hbar\,m|\,s,\,m\,\rangle. \tag{229}$$

Пусть величина спина s фиксирована (она может быть целой либо полуцелой). Собственные состояния с разными $m = s_z$ попарно ортогональны:

$$\langle\,s,\,m\,|\,s,\,m'\,\rangle = \delta_{m\,m'}, \qquad \text{где} \qquad m,\,m' = -s,\,-s+1,\ldots,\,s. \tag{230}$$

Пространство состояний спина s — это линейная оболочка набора состояний $|\,s,\,m\,\rangle$. Его размерность равна $2s+1$:

$$V = L\left(\{|\,s,\,m\,\rangle;\,m = -s,\,-s+1,\ldots,\,s\}\right). \tag{231}$$

Вектора $|\,s,\,m\,\rangle$ образуют в пространстве V полный базис:

$$|\,s,\,\underbrace{m\,\rangle\langle\,s,\,m}_{m}\,| = \hat{\mathbb{1}}_V\,. \tag{232}$$

15.1.2 Прямое произведение пространств

Совместное пространство состояний двух независимых моментов s_1, s_2 есть прямое произведение $V = V_1 \otimes V_2$ пространств состояний каждого из них[13]. Оно имеет размерность $(2s_1+1)(2s_2+1)$:

$$V = L\left(\{|\,s_1,\,m_1;\,s_2,\,m_2\,\rangle\}\,,\right) \qquad \text{где} \qquad |\,s_1,\,m_1;\,s_2,\,m_2\,\rangle \triangleq |\,s_1,\,m_1\,\rangle\otimes|\,s_2,\,m_2\,\rangle. \tag{233}$$

Проекции моментов $m_{1,2}$ пробегают значения $m_{1,2} \leqslant s_{1,2}$. Состояния $|\,s_1,\,m_1;\,s_2,\,m_2\,\rangle$ попарно ортогональны:

$$\langle\,s_1,\,m_1;\,s_2,\,m_2\,|\,s_1,\,m_1';\,s_2,\,m_2'\,\rangle = \delta_{m_1\,m_1'}\delta_{m_2\,m_2'}. \tag{234}$$

Вектора $|\,s_1,\,m_1;\,s_2,\,m_2\,\rangle$ образуют в пространстве $V_1 \otimes V_2$ полный базис:

$$|\,s_1,\,\underbrace{m_1;s_2\,m_2\,\rangle\langle\,s_1,\,m_1;s_2,\,m_2}_{m_1,\,m_2}\,| = \hat{\mathbb{1}}_1 \otimes \hat{\mathbb{1}}_2 = \hat{\mathbb{1}}_{V_1\otimes V_2}\,. \tag{235}$$

Каждый из операторов момента $\hat{\mathcal{S}}_{1,2}$ действует в собственном подпространстве:

$$\hat{\mathcal{S}}_1 = \hat{\mathbf{S}}_1 \otimes \hat{\mathbb{1}}_2; \qquad \hat{\mathcal{S}}_1^2 = \hat{\mathbf{S}}_1^2 \otimes \hat{\mathbb{1}}_2; \qquad \text{и} \qquad \hat{\mathcal{S}}_2 = \hat{\mathbb{1}}_1 \otimes \hat{\mathbf{S}}_2; \qquad \hat{\mathcal{S}}_2^2 = \hat{\mathbb{1}}_1 \otimes \hat{\mathbf{S}}_2^2\,. \tag{236}$$

[13] Величины s_1, s_2 везде в данном разделе фиксированы. Иногда для краткости их опускают.

15.2 Состояния с определенным полным моментом

15.2.1 Оператор суммы двух моментов

Операторы полного момента $\hat{\mathcal{J}}$ и $\hat{\mathcal{J}}^2$ равны:

$$\hat{\mathcal{J}} = \hat{\mathcal{S}}_1 + \hat{\mathcal{S}}_2 = \hat{\mathbf{S}}_1 \otimes \hat{\mathbb{1}}_2 + \hat{\mathbb{1}}_1 \otimes \hat{\mathbf{S}}_2; \quad \text{и} \quad \hat{\mathcal{J}}^2 = \hat{\mathbf{S}}_1^2 \otimes \hat{\mathbb{1}}_2 + \hat{\mathbb{1}}_1 \otimes \hat{\mathbf{S}}_2^2 + 2\,\hat{\mathrm{S}}_{1,\,\underbrace{i \otimes \hat{\mathrm{S}}_{2,\,i}}} . \tag{237}$$

