Квантовая теория

4.02.0[illegible]

Лекция.

Свешников Константин Алексеевич.

Каф. КТ и ФВЭ 3-36, 5-13, Б-14 939 2696
costa@bog.msu.ru

Оптимального учебника нет!

1. Ландау, Лифшиц 3 том нерел. кв мех
2. Давыдов Кв. механика 12. Фок Начала QM
3. Анри Боум
4. Соколов, Тернов, Жуковский (Лунев, Хрусталев, Свешн., Свеш-а)
5. Фейнман Статистическая механика (*) !
6. Дирак Принципы кв. мех.
7. Линкин Г. Кв. мех.
8. Мессиа 2 тома Кв. мех. как справочник
9. Елютин, Кривченков (1-е изд.)
10. Белокуров, Тимофеевская, Хрусталев Квантовая телепортация - обыкновенное чудо (для чтения)
11. Блохинцев Основы кв. мех.

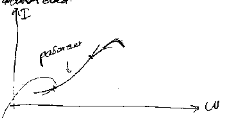
Глава 1. Постулаты QT (кв. теории)

Мы должны уже знать, что:
в мех. Ньютона нет масштабного пар-ра, т.е. ур. Ньют. формально применимы к любому объекту; в спец. теории отн-ти появи. c (скор. света) и оказ-ся, что (?) совместить мех. Ньют. и СТО можно только

полагая, что c - max. скор. движ. объектов и она постулирована. Тогда мех. делится на рел. и нерел. В классич. электроде c вх. в ур-ие как универс. пост. и учит. термодин., получаем изл. спос-ть АЧТ:

$$I(\omega)d\omega = \frac{kT}{\pi^2 c^3}\,\omega^2 d\omega$$

Эта ф-ла справ. только в огр. инт-ле T_{ω} ~~[illegible]~~

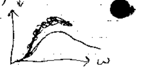


Но если $\int^{\infty} d\omega$, то получим ∞ Конец!

1900 Макс Планк предположил, что изл. происх. не непр., а квантами, эн. которых пропорц. частоте с пост. $\hbar$: $E = \hbar\omega$, $\hbar = 1{,}054887 \cdot 10^{-34}$ Дж·с (разм-ть действия).

Тогда $I(\omega)d\omega = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3}\cdot\frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}-1}$ - ф-ла Планка

Кривая Вина (закон Вина)



Возникает подразд. на классич. события (действие $\gg \hbar$) и квантовые (действие $\sim \hbar$).

Гипотеза де Бройля (1924), что с каждой ч-цей (телом) связан волн. процесс, ест. харак-ся дл. волны де Бройля: $\lambda = \frac{h}{p}$ $\left(\lambda = \frac{\hbar}{p}\right)$

Если λ де Б. мала по ср. с разм. сис-ма, то поведение - классич., если нет, то поведение неклассическое → корпуск.-волн. дуализм.

Док-во - опыт Дэвиссона - Джермера.

1885 - закон Бальмера: $\omega_{mn} = R\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right)$
$m = 2$, $n = 3, 4, 5 \ldots$

Это соотн. обобщается на все спектр. линии элементов.

1908 - Ритц сформулировал свой комбинац. принцип: любую! спектр. линию любого! эл-та можно представить в виде:

$$\omega_{mn} = f(m_1, \ldots, m_s) - f(n_1, \ldots, n_s)$$

f - действит. ф-ция S переменных

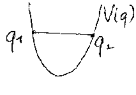
Это универсальный закон природы. Обобщение ф-лы Бальмера.

Отсюда следует закон композиции частот: $\boxed{\omega_{mp} + \omega_{pn} = \omega_{mn}}$

Эта формула положила конец классич. физике. Почему?

Пример. частица в пот. яме

$$E = \mu\frac{\dot{q}^2}{2} + V(q)$$



Если есть заряд, то ч-ца будет излучать.

$$T = 2\int_{q_1}^{q_2}\frac{dq}{v(q)}, \text{ где}$$

скорость $v = \sqrt{\frac{2}{\mu}(E - V(q))}$

Введем $E = E_0 n$ (где E_0 - const, n - безразм. величина)

$\omega = \frac{2\pi}{T}$

коорд. $\vec{r}$-ия — период. ф-ция времени ⇒ ее можно разложить в ряд Фурье

$$q(t) = \sum_m q_m e^{i\omega_{mn} t}$$

где $\omega_{mn} = m\omega$, m-целое

В силу лин-ти ур-ий Максвелла спектральное разложение излучения будет иметь такой же вид

Для частот $\omega_{m_1 n} + \omega_{m_2 n} = \omega_{m_1+m_2, n}$

Рассм. $q^2(t)$ = это тоже период. ф-ция ⇒ она тоже расклад. ся в ряд Фурье с теми же спектр. компонентами:

$$q^2(t) = \sum_m (q^2)_m e^{i\omega_{mn} t}$$

Это можно обобщить на ∀ ф-цию $f(q(t))$:

$$f(q(t)) = f(t) = \sum_m f_m e^{i\omega_{mn} t}$$

$$q^2(t) = \sum_{m_1 m_2} q_{m_1} q_{m_2} e^{i(\omega_{m_1 n} + \omega_{m_2 n})t} =$$

закон композиции

$$= \sum_{m_1 m_2} q_{m_1} q_{m_2} e^{i\omega_{m_1+m_2, n} t} =$$

$$= \sum_m \Big(\sum_{m_1+m_2=m} q_{m_1} q_{m_2} \Big) e^{i\omega_{mn} t}$$, получилось то же самое

Иск. координата периодич. ⇒ и ∀ ф-ция этой коорд-ты периодична с теми же параметрами

Перейдем к заряду.

Вос-ся уравнениями Максвелла:

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \frac{1}{c} \int d\vec{r}' \, \frac{\vec{j}\left(\vec{r}', t - \frac{|\vec{r}-\vec{r}'|}{c}\right)}{|\vec{r}-\vec{r}'|}$$

$$\varphi(\vec{r}, t) = \int d\vec{r}' \, \frac{\rho\left(\vec{r}', t - \frac{|\vec{r}-\vec{r}'|}{c}\right)}{|\vec{r}-\vec{r}'|}$$

В силу лин-ти ур-ний Максвелла по времени излучение будет происх. на таких же частотах.

В классич. случае эл-ны в атоме вращ. вокруг ядра → условно периодическое движение

Имеем набор частот $\{\omega_j\}_{j=1}^{s}$

$$\vec{q}(t) = \sum_{\{l\}} q_{\{l\}} e^{i\Omega(l)t},$$

где $l = (l_1 \dots l_s)$,

$$\underbrace{\Omega}_{\text{комбинац. частота}} = \sum_{j=1}^{s} l_j \underbrace{\omega_j}_{\text{осн. частоты}}$$

условно-периодич. движение

В механике доказ-ся, что ∀ замкн. движ. описывается так

$$\omega_{\{l_1\}n} + \omega_{\{l_2\}n} = \omega_{\{l_1+l_2\}n},$$

(что противоречит закону композиции).

$$\rho(\vec{r}, t) = \sum_{\substack{\{l\} \\ l_1 \dots l_s}} \rho_{\{l\}} e^{i\Omega(l)t}$$

13.02.07. лекция 2

$\vec{j}(\vec{r}, t) = \dots$

$$\Phi(\vec{r}, t) = \int d\vec{r}' \, \frac{\rho\left(\vec{r}', t - \frac{|\vec{r}-\vec{r}'|}{c}\right)}{|\vec{r}-\vec{r}'|}$$

$$\vec{A}(\vec{r},t)=\frac{1}{c}\int d\vec{r}\,'\,\frac{\vec{j}(\vec{r}\,',t-\frac{|\vec{r}-\vec{r}\,'|}{c})}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|}$$

Зав-ть $t-\frac{|\vec{r}-\vec{r}\,'|}{c}$ остается и в $A(r,t)$ $\Phi(r,t)$,

т.к. интеграл берется по $d\vec{r}\,'$, поэтому:

$$\Phi(\vec{r},t)=\sum_{\{e\}}\Phi_{\{e\}}e^{i\Omega(e)t}$$
$$\vec{A}(\vec{r},t)=\sum_{\{e\}}\vec{A}_{\{e\}}e^{i\Omega(e)t}$$

Т.к. напр-ти ищутся как произв. от пот-лов, то эта времен. зав-ть переходит и в напр-ти, кот. мы и видим на фотопластинке.

$\omega=\omega(n)$

Пусть есть одна $\omega \Rightarrow \omega_{mn}=m\omega$

Для этих частот

$$\omega_{m_1n}+\omega_{m_2n}=\omega_{m_1+m_2n}$$

Т.к. энергия усл.-период. движ. не квантована и т.к. это выраж. не совп. с комбинац. принципом Ритца $\omega_{mp}+\omega_{pn}=\omega_{mn}$, то ~~имеет~~ есть 2 противоречия.

// Вопросы причинности в кв. мех // редактор Терлецкий

Выход из тупика: 1925 Гейзенберг создал матричную механику — если все спектр. компон. нумер. 2 индексами, можно этим дискрет. индексам поставить в соотв. другие

(6)

мат. величины — матрицы.
Если ранее с класич. частотами были связаны ф-ции (напр. пот.), теперь нужно эти величины воспринимать как матрицы:

$$F_{mn}e^{i\omega_{mn}t}=\left(F(t)\right)_{mn}$$

напр-ти,
потенциалы,
токи

Что следует из этого предполож-я? Тогда комбинац. принцип можно представить в виде:

$\omega_{mn}=\omega_m-\omega_n$ (как следствие $\omega_{mp}+\omega_{pn}=\omega_m-\omega_p+\omega_p-\omega_n=\omega_{mn}$)

Тогда $F_{mn}(t)=F_{mn}e^{i\omega_{mn}t}=$

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

Введем диаг. матрицу $\Omega_{mn}=\omega_m\delta_{mn}$,

Тогда $F(t)=e^{i\Omega t}Fe^{-i\Omega t}$,

где Ω — матрица круг. частот, соотв. решению бор. ур-ия атома,

а $(F)_{mn}=F_{mn}$

/ Матрич. ф-ции

Есть иск. ф-ция $f(x)=\sum_{n=0}^{\infty}f_nx^n$, а ф-ция от матр. арг-та $f(A)=\sum_{n=0}^{\infty}f_nA^n$

(7)

Коммутатор $[A,B]=AB-BA$, в общем случае он $\neq 0$

$$e^A=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{A^n}{n!}$$

// $f(x)$ сх-ся в пределах радиуса сх-ти соотв. ф-ции

Про $f(A)$ это утверждать нельзя.

Если $\exists f(x)$ еще не знаем, что $\exists f(A)$ //

$$\underline{F(t)=e^{i\Omega t}Fe^{-i\Omega t}}$$

эта ф-ла удовл. комб. принципу +

Если $q(t)=\sum_m e^{i\omega_{mn}t}q_m$, то

$$q^2(t)=\sum_m e^{i\omega_{mn}t}(q^2)_m$$

$$f(q)=\sum_n e^{i\omega_{mn}t}f_m$$

С точки зр. закона комм-ции Ритца это неверно

мы имеем дело с матрицей

$$F(t)=e^{i\Omega t}Fe^{-i\Omega t}$$

Расм. $F^2(t)=e^{i\Omega t}F\cancel{e^{-i\Omega t}}\cdot\cancel{e^{i\Omega t}}\cdot F\cdot e^{-i\Omega t}=$

$=$ (т.к. для $\forall A$, для кот. $\exists A^n$ $e^A\cdot e^{-A}\equiv 1$) $=$

$$=e^{i\Omega t}F^2e^{-i\Omega t},$$

т.е. матр. ф. F^2 удовл. тем же условиям и имеет тот же спектр. состав,

* Если мы будем воспринимать координаты, потенциалы и т.п. как матричные функции, то получим полное согласие с экспериментальными фактами по спектру частот. *

$\forall f(F)$: $f(F)=e^{i\Omega t}fe^{-i\Omega t}$

Согл. Бору $\boxed{\omega_m=\frac{E_m}{\hbar}}$

Введем энергетич. матрицу

$$H=\hbar\Omega$$

Комп-ты этой матрицы - энергии отдельных боровских орбит

$$(H)_{mn}=E_m\delta_{mn}$$

$$\boxed{F(t)=e^{\frac{i}{\hbar}Ht}Fe^{-\frac{i}{\hbar}Ht}}$$ - интегральная форма ур-ния Гайзенберга (эволюция во времени физ. велич. F)

$$\frac{dF}{dt}=\frac{i}{\hbar}He^{\frac{i}{\hbar}Ht}Fe^{-\frac{i}{\hbar}Ht}-e^{\frac{i}{\hbar}Ht}Fe^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\cdot\frac{i}{\hbar}H=$$

$= \frac{i}{\hbar}[H, \mathcal{F}(t)]$

$$\boxed{\frac{d\mathcal{F}}{dt} = \frac{i}{\hbar}[H, \mathcal{F}(t)]}$$ Уравнение Гейзенберга

14.02.07
лекция 3.

H от времени не зависит (энергия)

Это соотн. верно и для ∀ ф-ции $\mathcal{F}$:

$\varphi(\mathcal{F}(t)) = e^{\frac{i}{\hbar}Ht}\varphi(\mathcal{F})e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$

① Кинематический постулат

Всем физ. величинам мы должны сопоставл., с т. зр. их матем. образов, не функции, а матрицы.
(Величины ведут себя так, как если бы они были матрицами).

Проверим, насколько этот пост. дает возм. постр. непротиворечив. дин. схему, кот. бы позв. вычисл. все, что нам нужно

В этих ур-ях есть ассиметрия, т.к. матр. гам. явл. веден. - диагон.

В этих ур-ях есть степ. свободы.

Если все величины будем менять по закону $\mathcal{F} \to \mathcal{F}' = S^{-1}\mathcal{F}S$ при $\det S \neq 0$

© $H \to H' = S^{-1}\mathcal{F}S$ (преобр-ие подобия)

$\varphi(S^{-1}\mathcal{F}S) = \sum_{n=0}\varphi_n(S^{-1}\mathcal{F}S)^n =$

$= \sum_{n=0}^{\infty}\varphi_n S^{-1}\mathcal{F}\cancel{S}\cdot\cancel{S^{-1}}\mathcal{F}\cancel{S}\cdot\ldots\cdot\cancel{S^{-1}}\mathcal{F}S =$

$= S^{-1}\sum_{n=0}^{\infty}\varphi_n\mathcal{F}^n S \Rightarrow$

$\Rightarrow \varphi(\mathcal{F}') = S^{-1}\varphi(\mathcal{F})S$ (∀ ф-ция от $\mathcal{F}$, если мы ее преобр-м, преобр. со также)

Тогда

$\varphi(\mathcal{F}'(t)) = S^{-1}\varphi(\mathcal{F}(t))S =$

$= \underbrace{S^{-1}e^{\frac{i}{\hbar}Ht}\,\text{[redacted]}\,S}_{e^{\frac{i}{\hbar}H't}}\underbrace{S^{-1}\varphi(\mathcal{F})S}_{\varphi(\mathcal{F}')}S^{-1}e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}S =$

$= e^{\frac{i}{\hbar}\underbrace{S^{-1}HS}_{H'}t}\cdot\varphi(\mathcal{F}')\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}\overbrace{S^{-1}HS}^{H'}t} =$

$= e^{\frac{i}{\hbar}H't}\varphi(\mathcal{F}')\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}H't}$

Теперь исх. диаг. матр. H уже не явл. диаг., при этом ур-ние Гейзенберга не поменялось:

$$\frac{d\varphi(\mathcal{F}')}{dt} = \frac{i}{\hbar}[H', \varphi(\mathcal{F}')]$$

В мех. ур. движ. могут быть получены из гамильтоновой ф-ции и скобок Пуассона ($\{q_a p_b\} = \delta_{ab}$)

Как, если это так, перенесется этот принцип на кв. мех.?

H рассм. как ф-цию исх. перем-х:

$H = H(\mathcal{F}_1, \ldots \mathcal{F}_s)$

Если имеем совок. в исх. коммутаторов $[F_n, F_m]$, то дост. ли задание этих ком-в для примен. схемы из мех.-ки?

Коммутатор произв. матриц A, B с третьей м. C:

$$[AB, C] = ABC - CAB =$$

$$= ABC - ACB + ACB - CAB =$$

$$= A[B,C] + [A,C]B$$

$$\boxed{[AB, C] = A[B,C] + [A,C]B}$$

$$\boxed{[A_1 \dots A_n, B] = \sum_{k=1}^{n} A_1 \dots A_{k-1}[A_k, B]A_{k+1} \dots A_n}$$

Пусть имеем

$$\frac{dA_l}{dt} = \frac{i}{\hbar}[H, A_l] \quad , l = 1, \dots, s$$

Следует ли отсюда, что из этих ур-ий $\Rightarrow$ ур-ие для $F = A_1 \dots A_s$? Да, следует. Покажем.

$$\frac{dF}{dt} = \sum_{l=1}^{s} A_1 A_{l-1} \frac{dA_l}{dt} A_{l+1} \dots A_s =$$

$$= \sum_{l=1}^{s} A_1 \dots A_{l-1} \frac{i}{\hbar}[H, A_l]A_{l+1} \dots A_s =$$

$$= \frac{i}{\hbar}[H, A_1 \dots A_s] = \frac{i}{\hbar}[H, F]$$ ч.т.д. как и в мех-ке

Т.е. в матр. механике, вып. св-во: если знаем дин-ку исх. величин, из ком. строится составная, то ур-ие движ. состав. - следствие ур. движ. исх. величин, из кот. строится состав. Достаточно знать динамику элемент. величин, чтобы из них $\Rightarrow$ ур-ие движ.

$$\frac{dF_l}{dt} = \frac{i}{\hbar}[H, F_l]$$

$$\downarrow$$

$$\frac{d\varphi(F_1 \dots F_s)}{dt} = \frac{i}{\hbar}[H, \varphi]$$

Нам дост. задать H как ф-ю $F_1 \dots F_s$ $H = H(F_1 \dots F_s)$ и зафиксир. ком-ры $[F_n, F_m]$, тогда ур-ие Гейзенберга самосогласовано

$$H = \sum_{\{l\}} h_{l_1 \dots l_s} F_1^{l_1} \dots F_s^{l_s}$$

$$\frac{dF_k}{dt} = \frac{i}{\hbar}[H, F_k],$$

Динамический постулат: динамика величин подчиняется ур-нию Гейзенберга

$$[\underset{A_1}{F_1^{l_1}} \dots \underset{A_s}{F_s^{l_s}}, F_k] = \sum_{n=1}^{s} A_1 \dots A_{n-1}[A_n, F_k]A_{n+1} \dots A_s$$

• Кв. мех. явл. обобщ. класси. в том см., что она не вносит никакого нового в-ия.

Гам. ф-ция явл. инв. (по форме) и вкл. и в кв. механике (по кр. мере, для окр. мира - эл. сил, атомов, молекул)

21.02.07 лекция 4.

Ранее в кач-ве группы инвар-ти фигурировало преобр-ие подобия. Его нужно сузить, т.к. там и при таком преобр-ии (мы знаем что $\exists$ такая форма H, что матр. диагон., и на диаг. - СВ $\Rightarrow$ матр.

H должно с пом. такого преобраз. переводится в диаг. форму).
H и F равноправны ($F \to F' = S^{-1}FS$, $H \to H' = S^{-1}HS$) ⇒ естеств. (предпол.)
Потребовать то же от других величин (что надо. диаг. H - энергии - диаг. эл-ты матрицы).

③ Постулат об измерениях

∀ физ. величины спектр возможных значений - это совок-ть значений ~~матрицы~~ (собств.) матрицы, приведенной к диагональной форме.

Возникает доп. условие: если мы хотим, чтобы матрица, привед. к диаг. виду, содержала на диаг. только действ. число, то нужно сузить класс матриц → конечномерные эрмитовы (матрицы величин) и класс матриц, осуществляющих преобр-ие до унитарных матриц $S = U$, $U^+ = U^{-1}$, т.к. у эрмитовой матрицы СЗ действ.

+ Теор. ∀ ~~[...]~~ конечном.(!) эрмитову матрицу можно привести к диаг. виду:
∃ унит. матрица U, такая, что
$\forall F(N \times N) \to f = U^+ F U$
диаг. матрица

Если матрица ∞-мерная, то эта теор. неверна.

Выясним, как выглядят коммутац. соотношения.

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(q)$$ - если вместо p и q - эрм. матр, то и H - тоже эрм. матрица.

При переходе в кв. мех. вместо q и p, H - эрмитовы матрицы

Должны потребовать от ур-ий Гайз., чтобы они по форме совп. с классическими.

$$\dot{q} = \frac{i}{\hbar}[H, q]$$

$$\dot{p} = \frac{i}{\hbar}[H, p]$$

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

$$\dot{q} = \frac{p}{m} \qquad \dot{p} = -\frac{\partial V}{\partial q}$$

$$\dot{q} = \frac{i}{\hbar}\left[\frac{p^2}{2m} + \cancel{V(q)}, q\right] =$$

$$= \frac{i}{2\hbar m}\left(p[p,q] + [p,q]p\right) \underset{\text{клас.}}{\overset{\text{б}}{=}} \frac{p}{m}$$

Если $[p, q] = -i \cdot \hbar \cdot \mathbb{1}$, то все верно
единичн. матр.

$$\dot{p} = -\frac{\partial V}{\partial q}$$

$$\dot{p} = \frac{i}{\hbar}[H, p] = \frac{i}{\hbar}[V(q), p]$$

* Пусть $[A, B] = C$ и пусть $[B, C] = 0$, тогда ∀ ф-ции F: $[F(B), A] = F'(B)[B, A]$ *

$[q, p] = i\hbar \cdot \mathbb{1} \Rightarrow$

$p = \frac{i}{\hbar}\cdot\frac{\partial U}{\partial q}(q)\, \underbrace{[q,p]}_{i\hbar} = -\frac{\partial U}{\partial q}$

$\underline{[q,p] = i\hbar\cdot 1}$

$(AB)^+ = B^+A^+$

$[q,p]^+ = (qp-pq)^+ = pq - qp = [p,q] =$

$= -i\hbar\cdot 1$

Если перейдем к другой форме матриц p и q:

$q \to q' = U^+ q U$, (унитар. преобр)

$p \to p' = U^+ p U$,

то канонич. коммутатор

(при таком преобр. эрмитова матр. переходит в эрмитову

$F'^+ = (U^+FU)^+ = U^+FU = F'$)

$U^+[q,p]U = [U^+qU, U^+pU] =$

$= U^+qpU - U^+pqU =$

$= U^+q\underbrace{UU^+}_{1}pU - U^+p\underbrace{UU^+}_{=1}qU = [q',p'] =$

$= i\hbar U^+1U = i\hbar$

Коммутатор сохр. ся $[q(t), p(t)] = i\hbar\cdot 1$

$F(t) = e^{\frac{i}{\hbar}Ht}F(0)e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$ — реш. ур. Гейз. в интегр. форме

Ue^{iA}, $A = A^+$

$U^+ = U^{-1}$ — унитар. пер-р/матрица

$U^+ = e^{-iA} = U^{-1}$

Эволюция во вр. $\forall$ велич. F — это унитарное преобразование $\Rightarrow$

$[q(t), p(t)] = i\hbar$ всегда один и тот же (не меняется со вр.)