Коммутационные соотношения:

$$\left[\hat{\mathcal{J}}_{\mathrm{j}}^2,\, \hat{\mathcal{J}}_{\mathrm{k}}\right] = \left[\hat{\mathcal{J}}_{\mathrm{j}}^2,\, \hat{\mathcal{S}}_{1,\,k}^2\right] = \left[\hat{\mathcal{J}}_{\mathrm{j}}^2,\, \hat{\mathcal{S}}_{2,\,k}^2\right] = 0; \tag{238a}$$

$$\left[\hat{\mathcal{S}}_{1,\,\mathrm{j}}^2,\, \hat{\mathcal{J}}_{\mathrm{k}}\right] = \left[\hat{\mathcal{S}}_{2,\,\mathrm{j}}^2,\, \hat{\mathcal{J}}_{\mathrm{k}}\right] = 0; \tag{238b}$$

$$\left[\hat{\mathcal{J}}_{\mathrm{j}}^2,\, \hat{\mathcal{S}}_{1,\,k}\right] = -\left[\hat{\mathcal{J}}_{\mathrm{j}}^2,\, \hat{\mathcal{S}}_{2,\,k}\right] = 2i\,\varepsilon_{klm}\,\hat{\mathcal{S}}_{1,\,l}\,\hat{\mathcal{S}}_{2,\,m}\,. \tag{238c}$$

Для данных $s_1,\, s_2$ можно найти собственные вектора $|\, s_1,\, s_2;\, j,\, m\,\rangle$ операторов полного момента $\hat{\mathcal{J}}^2$, $\hat{\mathcal{J}}_z$:

$$\hat{\mathcal{J}}^2\,|\, s_1,\, s_2;\, j,\, m\,\rangle = \hbar^2\, j\,(j+1)\,|\, s_1,\, s_2;\, j,\, m\,\rangle; \quad \hat{\mathcal{J}}_z\,|\, s_1,\, s_2;\, j,\, m\,\rangle = \hbar\, m\,|\, s_1,\, s_2;\, j,\, m\,\rangle. \tag{239}$$

Они также образуют ортонормированный базис в пространстве V:

$$V = L\left(\{|\, s_1,\, s_2;\, j,\, m\,\rangle;\; j = |s_1 - s_2|,\, \ldots\, s_1 + s_2;\,,\; m = -j,\, \ldots\, j;\}\right); \tag{240a}$$

$$\langle\, s_1,\, s_2;\, j,\, m\,|\, s_1,\, s_2;\, j',\, m'\,\rangle = \delta_{j\,j'}\,\delta_{m\,m'}. \tag{240b}$$

Соотношение полноты выглядит следующим образом:

$$|\, s_1,\, s_2;\, \underbrace{j,\, m\,\rangle\langle\, s_1,\, s_2;\, j,\, m}_{j,m}\,| = \hat{\mathbb{1}}_{V_1 \otimes V_2}\,. \tag{241}$$

15.2.2 Скалярные произведения моментов

В силу коммутационных соотношений (238a) для состояний $|\, s_1,\, s_2;\, j,\, m\,\rangle$ точно измеримыми являются также скалярные произведения моментов $\hat{\mathcal{J}}$, $\hat{\mathcal{S}}_1$ и $\hat{\mathcal{S}}_2$. Их значения находят с помощью очевидных тождеств:

$$\hat{\mathcal{J}}_i\;\hat{\mathcal{S}}_{1,\,i} = \frac{1}{2}\left[\hat{\mathcal{J}}_i^2 + \hat{\mathcal{S}}_{1,\,i}^2 - \hat{\mathcal{S}}_{2,\,i}^2\right]; \tag{242a}$$

$$\hat{\mathcal{J}}_i\;\hat{\mathcal{S}}_{2,\,i} = \frac{1}{2}\left[\hat{\mathcal{J}}_i^2 + \hat{\mathcal{S}}_{2,\,i}^2 - \hat{\mathcal{S}}_{1,\,i}^2\right]; \tag{242b}$$

$$\hat{\mathcal{S}}_{1,\,i}\;\hat{\mathcal{S}}_{2,\,i} = \frac{1}{2}\left[\hat{\mathcal{J}}_i^2 - \hat{\mathcal{S}}_{1,\,i}^2 - \hat{\mathcal{S}}_{2,\,i}^2\right]. \tag{242c}$$