$[q(t), p(t')] = ?$

$[q(t), q(t')] = ?$

Если много степеней свободы

$\{q_a, p_a\}_{a=1}^N$

$[q_a, p_b] = i\hbar\,\delta_{ab}$

$[q_a, q_b] = [p_a, p_b] = 0$

Принцип канонического квантования.

Скобки Пуассона $\{q_a, p_a\}_{a=1}^N$

Для любых двух ф-ций A и B от q и p скобка Пуассона:

$$\{A, B\} = \sum_{a=1}^{N} \left(\frac{\partial A}{\partial q_a} \frac{\partial B}{\partial p_a} - \frac{\partial A}{\partial p_a} \frac{\partial B}{\partial q_a} \right)$$

$$\{q_a, p_b\} = \delta_{ab}$$

$$\{A, B\} = -\{B, A\}$$

$$\{\alpha_1 A_1 + \alpha_2 A_2, B\} =$$

$$= \alpha_1 \{A_1, B\} + \alpha_2 \{A_2, B\}$$

Тождество Якоби:

$\{A, \{B, C\}\} +$ цикл $\equiv 0$

$$[A, B] = -[B, A]$$

$[A, [B, C]] +$ цикл $\equiv 0$

Переход $\{\ \} \to [\ ]$:

$$\{,\} \to \frac{i}{\hbar}[\ ] -$$

принцип канонич. квантования

$\{q^2, p^2\} = 4qp \overset{\text{в кв. мех. нет}}{=} 4pq$

(18)

27.02.07. Лекция 5.

Квантовомеханическая теория измерений

Как по матрицам вычислять измеренные величины?

// Дж. фон Нейман „Математический(ие) аппарат (основы) квантовой механики" //

$$F \to F' = S^{+} F S \qquad S^{+} S = 1$$

(S - унитар., F - эрмитова)

Среди унитар. преобр. есть 1 выделенное, кот. порождается матрицей

$(S_1)_{mn} = e^{i\varphi_n} \delta_{mn}$ - фазовая матрица

$$(S_1^{+})_{mn} = e^{-i\varphi_n} \delta_{mn} = (S_1^{-1})_{mn}$$

$$(F')_{mn} = (S_1^{-1})_{nk} F_{kl} (S_1)_{ln} =$$

$= F_{mn} \, e^{i(\varphi_n - \varphi_m)} \to$ фазовая свобода

Пусть есть матрица $F \to f = S^{+} F S$

$(f)_{mn} = f_n \delta_{mn}$ (диагональная)

Пусть физ. велич. F такова, что все СЗ соотв., т.е. все возм. значения дан. физ. величины невырождены:

$f_k \neq f_l$, если $k \neq l$

(19)

такая величина наз-ся „с чисто дискретным невырожденным спектром".

Если она такая ↑, то преобразование, переводящее ее м. в диаг. форму, определено однозначно с точностью до S_1:

$$S \to S' = SS_1.$$

Док-во. Пусть F переводится 2-мя возможн. способами: S и U. Диагональные формы совпадают

$$\mathcal{F} \to f = U^+ \mathcal{F} U. \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \mathcal{F} = U f U^+$$

Должно выполняться рав-во:

$$f = \underbrace{S^+ U}_{W^+} f \underbrace{U^+ S}_{W}$$

$$f = W^+ f W, \quad W^+ = W^{-1}$$ (т.е. произв. унит. мат.- унит. матрица)

$$W^+ = (U^+ S)^+ = S^+ U = S^{-1} U = (U^+ S)^{-1} =$$

$$Wf = fW$$, т.е. диаг. мат. f должна коммут. с унит. W W^{-1}

$$(Wf = fW)_{mn}$$

$$W_{mn} f_n = f_m W_{mn}$$

$$W_{mn}(f_m - f_n) = 0 \quad \forall m, n$$

Пусть $m \neq n$. Если $f_m \neq f_n$, то $W_{mn} = 0$

$W_{mn} \neq 0$ если $m = n$. $\Rightarrow$

$\Rightarrow W_{mn}$ - диаг.

А диаг. унит. матрица может быть только фазовой

$$W_{mn} = e^{i\varphi_n} \delta_{mn}, \text{ т.е.}$$

$$U^+ S = S_1$$

$$S = U S_1$$

// фон Нейман делал так: //

Пусть есть 2 величины, не связ. преобразованием. Пусть в условиях нашего измерения величина F имеет точное значение (одно из диагон. элем. матр. $\mathcal{F}$) f_l, тогда

$$\mathcal{F} = S f S^+, \quad T = T^+ \quad \mathcal{F} = \mathcal{F}^+$$

$$\mathcal{F}_{mn} = \sum_l S_{ml} f_l S^{-1}_{ln}.$$

Исследуем, что нам даст измерение величины T (если мерили F, получили f_l, а T-?).

Если померить однократно - неизвестно что.

Кв. мех. дает ответ, что будет только для сред. величины

$$\langle T \rangle_l = (S^{-1} T S)_{ll}$$

1) Ср. величина $\langle T\rangle_e$ · действительная

$$\langle T\rangle_e^* = (S^+TS)^*_{ee} =$$

$$= [(S^+TS)^+]_{ee} = (S^+TS)_{ee}$$

2) Если $T=1$, то и сред. тоже должно быть 1:

$$\langle T\rangle_e = (S^{-1}S)_{ee} = 1$$

3) Если $T=0$, то $\langle T\rangle_e = 0$

4) Если $T = \alpha A + \beta B$, то $\langle T_e\rangle = \alpha\langle A\rangle_e + \beta\langle B\rangle_e$
эрмит. матр

5) Если $T = F$, то $\langle F\rangle_e = (S^{-1}S f S^{-1}S)_{ee} =$
$= (f)_{ee} = f_e$, как и должно быть

6) Матрица S определена неоднозначно:

$$S \Rightarrow S' = S\cdot S_1$$

Если S', то

$$\langle T\rangle_e = (S'^{-1}TS')_{ee} = (S_1^{-1}S^{-1}TSS_1)_{ee} =$$

$= e^{-i\varphi_e}(S^{-1}TS)_{ee}\,e^{i\varphi_e}$ – то же, что и было

т.е. ф-ла $\langle T\rangle_e = (S^{-1}TS)_{ee}$ удовл. всем требованиям для среднего значения.

Т.к. имеем дело со средним, необх. ввести дисперсию:

$$D_e(T) = \langle (T - \langle T\rangle_e)^2\rangle_e$$

Введем матрицу $B = T - \langle T\rangle_e = B^+$ (она тоже эрмитова). Тогда

$$D_e(T) = \langle B^2\rangle_e = (S^{-1}B^2S)_{ee} =$$

$$= (\underbrace{S^+B^+}_{d^+}\underbrace{BS}_{d})_{ee} = (d^+d)_{ee} =$$

$$= \sum_p \underset{d^*_{pe}}{\underset{\parallel}{(d^+)_{ep}}}\, d_{pe} = \sum_p |d_{pe}|^2 \geq 0$$

Пусть теперь, что величина T тоже имеет определенное точное значение, тогда дисперсия равна нулю и

все $\underline{d_{pe} = 0}$ для данного фикс. e.

При этом сред. знач. $\langle T\rangle_e$ можно сопоставить число t_e, кот. должно совпасть с одним из диаг. эл-тов матрицы T:

$$\langle T\rangle_e = t_e.$$

Пусть теперь перебирая все вел. F и измеряя при этом T, будем иметь одно и то же диаг. T,
Если эти усл. вып-ся для всех l то вся матрица бре будет нулевой, т. обр.,

$$d = B\cdot S$$

$$d = 0 \Leftrightarrow (T - \langle T\rangle) S = 0,$$

t - диаг. матр. в кот. трив-ся T

$$TS = tS = St$$

т.к. t - диаг.

$$T = StS^{+}$$

$$F = SfS^{+}$$

Если 2 физ. велич. одновремен. измеримы, то для того, чтобы они могли быть измеримо обеих матрицы должны иметь одну и ту же структуру - они должны одним и тем же унитарным преобр. перев. в диаг. форму => они должны коммутировать

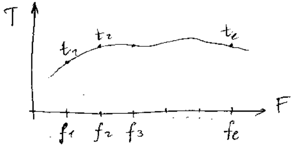
$$[F, T] = FT - TF =$$

$$= SfS^{+}StS^{+} - \ldots = S[f,t]S^{+} = 0$$

f, t - диаг., а диаг всегда коммутируют =>

Для того, чтобы велич. могли быть одновр. измеримы точно, необх., чтобы их матрицы коммутировали $[F,T]=0$

28.02.07 Лекция 6.



$$t_l = \varphi(f_l) \quad \forall l$$

$$t = \varphi(f_l)$$

$$T = StS^{-1} = \varphi(SfS^{-1}) = \varphi(F)$$

Если имеем дело с велич. T, кот. коммутир. с др. велич. F с чисто дискр. невыр. спектром, то T - ф-ция F.

Если F - велич. с чисто дискр. невырожд. спектром, то $\forall$ эрмитова матр. коммутир. с диаг. матр. f, тоже будет диагон.

$$[T, f] = 0$$

$$([T,f])_{mn} = T_{mn}f_n - f_m T_{mn}$$

$$0 = T_{mn}(f_n - f_m)$$

( ) = 0 тогда и т.д., когда $m=n$ => $T_{mn}=0$ только если $m \neq n$ =>

$\Rightarrow T_{mn}$ - диагональная

$$T_{mn} = t_n \delta_{mn}$$

Если бы спектр был вырожден у F, то скобка $= 0$ при $m \neq n$ мало бы

$$T_i = \varphi_i(F)$$

$$[T_i, T_j] = 0$$

Только эти величины имеют точное значение.

Столбец $|u_e\rangle$ — Состояние

Каждый столбец опр-ся набором матр. эл-тов

$$\{u_m^{(e)} = S_{me} e^{i\varphi_e}\}$$

Вводим сопряж. этому столбцу строку

$\langle u_e|$, она опис-ся совок-тью

$$\{u_m^{*(e)} = S^{-1}_{em} e^{-i\varphi_e}\}$$

$$\langle T\rangle_e = (S^{-1} T S)_{ee} = S^{-1}_{em} T_{mn} S_{ne} =$$
$$= u_m^{*(e)} T_{mn} u_n^{(e)} = \langle u_e | T | u_e\rangle$$

$$\langle u_e | u_{e'}\rangle = e^{-i\varphi_e} \underbrace{S^{-1}_{em} S_{me'}}_{\delta_{ee'}} e^{i\varphi_{e'}} =$$

$= \delta_{ee'}$ $\Rightarrow$ это ортонормированный набор

$$\left(\sum_e |u_e\rangle\langle u_e|\right)$$

// $A = |a\rangle\langle b|$ - матрица

$$A|c\rangle = \underbrace{|a\rangle \underbrace{\langle b|c\rangle}_{\text{число}}}_{\text{другой столбец}}$$

Объект, кот. переводит столб. в столб, стр в стр. - матрица

$$A_{nm} = a_n b_m$$

$$\left(\sum_e |u_e\rangle\langle u_e|\right)_{mn} =$$

$$= \sum_e S_{me} e^{i\varphi_e} e^{-i\varphi_e} S^{-1}_{en} = \delta_{mn}$$

$$\sum_e |u_e\rangle\langle u_e| = 1$$

$$\sum_e |u_e\rangle\langle u_e|a\rangle = |a\rangle$$

u_e - базис, причем ортонормир.

Т. обр.,

$\langle T\rangle = \langle u_e|T|u_e\rangle$

диаг. матр. эл-т по базисным векторам u_e.

$\mathcal{F}_{mn} = S_{me} f_e S^{-1}_{en}$

$\mathcal{F} = S f S^{-1}$

$= S_{me} e^{i\varphi_e} f_e e^{-i\varphi_e} S^{-1}_{en} =$

$= \sum_e U^{(e)}_m f_e U^{*(e)}_n$

$\mathcal{F} = \sum_e |u_e\rangle f_e \langle u_e|$

Проверим

$\left(\mathcal{F} = \sum_e |u_e\rangle f_e \langle u_e|\right)_{mn} = ?$

$\Rightarrow \mathcal{F}_{mn} = \sum_e S_{me} \cancel{e^{i\varphi_e}} f_e S^{-1} \cancel{e^{-i\varphi_e}}$

Эта ф-ла имеет еще смысл:

$\mathcal{F} = \sum_{e'} |u_{e'}\rangle f_{e'} \langle u_{e'}|$

$\mathcal{F}|u_e\rangle = \sum_{e'} |u_{e'}\rangle f_{e'} \underbrace{\langle u_{e'}|u_e\rangle}_{\delta_{ee'}} =$

$= f_e|u_e\rangle$, т.е.

$|u_e\rangle$ – СВ матр. $\mathcal{F}$ (столбцы)

f_e – СЗ матр. $\mathcal{F}$

$[T, \mathcal{F}] = 0$

$\langle u_e|[T,\mathcal{F}]|u_{e'}\rangle = \langle u_e|T|u_{e'}\rangle f_{e'} -$

$- f_e \langle u_e|T|u_{e'}\rangle =$

$= (f_{e'} - f_e)\langle u_e|T|u_{e'}\rangle = 0$

$\langle u_e|T|u_{e'}\rangle = t_e \delta_{ee'} \Rightarrow$

в базисе u матр. T имеет диаг. вид.

Поск. $t_e \delta_{ee'} = \underline{t_e \langle u_e|u_{e'}\rangle} = \langle u_e|T|u_{e'}\rangle$

и это верн. $\forall$ некоррелир. e и e',

и u_e и $u_{e'}$ – базисы, то

$T|u_e\rangle = t_e|u_e\rangle$

2 матр. имеют общий набор СВ (если одна из них – с чисто дискр. невырожд. спектром и они коррелир.), разные у них только СЗ.

$\varphi(\mathcal{F}) =$

$\mathcal{F}^2 = \sum_{ee'} |u_e\rangle f_e \underbrace{\langle u_e|u_{e'}\rangle}_{\delta_{ee'}} f_{e'} \langle u_{e'}| =$

$= \sum_e |u_e\rangle f_e^2 \langle u_e|$ – практич. то же, что и для F, только $f_e \to f_e^2$

По индукции, для $\varphi(F)$:

$$\varphi(F) = \sum_e |u_e\rangle \varphi(f_e) \langle u_e|$$

Для того, чтобы выяснить, какие будут знач. у величины, нужно найти СЗ и СВ, а у ф-ции от исх. велич. будут такие же СВ, но другие СЗ.

~

А что будет, если T не коммутирует с F?

Пусть T тоже велич. с чисто дискр. невырожд. спектром, кот. не св. и ф-ция от F и не коммутир. с ней, т.е. матрица: $[F, T] \neq 0$

Тогда можно записать:

$$T = \sum_s |v_s\rangle t_s \langle v_s|$$

$$T|v_s\rangle = t_s|v_s\rangle$$

$\langle v_s|v_{s'}\rangle = \delta_{ss'}$ – ортонорм. базис

$$\langle T\rangle_e = \langle u_e|T|u_e\rangle = \sum_s t_s \langle u_e|v_s\rangle\langle v_s|u_e\rangle =$$

$$= \sum_s t_s \underbrace{|\langle u_e|v_s\rangle|^2}_{P_{es}}$$

взвеш. сред. по всем возм. точн. зн. T с весами, кот. опр-ся u_e и v_s

Коэф-ты при всех точных знач. t_s, кот. появл. в серии измерений, это вероятности (статист. веса)

$$0 \le |\langle u_e|v_s\rangle|^2 \le \|u_e\|^2 \cdot \|v_s\|^2$$

$\|u_e\|^2 = \langle u_e|u_e\rangle = 1$, т.к. базис ортонормир. $\Rightarrow$

$\Rightarrow 0 \le P_{es} \le 1$ – как и для статистич. веса!

$$\sum_s P_{se} = 1 = \sum_s \langle u_e|v_s\rangle\langle v_s|u_e\rangle =$$

$$= \langle u_e|\underbrace{\left(\sum_s |v_s\rangle\langle v_s|\right)}_{1}|u_e\rangle = \langle u_e|u_e\rangle = 1$$

Если имеем чистое сост., в кот. велич. F с чисто дискр. невырожд. спектром имеет точное знач., то вероятность, с кот. при измер. велич. T мы получим t_s, опред-ся матр. P_{se}:

$$\langle F\rangle_s = \sum_e f_e P_{se}$$

7.03.07. Лекция 7.

Если величины не коммутируют, одновременного точного измерения мы провести не можем. Соотношение, характеризующее эту несоизмеримость, соотношение неопределенности

Пусть $[A,B]=iC$

$\langle A\rangle=\bar A$

$\langle B\rangle=\bar B$

$A_1=A-\bar A \qquad B_1=B-\bar B$

$A=A^+ \qquad B=B^+ \qquad C=C^+$

$[A,B]^+=[B,A]=-iC^+=-iC \Rightarrow$ ↑ не соотв. напрямую никакой физ. величине

$\qquad\qquad \underset{-iC}{\parallel}$

Введем оператор $M=A_1+i\lambda B_1$,

где λ – ∀ действительное число

$M^+=A_1-i\lambda B_1$

Вычислим среднее значение T:

$T=M^+M$

$T^+=(M^+M)^+\overset{*}{=}T \Rightarrow$ ему можно сопоставить (мысленно) какую-то физич. величину.

$\langle T\rangle=\langle u_e|T|u_e\rangle\overset{*}{=}$

// $F|u_e\rangle=f_e|u_e\rangle$ //

$\overset{*}{=}\langle u_e|M^+M|u_e\rangle=\sum_n\langle u_e|M^+|u_n\rangle\langle u_n|M|u_e\rangle$,

$1=\sum_n|u_n\rangle\langle u_n|$

но ∀ $\langle u|A|v\rangle=\langle v|A^+|u\rangle^*$, тогда

$\langle T\rangle=\sum_n|\langle u_n|M|u_e\rangle|^2\geq 0$

$\langle M^+M\rangle=\langle(A_1-i\lambda B_1)(A_1+i\lambda B_1)\rangle=$

$=\langle A_1^2+\lambda^2B_1^2+\underbrace{i\lambda A_1B_1-i\lambda B_1A_1}_{i\lambda[A_1,B_1]}\rangle\overset{*}{=}$

$[A_1,B_1]=[A-\bar A,B-\bar B]=[A,B]=iC$

$\langle A_1^2\rangle=\langle(A-\bar A)^2\rangle=D(A)$ – дисперсия A

$\langle B_1^2\rangle=D(B)$

$\langle T\rangle\geq 0$

$\overset{*}{=}D(A)+\lambda^2D(B)+i\lambda i\langle C\rangle=$

$\overset{*}{=}D(A)+\lambda^2D(B)-\lambda\langle C\rangle\geq 0 \quad \forall\lambda$

Кв. трехчлен $>0 \Rightarrow$ дискриминант <0:

$\Delta=\langle C\rangle^2-4D(A)D(B)\leq 0$

$\boxed{D(A)D(B)\geq\frac{\langle C\rangle^2}{4}}$ – соотношение неопредел-ти

Частный случай: $[q,p]=i\hbar\cdot\mathbb{1}$

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

Условие достижения нижней грани соотнош. неопр-ти – это равенство $\langle T\rangle=0$

Т.к. $\langle T\rangle=\sum|\langle u_n|M|u_e\rangle|^2$, то $\langle T\rangle=0$ возможно только если $\boxed{M|u_e\rangle=0}$

$\langle u_e|M^+M|u_e\rangle=\langle v_e|v_e\rangle$

$\boxed{|v_e\rangle=M|u_e\rangle}=$

$\langle v_e|v_e\rangle=\langle v_e|M|u_e\rangle=\langle u_e|M^+|v_e\rangle^*=$

$= \langle u_e | M^+ M | u_e \rangle^* = \langle u_e | M^+ M | u_e \rangle = \langle v_e | v_e \rangle \geq 0$

В частности,

$[(q-\bar{q}) + i\lambda (p-\bar{p})] |u\rangle = 0$

$\{|u_e\rangle\}$ $\{\langle u_e|\}$

$\mathbb{1} |z\rangle = \sum_e |u_e\rangle\langle u_e| \cdot |z\rangle = \sum_e z_e |u_e\rangle$

$z_e = \langle u_e | z \rangle$

$\{|z\rangle\}$

Из $\forall$ совок-ти нормир. векторов лин. независ. мы всегда можем выбрать ортонорм. базис (метод Грамма-Шмидта)

Пусть есть посл-ть векторов

$|v_1\rangle, |v_2\rangle, \ldots$ (их столько, какова размерность пр-ва)

$\langle v_i | v_i \rangle = \|v_i\|^2 = \sum_n |v_n|^2 < \infty$

$|e_1\rangle = \frac{|v_1\rangle}{\|v_1\|}$ $\langle e_1 | e_1 \rangle = \frac{\langle v_1 | v_1 \rangle}{\|v_1\|^2} = 1$

Строим вспом. вектор

$|w_2\rangle = |v_2\rangle - |e_1\rangle\langle e_1 | v_2\rangle$

(проекция $|v_2\rangle$, ортог. к $|v_1\rangle$)

$\langle e_1 | w_2 \rangle = \langle e_1 | v_2 \rangle - \langle e_1 | v_2 \rangle = 0 \Rightarrow$ e_1 ортог. w_2

$|e_2\rangle = \frac{|w_2\rangle}{\|w_2\|}$ $\langle e_1 | e_2 \rangle = 0$

$|w_3\rangle = |v_3\rangle - |e_1\rangle\langle e_1 | v_3\rangle - |e_2\rangle\langle e_2 | v_3\rangle$

$\langle e_1 | w_3 \rangle = \langle e_1 | v_3 \rangle - \langle e_1 | v_3 \rangle = 0$

$\langle e_2 | w_3 \rangle = 0 \Rightarrow w_3$ ортог. e_1, e_2

$e_3 = \frac{|w_3\rangle}{\|w_3\|}$

$\langle e_1 | e_2 \rangle = \langle e_1 | e_3 \rangle = \langle e_2 | e_3 \rangle = 0$

Перебирая так все вектора, получим ортонорм. базис

$\{|e_n\rangle\}$, $\langle e_n | e_m \rangle = \delta_{nm}$

Базис можно выбрать из

$\forall \{|z\rangle\}$, если $\|z\| < \infty$

Лин прост-во векторов $\{|z\rangle\}$ с конечной нормой $\|z\| < \infty$ l_2.

$\alpha_1 |z_1\rangle + \beta |z_2\rangle = |z\rangle$.

$\forall$ вектор $|z\rangle$ этого пр-ва может быть выбран как первый вектор $|v\rangle$, пороxд. базис методом Гр-Шмидта

$\forall |z\rangle \Rightarrow \{|e_n\rangle\}$, $|e_1\rangle = \frac{|z\rangle}{\|z\|}$

Базис $\{|e_n\rangle\}$ такой же, как базис $\{|u_e\rangle\}$.