15.2.3 Четность суммы равных моментов

Пусть исходные моменты $s_1,\, s_2$ принадлежат разным частицам. Тогда оператор парной перестановки (213) действует на состояния следующим образом:

$$\hat{\mathrm{P}}(1,\,2)|\, s_1,\, m_1;\, s_2,\, m_2\,\rangle = |\, s_2,\, m_2;\, s_1,\, m_1\,\rangle, \quad \text{и} \quad \hat{\mathrm{P}}(1,\,2)|\, s_1,\, s_2;\, j,\, m\,\rangle = |\, s_2,\, s_1;\, j,\, m\,\rangle. \tag{243}$$

Согласно свойствам коэффициентов векторного сложения(248), если моменты частиц равны, четность состояния определяется полным моментом j:

$$\hat{\mathrm{P}}(1,\,2)|\,s,\,s;\,j,\,m\,\rangle = \hat{\mathrm{P}}(1,\,2)|\,s_1,\,s_2;\,j,\,m\,\rangle\Big|_{s_1=s_2=s} = (-1)^{2s+j}|\,s,\,s;\,j,\,m\,\rangle. \tag{244}$$

На примере состояний (202) явно видно, как это работает для $s_1 = s_2 = \frac{1}{2}$.

15.3 Коэффициенты Клебша — Гордана

15.3.1 Определение

Базисные состояния $|\,s_1,\,s_2;\,j,\,m\,\rangle$ выражаются через $|\,s_1,\,m_1;\,s_2,\,m_2\,\rangle$ с помощью $(2s_1+1)(2s_2+1)$ – мерной «квадратной» матрицы C:

$$|\,s_1,\,s_2;\,j,\,m\,\rangle = \sum_{m_1=-s_1}^{s_1}\sum_{m_2=-s_2}^{s_2}|\,s_1,\,m_1;\,s_2,\,m_2\,\rangle\, C^{j\,m}_{s_1\,m_1;\,s_2\,m_2}; \tag{245a}$$

$$|\,s_1,\,m_1;\,s_2,\,m_2\,\rangle = \sum_{j=|s_1-s_2|}^{s_1+s_2}\sum_{m=-j}^{j}|\,s_1,\,s_2;\,j,\,m\,\rangle\,\left(C^{-1}\right)^{s_1\,m_1;\,s_2\,m_2}_{j\,m}. \tag{245b}$$

Обратите внимание: в силу коммутационных соотношений (238a), z-проекции моментов в правой и левой частях равенств должны удовлетворять условию $m_1+m_2 = m$. В противном случае коэффициент равен нулю.

Матрица C унитарная, то есть $C^{-1} = C^{+}$. Это означает, что

$$\left(C^{-1}\right)^{s_1\,m_1;\,s_2\,m_2}_{j\,m} = \left(C^{j\,m}_{s_1\,m_1;\,s_2\,m_2}\right)^{*}. \tag{246}$$

Равенство напрямую следует из формулы (19) для коэффициентов разложения вектора по базису и свойства скалярного произведения (3):

$$C^{j\,m}_{s_1\,m_1;\,s_2\,m_2} = \langle\,s_1,\,m_1;\,s_2,\,m_2\,|\,s_1,\,s_2;\,j,\,m\,\rangle; \tag{247a}$$

$$\left(C^{-1}\right)^{s_1\,m_1;\,s_2\,m_2}_{j\,m} = \langle\,s_1,\,s_2;\,j,\,m\,|\,s_1,\,m_1;\,s_2,\,m_2\,\rangle. \tag{247b}$$

Числа $C^{j\,m}_{s_1\,m_1;\,s_2\,m_2}$ называются коэффициентами Клебша — Гордана[14].

15.3.2 Зависимость коэффициентов $C^{j\,m}_{s_1\,m_1;\,s_2\,m_2}$ от порядка слагаемых

При сложении по правилу треугольника порядок слагаемых в сумме определяется направлением векторов. Пространственная инверсия приводит к перестановке слагаемых: $\hat{\mathrm{I}}(\vec{s}_1+\vec{s}_2) = \hat{\mathrm{I}}\,\vec{s}_2+\hat{\mathrm{I}}\,\vec{s}_1 = -\vec{s}_2-\vec{s}_1$.

Собственные состояния операторов момента имеют определенную четность, см. (81), поэтому

$$C^{j\,m}_{s_1\,m_1;\,s_2\,m_2} = (-1)^{(j+s_1+s_2)}\,C^{j\,m}_{s_2\,m_2;\,s_1\,m_1}; \qquad \text{и} \tag{248a}$$

$$C^{j\,m}_{s\,m_1;\,s\,m_2} = (-1)^{(j+2s)}\,C^{j\,m}_{s\,m_2;\,s\,m_1}, \qquad \text{для} \qquad s_1 = s_2 = s. \tag{248b}$$

Поскольку множители в этих равенствах не зависят от m_1, m_2, состояния (245a) имеют определенную четность относительно перестановки моментов:

$$|\,s_1,\,s_2;\,j,\,m\,\rangle = (-1)^{(j+s_1+s_2)}\,|\,s_2,\,s_1;\,j,\,m\,\rangle. \tag{249}$$

[14] Их также называют коэффициентами Вигнера или коэффициентами векторного сложения.