Тогда, т.к. $F = \sum_e |u_e\rangle f_e \langle u_e|$, то

$G = \sum_n |e_n\rangle g_n \langle e_n|$ $|e_n\rangle$ - СВ

$G|e_n\rangle = g_n |e_n\rangle$ g_n - СЗ

$|e_1\rangle \Leftrightarrow |z\rangle \in l_2$

Каждому $|z\rangle$ пр-ва l_2 можно сопоставить (по кр. мере, в рамках этой лекции) величину с чисто дискр. невырожд. спектром с точными знач. g_n и СВ $|e_n\rangle$.

Пр-во векторов $|z\rangle$ с конеч. нормой это собой в всех чистых сост-ий в квантовой системе.

Т. обр., каждому чистому сост. соотв. вектор с конеч. нормой, или луч

$|z_1\rangle \to |e_1\rangle \to g_1$

$|z_2\rangle \to |h_1\rangle \to f_1$

Поск. l_2 - пр-во линейное, то можно построить $|z\rangle = \alpha_1|z_1\rangle + \beta\alpha_2|z_2\rangle$ и

$|z\rangle \to |k_1\rangle \to l_1$

Есть 2 чистых состояния $|z_1\rangle$ и $|z_2\rangle$ и лин. комб. этих векторов снова дает чистое состояние $|z\rangle$: это принцип суперпозиции состояний.

Если $\langle z_1|z_2\rangle = 1$ и $\langle z_2|z_2\rangle = 1$, то

$\langle z|z\rangle = 1$, и

$|\langle z_1|z\rangle|^2 = P_1$ - вер-ть того, что

если мы нах. в сост. z, то по рез-там измер. будем иметь z_1

$|\langle z_2|z\rangle|^2 = P_2$ — и z_2

13.03.07 Лекция 8.

l_2 - пр-во $\Leftrightarrow \{|z\rangle\}$ $\|z\| < \infty$

$\{|u_e\rangle\}$ $|z\rangle = \sum_e z_e|u_e\rangle$

Векторное пр-во, леж. в основе этой конструкции - это гильбертово прост-во $\mathcal{H}$.

Кв. механика - в гильб. пр-ве.

Это лин. пр-во ~~векторов~~ векторов, для кот.:

1) определено скал. произв-ие,

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

$\langle f|f\rangle = \|f\|^2 \geq 0$

$\langle f|f\rangle = 0 \Leftrightarrow |f\rangle = \emptyset$ (векторный ноль)

2) для скал. произв. должно вып-ся нер-во Коши-Буняковского:

$|\langle f|g\rangle|^2 \leq \|f\|^2 \cdot \|g\|^2$

вып-ся нер-во треугольника:

$\|f+g\| < \|f\| + \|g\|$

3) $\exists$ ортонормированный базис $\{|f_n\rangle\} \in \mathcal{H}$, такой что $\forall$ вектор $|z\rangle$ может быть предст. в виде лин. комб. базисных векторов:

$\forall |z\rangle = \sum_n z_n|f_n\rangle$;

$\langle f_n|f_m\rangle = \delta_{nm}$;

$z_n = \langle f_n | z \rangle$;

$$1 = \sum_n |f_n\rangle\langle f_n|;$$

$\langle f|g\rangle = \sum_n \langle f|f_n\rangle\langle f_n|g\rangle$ - св-во полноты;

Если $\langle f|f_n\rangle = 0 \ \forall n \Rightarrow |f\rangle = \varnothing$ - св-во замкнутости

Осн. св-во гильбертова пр-ва: все пр-ва устроены одинаково - они изоморфны друг другу.

Док-во. Пусть есть H_1 и H_2. Изоморфизм означает, что если есть в H_1 два вектора f_1, g_1, в H_2 - f_2, g_2, соотв-ие, то

$$\langle f_1|g_1\rangle = \langle f_2|g_2\rangle,$$

$$\alpha f_1 + \beta g_1 \longleftrightarrow \alpha f_2 + \beta g_2.$$

$H_1 \xrightarrow[\text{в соотв-ие пр-во столбцов}]{\text{поставим}} l_2$

$$|f_1\rangle = \sum_n f_n |e_n^{(1)}\rangle$$

$$\{f_n\} = |f\rangle \qquad f_n = \langle e_n^{(1)}|f\rangle$$

$\langle f_1|g_1\rangle = \sum_n f_n^* g_n \Rightarrow$ изоморфизм H_1 пр-ву l_2

То же самое проделаем с H_2:

$H_2 \to l_2 \qquad \Rightarrow$ изоморфизм H_1 и H_2

Матрица - реализация мин. операторы. Перейдем к операторам.

$$\langle u|T|v\rangle = \langle v|T^+|u\rangle^*$$

Теперь эрм. матрицы переходят в эрмитовы операторы:

$T = T^+$ и $U^+ = U^{-1}$ - унит. опер-ры

Унит. операторы сохр. норму

$$U|u\rangle = |u'\rangle$$

$$U|v\rangle = |v'\rangle$$

$$\langle u'|v'\rangle = \langle u|v\rangle$$

$$U|e_n\rangle = |e_n'\rangle$$

$$\langle e_n'|e_m'\rangle = \delta_{nm} = \langle e_n|e_m\rangle$$

И разложение по базису теперь!

$$T = \sum_n |e_n\rangle t_n \langle e_n|.$$

Ф-ции: $\varphi(T) = \sum_n |e_n\rangle \varphi(t_n) \langle e_n|$

$T|e_n\rangle = t_n|e_n\rangle$, $|e_n\rangle$ - СВ, t_n - СЗ

Введем теперь опер-р $|\psi\rangle \in H$,

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1,$$

$$\bar{T} = \langle\psi|T|\psi\rangle$$

$$D(T) = \langle\psi|(T-\bar{T})^2|\psi\rangle$$

$|\psi\rangle = |e_n\rangle \Rightarrow D(T) = 0 \Rightarrow$ чистое состояние

Если T - велич. с чисто дискр. невыр. спектром, то ∀ другая величина, кот. коммутирует с T будет явл. ее ф-цией:

$$[F, T] = 0$$

$$\Downarrow$$

$$F = \varphi(T)$$

Это следует из того, что

$$\langle e_n | [F, T] | e_m \rangle = (t_m - t_n) \langle e_n | F | e_m \rangle = 0$$

Если спектр невыр., то

$(\ ) \neq 0$ при всех $m \neq n \Rightarrow$

$F = \varphi(T)$ $\quad$ F - диаг. матрица

Если имеем $T|e_n\rangle = t_n |e_n\rangle$

$t_n \leftrightarrow |e_n\rangle$ -

если спектр невырожд.

Если спектр вырожд., $t_n \leftrightarrow |e_n'\rangle, |e_n''\rangle$.
Т.е. измерив знач. T, кот. вырожд., мы не можем точно сказать, какому вектору оно соответствует (т.е. в каком нах. система пол-ие состоянии).

Но указать напрямую велич. с ч. д невыр спектром очень сложно (кроме гарм. осциллятора одномерного - их очень мало).

Поэтому для того, чтобы определить, находимся мы в чистом сост. или нет, нужно ввести полный набор наблюдаемых

(40)

$\{F_1, F_2, \dots F_s\}$

$[F_i, F_j] = 0$

Каждая из них может не иметь чисто д. нев. спектра, но у них общий СВ:

$$F_i |f_1 \dots f_s\rangle = f_i |f_1 \dots f_s\rangle$$

И для каждого такого вектора набор СЗ уникален - каждому вектору сопоставляем опред. набор СЗ, для другого - другой:

$$(f_1 \dots f_s) \neq (f_1' \dots f_s')$$

Пример. Чтобы вычислить чистое сост. эл-на в атоме водорода, нам нужно знать не только энергию, но и ℓ (орбит. мом.), m (его проекцию). Совок-ть H (гам-н), ℓ, m - это полный набор наблюдаемых.

14.03.07 Лекция 9

(спектр. разложение эрмитов.)
Для гильбертова пр-ва оператора величины T по базису. $T = \sum_\ell |U_\ell\rangle t_\ell \langle U_\ell|$

$\langle U_\ell | U_{\ell'} \rangle = \delta_{\ell\ell'}$

$T|U_\ell\rangle = t_\ell |U_\ell\rangle$ (при этом спектр может быть вырожденным)

$\forall\ |\psi\rangle \in H$, $\langle\psi|\psi\rangle = 1$:

$$\langle\psi|T|\psi\rangle = \sum_\ell t_\ell \underbrace{|\langle U_\ell|\psi\rangle|^2}_{P_\ell}$$

вер-ть, что если в чистом сост. U_ℓ ...

(41)

// Курант, Гильберт Методы мат физики //

Общий вид эрмитового оператора в гильб. прост. вс. имеет сложную структуру => вид оператора величины $\mathcal{F}$ тоже имеет сложную структуру:

$$\mathcal{F} = \underbrace{\sum_\ell |u_\ell\rangle f_\ell \langle u_\ell|}_{\text{то, что соотв. дискр спектру}} + \int_a^b df\, |f\rangle f \langle f|$$

$\langle u_\ell|u_{\ell'}\rangle = \delta_{\ell\ell'}$ $\quad \langle f|f'\rangle = \delta(f-f')$

$\langle u_\ell|f\rangle = 0$

Непрерывно вектора $|f\rangle$ никакому чистому сост не соотв. (т.к. $\delta(0)=0$).

(Совокупность дискретных уровней + символич. интеграл по непр. спектру)

$$1 = \sum_\ell |u_\ell\rangle\langle u_\ell| + \int_a^b df\, |f\rangle\langle f|$$

$\forall$ вектор (вектор с конеч. нормой) гильб. пр-ва может быть представлен в виде лин. комб. векторов дискр спектра и разложения по непр. спектру:

$$|\psi\rangle = \sum_\ell a_\ell |u_\ell\rangle + \int_a^b df\, a_f |f\rangle,$$

$\|\psi\| < \infty$ $\qquad a_\ell = \langle u_\ell|\psi\rangle$

$a_f = \langle f|\psi\rangle$

Для дискр. спектра: $\mathcal{F}|u_\ell\rangle = f_\ell |u_\ell\rangle$

Для непр. спектра: $\mathcal{F}|f\rangle = \int_a^b df'\, |f'\rangle f' \overbrace{\langle f'|f\rangle}^{\delta(f-f')} =$

$= f|f\rangle$

Вектора непр. сп. - тоже СВ оператора $\mathcal{F}$ (физического смысла нет - никакой физич. величине это сост. не соответствует)

Берем чистое состояние $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ и воспользуемся полученным базисом (из дискр и непр. частей)

$$\langle\psi|\underbrace{\left(\sum_\ell |u_\ell\rangle\langle u_\ell| + \int_a^b df\, |f\rangle\langle f|\right)}_{=1}|\psi\rangle =$$

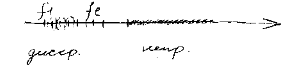
$$= \sum_\ell |\langle u_\ell|\psi\rangle|^2 + \int_a^b df\, |\langle f|\psi\rangle|^2 = 1$$

$$\langle\psi|\mathcal{F}|\psi\rangle = \bar{\mathcal{F}} = \sum_\ell f_\ell \underbrace{|\langle u_\ell|\psi\rangle|^2}_{\text{вер.-ть } P_\ell} + \int_a^b df\, f \underbrace{|\langle f|\psi\rangle|^2}_{\text{плотность верт. } \rho_f}$$

соотв. возм. дискр знач. величины

соотв. возм. непр. знач. величины

обнаруж. знач. f в инт-ле $(f, f+df)$



Зафиксировать 1 конкр. точку по непр. спектре мы не можем [redacted], в отличие от дискр спектра

$|\psi\rangle = \int df\, a_f |f\rangle$

$\langle\psi|\psi\rangle = 1 = \int df\, |a_f|^2$

$\mathcal{F} = \int_a^b df \cdot f \cdot |a_f|^2$ → плотность вер-ти

$a_f = \langle f | \Psi \rangle$

Пример. $[q, p] = i\hbar$

$S = e^{-\frac{i}{\hbar}ap}$, $\forall a \in Re$

$S^+ q S = q + a$

$\left(e^{\frac{i}{\hbar}ap} q e^{-\frac{i}{\hbar}ap} = q(a) \right.$

$\frac{dq}{da} = e^{\frac{i}{\hbar}ap} \cdot \frac{i}{\hbar} p \cdot q \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}ap} +$

$+ e^{\frac{i}{\hbar}ap} q \left(-\frac{i}{\hbar} p\right) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}ap} =$

$= \underbrace{e^{\frac{i}{\hbar}ap} \frac{i}{\hbar} \underbrace{[p, q]}_{= -i\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar}ap}}_{1} = e^{\frac{i}{\hbar}ap} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}ap} = 1 \Rightarrow$

$\Rightarrow q(a) = q + a$

S - оператор сдвига координаты на произв. величину a.

Пусть у опер-ра q есть дискр. СЗ и соотв. норм. вектор:

$q|q_0\rangle = q_0|q_0\rangle$,

$\langle q_0 | q_0 \rangle = 1$.

Тогда рассм. вектор $|q_0'\rangle = S(a) q_0$.

Поск. опер. S - унит. ($SS^+ = 1$), он сохраняет норму вектора $\Rightarrow \langle q_0' | q_0' \rangle = 1$.

$q|q_0'\rangle = \underbrace{qS}_{S(q+a)}|q_0\rangle =$ $(S^+ q S = q + a \Leftrightarrow qS = S(q+a))$

$= S(q_0 + a)|q_0\rangle = (q_0 + a)|q_0'\rangle$

$|q_0'\rangle = |q_0 + a\rangle$

Но q_0 и q_0' как СВ эрмит. оператора, соотв. разл. СЗ, должны быть ортогональны.

$\langle u_{e'} | \mathcal{F} | u_e \rangle = f_e \langle u_{e'} | u_e \rangle = \langle u_e | \mathcal{F} | u_{e'} \rangle^* =$

$= f_{e'} \langle u_{e'} | u_e \rangle$

$(f_e - f_{e'}) \langle u_e | u_{e'} \rangle = 0 \Rightarrow$ векторы, соотв. разл. СЗ, ортогон.

Если есть хотя бы один СВ опер. q, соотв. СЗ q_0, то получаем континуум СВ, кот. ортогон. между собой, но в гильб. пр-ве такого быть не может - в нем базис всегда счетный $\Rightarrow$ нужно заменить

$\langle q_0 | q_0 \rangle = 1$ на $\langle q_0 | q_0 \rangle = \delta(0) = \infty$

$\langle q_0 | q_0' \rangle = \delta(q_0 - q_0')$

У опер-ра q может быть только чисто непр. спектр $\Rightarrow$

$q = \int_{-\infty}^{+\infty} dq\, |q\rangle q \langle q|$, $\langle q | q' \rangle = \delta(q - q')$

$q|q_0\rangle = q_0|q_0\rangle$

$1 = \int |q\rangle dq \langle q|$

$|\Psi\rangle = \int dq\, |q\rangle\, \Psi(q)$

$\Psi(q) = \langle q | \Psi \rangle$ - волновая функция (!!!)

$\langle \Psi | \Psi \rangle = 1 = \int dq\, |\Psi(q)|^2$

$\bar{q} = \langle\Psi|q|\Psi\rangle = \int dq \cdot q \cdot \underbrace{|\Psi(q)|^2}_{\text{плотность вероятности}}$

В.ф. - это коорд. реализация чистого сост. сис-мы через базис (несобств. базис) СВ оператора q.

То же и для оператора p.

$p,\ S = e^{\frac{i}{\hbar} q b}$

$S^+ p S = p + b$

$p = \int_{-\infty}^{\infty} dp\, |p\rangle p \langle p|$

$p|p_0\rangle = p_0|p_0\rangle$

$\langle p_0|p_0'\rangle = \delta(p_0 - p_0')$

$1 = \int dp |p\rangle\langle p|$

$|\Psi\rangle = \int dp\, |p\rangle\, \tilde{\Psi}(p)$

$\langle\Psi|\Psi\rangle = 1 = \int dp\, |\tilde{\Psi}(p)|^2$

$\tilde{\Psi}(p) = \langle p|\Psi\rangle$

$\bar{p} = \langle\Psi|p|\Psi\rangle = \int dp \cdot p\, |\tilde{\Psi}(p)|^2$

21.03.07 лекция 10.

$[r_i, p_i] = i\hbar\,\delta_{ij}$

Вводим разложение опер-ра $\hat{\vec{r}}$:

$\hat{\vec{r}} = \int |\vec{r}\rangle \vec{r} \langle\vec{r}|\, d\vec{r}$

$\hat{\vec{r}}|\vec{r}\rangle = \vec{r}|\vec{r}\rangle$

Условие нормировки: $\langle\vec{r}|\vec{r}\,'\rangle = \delta(\vec{r} - \vec{r}\,')$

Единичный оператор будет иметь вид:

$\mathbb{1} = \int d\vec{r}\, |\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|$

Волновая ф. понят. как разложение вектора чистого сост., принадл. гильб. пр-ву, по $\vec{r}$:

$|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$, $\langle\Psi|\Psi\rangle = 1$

$\Psi(\vec{r}) = \langle\vec{r}|\Psi\rangle$

$|\Psi\rangle = \int d\vec{r}\, |\vec{r}\rangle \Psi(\vec{r})$

$\langle\Psi|\Psi\rangle = 1 = \int d\vec{r}\, \langle\Psi|\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|\Psi\rangle = \int d\vec{r}\, |\Psi(\vec{r})|^2$

$\Psi(\vec{r})$ - квадр. интегр. ф-ции - это другая реализация гильб. пр-ва, изоморфная другим

$\{\Psi(\vec{r})\} \in L_2$ - это то же гильб. пр-во, но реализ. в виде квадр. интегр. ф-ций

Скал. произв.:

$\langle\Psi_1|\Psi_2\rangle = \int d\vec{r}\, \langle\Psi_1(\vec{r})|\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|\Psi_2(\vec{r})\rangle = \int d\vec{r}\, \Psi_1^*(\vec{r}) \cdot \Psi_2(\vec{r})$

Вводится пр-во $\hat{\vec p}$ – это разложение опер-ра импульса по его СВ!

$$\hat{\vec p} = \int d\vec p\, |\vec p\rangle\, \vec p\, \langle \vec p|$$

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

$\langle \vec p|\vec p\,'\rangle = \delta(\vec p - \vec p\,')$ – нормировка

$\tilde\psi(\vec p) = \langle \vec p|\psi\rangle$ – то же самое, но в.ф. в импульсном представлении

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1 \Rightarrow \int d\vec p\, |\tilde\psi(\vec p)|^2$$

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \int d\vec p\; \tilde\psi_1^*(\vec p)\, \psi_2(\vec p)$$

$\{\tilde\psi(\vec p)\} \in \tilde{\mathcal L}_2$ – тоже реализация гильб. пр-ва, только разложенная по другому базису

$$\langle \vec r\rangle_\psi = \langle\psi|\vec r|\psi\rangle = \int d\vec r\; \vec r\, |\psi(\vec r)|^2$$

$$\langle\vec p\rangle_\psi = \langle\tilde\psi|\vec p|\tilde\psi\rangle = \int d\vec p\cdot \vec p\, |\tilde\psi(\vec p)|^2$$

плотность распределения по коорд. / импульсу

Имеет место равенство (можно опр-ть действие опер-ра координаты на в.ф.)!

$$\hat{\vec r}\,\psi(\vec r) = ?$$

Рассм. матричный элемент:

$$\langle \vec r|\hat{\vec r}|\psi\rangle =$$

эрмитовый опер-р ⇒ им можно действ. и на бра-вектор $\vec r$ и на кет-вектор ψ

$$= \vec r\,\langle\vec r|\psi\rangle = \vec r\cdot\psi(\vec r) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \hat{\vec r}\,\psi(\vec r) = \vec r\cdot\psi(\vec r)$$

2. Координат. реализация оператора импульса

$$(\hat{\vec p}\,\psi)(\vec r) = -i\hbar\,\vec\nabla\psi(\vec r)$$

Проверим, прежде всего, что такие опр. опер-в коорд. и имп. удовл. коммутационным соотношениям:

$$[r_i, p_j] = i\hbar\,\delta_{ij}$$

$$[r_i,p_j]\,\psi(\vec r) = [r_i(-i\hbar\nabla_j) - (-i\hbar\nabla_j)r_i]\,\psi(\vec r) =$$

$$= i\hbar\,\delta_{ij}\,\psi(\vec r)$$

т.к. ψ – произв., то верно и для операторов

Докажем, что p – эрмитов опер-р.

$$\langle\psi_1|p_i|\psi_2\rangle = \langle\psi_2|p_i|\psi_1\rangle^*$$

$$\int d\vec r\,\psi_1^*(\vec r)\,(-i\hbar\nabla_i)\,\psi_2(\vec r) = \{\text{по частям}, \}\stackrel{*}{=}$$

ψ_1 и ψ_2 – кв. инт. ⇒ они на ∞ убывают ⇒ подстановка $= 0$

$\stackrel{*}{=} \int d\vec{r} \, (i\hbar \nabla_i \Psi_1^*) \, \Psi_2(\vec{r}) =$

$= \left[\int d\vec{r} \, \Psi_2^*(\vec{r}) (-i\hbar \nabla_i \Psi_1) \right]^* =$

$= \langle \Psi_2 | p_i | \Psi_1 \rangle^* \Rightarrow$ каждая комп-та опер-ра p - это эрмитов оператор

Единственно ли представление коорд. опер-ра имп-са?

Теор (фон Нейман). Для конечн. системы обобщ. коорд. и обобщ. имп-сов

$[q_a, p_b] = i\hbar \delta_{ab}$

реализация опер-в импульса в коорд. предст. в виде произв.

$p_a = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_a}$

единств. с точностью до унитар. преобр-ие

$\hat{q}_a \to q_a$.

Но!
Эта теорема неверна для систем с ∞ числом степеней свободы.

Можно аналогично реализовать опер-ры координаты и импульса в импульсном представлении

$\tilde{\Psi}(\vec{p}) = \langle \vec{p} | \Psi \rangle$

Опер-р имп-са: $\hat{\vec{p}} \, \tilde{\Psi}(\vec{p}) = \vec{p} \, \tilde{\Psi}(\vec{p})$

Опер-р коорд-ты $(\hat{\vec{r}} \tilde{\Psi})(\vec{p}) = +i\hbar \nabla_p \tilde{\Psi}(p)$

Как переводить коорд. пр-во в имп-ное и наоборот? Т.е, найдем связь Ψ и $\tilde{\Psi}$.

$$
\begin{array}{ccc}
 & |\Psi\rangle \in \mathcal{H} & \\
\swarrow & & \searrow \\
\Psi(\vec{r}) \in L_2 & & \tilde{\Psi}(\vec{p}) \in \tilde{L}_2
\end{array}
$$

$\Psi(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \Psi \rangle = \int d\vec{p} \, \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | \Psi \rangle =$

$= \int d\vec{p} \, \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle \, \tilde{\Psi}(\vec{p})$

$$\boxed{\Psi(\vec{r}) = \int d\vec{p} \, \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle \, \tilde{\Psi}(\vec{p})}$$

Ядро преобразования: $\langle \vec{r} | \vec{p} \rangle$

Введем обозначение $\langle \vec{r} | \vec{p} \rangle = \Psi_{\vec{p}}(\vec{r})$ - в.ф. в коорд. предст. от сост. с фикс. импульсом.