15.3.3 Рекуррентные соотношения

В силу первого (векторного) равенства (237) повышающие и понижающие операторы связаны между собой:

$$\hat{\mathcal{J}}^{\pm} = \hat{\mathcal{S}}_1{}^{\pm} + \hat{\mathcal{S}}_2{}^{\pm} = \hat{\mathrm{S}}_1{}^{\pm} \otimes \hat{\mathbb{1}}_2 + \hat{\mathbb{1}}_1 \otimes \hat{\mathrm{S}}_2{}^{\pm}. \tag{250}$$

Каждый из операторов $\hat{\mathcal{J}}^{\pm}$, $\hat{\mathcal{S}}_{1,\,2}{}^{\pm}$ действует на соответствующие состояния $|\, s_1,\, s_2;\, j,\, m\,\rangle$, $|\, s_{1,\,2},\, m_{1,\,2}\,\rangle$ по общим правилам (84c, 84d):

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{J}}^{\pm}|\, s_1,\, s_2;\, j,\, m\,\rangle &= \sqrt{j(j+1) - m(m\pm 1)}\,|\, s_1,\, s_2;\, j,\, m\pm 1\,\rangle; && (251a)\\ \hat{\mathcal{S}}_{1,\,2}{}^{\pm}|\, s_{1,\,2},\, m_{1,\,2}\,\rangle &= \sqrt{s_{1,\,2}(s_{1,\,2}+1) - m_{1,\,2}(m_{1,\,2}\pm 1)}\,|\, s_{1,\,2},\, m_{1,\,2}\pm 1\,\rangle. && (251b) \end{aligned}$$

Применяя равенство (250) к правой и левой частям (245a), приходим к следующему соотношению:

$$\begin{aligned} |\, s_1,\, s_2;\, j,\, m\pm 1\,\rangle = \sum_{m_1=-s_1}^{s_1}\sum_{m_2=-s_2}^{s_2} \frac{C^{j\,m}_{s_1\,m_1;\,s_2\,m_2}}{\sqrt{j(j+1)-m(m\pm 1)}}\times \\ \times\Big(\sqrt{s_1(s_1+1)-m_1(m_1\pm 1)}\,|\, s_1,\, m_1\pm 1;\, s_2,\, m_2\,\rangle + \\ +\sqrt{s_2(s_2+1)-m_2(m_2\pm 1)}|\, s_1,\, m_1;\, s_2,\, m_2\pm 1\,\rangle\Big)\,. \end{aligned} \tag{252}$$

Собирая вместе слагаемые с одинаковыми m_1, m_2, можно выразить $C^{j\,m}_{\dots}$ через $C^{j\,m\pm1}_{\dots}$ (здесь по-прежнему $m = m_1 + m_2$).

$$\begin{aligned} C^{j\,m}_{s_1\,m_1;\,s_2\,m_2} = \sqrt{\frac{s_1(s_1+1)-m_1(m_1\pm 1)}{j(j+1)-m(m\pm 1)}}C^{j\,m\pm1}_{s_1\,m_1\pm1;\,s_2\,m_2} + \\ +\sqrt{\frac{s_2(s_2+1)-m_2(m_2\pm 1)}{j(j+1)-m(m\pm 1)}}C^{j\,m\pm1}_{s_1\,m_1;\,s_2\,m_2\pm1}. \end{aligned} \tag{253}$$

Эти соотношения позволяют, выразив через $|\, s_1,\, m_1;\, s_2,\, m_2\rangle$ какой-либо из векторов $|\, s_1,\, s_2;\, j,\, m\rangle$, найти все члены мультиплета с данным j.

Обычно сперва вычисляют *векторы старшего веса,* $|\, s_1,\, s_2;\, j,\, j\,\rangle$, которые удовлетворяют уравнениям:

$$\hat{\mathcal{J}}^{+}|\, s_1,\, s_2;\, j,\, j\,\rangle = 0, \qquad \text{где} \qquad j = |s_1 - s_2|,\, |s_1-s_2|+1, \dots \quad s_1+s_2. \tag{254}$$

Далее, действуя понижающим оператором, последовательно получают состояния с меньшими m.