$\langle \vec{r} | \hat{p}_i | \vec{p} \rangle = \underset{\text{СЗ}}{p_i} \underbrace{\Psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = -i\hbar \nabla_i \Psi_p(\vec{r})}_{\text{ур-ие, его реш.}}$

$\Psi_{\vec p}(\vec r) = C e^{\frac{i}{\hbar}\vec p \vec r}$ – плоская волна

Определим C из усл. нормировки:

$$\langle \vec p\,' | \vec p\,'' \rangle = \delta(\vec p - \vec p\,') =$$

$$= \int d\vec r\, \Psi^*_{\vec p}(\vec r)\, \Psi_{\vec p\,'}(\vec r) = |C|^2 \underbrace{\int d\vec r\, e^{\frac{i}{\hbar}(\vec p\,' - \vec p)\vec r}}_{(2\pi\hbar)^3 \delta(\vec p - \vec p\,')}$$

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int dk\, e^{ikx}$$

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

$$\boxed{\Psi(\vec r) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d\vec p\, e^{\frac{i}{\hbar}\vec p \vec r}\, \tilde\Psi(\vec p)},$$

т.е. $\Psi(\vec r)$ и $\tilde\Psi(\vec p)$ связаны преоб-м Фурье. Соотв-но проделав все в обр. сторону, получим связь $\tilde\Psi(\vec p)$ и $\Psi(\vec r)$:

$$\tilde\Psi(\vec p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d\vec r\, e^{-\frac{i}{\hbar}\vec p \vec r}\, \Psi(\vec r)$$

Из теории инт-ла Фурье, известно что

$$\int d\vec r\, |\Psi(\vec r)|^2 = \int d\vec p\, |\tilde\Psi(\vec p)|^2$$ (если эти ф-ции квадр. инт.)

$\parallel$

$\langle \Psi | \Psi \rangle \Rightarrow$ верно

Системы во времени.

Ранее уже было выведено для консерв. системы:

$$\dot{F} = \frac{i}{\hbar}[H, F]$$

В класс. механике

$$\frac{d\varphi}{dt} = \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \{\varphi, H\}$$

Запишем общий вид ур-ия Гейзенберга:

$$\boxed{\dot{F} = \frac{\partial F}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}[H(t), F]}$$

Для случая консерв. системы

$H(t) = H$

$F(t) = e^{\frac{i}{\hbar}Ht} F(0)\, e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$ – представление Гейзенберга

$\bar F_\Psi(t) = \langle \Psi | F(t) | \Psi \rangle$ – представление Шредингера

$\langle \Psi |$ – это удобный способ записи р-тов усреднения и не более!!!

$F_\psi(t) = \langle\psi|F(t)|\psi\rangle = \langle\psi|e^{\frac{i}{\hbar}Ht}F(0)e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|\psi\rangle =$

$= \langle\psi(t)|F(0)|\psi(t)\rangle$

сред. знач. не изм. во вр. опер. F, но с зав. от вр. ($\psi(t)$) состоянию:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|\psi\rangle$$

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle}$$ — уравнение Шредингера

Если изм-ся опер-ры - это более логично физически, т.к. опер-ры - это и есть измеряемые физич. величины, но $\psi(t)$ часто удобнее

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(t) = H(t)\psi(t)$$

Явный вид интегральной формы оператора будет другой. Нужно ввести оператор эволюции:

$U(t,t_0)$ - оператор эволюции - он связывает сост. системы в разные моменты времени t и t_0.

$$\psi(t) = \underbrace{U(t,t_0)}\psi(t_0)$$

$$U = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)}$$

если гам-н не зависит явно от времени.

Если гам-н зависит от вр., то такой простой формы мы получить не сможем. Аналогично простой

формулы будут другие

Для большинства физ. задач гам-н зав. от времени гладко, т.е. если рассм. дост. малый промеж-к вр., то на нем гам-н можно считать постоянным:

$$U(\Delta t) = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t)\Delta t} = \left(1 - \frac{i}{\hbar}H(t)\Delta t + \dots\right)$$

Тогда для $U(t)$ получим:

$$U(t,t_0) \stackrel{*}{=}$$

интервал разобьем на N кусков, каждый из кот. $\le \Delta t$

$$\stackrel{*}{=} \prod_{i=1}^{N} e^{-\frac{i}{\hbar}H(t_i)\Delta t}$$

произведение exp упорядочено (от t_0 к t_N) по напр. возрастания аргумента t_i

знач. t из каждого отдельного инт-ла с номером i

$$\Delta t = \frac{t-t_0}{N}$$ N - большое, но конечное число.

Но! собрать экспоненты в одну не можем, т.к. в общем сл. гам-ны не коммутируют: $[H(t_i), H(t_j)] \neq 0$.

Квантовые физики договорились ввести специальный символ для записи этого соотношения.

// $$U(t,t_0) = \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}H(t_N)\Delta t} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}H(t_{N-1})\Delta t} \cdot \ldots \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}H(t_1)\Delta t}}_{\text{переставить не можем!}}$$

Такая конструкция - упорядоч. exp-та //

$$U(t,t_0) = T\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} H(\tau)\,d\tau\right]$$

В нестац. случае

$\Psi(t) = U(t,t_0)\Psi(t_0)$ — оператор эволюции

$U(t,t_0) = T\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} H(\tau)d\tau\right]$

$t - t_0 = N\Delta t$

$= T\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\sum_{i=1}^{N}\Delta t\, H(t_i)\right] =$

$= e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta t H(t_N)} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta t H(t_{N-1})} \cdot \ldots \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta t H(t_1)}\Psi(t_0)$

$t < t_N < t - \Delta t \qquad t_0 < t_1 < t_0 + \Delta t$

Опер-р эволюции — унитарный:

$U^+(t,t_0) = U^{-1}(t,t_0)$

$U^+(t,t_0) = e^{\frac{i}{\hbar}\Delta t H(t_1)} \cdot \ldots \cdot e^{\frac{i}{\hbar}\Delta t H(t_N)}$

Эволюция системы унитарна.
В процессе эволюции норма исх. вектора состояния сохраняется, а норма — это вер-ть.

$\langle\Psi(t_0)|\Psi(t_0)\rangle = \langle\Psi(t)|\Psi(t)\rangle$

$U(t,t_0) = U^{-1}(t_0,t)$

Покажем, что ур-ие Шр. для нестац. случая эквивалентно ур-ию Гейзенберга

$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = H_S(t)\Psi(t)$

$\dot{\mathcal{F}} = \frac{i}{\hbar}[H_H(t), \mathcal{F}(t)]$

Но! Нужно помнить, что H в представлениях Гейзенберга и Шр. — это разные вещи!

пост. опер-ры, не зав. от времени

$H_S(t) = H(p,q,t)$

$H_H(t) = H(p(t), q(t), t)$

$H_H(t) = U^+(t)H_S(t)U(t)$

$\overline{\mathcal{F}}(t) = \langle\Psi(t)|\mathcal{F}(0)|\Psi(t)\rangle =$

ср. знач. $\mathcal{F}$ в Шр. представлении

$= \langle\Psi(0)|\underbrace{U^+(t)\mathcal{F}(0)U(t)}_{\mathcal{F}(t)}|\Psi(0)\rangle = \langle\Psi(0)|\mathcal{F}(t)|\Psi(0)\rangle$

$\dot{\overline{\mathcal{F}}} = \langle\dot\Psi(t)|\mathcal{F}(0)|\Psi(t)\rangle + \langle\Psi(t)|\mathcal{F}(0)|\dot\Psi(t)\rangle =$

$= \langle\Psi(t)|\frac{1}{-i\hbar}H_S(t)\mathcal{F}(0)|\Psi(t)\rangle +$

$i\hbar\frac{\partial|\Psi\rangle}{\partial t} = H_S|\Psi\rangle$

$+ \langle\Psi(t)|\mathcal{F}(0)\frac{1}{i\hbar}H_S(t)|\Psi(t)\rangle =$

$-i\hbar\frac{\partial\langle\Psi|}{\partial t} = H_S\langle\Psi|$

$= \langle\Psi(0)|U^+(t)\cdot\left[\frac{i}{\hbar}H_S(t)\mathcal{F}(0) - \frac{i}{\hbar}\mathcal{F}(0)H_S(t)\right]U(t)|\Psi(0)\rangle =$

$= \langle\Psi(0)|\frac{i}{\hbar}\left(\underbrace{U^+H_S(t)U}_{H_H}U^+\mathcal{F}(0)U -\right.$

$\left. - \underbrace{U^+\mathcal{F}(0)U}_{\mathcal{F}(t)}U^+H_S(t)U\right)|\Psi(0)\rangle$

$\dot{\overline{\mathcal{F}}} = \langle\Psi(0)|\frac{i}{\hbar}[H_H(t), \mathcal{F}(t)]|\Psi(0)\rangle$

$$\dot{\mathcal{F}} = \frac{i}{\hbar}\left[H_H(t), \mathcal{F}(t)\right]$$

С точки зр. предст. Гейзенберга

Интеграл движения: $\dot{\mathcal{F}} = 0 = \frac{i}{\hbar}[H, \mathcal{F}]$

$[H, \mathcal{F}] = 0$ - условие для интеграла движения

В классич. механике инт-лы движения связаны с ~~их~~ симметрией системы

$S^+(\lambda) S(\lambda) = 1$ - унит. преобр-ие, не меняющее гам-н

$S^+ H S = H$

$HS = SH$

$S(0) = 1$

$S = e^{i\lambda T} \qquad T = T^+$

$S(\delta\lambda) = 1 + i\delta\lambda T$

$S^+(\delta\lambda) = 1 - i\delta\lambda T^+$

$SS^+ = 1 = (1 + i\delta\lambda T)(1 - i\delta\lambda T^+) =$

$= 1 + i\delta\lambda(T - T^+) + O(\delta\lambda^2) \Rightarrow$

$\Rightarrow$ все коэф-ты $(T - T^+) = 0 \Rightarrow T = T^+$.

$S^+ H S = H$

$S^+ H S = (1 - i\delta\lambda T^+) H (1 + i\delta\lambda T) =$

$= H + i\delta\lambda [H, T] + O(\delta\lambda^2) = H$

коэф-ты $= 0 \Rightarrow [H, T] = 0$

Если несколько пар-ров:

$S(\lambda_1, \dots \lambda_s)^+ = S^{-1}$

$S = 1 + \sum\limits_{r=1}^{s} \delta\lambda_r T_r$

генераторы преоб-ий

$T_r = T_r^+$

Их коммут. соотн. задают алгебру групп

В общем случае эти опер-ры могут не коммутир. друг с другом.

$[T_r, T_l] = i C_{rl}^k T_k$

структурные (групповые) константы группы

$[T_r, H] = 0 \qquad r = 1, \dots, s$

В зав-ти от того, сколько пар-ров в группе, столько будет и интегралов движения

$S = e^{i(\lambda_r T_r)} = (S^+)^{-1}$

$S^+ H S = H$

$H = H(q, p)$

$S^+ H S = H(S^+ q S, S^+ p S)$

$S^+ q S = q' \qquad S^+ p S = p'$

$H(q, p) = H(q', p')$ - инвариантность гамильтониана

Пример.

$$H = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + U(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$$

Самое простое преобр-ие - сдвиг:

$r_1 \to r_1' = r_1 + a$ $\quad p_1 \to p_1' = p_1$

$\vec r_2 \to \vec r_2' = \vec r_2 + \vec a$ $\quad \vec p_2 \to \vec p_2' = \vec p_2$

$S(\vec a) = e^{-\frac{i}{\hbar}\vec p_1 \vec a}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\vec p_2 \vec a}$

$S^+ \vec r_i S(\vec a) = \vec r_i + \vec a \quad i = 1,2$

$S(\vec a) = e^{-\frac{i}{\hbar}\vec P \vec a}$

$\vec P = \vec p_1 + \vec p_2$ — он должен коммутир. с гам-ном.

$[H, \vec P] = 0$ — закон сохр-ие имп-са

Развал кластера (радиоакт. ядра) на 2 куска

$\vec P = \vec p_1 + \vec p_2 = const$

Измерим в какой-то мом-т у 1-го куска точно коорд., а у 2-го в тот же момент — точно импульс. ⇒

мы знаем $\vec p_1$ из закона сохр. и $\vec p_2$ ⇒ обойдём соотнош. неопр-ти, т.е. одновр. определим $\vec r_1$ и $\vec p_1 = \vec P - \vec p_2$

Но! Если мерием $\vec r_1$, то про $\vec P$ в тот же момент ничего сказать не можем, т.к. они не коммутируют: $[r_{1i}, P_j] = [r_{1i}, p_{1j} + \cancel{p_{2j}}] \neq 0 = i\hbar\delta_{ij}$

10.04.07. Лекция 12.

$\Psi(t) = U(t)\Psi(0)$

$U^+(t)U(t) = 1$

$F(t) = U^+(t)F(0)U(t)$

$[q(0), p(0)] = i\hbar$

$U^+[q(0), p(0)]U = i\hbar = [q(t), p(t)]$

Рассм. аналог инт-ла движения для шредингеровского представления.

$\langle F(t)\rangle_\Psi = \langle F(0)\rangle_\Psi$ — опр-ие инт-ла движения

$\langle\Psi|U^+(t)F(0)U(t)|\Psi\rangle$

Для того, чтобы это вып-сь, необх. условие на Ψ

$H = const \quad U = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$,

$H\Psi = E\Psi$, т.е. Ψ должно быть СФ гам-на H.

$\langle\Psi|\Psi\rangle = 1$

$\langle\Psi|e^{\frac{i}{\hbar}Ht}F(0)e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|\Psi\rangle = \langle\Psi|F(0)|\Psi\rangle = \langle F(0)\rangle$

Вектора, явл. СВ гам-на — стацион. состояния, в них все физ. величины от времени не зависят.

Поставим задачу.

Пусть сис-ма консерв. ($H = const.$)
Рассматриваем эволюцию состояния
$\Psi(t) = U(t)\Psi(0) \quad \langle \Psi(0) | \Psi(0) \rangle = 1$.
С какой вер-тью в мом. вр. t обнаружим сис-му в том же состоянии?

$$P(t) = | \langle \Psi(0) | \Psi(t) \rangle |^2$$

$$H = \underbrace{\sum_n |n\rangle E_n \langle n|}_{\text{полный набор дискр. уровней}} + \int_{\mathcal{E}_0} d\mathcal{E} \, |\mathcal{E}\rangle \mathcal{E} \langle \mathcal{E}|$$

Дискр. уровни - это СВ H и обр. ортонорм. подсистему.

$$H|n\rangle = E_n |n\rangle$$

$$\langle n | m \rangle = \delta_{nm}$$

Непр. уровни: $H|\mathcal{E}\rangle = \mathcal{E}|\mathcal{E}\rangle$

$$\langle \mathcal{E} | \mathcal{E}' \rangle = \delta(\mathcal{E} - \mathcal{E}')$$

$$\langle n | \mathcal{E} \rangle = 0 \quad \forall n, \mathcal{E}.$$

Закон разложения единицы:

$$1 = \sum_n |n\rangle\langle n| + \int |\mathcal{E}\rangle d\mathcal{E} \langle \mathcal{E}|$$

Представим $\psi(0)$ в виде разложения:

$$\psi(0) = \sum a_n |n\rangle + \int d\mathcal{E} \, a(\mathcal{E}) |\mathcal{E}\rangle$$

$$\langle \Psi(0) | \Psi(0) \rangle = 1 = \sum_n |a_n|^2 + \int d\mathcal{E} \, |a(\mathcal{E})|^2$$

Работаем в с разложением по СВ гам-на.

$$\langle \Psi(0) | \underbrace{U(t)}_{e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}} | \Psi(0) \rangle =$$

$$= \langle \Psi(0) | \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} a_n |n\rangle + \int_{\mathcal{E}_0}^{\infty} d\mathcal{E} \, e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{E}t} a(\mathcal{E}) |\mathcal{E}\rangle =$$

$$= \sum_m a_m^* \langle m| + \int_{\mathcal{E}_0}^{\infty} a^*(\mathcal{E}') \langle \mathcal{E}' | d\mathcal{E}' \Big| \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} a_n |n\rangle + \int_{\mathcal{E}_0}^{\infty} d\mathcal{E} \, a(\mathcal{E}) e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{E}t} |\mathcal{E}\rangle =$$

$$= \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} |a_n|^2 + \int_{\mathcal{E}_0}^{\infty} |a(\mathcal{E})|^2 e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{E}t}$$

1) Пусть $\Psi(0) = |k\rangle$

$$\langle \Psi(0) | \Psi(t) \rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t}$$

$P_k(t) = 1$ - стац. состояние живет вечно

2) $\Psi(0) = a_1|k_1\rangle + a_2|k_2\rangle$
(нач. сост. есть лин. комб-ция нескольких дискр уровней). Тогда

$$|a_1|^2 + |a_2|^2 = 1$$

k_1 и k_2 ортогональны.

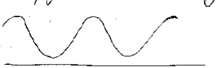
$$\langle\Psi(0)|\Psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t}|a_1|^2 + e^{-\frac{i}{\hbar}E_2 t}|a_2|^2$$

$$|\langle\Psi(0)|\Psi(t)\rangle|^2 = P(t) = |a_1|^4 + |a_2|^4 + 2|a_1|^2|a_2|^2\cos\left(\frac{E_1-E_2}{\hbar}t\right)$$

Вер-ть имеет осцилляц. хар-р, частота осц-ций пропорц. разности частот.

Если $\cos(\ )t = 1$, то

$$P(t) = (|a_1|^2 + |a_2|^2) = 1,$$ т.е. обнаружим сис-му в нач. сост-ии



3) $\Psi(0) = \int dE\, a(E)\,|E\rangle$
нормир. сост-ие, постр. из сост-ий непр. спектра – волновой пакет

$$\int |a(E)|^2 = 1 \qquad \langle\Psi(0)|\Psi(0)\rangle = 1$$

Тогда

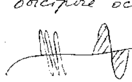
$$\langle\Psi(0)|\Psi(t)\rangle = \int_{E_0}^{\infty} dE\,|a(E)|^2 e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

Лемма Римана-Лебега:

Рассм. для нашего инт-ла предел при $t\to\infty$

$$\int^{\infty} dE\,|a(E)|^2 e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \xrightarrow[t\to\infty]{} 0$$

$|a(E)|^2$ – гладкая ф-ция, но все накладыв. в пределе – очень быстрые осцилляции

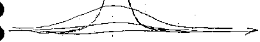


Будет происходить компенсация вкладов от инт-лов за первый полпериода и 2ой полупериода (каждые)

Лемма. Такой инт-л $\to 0$
(Если у ф-ции $a(E)$ нет сингулярностей)

Т.е., вер-ть обнаружить сис-му в том же состоянии равна 0. Волновые пакеты распадаются (расплываются).

Расплывание волнового пакета (своб. ч-ца).



Смешанное состояние или Матрицы плотности.

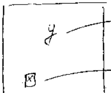
В реальной ситуации вокруг нас очень мало чистых состояний.

Исследуемый объект – только составная часть чего-то большего. И отделить исследуемую подсистему от всей системы невозможно.

Матрица плотности → Фейнман „Стат. мех."

Для начала введем тензорное произведение.

Мы считаем, что всё (вся Вселенная) нах. в чистом состоянии).



$\{|\theta_j\rangle\}$ - набор сост-ий объемлющей системы $\theta_j(y)$

$\varphi_i(x)$ - полный набор состояний подсистемы $\{|\varphi_i\rangle\}$

тенз. произв-ие

$$|\Psi\rangle = \sum_{ij} C_{ij}\,|\varphi_i\rangle \otimes |\theta_j\rangle$$

вектор состояния

корреляция между состояниями

Введем базисные вектора $|x\rangle$, $|y\rangle$

$|x\rangle \otimes |y\rangle = |x, y\rangle$ - это тоже коорд. базис

$$\langle x, y|\Psi\rangle = \Psi(x,y) =$$

$\theta_j(y) = \langle y|\theta_j\rangle$

$$= \sum_{ij} C_{ij}\, \langle x| \otimes \langle y| \, \Big| \, |\varphi_i\rangle \otimes |\theta_j\rangle =$$

$\varphi_i(x) = \langle x|\varphi_i\rangle$

$$= \sum_{ij} C_{ij}\, \varphi_i(x)\, \theta_j(y)$$

Будем измерять величину A (она имеет отношение только к подсистеме):

66

$$A = \sum_{ii'} |\varphi_i\rangle A_{ii'} \langle\varphi_{i'}|$$

матрица имеет вид $A_{ii'} = \langle\varphi_i|A|\varphi_{i'}\rangle$ (не диагональной).

По отн. к объемлющей системе это 1, т.к. никаким образом не воздейств. на объемл. сис-му

$$A = \sum_{ii'j} |\varphi_i\rangle|\theta_j\rangle A_{ii'} \langle\theta_j|\langle\varphi_{i'}|$$

$$1_y = \sum_j |\theta_j\rangle\langle\theta_j|$$

$$\langle A\rangle_\Psi = \langle\Psi|A|\Psi\rangle =$$

$$= \sum_{ij} C^*_{ij} \langle\varphi_i|\langle\theta_j| \sum_{kk'l} |\varphi_k\rangle|\theta_l\rangle A_{kk'} \langle\theta_l|\langle\varphi_{k'}| \sum_{mn} C_{mn}|\varphi_m\rangle|\theta_n\rangle =$$

δ_{jl} δ_{ik} δ_{ln} $\delta_{k'm}$

$$= \sum_{imn} C^*_{in} C_{mn} A_{im}$$

Введем матрицу $\rho_{mi} = \sum_n C_{mn} C^*_{in}$

то, что мы измеряем

(след)

$$\langle A\rangle_\Psi = \sum_{im} \rho_{mi} A_{im} = \mathrm{Tr}(\rho A) = \mathrm{Tr}(A\rho)$$

содержит коэф-ты C, кот. отвечают за связь между нашей подсистемой и объемлющей системой

67

ρ - матрица относится к подсистеме.

Введем другие обозначения:

$$\rho_{i'i} = \sum_n C_{i'n} C^*_{in}$$

$$\rho^*_{ii'} = \sum_n C_{i'n} C^*_{in} = \rho_{i'i}$$

$\rho = \rho^+$ - статистический оператор (матрица плотности)

Наша подсистема нах-ся в смешанном состоянии.

Св-ва оператора ρ.

• Если в кач-ве измеряемой величины возьмем единичную, то

$$\langle 1 \rangle_\Psi = \langle \Psi | 1 | \Psi \rangle = 1 = Tr \rho \cdot 1 = Tr \rho,$$

т.е. $\underline{Tr \rho = 1.}$

Матрица ρ соотв. эрмитову опер-ру. Спектральное разложение

$$\rho |n\rangle = w_n |n\rangle$$

$$\langle n | m \rangle = \delta_{nm}$$

$$\rho = \sum_n |n\rangle w_n \langle n|$$

Представим, что мы в кач-ве A исп. опер-р, кот. имеет 2 знач. („да“-„нет“)

$$A = |n^*\rangle\langle n^*|$$

$$\langle n^* | A | n^* \rangle = 1$$

$$\langle n | A | n \rangle = 0 \qquad n \neq n^*$$

$$\bar{A} = Tr A\rho = \sum_n \langle n | A \underbrace{\rho | n \rangle}_{w_n |n\rangle} =$$

$$= \sum_n \langle n | n^* \rangle w_n \langle n^* | n \rangle = w_{n^*}$$

$$A = |n^*\rangle \underbrace{\left(\sum_j |\theta_j\rangle\langle\theta_j| \right)}_{1_y} \langle n^*|$$

$$\bar{A} = \langle \Psi | A | \Psi \rangle = \sum_j \langle \Psi | | n^* \rangle |\theta_j\rangle \langle\theta_j| \langle n^* | | \Psi \rangle$$

$$= \sum_j | \langle \Psi | | n^* \rangle |\theta_j\rangle |^2 \geq 0 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \quad w_n \geq 0 \quad \forall n$$

Т.к. Tr - сумма c.з. $\Rightarrow$ $w_n \in [0, 1]$:

$$1 \geq w_n \geq 0 \quad \forall n \quad \sum_n w_n = 1$$

$$\langle A \rangle_\Psi = Tr \rho A = \sum_n \langle n | \rho A | n \rangle =$$

$$= \sum_n w_n \langle n | A | n \rangle = \bar{A}$$

Статист. сумма от всех вкладов сост. n с весами w_n.

Смеш. сост. - смесь разл. чистых сост., каждое из кот вносит вклад с весом w_n.

Чистое сост. - частн. случай смеш.

Если $\rho = |n^*\rangle\langle n^*|$

$\omega_{n^*} = 1 \quad \omega_n = 0 \quad n \neq n^*$

Необх. и дост. усл. того, чтобы ρ сводилась к проектору $\rho = |n^*\rangle\langle n^*|$:

$$\rho^2 = \rho$$

Проверка: 1) $\rho^2 = |n^*\rangle\langle n^*|n^*\rangle\langle n^*| = |n^*\rangle\langle n^*|$

2) $\rho^k = \rho \quad k \geq 1$

$\rho = \sum_n |n\rangle \omega_n \langle n|$

$\rho^k = \sum_n |n\rangle \omega_n^k \langle n|$

Если $\rho^k = \rho$, то $\omega_n^k = \omega_n \quad \forall n, k$ — это возм. только если все $\omega_n = 0$ или $\omega_n = 1$, но т.к. $\omega = 1$ может быть только одна, то $\omega_n = 0$, $\omega_{n^*} = 1$.

Энтропия.

$$S = -\rho \ln \rho$$

Спектральное разложение:

$$S = -\sum_n |n\rangle \omega_n \ln \omega_n \langle n|$$

Если $\omega_{n^*} = 1$, все ост. $\omega_{n \neq n^*} = 0$, то (чистое сост.) энтропия минимальна:

$S'' = 0$ $\qquad S'' > 0$ — для смеш. сост-ий

Пусть сис-ма нах. в смеш. сост. с матр. плотности ρ. Какова вер-ть обнаружить сис-му в чистом состоянии $\mathcal{X}$?

$|\chi\rangle$ В случае чистого сост. $|\Psi\rangle$:

$P_\chi = |\langle\chi|\Psi\rangle|^2 =$

$= \langle\Psi|\chi\rangle\langle\chi|\Psi\rangle = \langle\Psi|\Pi_\chi|\Psi\rangle$

$\Pi_\chi = |\chi\rangle\langle\chi|$ — проектор на сост. χ (равен 1 если сист. нах. в сост. χ и 0, если сист. нах. в $\forall$ ортог. к χ сост.)

$\Pi^2 = \Pi$

$P_\chi = Tr(\Pi_\chi \rho) =$

$= \sum_n \langle n|\Pi_\chi \rho|n\rangle =$

в базисе СВ ρ $= \sum_n \omega_n \underbrace{\langle n|\chi\rangle\langle\chi|n\rangle}_{} = \sum_n \omega_n P_\chi(n)$

вер-ть, что сис-ма, если нах. в сост. n, будет проявл. св-ва сост. χ

Мы всегда можем выбрать такой базис, в кот. χ будет одним из базисных векторов. Тогда

$P_\chi = \sum_{\chi'} \langle\chi'|\Pi_\chi \rho|\chi'\rangle = \sum_{\chi'} \underbrace{\langle\chi'|\chi\rangle}_{\delta_{\chi\chi'}} \langle\chi|\rho|\chi'\rangle =$

$= \langle\chi|\rho|\chi\rangle$

Ср. знач. от матр. плотности по чистому сост. χ, вер-ть кот. хотим найти.

Для Шредин. представл., консерв. сис-мы закон эволюции:

$$\Psi(t)=U(t)\Psi(0).$$

Должно быть такие описание эволюции в терминах ~~плотно~~ матрицы плотности

$$\rho(t)=\sum_n \omega_n |n(t)\rangle\langle n(t)| =$$

$$= U(t)\sum_n \omega_n|n(0)\rangle\langle n(0)|U^+ =$$

$$= U(t)\rho(0)U^+(t)$$

Для опер. физ. величины $F(t)=U^+(t)F(0)U(t)$ — для ρ - наоборот, но ρ - опер-р другой природы, заменяющий вектор состояния.

Матр. плотности описывает смеш. сост., в то вр. как опер. физ. величины описывает физ. величину.

$$U(t)=e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$$

$$\boxed{\dot\rho = -\frac{i}{\hbar}[H,\rho]}$$

Для измер. физ. величин в чистых сост. было соотн-ие неопр-ти, но оно выводилось для чистых состояний.

Вопрос: а для смешанных?

Ответ: то же самое!

Надо проверить. Раньше: $M=A_1+i\lambda B_1$, $T=M^+M$,

$\langle T\rangle_\psi\ge 0$ Нужно проверить: $\langle T\rangle_\rho \ge 0$.

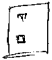
$$\langle T\rangle_\rho = Tr\, T\rho = \sum_n \omega_n \underbrace{\langle n|T|n\rangle}_{\ge 0} \ge 0 \Rightarrow$$

соотн неопр-ти имеет тот же вид, что и для чистых сост-ий.

Лекция 13. 11.04.07

Откуда берем матрицу плотности?

Пример. Термостат



Тогда матрица плотности - это распр-ие Больцмана

$$\rho = \frac{e^{-\beta H}}{Tr\, e^{-\beta H}}$$

$$\rho|n\rangle = \omega_n|n\rangle$$

$$|n\rangle\equiv|E_n\rangle$$

$$\omega_n = \frac{e^{-\beta E_n}}{\sum_n e^{-\beta E_n}}, \quad \sum_n\omega_n=1$$

Приведенная матрица плотности.

Напр, если имеется 2 частицы, связ. законом сохр. имп. (эн). Каждая из подсистем явл. частью системы, сост из двух частиц.

...в потенциальном поле:

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + U(\vec{r})$$

В координатном представлении

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_r + U(\vec{r}).$$

Тогда $\Psi = \Psi(\vec{r},t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\,\Psi_E(\vec{r})$

↑ закон эволюции стац. состояния

и $\overset{\text{для}}{\text{СФ}}$ гам-на:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_r + U(\vec{r})\right]\Psi_E = E\,\Psi(\vec{r})$$

Нестационарное ур-ие Шредингера:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_r + U(\vec{r})\right)\Psi(\vec{r},t)$$

Осн. св-во этого ур-ия Шр.! — для него имеет место ур-ние непр.-ти:

$$i\hbar\,\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \Psi^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U\right)\Psi \quad (\text{домножили на } \Psi^*)$$

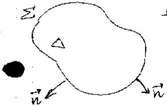
$$-i\hbar\,\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\Psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U\right)\Psi^*\cdot\Psi \quad (\text{сопрягли и умножили на } \Psi \text{ справа})$$

$$i\hbar\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t} + \frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\Psi\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\underbrace{\left(\Psi^*\Delta\Psi - \Delta\Psi^*\Psi\right)}_{\vec{\nabla}\left(\Psi^*\vec{\nabla}\Psi - \vec{\nabla}\Psi^*\Psi\right)}$$

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

$\rho = |\Psi|^2$ — плотность вер-ти, $\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi}\left(\Psi^*\vec{\nabla}\Psi - \Psi\vec{\nabla}\Psi^*\right)$ — плотность потока вер-ти

Вер-ть обнаружить ч-цу внутри объема:



$$P_\Delta(t) = \int_\Delta d\vec{r}\,|\Psi(\vec{r},t)|^2$$

Как будет менятся вер-ть обн. ч-цу внутри объема?

$$\frac{\partial P_\Delta(t)}{\partial t} = -\int_\Delta d\vec{r}\cdot\operatorname{div}\vec{j} = -\int_\Sigma d\vec{\sigma}\cdot\vec{j}$$

Пусть $U=0$, $H = \frac{\vec{p}^2}{2m}$ (своб. частица)

$$\Psi_E(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\,e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}}$$

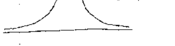
$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m}, \quad 0 \le E \le \infty$$

— гам-н имеет чисто непр. спектр, каждый ур-нь энергии ∞ кратно вырожден

Тогда закон эволюции для волн. пакета

$$\Psi(\vec{r},t) = \int d\vec{p}\cdot a(\vec{p})\,e^{-\frac{i}{\hbar}E_p t}\,\Psi_{\vec{p}}(\vec{r})$$ — расплывание пакета

$$\int_{-\infty}^{+\infty}|\vec{a}(p)|^2\,d\vec{p} = 1$$



$$\Delta p \sim \frac{\hbar}{\Delta x}$$

$$\Delta v \sim \frac{\hbar}{m\Delta x}$$

Время расплывания пакета — то время,

за кет. [illegible] то скорость [illegible]
нач. ширины пакета:

$$\Delta t \cdot \Delta v \sim \Delta x$$

$$\Delta t \sim \frac{m(\Delta x)^2}{\hbar}$$ – пакет настолько исказится, что опознать исходную форму будет невозможно

$H\psi = E\psi$ – для этой задачи имеется 10 (?) свойств
$\langle\psi|\psi\rangle = 1$

1) Вариационный принцип КМ

Функционал энергии $E[\Psi] = \langle\Psi|H|\Psi\rangle =$
$= \int d\vec{r} \left[\frac{\hbar^2}{2m} |\vec{\nabla}\psi|^2 + U|\psi|^2 \right]$

Будем искать экстремум функционала:
$\delta \left[E[\psi] \right] = 0$ * $\langle\Psi|\Psi\rangle = 1$ – доп. условие, при ком. ищем экстремум
$\Rightarrow$ экстремум

Ищем исп. метод коэф-тов Лагранжа.
(Ищем условный экстремум)

Введем ф-ю: $F = E[\Psi] + \lambda \left(\langle\Psi|\Psi\rangle - 1 \right)$
$\langle\Psi|\mathbf{H}|\Psi\rangle$

Т.к. Ψ - комплексная ф-ция, то у нее 2 степени свободы (действ. и мн.) $\Rightarrow$ вариации bra и ket векторов независимы.

$(z = u + iv \quad , \quad z^* = u - iv)$

$\delta\langle\Psi|H|\Psi\rangle = (\delta\langle\Psi|) H|\Psi\rangle + \lambda\, \delta\langle\Psi| . |\Psi\rangle = 0$

коэф-т при независимой вариации должен быть $=0$.

$$H|\Psi\rangle + \lambda|\Psi\rangle = 0$$

$$\lambda = -E$$

$$\begin{cases} H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle \\ \langle\Psi|\Psi\rangle = 1 \end{cases}$$

То же и для ket-вектора:

$\delta|\Psi\rangle \qquad \langle\Psi|H + \lambda\langle\Psi| = 0$,

и вариац. принцип даёт

2) 1. В.ф. Ψ должна быть всегда непрерывной.

2. Если пот-л в ур. Шр. не имеет сингулярностей (скачки, если есть, конечно), то и в.ф. непрерывна.

Если пот-л имеет сингулярности (∞ стенки и т.п.), то <u>производная</u> в.ф. может быть разрывна
но не сама в.ф.

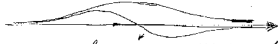
3) Следствие вар. принципа.

Договоренность. В КМ принято нумеровать энергет. уровни Гамильтониана начиная с 0: наинизший по энергии уровень $H\Psi_0 = E_0\Psi_0$.

Св-ва основного сост. (в задаче о перем. ч-це в потенц. поле)

Из вар. пр. $\Rightarrow$ Ψ_0 соотв. минимуму ф-ла энергии
$E[\Psi] = \int dx \left[\frac{\hbar^2}{2m} \left|\frac{d\Psi}{dx}\right|^2 + U|\Psi|^2 \right]$

Как добиться минимума ф-ла? Нам мешает кинетич. часть. Э теорема, кот. уже, прогиб должна меняться очень медленно, но в то же время



возникает grad ψ, существ. отлич. от 0 $\Rightarrow$

$\Rightarrow$ <u>В. ф. осн. сост-ия в ур. Шр. не имеет узлов</u>

<u>ψ_0 не имеет узлов</u>

4) Отсюда $\Rightarrow$, что все ост. ф-ции (других сост.) должны иметь хотя бы один узел, т.к.

$$\langle \psi_n | \psi_0 \rangle = 0 \quad n \neq 0$$

Значит, ни одна ψ_n не может быть знакоопределена.

<u>ψ_n, $n \geq 1$ $\exists$ хотя бы один узел</u>

5) Из того, что ψ_0 не имеет узлов $\Rightarrow$, что ~~Вырожден~~ <u>наинизший уровень энергии не вырожден</u>.

Если предположим, что $E_0 \psi_0 = H \psi_0$

и $E_0 \psi_0' = H \psi_0'$,

и ψ_0 и ψ_0' - лин. незав.

Построим лин. комб. $c\psi_0 + c'\psi_0' = \psi_0''$ - тоже СФ H

Но можем всегда подобрать c и c' так, чтобы их лин. комб. занулилась, а тогда $\psi_0'' = 0$, т.е. $\exists$ узел, чего не может быть.

6) $U_{min} = \min\limits_{\vec r} [U(\vec r)]$

Тогда можно написать оценку снизу для функционала энергии:

$$E[\psi] = \int d\vec r \left[\underbrace{\frac{\hbar^2}{2m} |\vec\nabla \psi|^2}_{\geq 0 \text{ (кин. эн.)}} + \underbrace{U |\psi|^2}_{\geq U_{min}} \right],$$

т.е. $\boxed{E \geq U_{min}}$

7) Выберем энергет. шкалу так, чтобы на пространств. ∞

$$U(\infty) = 0.$$

Тогда уровни с $E > 0 \in$ непр. спектру,

а дискр. уровни могут $\exists$ только при $E < 0$.

Док-во. Пусть сост. частицы $\in$ непр. спектру, т.е. волн. пакет, кот. расплыв. и она уходит на ∞, но там $U = 0 \Rightarrow E > 0$ (т.к. остается только кин. энергия).

И соотв-но, при $E < 0$ - дискр. спектр, т.к. вер-ть обн. ч-цу на ∞ стремится к 0.

8) Дискретные уровни $\exists$ не всегда.

Д. уровни $\exists$ тогда и только тогда, когда пот-л имеет области, где он отрицателен, т.е. должна быть пот. яма.

Если $U \geq 0$ везде то спектр чисто непр.

a - хар. размер ямы

Частица тоже должна иметь размеры:

$$\Delta x \sim a \quad \Delta p \sim \frac{\hbar}{a},$$

$$E \sim \frac{\hbar^2}{2ma^2} + \langle U \rangle$$

Вне ямы в.ф. быстро обр. в 0 $\Rightarrow$ инт-л по обл-ти ямы, тогда

$$\langle U \rangle \sim -V_0 \underbrace{\int |\Psi|^2}_{1}$$

$$E \sim \frac{\hbar^2}{2ma^2} - V_0$$

$$\frac{\hbar^2}{2ma^2} \le V_0$$ (чтобы были дискр уровни)

$\Rightarrow$ условие на пар-ры ямы, при кот. в ней может быть связ. сост:

$$\frac{ma^2 V_0}{\hbar^2} \ge 1$$

18.04.07 Лекция 14.

9) В кл. мех. частица, нах. в пот. яме, колеблется между точками поворота, проникновение через стенки запрещено.

В кв. мех. в.ф. туннелир. в запрещ. область, вер-ть обнаружить ч-цу вне ямы $\neq 0$: $|\Psi|^2 \neq 0$.

Но $|\Psi|^2 (r \to \infty) = 0$

10) Если имеем дело с невырожд. уровнями энергии, то такие в.ф. всегда могут быть сделаны действительными, т.к.

$$\left(\frac{p^2}{2m} + U\right)\Psi = E\Psi$$ - не содержит комплексных величин

Если такое ур-ие вып-ся в целом, то оно вып-ся и отдельно для мнимой и действ. части Ψ:

$$\Psi = u + iv$$

$$\left(\frac{p^2}{2m} + U\right)u = Eu$$

$$\left(\frac{p^2}{2m} + U\right)v = Ev$$

u и v пропорциональны

Если бы уровни были вырожд, то мы уже не смогли бы сказать, что u и v пропорц. друг другу, т.к. может быть $\exists$ несколько лин. незав. решений.

T - интеграл движения

$$[H, T] = 0$$

Если имеется как min 2 некоммутир. инт-ла движения

$$[T_1, T_2] \neq 0,$$

то спектр гамильтониана обязательно вырожден.

(От противного: если спектр невырожден, то H - величина с невырожд. спектром $\Rightarrow$ T_1, коммутирующая с H или T_2, коммутир. с H - ф-ция H $\Rightarrow$ их коммутатор $= 0$)

Одномерная квантовая механика
(частица в пот. поле)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\Psi = E\Psi, \quad -\infty < x < \infty$$

Св-ва этой задачи:

1) Все дискр. уровни, кот. могут здесь возникать обязательно невырождены.

Умножим ур-ие на Ψ^*, потом сопрям. ур-ие умножим на Ψ и вычтем:

$$\Psi^*[\quad] - [\quad]^*\Psi = 0$$

$$\Psi^*\Psi'' - \Psi^{*\prime\prime}\Psi = 0$$

$$\frac{d}{dx}\underbrace{(\Psi^*\Psi' - \Psi^{*\prime}\Psi)}_{W(\Psi^*,\Psi)} = 0$$

$$\frac{d}{dx}W(\Psi^*,\Psi) = 0$$

$$W(\Psi^*,\Psi) = \text{const}$$

Можно то же самое проделать $\forall$ 2х решений

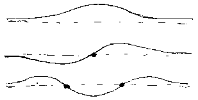
$$W(\Psi_1,\Psi_2) = \text{const} \Rightarrow$$

$\Rightarrow \Psi_1$ пропорц. Ψ_2

$n=0$

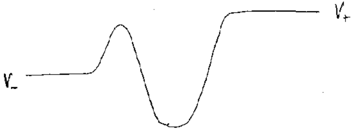
$n=1$

$n=2$



В математике доказывается теорема: для такого ур-ия число узлов следующего уровня на 1 больше предыдущего и узлы предыдущего располаг. между …

Запомнить!



Будем считать, что $V_- < V_+$

1) Если $E < \min(V_-, V_+)$, $E < V_-$, то могут быть дискр. уровни

2) Если $V_- < E < V_+$, то в.ф образуют непр. спектр, но они невырождены (слева ч-ца может уйти на ∞, справа только протуннелировать)

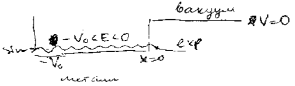
$$\Psi(x \to -\infty) \to A\sin(kx+\delta)$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$\Psi(x \to +\infty) \to Be^{-\varkappa x}$$

$$\frac{\hbar^2\varkappa^2}{2m} = V_0 - E > 0$$

Пример. Эл-ная проводимость в металле



Вер-ть обнаружить эл-н в обл. от гр. пр-ко до какой-то точки $=0$, т.к. слева - волновой пакет, кот. растекается $\Rightarrow$ ч-ца уходит на простр. ∞

Норма в.ф. $= \infty$ ($\| \sin^2 \|$) $\Rightarrow$ вер. об.

3) $E > V_+ = \max(V_-, V_+)$

$W \neq 0$

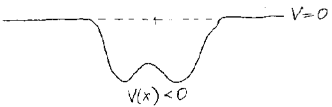
Ч-ца имеет двукратно вырожд. состояние

$$\Psi = A e^{ik_{1,2}x} + B e^{-ik_{1,2}x}$$

$$x \to \pm\infty$$

Спектр непрерывный

Утв. Достаточным условием $\exists$ хотя бы одного связ. уровня в однолер. кв.м. явл. след.: данная $\exists$ яма, у кот. края нах-ся на одной высоте



Из вариац. принципа уровни явл. экстремумами ф-ла энергии.

Выберем пробную в.ф.

$$\Psi_{tr} = C e^{-\frac{\varepsilon}{2}x^2}, \quad C = \sqrt[4]{\frac{\varepsilon}{\pi}}$$

$$E_{tr} = \int dx \left[\frac{\hbar^2}{2m} \Psi'^2 + V \Psi^2 \right]$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \int dx \sqrt{\frac{\varepsilon}{\pi}} x^2 e^{-\varepsilon x^2} \cdot \varepsilon^2$$

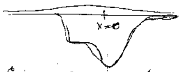
$$\sqrt{\frac{\varepsilon}{\pi}} \varepsilon^2 \int x^2 e^{-\varepsilon x^2} = \sqrt{\frac{\varepsilon}{\pi}} \varepsilon^2 \left(-\frac{\partial}{\partial \varepsilon} \int e^{-\varepsilon x^2} \right) =$$

$$= \sqrt{\frac{\varepsilon}{\pi}} \varepsilon^2 \left(-\frac{\partial}{\partial \varepsilon} \sqrt{\frac{\pi}{\varepsilon}} \right) = \frac{\varepsilon^{\frac{5}{2}}}{\pi^{\frac{1}{2}}} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{\pi^{1/2}}{\varepsilon^{3/2}} = \frac{1}{2} \varepsilon$$

$$K_{tr} = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{1}{2} \varepsilon$$

$$\int dx\, V \psi^2 \approx$$

$$\approx \sqrt{\frac{\varepsilon}{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} V(x) dx < 0$$



Если ε мало, то в. ф. $\approx$ const

$$E_{tr} \sim \frac{\hbar^2}{4m} \varepsilon - \sqrt{\frac{\varepsilon}{\pi}} \bar{V}$$

Если $\varepsilon \to 0$, то первое слаг. $\to 0$ быстрее, чем второе, т.е. кин. эн. уменьшается быстрее пот., т.е. доминирует отриц. слаг. (пот.)

т.к. сост. – это экстр. ф-ла энергии и мы уже нашли ф-цию усл. $E<0$, $\Rightarrow$ у минимума она еще меньше $\Rightarrow \exists$ связ. сост.

Если яма прямоуг., но стенки разной высоты, то связ. сост. может не $\exists$.

24.04.07. Лекция 15

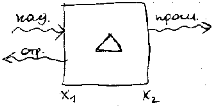
Прохождение сквозь и отражение от одномерного потенциального барьера

$E>V_0$ – возникает отраж. волна, в отличие от классики

V_0: $V_0(-\infty)=0$

$V_0(+\infty)=V_0$

$$\frac{\partial P_\Delta}{\partial t} = -\int_\Sigma d\vec{\sigma}\,\vec{j}$$ — изменение вер-ти обнаружить ч-цу внутри объема Δ.



$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\int_{x_1}^{x_2} dx \cdot \frac{\partial j}{\partial x} = -(j_2 - j_1),$$

где j – плотность потока вер-ти: (в одномер. случае)

$$j = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^* \partial_x \psi - \psi \partial_x \psi^*\right)$$

x_1 (слева, далеко от барьера)

$$E = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} > V_0$$

$$\psi_1 = Ae^{ik_1 x} + Be^{-ik_1 x}$$

$\Psi_2 = A e^{ik_2 x}$ $\qquad \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} = E - V_0$

$j_2 = \frac{\hbar k_2}{m}|A|^2$ поток прош. г-ы

$j_1 = \frac{\hbar k_1}{m}(1 - |B|^2)$ → поток пад. г-ы, поток отраж. г-ы

$j_1 = j_2$, т.к. вронскиан не зав. от x и соотв. одному и тому же знач. энергии, только один — в т. x_1, другой — в т. x_2

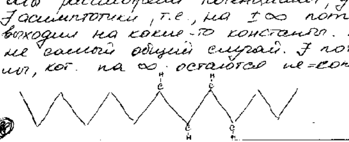
коэф-т отражения — $R = |B|^2 = \left|\frac{j^{отр}}{j^{пад}}\right|$
отношение потоков (пад. и отр)

коэф-т прохождения → $T = \left|\frac{j^{прош}}{j^{пад}}\right| = \frac{k_2}{k_1}\cdot|A|^2$

// Мы заранее приняли амплитуду падающей волны единичной //.

$$R + T = 1 \quad (\text{т.к. } j_1 = j_2)$$

Мы рассмотрели потенциалы, у которых ∃ асимптотики, т.е., на $\pm\infty$ потенциал выходит на какие-то константы. Но это не самый общий случай. ∃ потенциалы, кот. на ∞ остаются не=const



38

Пот-л:

Рассм. задачу на уравнение (одномер.) Шредингера в периодическом потенциале:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\Psi(x) = E\,\Psi(x)$$

$$V(x) = V(x+a)$$

Пусть $\Psi_E(x)$ — реш. ур. Шр. с эн E. Тогда ∃ и другое реш. того же ур-ия, кот. получается сдвигом иск. на период.

$$\tilde{\Psi}_E(x) = \Psi_E(x+a)$$

Теорема Флоке. Если пот-л периодич., то мы можем рассм. в кач-ве реш. в.-ф., удовл. условию

$$\Psi(x+a) = \lambda\,\Psi(x)$$

У ур. Шр. должно быть 2 лин. незав. решения (т.к. оно — 2-го пор-ка):

$$u_1(x),\ u_2(x)$$

$u_1(x+a) =$, $u_2(x+a) =$ $\Big\}$ $u_i(x+a) = C_{ij}u_j(x)$

Тоже фунд. пара решений

$\det C \neq 0$ (т.к. опр. всегда ∃ — обратное преобр-ие)

$(\det C = 1)$

39

Ищем решение в виде:

$\psi(x) = A u_1(x) + B u_2(x)$

$\psi(x+a) = \lambda \psi(x) = \lambda(A u_1(x) + B u_2(x))$

С др. стороны, $\psi(x+a) = A u_1(x+a) + B u_2(x+a) =$

$= A(C_{11} u_1(x) + C_{12} u_2(x)) + B(C_{21} u_1(x) + C_{22} u_2(x))$

Т.к. $u_1(x)$ и $u_2(x)$ - лин. незав., то:

$$\begin{cases} \lambda A = A C_{11} + B C_{21} \\ \lambda B = C_{12} A + C_{22} B \end{cases}$$

$$\det \begin{pmatrix} C_{11} - \lambda & C_{21} \\ C_{12} & C_{22} - \lambda \end{pmatrix} = 0$$

$$C_{11} C_{22} - (C_{11} + C_{22})\lambda + \lambda^2 - C_{12} C_{21} = 0$$

$$\lambda_1 \lambda_2 = \det C = 1$$

λ должна сводиться к фазовому множителю. Пусть это не так. Напр.,

$|\lambda_1| > 1$

$\psi(x+a) = \lambda \psi(x)$

$\psi(x) \xrightarrow[x \to \infty]{} \infty$ - это в кв.м. не допускается $\Rightarrow$ ($|\lambda_1| < 1$ - аналогично)

выбираем: $\lambda_1 = e^{ika}$, $\lambda_2 = e^{-ika}$,

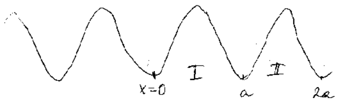
K - квазиимпульс $\quad -\frac{\pi}{a} \le k \le \frac{\pi}{a}$

$\psi(x+a) = e^{ika} \psi(x)$

Решение: $\psi(x) = e^{ikx} \Phi_k(x)$, плоская волна, производящ. блоховской ф-цией

$\Phi_k(x+a) = \Phi_k(x)$ - ф-ция Блоха

$$\psi(x+a) = e^{ik(x+a)} \Phi_k(x+a) = e^{ika} \psi(x)$$



Рассм. сначала ур. Шр

$0 \le x \le a \quad \psi_I = A u_1 + B u_2$

$a \le x \le 2a \quad \psi_{II}(x) = e^{ika} \psi_I(x-a) =$

$= e^{ika}[A u_1(x-a) + B u_2(x-a)]$

Нам надо сшить эти реш. и их произв. в т. $x = a$:

$$\begin{cases} \psi_I(a) = \psi_{II}(a) \\ \psi_I'(a) = \psi_{II}'(a) \end{cases}$$

$$\begin{cases} A u_1(a) + B u_2(a) = e^{ika}[A u_1(0) + B u_2(0)] \\ A u_1'(a) + B u_2'(a) = e^{ika}[A u_1'(0) + B u_2'(0)] \end{cases}$$

$$0 = \begin{Vmatrix} u_1(a) - e^{ika}u_1(0) & u_2(a) - e^{+ika}u_2(0) \\ u_1'(a) - e^{ika}u_1'(0) & u_2'(a) - e^{ika}u_2'(0) \end{Vmatrix}$$

$$\cos Ka = \frac{[u_1(0)u_2'(a) + u_1(a)u_2'(0)] - [u_2(0)u_1'(a) + u_2(a)u_1'(0)]}{\cancel{\ldots}\, 2\underbrace{(u_1u_2' - u_1'u_2)}_{\text{const}}}$$

Это ур-ие связывает квазиимп. K частицы с теми уровнями энергии, на кот. она нах-ся (через u_1, u_2).

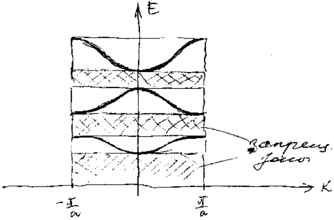
Поск. у нас - cos действ. величина, то пр. часть

$$|\quad\quad| \leq 1,$$

т.е. возникает зонная структура, состоящая из разреш. (где нер-во вып-ся) энергетич. зон и запрещ. энерг. зон (где нер-во не вып-ся).

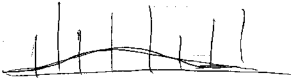
Находим u_1, u_2, потом - пр. часть и

$E = E(K)$, $-\frac{\pi}{a} \leq K \leq \frac{\pi}{a}$



Это ↑ для строго периодич. структуры. А что, если структура абсолютно хаотична? (например, в аморфных телах). Будет эффект Андерсена

и прошедшая, и отраженная волна будут „гаситься" (из-за ↑ хаотичности фаз) ⇒ эф. Ан.: возникает связ. состояние - волна не выйдет!



Квазиклассическое приближение.

Кв. мех. должна содержать классич. как предельный переход.

Ур-ие Шр. (нестац.):

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left(\frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + V \right) \Psi$$

Как отсюда вытекают ур-ие клас. мех.?

Запишем в. ф. в виде:

$$\Psi = a e^{\frac{i}{\hbar} S} \qquad |\Psi|^2 = a^2$$

Подставим в ур-ие:

$$a \frac{\partial S}{\partial t} - i\hbar \frac{\partial a}{\partial t} + \frac{a}{2m} (\vec{\nabla} S)^2 - \frac{i\hbar}{2m} a \Delta S -$$

$$- \frac{i\hbar}{m} \vec{\nabla} S \vec{\nabla} a - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta a + V a = 0$$

Распишем отдельно мнимую и действит. часть:

$$\begin{cases} \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} (\vec{\nabla} S)^2 + V - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta a}{a} = 0 \\ \frac{\partial a}{\partial t} + \frac{1}{2m} a \Delta S + \frac{1}{m} \vec{\nabla} S \vec{\nabla} a = 0 \end{cases}$$

Эти ур-ие эквив-ны (в точности) ур-ию Шр.

Сделаем неком приближения.

Все приближения – в коэф-те $\frac{\hbar^2}{2m}$ (там есть $\hbar$).

Член $\frac{1}{2m} (\vec{\nabla} S)^2$ конкурир с $\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta a}{a}$. Сравнивая эти 2 выраж., получим

$$|S| \gg \hbar$$

(чтобы пренебречь членом с $\frac{\hbar^2}{m} \frac{\Delta a}{a}$)

Учитывая это приближение, получим уравнение:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} (\vec{\nabla} S)^2 + V = 0 \text{ – ур-ие Гам.-Якоби}$$

Т. е., кв. мех. переходит в классич. при условии

$$|S| \gg \hbar.$$

Теперь рассм. 2е ур-ие.

Напомним, что если S – действие, то $\vec{\nabla} S = \vec{p}$ (импульс). Тогда

умножим ~~ур~~ 2ое ур-ие на $2a$:

$$\frac{\partial a^2}{\partial t} + \frac{a^2}{m}\Delta S + \frac{1}{m}\vec\nabla S\,\vec\nabla(a^2) = 0$$

$$|\Psi|^2 = a^2 = \rho$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec\nabla\Big(\frac{\rho}{m}\underbrace{\vec\nabla S}_{\vec p}\Big) = 0$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec\nabla(\rho\vec V) = 0 \text{ – ур-ие непр.-ти}$$

Т.е. волн. пакет движется по законам классич. мех.

Как именно будут трансформ-ся кв.-мех. в. ф., если будем исп. приближ. ~~[illegible]~~ $\hbar \ll |S|$?

Метод Венцеля-Крамерса-Бриллюэна. (приближение).

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + V\Psi = E\Psi$$

Будем искать Ψ в виде: $\Psi = e^{\frac{i}{\hbar}S}$ (без амплитуды! тогда S – комплекс. величина). Тогда

$$\frac{1}{2m}(\vec\nabla S)^2 + V - E - \frac{i\hbar}{2m}\Delta S = 0$$

Чтобы вып-сь ур-ие Гам-Як, потребуем вып-ие условия

$$|\vec\nabla S|^2 \gg \hbar|\Delta S|.$$

В этом приближении:

$$\frac{1}{2m}(\vec\nabla S)^2 + V - E = 0 \to \text{ур. Гам.-Як.}$$

Расшифруем условие $|\vec\nabla S|^2 \gg \hbar|\Delta S|$.

$$\vec p = \vec\nabla S \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \frac{\hbar}{p^2}|\vec\nabla\vec p| \ll 1$$

В одномерном случае:

$$\frac{\hbar}{p^2}\left|\frac{dp}{dx}\right| \ll 1$$

$$\left|\frac{d\lambda}{dx}\right| \ll 1,$$

где $\left|\frac{1}{p^2}\frac{dp}{dx}\right| = \frac{d}{dx}\Big(\frac{1}{p}\Big)$

λ – длина волны Де Бройля.

Т. обр., квазиклассич. прибл. св-ся к след: медленное измен. длины волны частицы по ср. с характ. размерам сис-мы

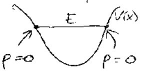
Запишем условие по-другому:

$$p = \sqrt{2m(E - V(x))} \to \text{ в } \frac{dp}{dx}:$$

$$\frac{\hbar}{p^2}\left|\frac{dp}{dx}\right| = \frac{m\hbar}{p^3}\left|\frac{dV}{dx}\right| \ll 1 \quad \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \quad \frac{p^3}{m\hbar} \gg \left|\frac{dV}{dx}\right|$$

Видно, что это условие может нарушаться в классич. точках поворота



Условие нарушается

условие $|S| \gg \hbar$ слишком грубое

Что же делать с точками поворота?
Рассматриваем одномерное ур-ие:

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + V - E - \frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2 S}{\partial x^2} = 0$$

S представляется (в приближении ВКБ) в виде ряда:

$$S = \sigma_0 + \frac{\hbar}{i}\sigma_1 + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2\sigma_2 + \dots$$

Подставляем в ур-ние, используя теорию возмущения.

$$\frac{1}{2m}\left(\sigma_0' + \frac{\hbar}{i}\sigma_1' + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2\sigma_2' + \dots\right)^2 + V - E -$$

$$-\frac{i\hbar}{2m}\left(\sigma_0'' + \frac{\hbar}{i}\sigma_1'' + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2\sigma_2'' + \dots\right) = 0 \; -$$

— это ряд по степеням $\hbar$, он равен 0 тогда и только тогда, когда все коэф-ты $= 0$.

$\hbar^0$: $(\sigma_0')^2 = 2m(E - V) = p^2(x)$

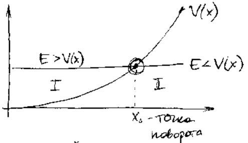
$\hbar^1$: $2\sigma_0'\sigma_1' + \sigma_0'' = 0$

$\hbar^2$: $2\sigma_0'\sigma_2' + (\sigma_1')^2 + \sigma_1'' = 0$

. . . . . .

$\hbar^n$:

25.04.07. Лекция 16.



I: $\sigma_0 = \pm\int_x^{x_0} p(x) + C_0$

Интегрировании так, чтобы нижн. предел был меньше верх.

$$p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))}$$

$$\sigma_1' = -\frac{1}{2}\frac{\sigma_0''}{\sigma_0'}$$

$$\sigma_1 = -\frac{1}{2}\ln\sigma_0 + C_1$$

$$\psi_I = e^{\frac{i}{\hbar}(\mp\int_x p(x)dx' + C_0)} \cdot e^{-\frac{1}{2}\ln\sigma_0' + C_1} =$$

$$//\psi = e^{\frac{i}{\hbar}S} = e^{\frac{i}{\hbar}(\sigma_0 + \frac{\hbar}{i}\sigma_1 + \dots)}//$$

$$= \frac{1}{\sqrt{p}}\left(a\sin(z+\gamma) + b\cos(z+\gamma)\right)$$

$$z = \frac{1}{\hbar}\int_x^{x_0} p(x')dx'$$

II: $$\psi_{II} = \frac{1}{\sqrt{|p|}}\left(Ae^{-|z|} + Be^{|z|}\right)$$

$$|p| = \sqrt{2m(V-E(x))}$$

$$|z| = \frac{1}{\hbar}\int_{x_0}^x |p(x')|dx'$$

Эти решения нужно „сшить" в окрест-ти точки поворота. В этой окр-ти пользоваться квазикл. прибл. нельзя, поэтому сшивать будем, исходя из исх ур-ния Шр.

Разложим пот-л в точке поворота в ряд Тейлора:

$$V(x) = \underset{\overset{\|}{E}}{V(x_0)} + V'(x_0)(x-x_0) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow E - V(x) = -V'(x_0)(x-x_0)$$

Тогда ур. Шр:

$$\psi'' - \alpha(x-x_0)\psi = 0 \quad, \text{ где } \alpha\frac{\hbar^2}{2m} = V'(x_0)$$

Кроме Ландафшица (Давыдов, Елютин)

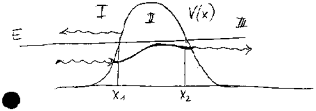
$$\Psi(x) = a\Psi_1(x) + b\Psi_2(x)$$

$$\psi_1 = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{p}}\sin(z+\frac{\pi}{4}) & x<x_0\ (I)\\ \frac{1}{2\sqrt{|p|}}e^{-|z|} & x>x_0\ (II)\end{cases}$$

$$\psi_2 = \begin{cases}\frac{1}{\sqrt{p}}\cos(z+\frac{\pi}{4}) & x<x_0\ (I)\\ \frac{1}{\sqrt{|p|}}e^{|z|} & x>x_0\ (II)\end{cases}$$

Прелесть этих решений в том, что они явл. решениями для $\forall$ формы потенциала, т.к. p и z выражаются через него. Однако, это верно только в рамках квазикл. прибл.

Прохождение под барьером в случае квазиклассического приближения



$$\psi_I = \frac{a}{\sqrt p}\sin(z+\frac{\pi}{4}) + \frac{b}{\sqrt p}\cos(z+\frac{\pi}{4}) =$$

$$z = \frac{1}{\hbar}\int_x^{x_1} p(x')dx'$$

$$= B_0\frac{e^{-i(z+\frac{\pi}{4})}}{\sqrt p} + B_1\frac{e^{i(z+\frac{\pi}{4})}}{\sqrt p}$$

$$B_0 = \frac{b+ia}{2} \qquad B_1 = \frac{b-ia}{2}$$

При $x\to-\infty$ $z \to -\frac{1}{\hbar}p(x)$, тогда $e^{-iz} \to e^{\frac{i}{\hbar}p(x)}$ как и должно быть, т.к. на $-\infty$ пад. волна должна быть плоской

$$\Psi_{nag} = B_0 \frac{e^{-i(z+\frac{\pi}{4})}}{\sqrt{p}}$$

$$\Psi_{otp} = B_1 \frac{e^{i(z+\frac{\pi}{4})}}{\sqrt{p}}$$

$$\Psi_{II} = \frac{a}{2\sqrt{|p|}} e^{-|z|} + \frac{b}{\sqrt{|p|}} e^{|z|}$$

$$|z| = \frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x} |p(x')| dx'$$

Введем $|z| = \gamma - |\tilde{z}|$,

где $\gamma = \frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2} |p(x)| dx$, а $|\tilde{z}| = \frac{1}{\hbar}\int_{x}^{x_2} |p(x')| dx'$. Тогда

$$\Psi_{II} = \frac{a}{2\sqrt{|p|}} e^{-\gamma} e^{|\tilde{z}|} + \frac{b}{\sqrt{|p|}} e^{\gamma} e^{-|\tilde{z}|} =$$

$$= \frac{\tilde{a}}{2\sqrt{|p|}} e^{-|\tilde{z}|} + \frac{\tilde{b}}{\sqrt{|p|}} e^{|\tilde{z}|}$$

$$\tilde{a} = 2b e^{\gamma}, \quad \tilde{b} = \frac{a e^{-\gamma}}{2}$$

$$\Psi_{III} = \frac{\tilde{B}_0}{\sqrt{p}} e^{-i(\tilde{z}+\frac{\pi}{4})} + \frac{\tilde{B}_1}{\sqrt{p}} e^{i(\tilde{z}+\frac{\pi}{4})}$$

$$\tilde{z} = \frac{1}{\hbar}\int_{x_2}^{x} p(x') dx'$$

$$\tilde{B}_0 = \frac{\tilde{b} + i\tilde{a}}{2} \qquad \tilde{B}_1 = \frac{\tilde{b} - i\tilde{a}}{2}$$

$x \to \infty \Rightarrow \tilde{z} \to \frac{px}{\hbar} \Rightarrow e^{-i(\tilde{z}+\frac{\pi}{4})}$ - волна, идущая из ∞, а у нас волна уходит на $\infty \Rightarrow \tilde{B}_0 = 0$

$$\tilde{B}_0 = 0 \Rightarrow \tilde{b} = -i\tilde{a} \Rightarrow \tilde{B}_1 = \tilde{b} = \frac{a e^{-\gamma}}{2}$$

$$\tilde{a} = 2b e^{\gamma} = i\tilde{b} \qquad b = \frac{ia}{4} e^{-2\gamma}$$

$$B_0 = \frac{b + ia}{2} = \frac{ia}{2}\left(\frac{e^{-2\gamma}}{4} + 1\right)$$

$$B_1 = \frac{ia}{2}\left(\frac{1}{4}e^{-2\gamma} - 1\right)$$

$$\tilde{B}_1 = \frac{a}{2} e^{-\gamma}$$

Коэффициент прохождения:

$$T = \left|\frac{\tilde{B}_1}{B_0}\right|^2 = \frac{1}{(e^{\gamma} + \frac{1}{4}e^{-\gamma})^2}$$

Коэффициент отражения:

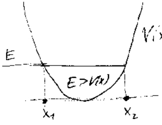
$$R = \left|\frac{B_1}{B_0}\right|^2 = \left(\frac{1 - \frac{1}{4}e^{-2\gamma}}{1 + \frac{1}{4}e^{-2\gamma}}\right)^2$$

Прелесть этих выражений в том, что они зависят только от γ, а γ - явный интеграл от пот-ла. Но в реальности γ велико и таким образом коэф-ты не пишут, а пишут так:

$$T \simeq e^{-2\gamma} \qquad R \simeq 1 - e^{-2\gamma}$$

$$\gamma = \frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(V(x) - E)}\, dx$$

Рассмотрим теперь яму (в квазиклассич. приближении)



Для разреш. области (где $E>V(x)$)

$$\psi_1 = \frac{a}{\sqrt{p}} \sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x} p(x')dx' + \frac{\pi}{4}\right)$$

$$\psi_2 = \frac{a'}{\sqrt{p}} \sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_{x}^{x_2} p(x')dx' + \frac{\pi}{4}\right)$$

В одномер. ур. Шр. все дискр. уровни невырождены и в.ф. у них одна и то же $\Rightarrow$

$\Rightarrow \psi_1(x) = \psi_2(x) \qquad x_1 \le x \le x_2$

Ландау не смотреть!

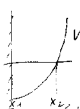
$\psi_1'(x) = \psi_2'(x)$

$$-tg\left(\frac{1}{\hbar}\int_{x}^{x_2} p(x')dx' + \frac{\pi}{4}\right) = tg\left(\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x} p(x')dx' + \frac{\pi}{4}\right) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \frac{1}{\hbar}\left(\int_{x_1}^{x} \dots + \int_{x}^{x_2} \dots\right) + \frac{\pi}{2} = \pi n, \quad n \gg 1$$

$$\int_{x_1}^{x_2} p(x)dx = \pi\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar, \quad n \gg 1$$

Если стенка вертикальная, то нет $\frac{1}{2}$, т.к. нарушается условие квазиклас-ти $\frac{p^3}{m\hbar} \gg \frac{\partial V}{\partial x}$, т.к. там $\frac{\partial V}{\partial x} \to \infty$



В этом случае ч-ца пройти не сможет ни (за стенку) в клас., ни в квазикл. случае

$$\psi_1 = \frac{a}{\sqrt{p}} \sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x} p(x')dx'\right)$$ – нет $\frac{\pi}{4}$, чтобы за стенкой решение обратилось в 0

Тогда условие Бора-Зоммерф. запишется так:

$$\int_{x_1}^{x_2} p(x)dx = \pi\left(n+\frac{1}{4}\right)\hbar \quad \text{или } \tfrac{3}{4}, \quad n \gg 1$$

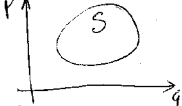
А что если рассм-ся не связ. сост., а происх. отражение квазикл. ч-цы от вертик. стенки

Можно записать:

$$\oint p\,dq = 2\pi\hbar\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

На каждое связ. сост. прих-ся в фаз. плоскости (p,q) площадка

Переход к след. связ. сост. увелич. площ. на $2\pi\hbar$ $\Rightarrow$ можно посчитать, сколько всего связ. сост., если зад. S разреш. обл.



$$N \approx \frac{S}{2\pi\hbar}$$

Это означает, что на каждый эл-т $dp\,dq$ прих-ся число квазикл. сост.:

$$\Delta p\,\Delta q = \Delta S \Rightarrow \Delta N = \frac{\Delta p\,\Delta q}{2\pi\hbar}$$

Лекция 17. 2.05.07.

3D кв. мех

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r})$$

Рассм. $V(\vec{r}) = V(r)$, т.е. сферич. симм. случай.

Тогда возможно разделение перем. на угловую часть и радиальную.

$$\Delta = \Delta_r + \frac{1}{r^2}\Delta_{\theta,\varphi}$$

$$\Delta_r = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) \equiv \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r)$$

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

$$\psi = R(r)\cdot\Phi(\theta,\varphi)$$

$$\Delta_{\theta\varphi}\Phi = \lambda\Phi$$

Реш. этой задачи (кв-мех-кое):

$$\Phi(\theta,\varphi) = Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

$$\lambda = -l(l+1), \quad l = 0, 1 \ldots$$

$$-l \le m \le l$$

$$Y_{lm} \underset{m\ge 0}{=} i^l (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\cdot\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} \times P_l^m(\cos\theta)e^{im\varphi}$$

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

$m<0$ $\quad Y_{l,-|m|} = (-1)^{|m|}Y_{l|m|}$

Т.к. в.ф. опр. с точностью до фазы, то

у нас нет никакого основания считать m целым!

Док-ся, что на $[-1,1]$ для кр. задача Лежандра (при усл. огр-ти на), полной сис-мой реш. яв. сферич. ф-ции.

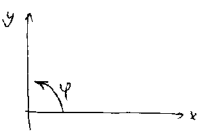
$$\int\limits_{4\pi} d\Omega\, Y^*_{l'm'}Y_{lm} = \delta_{ll'}\delta_{mm'}$$ — ортонорм. сис-ма сферич. ф-ций

$\sin\theta\, d\theta\, d\varphi$

\+
огр. ф-цию $f(\theta,\varphi)$ можно разложить в ряд

$$f(\theta,\varphi) = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} a_{lm}Y_{lm}(\theta,\varphi)$$ — полнота сис-мы сферич. ф-ций

$$a_{lm} = \int d\Omega\, Y^*_{lm}f(\theta,\varphi)$$



Пусть мы создали идеальный двумер. объект (что на самом деле очень трудно)

Оператор вращения в плоскости xy.

$$l_z = -i\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

Рассм. унит. преобр-ие:

опер-р сдвига

$$e^{i\theta l_z}f(\varphi) = e^{i\theta(-i\frac{\partial}{\partial\varphi})}f(\varphi) = e^{\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}}f(\varphi) =$$

$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\left(\theta \frac{\partial}{\partial\varphi}\right)^n f(\varphi) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\theta^n f^{(n)}(\varphi) =$

$= f(\varphi+\theta)$, т.е. l_z - генератор поворота, кот. изменяет аргумент в.ф. на θ, т.е.

$$l_z = -i\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

Какие у этого опер-ра СЗ?

$$l_z\psi = \nu\psi$$

$$-i\frac{\partial}{\partial\varphi}\psi=\nu\psi$$

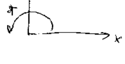
$$\psi = Ce^{i\nu\varphi}$$

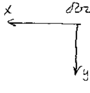
В ~~кв~~ классич. мех. ν - целое.
Но в кв мех в.ф. опр. с точн. до фазы, то ν - необязательно целое. Поэтому

$$\nu = n+\alpha$$

n — действ. целая часть, $0\le\alpha<1$

$$\psi(\varphi+2\pi) = e^{i2\pi\alpha}\cdot\psi(\varphi)$$





Отражение на плоскости - это преобр., кот. может быть получено непр. обр., начиная с тожд. преобр-ие - поворот на π

Рассм. задачу 2 ч-ц.

Если $V=V(\vec r_1-\vec r_2)$, то задача св-ся к одночастн.

Замена частиц св-ся к отражению.

$\vec r_1-\vec r_2 \to \vec r_2-\vec r_1$

$\vec r = \vec r_1-\vec r_2$

замена: $\vec r\to-\vec r$

Поворот на π:

$$e^{il_z\pi}\psi_\nu = \psi_\nu(-\vec r) = e^{i\pi\nu}\psi_\nu(\vec r) = e^{i\pi(n+\alpha)}\psi_\nu(\vec r)$$

ψ - СФ, ν - СЗ

Если $\alpha=0$, то $e^{i\pi n} = (-1)^n$ либо бозон, либо ферм.

Если $\alpha\neq0$, то „парастатистика" - не бозоны и не фермионы, это возм. только на плоскости (в 3х-мер. случае теор. Паули утв., что кроме бозонов или фермионов ничего быть не может).

Радиальное уравнение Шредингера

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_r + \frac{\hbar^2}{2mr^2}l(l+1)+V(r)\right]R = ER$$

$$\Delta_r = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\,\cdot)$$

$$R = \frac{u}{r}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}u'' + \left(V(r) + \frac{\hbar^2}{2mr^2}\,l(l+1)\right)u\right] = Eu$$

Отличие от ур Шр.:

по форме - то же, что и ур. Шр. для одномер., но не V, а V_{eff} + теперь $0 < r < \infty$!, а не на всей вещ. оси,

т.к. Нужно гр. условие:

$$\int |\psi|^2 dr = 1$$

$$\parallel$$

$$\int r^2 |R|^2 \underbrace{\int d\Omega |Y_{lm}|^2}_{=1 \text{ в силу норм. ш. ф-ций}} = 1$$

$$\int r^2 |R|^2 dr = 1 = \int_0^\infty |u|^2 dr \,!$$

u может быть сингул. в „0"?

Рассм. ф-цию

$u \sim \frac{1}{\sqrt[4]{r}}$, тогда $\int_0^\infty \frac{dr}{\sqrt{r}}$, он берется

Но на самом деле, $u(0)=0$.

Рассм. ср. кин. эн. г-цы

$$\overline{T} = \langle\psi|\frac{\hat{p}^2}{2m}|\psi\rangle =$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m}\int dr\, |\vec{\nabla}\varphi|^2$$

$$\vec{\nabla} = \left\{\vec{e}_r\frac{\partial}{\partial r},\ \vec{e}_\theta\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta},\ \vec{e}_\varphi\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right\}$$

Будем рассм. только рад. част.:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\int_0^\infty r^2 dr \left|\frac{\partial R}{\partial r}\right|^2$$

на ∞ R убывает → нет проблем

а в нуле?

1) Физ. усл.: для стац. сост. г-цы ср. кин. эн. должна быть конечна! (если нет, то г-ца падает на центр с ускорением, и это сост. - не стац.) Т.обр., $\int$ должен быть конечен в „0".

Для этого: критич. крайний случай:

весь инт-л $\int \sim \frac{1}{r}$, тогда

$$\left|\frac{\partial R_{кр}}{\partial r}\right|^2 = \frac{1}{r^3}$$

Если $\frac{1}{r^{3-\varepsilon}}$, то инт-л возьмется:

$$\int_0 r^2 dr \frac{1}{r^{3-\varepsilon}} = \int \frac{dr}{r^{1-\varepsilon}}$$

$$\left.\frac{\partial R}{\partial r}\right|_{r\to 0} = \frac{1}{r^{3/2}}$$

$$R_{кр} \underset{r\to 0}{\sim} \frac{1}{\sqrt{r}}$$ случае $\Rightarrow R_{кр} \sim \frac{1}{r}, \frac{1}{r^{3/2}}$...

$u_{кр} \sim \sqrt{r} \Rightarrow u(0)=0$, но это не строгое следствие!

Если U быстрее $U_{кр}$, то
$T=\infty$ → падение на центр ⇒
сост-ие не стац.,
если U медл., чем $U_{кр}$, то
реш. ∃.
В кл. мех. ракета ...

8.05.07. Лекция 18.

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m}u'' + \left(V(r) + \frac{\hbar^2}{2mr^2}l(l+1)\right)u = Eu, \\ u(0)=0. \end{cases}$$

$V(r \to \infty) = 0$

$E<0$ - дискр. уровни

$E>0$ - непр. спектр (за искл. экзотич. исключений) ∃ потенц.

Если $V(r)>0$, то дискр. спектра нет вообще!

Если ∃ обл., где $V(r)<0$, то дискр. ур. в яме могут возникать при усл.

$$\frac{2m}{\hbar^2} V_0 a^2 \geq 1.$$

 Дискр. уровни хар-ся n_r и l. $E(n_r, l)$

$n_r = 0 \to E_{min}$

Теор. Основн. сост. не имеет нулей (кроме как в нуле), а все следующие имеют на 1 больше.

Центробеж. пот-л - положит. ⇒ с ростом l ур-ни поднимаются.

Оценка на число ур-ней с данным l:

$$N_l \lesssim \frac{2m}{\hbar} \cdot \frac{1}{2l+1} \int_0^\infty dr \cdot r\, \tilde{V}(r), -$$
оценка Баргмана

где $\tilde{V}(r) = \begin{cases} |V|, & V<0 \\ 0, & V>0. \end{cases}$

$l=0 \quad N_0 \simeq \frac{m}{\hbar^2} V_0 a^2$

(потенциал имеет обл. отриц-ти $\sim a$)

Можно найти то l, при кот. ∃ хотя бы одно связ. состояние (положить $N_l = 1$).

Различные виды асимптотик потенциала на ∞.

Рассм. потенциал

$V(r) \xrightarrow[r \to 0]{} -\frac{\alpha}{r^s}$.

Для разных s - разные случаи.

$r \sim a \quad p^2 \sim \frac{\hbar^2}{a^2}$

$$E \approx \frac{\hbar^2}{2ma^2} - \frac{\alpha}{a^s}$$

Как эта ф-ция ведет себя в зав-ти от a? Все зависит от s.

Если $s>2$, то при уменьш. a $E\downarrow$,
~~то есть имеем падение на центр.~~
при увелич. a $E\uparrow$

Если $s<2$, то уст. сост. $\exists$.

Инт-л из нер-ва Баргмана:

$$\int_0^\infty r\,dr\,\tilde V(r)$$

при $s>2$ этот инт-л расх-ся,
при $s<2$ этот инт-л сх-ся.

при $s=2$ $V(r)\xrightarrow[r\to 0]{} -\frac{\alpha}{r^2}$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left(R''+\frac{2}{r}R'\right)+\left(\frac{\hbar^2}{2mr^2}l(l+1)-\frac{\alpha}{r^2}\right)R=ER$$

В т. $r=0$: . . . . . $=0$

Вводим пар-р $\gamma=\frac{2m\alpha}{\hbar^2}-l(l+1)$

$$R''+\frac{2}{r}R'-\frac{\gamma}{r^2}R=0 \text{ — одн. ур. Эйлера}$$

$$R=r^\beta$$
$$\beta(\beta+1)-\gamma=0$$
$$\beta^2+\beta-\gamma=0$$
$$\beta=-\frac{1}{2}\pm\sqrt{\frac{1}{4}+\gamma}$$

Если $\gamma>-\frac{1}{4}$, то $\beta=-\frac{1}{2}+\sqrt{\frac{1}{4}+\gamma}$
(т.е. при не слишком больших l)

$R\sim r^{-\frac{1}{2}+\sqrt{\ }}$ —

$\gamma<-\frac{1}{4}$

$R\sim a r^{-\frac{1}{2}+i\sqrt{\ }}+b r^{-\frac{1}{2}-i\sqrt{\ }}$ — ч-ца падает на центр

∞

Поведение на ∞

$V(r)\xrightarrow[r\to\infty]{} -\frac{\alpha}{r^s}$

$$\int_0^\infty r\,dr\,\tilde V(r)$$

Если $s>2$, то инт-л сх-ся $\Rightarrow$
$\Rightarrow$ конечное число дискр. уровней

Если $s<2$, то инт-л расх-ся $\Rightarrow$
$\Rightarrow$ ∞ число уровней (кулон. пот-л)

∞

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

$l=0$ → одномерная задача (в 0 — ∞ высокая непрониц. стенка из-за условия $u(0)=0$).

Там, где работает квазикл. прибл. $\frac{m\hbar}{p^3}\left|\frac{\partial V}{\partial r}\right|\ll 1$

решение: $u = C\sin\left[\frac{1}{\hbar}\int_0^r p(r)\,dr\right]$

$l\neq 0$. Надо проверить, насколько квазикл. приближение применимо. Для этого проанализируем условие

$$\left|\frac{d\lambda}{dr}\right| \ll 1$$

$\lambda = \frac{\hbar}{p}$ $\qquad \hbar l \,"="\, rp$ → оценка!

$$\Downarrow$$

$$\frac{\hbar}{p} \,"="\, \frac{r}{l}$$

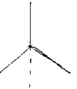
$$\left|\frac{d\lambda}{dr}\right| \simeq \frac{1}{l} \ll 1 \Rightarrow$$

l должно быть дост. велико (большое l - большие угл. момент ⇒ большая энергия ⇒ большое действие, $\gg \hbar$)

$\underline{\underline{l \gg 1}}$ — квазикл. прибл. для радиального уравнения

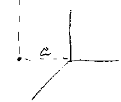
Угловой момент.

Задача о параллельном переносе.



$S(\vec a) = e^{-\frac{i}{\hbar}\vec p\vec a}$ - опер-р сдвига

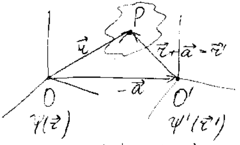
Гейзенберг → $S^{+}\vec r S = \vec r + \vec a$ — трансляция на $\vec a$.



$S(\vec a) = e^{-\frac{i}{\hbar}\vec a\left(\frac{\hbar}{i}\nabla\right)} = e^{-\vec a\nabla}$

Шредингер

$\psi'(\vec r) = S(\vec a)\psi(\vec r) = \psi(\vec r - \vec a)$

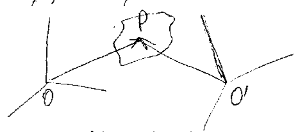


$$\psi(\vec r) = \psi'(\vec r')$$

$$\psi(\vec r) = \psi'(\vec r + \vec a)$$

$$\psi'(\vec r) = \psi(\vec r - \vec a)$$

Опер.р поворота.



$$\psi(\vec r) = \psi'(\vec r')$$

Беск. малый поворот,

$\vec a = \vec n\varphi = \vec\varphi$

$\vec r' = \vec r + \delta\vec r$ беск. малый пар-р поворота

$\delta\vec r = [\delta\vec\varphi \times \vec r]$

Как при этом связаны ψ и ψ'?

$$\psi'(\vec{r}\,') = \psi(\vec{r})$$

$$\psi'(\vec{r}) = \psi(\vec{r} - \delta\vec{r})$$

$$\psi'(\vec{r}) = \psi(\vec{r}) + \delta\psi(\vec{r})$$

$$\delta\psi(\vec{r}) = -\delta\vec{r}\,\vec{\nabla}\,\psi(\vec{r}) = -\left([\delta\vec{\varphi} \times \vec{r}]\cdot\vec{\nabla}\right)\psi(\vec{r}) =$$

$$= -\left(\varepsilon_{abc}\,\delta\varphi_b\, r_c\, \nabla_a\right)\psi(\vec{r}) =$$

$$= -\left(\varepsilon_{bca}\,\delta\varphi_b\, r_c\, \nabla_a\right)\psi(\vec{r}) =$$

$$= -\delta\vec{\varphi}\,[\vec{r} \times \vec{\nabla}]\psi(\vec{r}) =$$

$$= -\frac{i}{\hbar}\delta\vec{\varphi}\,[\vec{r} \times \vec{p}]\psi(\vec{r})$$

$$\delta\psi(\vec{r}) = -\frac{i}{\hbar}\delta\vec{\varphi}\cdot \underbrace{\vec{l}}_{\text{оператор орбит. момента}}\psi(\vec{r})$$

$$\vec{l} = [\vec{r} \times \vec{p}]$$

$$l_i = l_i^+ \qquad [l_i, l_j] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk}\, l_k$$

l – генератор преобразований поворотов

Коммутатор $[\ \ ]$ – свойство группы, а не ~~операторов~~ конкр. задачи.

$$l_x l_y - l_y l_x = i\hbar l_z$$

. . . . .

$$S(\vec{a}) = e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{a}\vec{p}}$$

$$\delta\psi(\vec{r}) = -\frac{i}{\hbar}\,\delta\vec{a}\,\vec{p}\cdot\psi(\vec{r})$$

$[p_i, p_j] = \underline{\underline{0}}$! – общее групповое свойство группы переноса

т.е. параллельными переносами перейдем в ту же точку.

$$S(\vec{a}) = e^{-\frac{i}{\hbar}a_x p_x}\, e^{-\frac{i}{\hbar}a_y p_y}\, e^{-\frac{i}{\hbar}a_z p_z}$$

т.е. группа переносов – абелева(!)

А группа вращения – не абелева

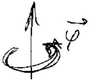
$$\delta\psi(\vec{r}) = -\frac{i}{\hbar}\,\delta\vec{\varphi}\,\vec{l}\,\psi(\vec{r})$$

Как восстановить вид преобразования для конечного поворота?

$$\vec{\varphi} = \vec{n}\,\varphi$$

Зафиксируем $\vec{n}$ и будем менять φ от ∞ малого до конечного.

т.к. $\vec{n}$ – фикс., то все вращения вокруг этой оси образуют абелеву группу



$$U(\varphi + \delta\varphi) = U(\varphi)\,U(\delta\varphi) = U(\delta\varphi)\,U(\varphi)$$

$$\psi'(\vec{r}) = U(\varphi)\cdot\psi(\vec{r})$$

Для ∞ малого поворота

$$U(\delta\varphi) = 1 + \delta U$$

$$\delta U = -\frac{i}{\hbar}\delta\varphi\cdot\vec{n}\,\vec{l}$$

$U(\varphi+\delta\varphi) = U(\delta\varphi)U(\varphi) =$

$= \left(1 - \frac{i}{\hbar}\delta\varphi(\vec{n}\vec{e})\right)U(\varphi)$

$$\frac{U(\varphi+\delta\varphi) - U(\varphi)}{\delta\varphi} = -\frac{i}{\hbar}(\vec{n}\vec{e})U(\varphi)$$

$U'(\varphi) = C\cdot U(\varphi)$

↓ C не зав. от φ

$U(\varphi) = e^{-\frac{i}{\hbar}\varphi(\vec{n}\vec{e})}$ $\quad \vec{e} = \vec{e}^+$ (эрмитово)

↓

$U(\vec{\varphi}) = e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{\varphi}\vec{e}}$

ср. с $S(\vec{a}) = e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{a}\vec{p}}$

Разница: опер-ры e между собой не коммутируют: мы должны зафикс. послед-ть поворотов.

$U(\vec{\varphi}) = e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{\varphi}\vec{J}}$ $\quad \vec{J} = \vec{J}^+$

$[J_i, J_j] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk}J_k$

J - операторы углового момента сис-мы

$J_i \to \hbar J_i$

↓

$[J_i, J_j] = i\,\varepsilon_{ijk}J_k$

$\vec{J}^2 = J_i J_i$

$[\vec{J}^2, J_i] = [J_j J_j, J_i] = i\varepsilon_{ijk}J_k J_j +$

$+ J_j\, i\varepsilon_{ijk}J_k = i\varepsilon_{ijk}(J_k J_j + J_j J_k) = 0$

$a_{mn}b_{mn} \overset{\text{переобозначение } n\leftrightarrow m}{=} a_{nm}b_{nm} = a_{mn}(-b_{mn}) =$

$= -a_{mn}b_{mn} \Rightarrow$

$\Rightarrow a_{mn}b_{mn} = 0$

$\{\vec{J}^2, J_z\}$

Введем СВ:

$|JM\rangle$: $\quad J_z|JM\rangle = M|JM\rangle$

$\vec{J}^2|JM\rangle = \lambda|JM\rangle$

Введем вспом операторы $J_\pm = J_x \pm iJ_y$

J_x, J_y - эрмитовы

$J_\pm = J_\mp^+$

$[J_z, J_\pm] = [J_z, J_x \pm iJ_y] =$

$= iJ_y \pm i\cdot i J_x\cdot(-1) = \pm(J_x \pm iJ_y) = \pm J_\pm$

$J_z J_\pm - J_\pm J_z = \pm J_\pm$

$J_z J_\pm = J_\pm(J_z \pm 1)$

$J_\pm|JM\rangle = |\widetilde{JM}\rangle$

$J_z|\widetilde{JM}\rangle = J_\pm(J_z \pm 1)|JM\rangle =$

$= (M \pm 1) | J\widetilde{M} \rangle$

$J_\pm | JM \rangle = C(JM) \, | JM \pm 1 \rangle$

Действие опер. в $J_\pm$ ~~на~~ увел. или уменьш. СЗ на 1.

$$\vec{J}^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 = \frac{1}{2}(J_+ J_- + J_- J_+) + J_z^2 =$$

$$= J_+ J_- + J_z^2 - J_z = J_- J_+ + J_z^2 + J_z$$

$$[J_+, J_-] = 2J_z = [J_x + iJ_y, J_x - iJ_y] =$$

$$= 2J_z$$

$$\vec{J}^2 | JM \rangle = \lambda | JM \rangle$$

опер-р $J_+J_- + J_-J_+$ не отриц.

Ранее был опер-р $T = M^+ M$ $\quad \langle T \rangle_\psi \geq 0 \Rightarrow$

при фикс. λ J_z^2 не может неогр. расти $\Rightarrow$

$\Rightarrow$ оно огр-но знач. λ

$$J_\pm | JM \rangle = C(JM) | JM \pm 1 \rangle$$

$\exists \; JM_{max}: \quad J_+ | JM_{max} \rangle = 0$

$\vec{J}^2 | JM_{max} \rangle = \lambda | JM_{max} \rangle$,

с др. стороны $\quad \vec{J}^2 | JM_{max} \rangle = (J_- J_+ + J_z^2 + J_z) | JM_{max} \rangle$

$$= \underbrace{(M_{max}^2 + M_{max})}_{\lambda} | JM_{max} \rangle$$

$M_{max} \equiv J \;, \quad \lambda = J(J+1)$

Аналогично, снизу ограничено

J_z^2 ! $\quad J_- | JM_{min} \rangle = 0$

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

$$\lambda = M_{min}^2 - M_{min} = M_{max}^2 + M_{max}$$

$$M_{min} = -M_{max} = -J$$

M_{min} и M_{max} должны отличаться на целое число и $M_{min} = -M_{max} \Rightarrow$

$\Rightarrow J = 0, \frac{1}{2}, 1, \ldots$

$$\underline{\lambda = J(J+1)} \;, \quad \underbrace{-J \leq M \leq J}_{2J+1 \text{ значение}}$$

$$\langle JM | J'M' \rangle = \delta_{JJ'} \delta_{MM'}$$

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

$$\langle JM | \vec{J}^2 | JM \rangle = J(J+1) = M^2 - M +$$

$$+ \langle JM | J_+ \underbrace{\,}_{\sum_{M'} |JM'\rangle\langle JM'|} J_- | JM \rangle =$$

$$= M^2 - M + \langle JM | J_+ \underbrace{| JM-1 \rangle \langle JM-1 | J_- | JM \rangle}$$

$\langle u | T | v \rangle = \langle v | T^+ | u \rangle^* \quad |\langle JM | J_+ | JM-1 \rangle|^2$

$$|\langle JM | J_+ | JM-1 \rangle|^2 = J^2 - M^2 + J + M =$$

$$= (J+M)(J-M+1)$$

Фазу выбираем так, чтобы

$\langle JM | J_+ | JM-1 \rangle = \sqrt{(J+M)(J-M+1)}$

$\langle JM-1 | J_- | JM \rangle = \sqrt{(J+M)(J-M+1)}$

$J_\pm |JM\rangle = C_\pm (JM) |JM \pm 1\rangle$ – отсюда находим $C_\pm$

$J_\pm |JM\rangle = \sqrt{(J\mp M)(J\pm M+1)} |JM\pm 1\rangle$

Найти $J_{x,y}$ - ?

$|JM\rangle$:

$\langle JM | J_x | JM-1 \rangle = \langle JM-1 | J_x | JM \rangle =$

$= \frac{1}{2}\sqrt{(J+M)(J-M+1)}$

$\langle JM | J_y | JM-1 \rangle = - \langle JM-1 | J_y | JM \rangle =$

$= \frac{1}{2i}\sqrt{(J+M)(J-M+1)}$

$\langle JM | J_z | JM' \rangle = M\delta_{MM'}$

(матрица опер-ра J_z - диаг-на)

$\langle JM | J_{x,y} | JM \rangle = 0$

(т.к. матрицы неdiаг-ны)

Как выглядит орбит. момент?

$\{\vec{\ell}^2, \ell_z\}$ – выбираем в качестве 2х коммут. опер. в

$\ell_z = -i\frac{\partial}{\partial\varphi} \qquad \vec{\ell}^2 = -\Delta_{\theta\varphi}$

СФ – это вектора $|JM\rangle$ спроекти-рованные на $|\theta\varphi\rangle$: $|\ell m\rangle$

$\vec{\ell}^2 |\ell m\rangle = \ell(\ell+1)|\ell m\rangle$

$\ell_z |\ell m\rangle = m|\ell m\rangle$

ℓ имеет только целые значения: (т.к. реш. ур. для $\Delta_{\theta\varphi}$ – сфер. ф-ции, кот. имеют целые СЗ)

$\ell = 0, 1, \ldots \qquad -\ell \le m \le \ell$

$\langle \theta\varphi | \ell m \rangle = Y_{\ell m}(\theta, \varphi) =$

$= i^\ell (-1)^m P_\ell^m(\cos\theta)\sqrt{} \cdot e^{im\varphi}$

$\ell_\pm |\ell m\rangle = \ell_\pm Y_{\ell m} = \sqrt{(\ell\mp m)(\ell+m+1)}\, Y_{\ell, m\pm 1}$

Если бы не было $(-1)^m$, то появился бы „–" перед корнем (во Флюгге – без $(-1)^m$)

15.05.07 Лекция 19.

$\vec{\ell} = [\vec{r} \times \vec{p}]$

$\vec{\ell}^2 = -\hbar^2 \Delta_{\theta\varphi}$

Рассм. случай, когда угловой момент порождается другими степенями свободы – спиновыми (не координатными)

В сис-ме центра масс $\vec{p}=0 \Rightarrow \vec{l}=0$, но у некот. объектов $\vec{l}\neq 0$ (ч-ця) и есть некот. собств. момент $\vec{s}$, $\vec{J}=\vec{s}+\vec{l}$

Спиновые степени свободы - принципиально другие степ. свободы:

$[s_i, p_j] = [s_i, r_j] = [s_i, l_j] = 0$.

Но для спина также:

$$[s_i, s_j] = i\,\varepsilon_{ijk} s_k$$

Исп-м 2 коммут. опер-ра $\{\vec{S}^2, S_z\}$

$\vec{S}^2 = S(S+1)$, $S = 0, 1/2, 1 \dots$

СЗ опер-ра S_z: σ, $-S \leq \sigma \leq S$.

$$\vec{S}^2\,\Psi(\vec{r},\sigma) = S(S+1)\,\Psi(\vec{r},\sigma)$$

$$S_z\,\Psi(\vec{r},\sigma) = \sigma\,\Psi(\vec{r},\sigma)$$

Вектор состояния - это в. ф. по $\vec{r}$ и одновременно столбец из $2S+1$ комп-т:

$$|\Psi\rangle \Longleftrightarrow \begin{pmatrix} \Psi(\vec{r}, s) \\ \dots \\ \dots \\ \Psi(\vec{r}, -s) \end{pmatrix}$$

Нормировка: $\langle\Psi|\Psi\rangle = \int \sum_{\sigma=-s}^{s} |\Psi(\vec{r},\sigma)|^2 d\vec{r}$

$|\Psi(\vec{r},\sigma)|^2$ - плотность вер-ти того, что ч-ца будет нах. в т. $\vec{r}$ и $S_z=\sigma$;

вер-ть —"— : $P_\sigma = \int |\Psi(\vec{r},\sigma)|^2 d\vec{r}$

Явный вид операторов спина.

Опер-ры спина подчиняются след. у:

$$(S_x)_{\sigma,\sigma-1} = (S_x)_{\sigma-1,\sigma} = \frac{1}{2}\sqrt{(S+\sigma)(S-\sigma+1)}$$

$$(S_y)_{\sigma,\sigma-1} = -(S_y)_{\sigma-1,\sigma} = \frac{1}{2i}\sqrt{(S+\sigma)(S-\sigma+1)}$$

$$(S_z)_{\sigma,\sigma'} = \sigma\,\delta_{\sigma\sigma'}$$

в общем случае

- $S=0$ – ч-ца никаких спиновых св-в не проявляет

- $S=\frac{1}{2}$, $\sigma = \pm\frac{1}{2}$

$$S_z = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}, \qquad \begin{array}{c|c} & \sigma=S \ \dots \ -S \\ \hline \sigma=S & \\ \vdots & \\ \sigma=-S & \end{array}\begin{pmatrix}\sigma_{s,s} & & \\ & & \\ & & \sigma_{-s,-s}\end{pmatrix}$$

$$S_x = \begin{pmatrix}0 & \frac{1}{2}\\ \frac{1}{2} & 0\end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix},$$

$$S_y = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}, \text{ т. обр.}$$

$$\vec{S} = \frac{1}{2}\vec{\sigma}$$

- $S=1$

$$S_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{pmatrix},\quad S_y = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&-i&0\\i&0&-i\\0&i&0\end{pmatrix},\quad S_z = \begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix}$$

$(S_i)_{jk} = i\,\varepsilon_{j(i)k}$ – можно проверить, что это так

Конечные повороты.

$\vec{\varphi} = \varphi \cdot \vec{n}$, ($\vec{n}$ - напр. оси поворота, φ - угол)

тогда $U(\vec{\varphi}) = e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{J}\vec{\varphi}}$

$\vec{J} \to \hbar\vec{J}$, $U(\vec{\varphi}) = e^{-i\vec{J}\vec{\varphi}}$

Матрицы конечных вращений.

Исх. сост-ие $|\Psi\rangle = |JM\rangle$

Произведем поворот, тогда $|\Psi\rangle \to |\Psi'\rangle = U(\vec{\varphi})|\Psi\rangle$

J при повороте не изменяется, т.к. $[\vec{J}^2, U(\vec{\varphi})] = 0$, поэтому

$$|\Psi'\rangle = \sum_{M'=-J}^{J} a_{JM'} |JM'\rangle$$

$D^{(J)}_{M'M}(\vec{\varphi})$ - матрицы конечных вращений, они унитарны

$$D^{(J)}_{MM'}(\vec{\varphi}) = \langle JM' | e^{-i\vec{J}\vec{\varphi}} | JM\rangle$$

Лучше всего расписывать эти матрицы через параметризацию Эйлера (3 последоват. поворота: 1) $0 \le \alpha \le 2\pi$ вокруг исх. оси z; 2) $0 \le \beta \le \pi$ вокруг новой оси y'; 3) $0 \le \gamma \le 2\pi$ вокруг новой оси z''). Матрица D в параметризации Эйлера:

$D^{(J)}_{M'M} = D^{(J)}_{M'M}(\alpha, \beta, \gamma)$,

опер-р поворота - произв-ие 3х ~~послед.~~ опер.-в поворотов в опред. посл-ти:

$$e^{-i\vec{J}\vec{\varphi}} = e^{-iJ_z\gamma} \cdot e^{-iJ_y\beta} \cdot e^{-iJ_z\alpha}$$

Подставим в матр. эл-т ($e^{-iJ_z\gamma}$ и $e^{-iJ_z\alpha}$ будут множителями, т.к. $|JM\rangle$ - СВ опер-ра J_z).

$$D^{(J)}_{M'M}(\alpha,\beta,\gamma) = \langle JM' | e^{-i\vec{J}\vec{\varphi}} | JM\rangle =$$

$$= e^{-i\gamma M'} \underbrace{\langle JM' | e^{-iJ_y\beta} | JM\rangle}_{d^{(J)}_{M'M}(\beta)} e^{-i\alpha M}$$

$d^{(J)}_{M'M}(\beta)$ - эти матрицы унитарны, действительны (т.к. J_y - чисто мнимая) $\Rightarrow$

$\Rightarrow$ • $dd^T = 1$ (т.е. ортогон. матр. поворота)

• $d^T(\beta) = d(-\beta) = d^{-1}(\beta)$

Общий вид d:

$$d^J_{M'M}(\beta) = \left[\frac{(J+M')(J-M')}{(J+M)!\,(J-M)!}\right]^{1/2} \cdot (\cos\beta/2)^{M+M'} \times$$

$$\times (\sin\beta/2)^{M'-M} \cdot (-1)^{M'-M}\, P^{(M'-M,\, M'+M)}_{J-M'}(\cos\beta)$$

полиномы Якоби:

$$P^{(a,b)}_n = \frac{(-1)^n}{2^n\, n!}(1-x)^{-a}(1+x)^{-b}\frac{d^n}{dx^n}\left[(1-x)^{n+a}(1+x)^{n+b}\right]$$

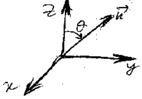
Пример.

Пусть $S = \frac{1}{2}$

// Преобр-ие Эйлера плохо в том смысле, что $\alpha'', \beta'', \gamma''$, соотв. 2м послед. поворотам α, β, γ и α', β', γ', очень сложно выражаются //

$$U(\vec{\varphi}) = e^{-i\vec{\varphi}\vec{S}} = e^{-\frac{i}{2}(\vec{n}\vec{\sigma})\varphi} = \cos\frac{\varphi}{2} - i\vec{n}\vec{\sigma}\sin\frac{\varphi}{2}$$

Решали задачу: найти СЗ, если изв. проекция. Пусть $\vec n$ лежит в плоск. zy, тогда повернем сис-му на угол θ и



$|\psi'\rangle = U(\theta)|\psi\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$

$|\psi\rangle = U^+(\theta)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = e^{i\frac{\theta}{2}\sigma_x}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}\\ i\sin\frac{\theta}{2}\end{pmatrix}$

$$U(\vec\varphi)|JM\rangle = \sum_{M'=-J}^{M'=J} D^{(J)}_{M'M}(\vec\varphi)\,|JM'\rangle$$

Сложение моментов.

Есть 2 подсистемы J_1 и J_2. Квадрат моментов сохраняются, меняется только напр-ие. Введем $\vec J = \vec J_1 + \vec J_2$. Какие значения принимает J?

Какой будет базис в совокупной системе?

Базис: $|J_1M_1\rangle \otimes |J_2M_2\rangle = |J_1J_2M_1M_2\rangle$

Всего значений: $N = (2J_1+1)(2J_2+1)$

Т.е. $\forall$ сост. - лин. комб. таких векторов для разных M_1 и M_2

Но иногда удобно вводить $\vec J = \vec J_1 + \vec J_2$

$\{\vec J^2, J_z\}$ и нов. хар-в. сост-ие числами J, M,

т.е. базис новый $|J_1J_2JM\rangle$

$J_z = J_{1z} + J_{2z} \Rightarrow M = M_1 + M_2$

$\vec J^2 = \vec J_1^2 + \vec J_2^2 + 2\vec J_1\vec J_2$ (т.к. J_1 коммутир. с J_2)

M_1	M_2	M
J_1	J_2	J_1+J_2

$J = J_1 + J_2$ - такое сост. должно быть

$-J \le M \le J$

J_1-1	J_2	J_1+J_2-1
J_1	J_2-1	
J_1-2	J_2	J_1+J_2-2
J_1-1	J_2-1	
J_1	J_2-2	

1 раз учитывается в $J = J_1+J_2$, $-J \le M \le J$

2 учит. в те знач. J кот. наим.,

3-ий

$J = J_1 + J_2$

$J = J_1 + J_2 - 1$

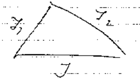
$J = J_1 + J_2 - 2$

$\vec J = \vec J_1 + \vec J_2$

$[J_i, J_k] = [J_{1i} + J_{2i}, J_{1k} + J_{2k}] = i\varepsilon_{ikl}J_{1l} + i\varepsilon_{ikl}J_{2l} = i\varepsilon_{ikl}(J_{1l} + J_{2l}) = i\varepsilon_{ikl}J_l$, т.е. суммар. момент есть снова угл. мом. по всем своим св-вам

$J_{min} = |J_1 - J_2|$

$J = J_1 + J_2, \dots, |J_1 - J_2|$



Пусть $J_1 > J_2$

$$N = \sum_{J=J_1-J_2}^{J=J_1+J_2}(2J+1) = 2\frac{J_1 - J_2 + J_1 + J_2 + 1}{2}(2J_2+1) = (2J_1+1)(2J_2+1),$$ как и должно быть

$M = J_1 + J_2 - 1 \Rightarrow$ 2 способа

M_1	M_2
$J_1 - 1$	J_2
J_1	$J_2 - 1$

Какой у них? Неизвестно.

Точно → лин. комбинация

$$|J_1J_2JM\rangle = \sum_{M_1M_2} \underbrace{\langle J_1J_2M_1M_2|J_1J_2JM\rangle}_{\text{коэф-ты векторного сложения}} |J_1J_2M_1M_2\rangle$$

2 базиса должны быть связаны унит. преоб-м, кот. и определяет коэф-ты лин. комб.

$$|J_1J_2M_1M_2\rangle = \sum_{J=|J_1-J_2|}^{J_1+J_2} \langle J_1J_2JM|J_1J_2M_1M_2\rangle |J_1J_2JM\rangle \qquad M = M_1 + M_2, \text{ т.е. фикс.}$$

У этих коэф-тов есть физ. смысл - это амплитуды вер-ти (если система нах. в сост. $|J_1J_2M_1M_2\rangle$ с какой вер. мы обнаружим ее в сост. $|J_1J_2JM\rangle$

16.05.07 Лекция 20.

Мы рассмотрели все это в представлении Шр., а можно и в представлении Гейзенберга.

$$F \to F' = U^+FU$$

Мы можем провести классификацию величин по отн. к поворотам.

Неприводимые тензоры.

1) Скаляр $\quad F' = U^+FU = F \quad \forall$ любых поворотов

$$U(\delta\vec\varphi) = 1 - i\vec J\delta\vec\varphi$$

Для того, чтобы величина была скаляром, она должна коммут. со всеми тремя опер-ми поворота, явл-ся генераторами группы вращения:

$$[\vec J, F] = 0, \quad \vec J - \forall \text{ момент } (l, s, l+s)$$

Св-ва скаляра.

- Матрич. эл-т $\langle JM|F|J'M'\rangle = \delta_{JJ'}\delta_{MM'}\langle J|F|J\rangle$

Проверим. $[\vec J, F] = 0 = [\vec J^2, F] = 0$

$$0 = \langle JM|[\vec J^2, F]|J'M'\rangle = \langle JM|\vec J^2F - F\vec J^2|J'M'\rangle =$$

$$= \big(J(J+1) - J'(J'+1)\big)\langle JM|F|J'M'\rangle$$

Если $J \neq J'$, то $\langle JM|F|J'M'\rangle = 0$, и

$\langle JM|F|J'M'\rangle$ отличен от нуля только если $J = J'$

- Аналогично $[J_z, F] = 0$

$$0 = \langle JM+1|\underbrace{[F, J_+]}_{0,\ \text{т.к. } J_+ = J_x + iJ_y}|JM\rangle = \langle JM+1|FJ_+ - J_+F|JM\rangle =$$

$$J_+|JM\rangle = \sqrt{(J-M)(J+M+1)}\,|JM+1\rangle$$

$$= \langle JM+1|F|JM+1\rangle\sqrt{(J-M)(J+M+1)} -$$

$$- \langle JM+1|J_+F|JM\rangle =$$

действ. на бра-вектор ⇒ переходит в J_-

$$= \sqrt{(J-M)(J+M+1)}\,\langle JM|F|JM\rangle$$

$$= \sqrt{\ }\,\big(\langle\ \rangle - \langle\ \rangle\big) = 0 \to$$

$$\Rightarrow \langle JM+1|F|JM+1\rangle = \langle JM|F|JM\rangle \Rightarrow$$

$\Rightarrow$ от M матр. эл-т не зависит $\Rightarrow$

$\Rightarrow \langle JM|F|J'M'\rangle = \delta_{JJ'}\delta_{MM'}\langle J\|F\|J\rangle$

2) Вектор

$$\vec{A} = \{A_1, A_2, A_3\}$$

Величина явл. вектором, если:

$$\underline{[J_i, A_j] = i\varepsilon_{ijk}A_k}$$

Рассм. повороты вокруг z: $U(\varphi) = e^{-i\varphi J_z}$.

Какой вид имеет $A_i'(\varphi) = U^+(\varphi)A_iU(\varphi)$

$[J_z, A_z] = 0 \Rightarrow A_z' = A_z$ при пов. вокруг z

$$\frac{d}{d\varphi}A_x'(\varphi) = e^{iJ_z\varphi}\, i\underbrace{[J_z, A_x]}_{i\varepsilon_{zxy}A_y,\ \varepsilon_{zxy}=1} e^{-iJ_z\varphi} \stackrel{*}{=}$$

$$\stackrel{*}{=} -U^+(\varphi)A_yU(\varphi) = -A_y'(\varphi)$$

$$\frac{d}{d\varphi}A_y'(\varphi) = U^+(\varphi)\, i\underbrace{[J_z, A_y]}_{i\varepsilon_{zyx}A_x = -iA_x}U = A_x'(\varphi)$$

$$\begin{cases} \frac{d}{d\varphi}A_x'(\varphi) = -A_y'(\varphi) \\ \frac{d}{d\varphi}A_y'(\varphi) = A_x'(\varphi) \end{cases}$$

$$\frac{d^2}{d\varphi^2}A_{x,y}' + A_{x,y}' = 0$$

$$A_x'(\varphi) = A_x\cos\varphi - A_y\sin\varphi$$

$A_y'(\varphi) = A_x\sin\varphi + A_y\cos\varphi$ — закон преоб-ия комп-т вектора при повороте вокруг z.

У вектора свои законы для матричного элемента - правила отбора.

Вычислим $[\vec{J}^2, [\vec{J}^2, A_i]]$:

$$[\vec{J}^2, [\vec{J}^2, A_i]] = 2(\vec{J}^2A_i + A_i\vec{J}^2) - 4J_i(\vec{J}\vec{A})$$

! $\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{imn} = \delta_{jm}\delta_{kn} - \delta_{jn}\delta_{km}$

Свертка по i

$$\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{ijl} = 2\delta_{kl}$$

$$\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{ijk} = 3! = 6$$

- $\vec{A}\vec{B} = F$ - скаляр
- $\vec{J}\vec{A} = \vec{A}\vec{J}$ (т.к. комп-ты J_i и A_i коммутируют)
- Матричные элементы

$$0 = \langle JM|\underbrace{[\vec{J}^2, [\vec{J}^2, A_i]]}_{\vec{J}^2(J^2A_i - A_iJ^2) - (J^2A_i - A_iJ^2)J^2}|JM'\rangle =$$

$$= \langle JM|2(J^2A_i + A_iJ^2)|JM'\rangle - 4\langle JM|J_i(\vec{J}\vec{A})|JM'\rangle \Rightarrow$$

$$\Rightarrow 4J(J+1)\langle JM|A_i|JM'\rangle = 4\langle JM|J_i(\vec{J}\vec{A})|JM'\rangle$$

$$1 = \sum_{J''M''}|J''M''\rangle\langle J''M''|$$

$$\langle JM|J_i(\vec{J}\vec{A})|JM'\rangle = \sum_{J''M''}\langle JM|J_i|J''M''\rangle\,\delta_{JJ''}\delta_{M'M''}\langle J\|\vec{J}\vec{A}\|J\rangle =$$

$= \langle JM|J_i|JM'\rangle \cdot \langle J|\vec J \vec A|J\rangle$

Теорема Вигнера – Эккарта:

$$\langle JM|A_i|JM'\rangle = \langle JM|J_i|JM'\rangle \cdot \frac{\langle J|\vec A\vec J|J\rangle}{J(J+1)}$$

$$\vec A \longrightarrow \underbrace{\vec J\, \frac{\vec J\vec A}{\vec J^2}}$$

геом. проекция вектора $\vec A$ на напр. $\vec J$ (только в смысле матрич. эл-тов)

$$\langle JM|[\vec J^2,[\vec J^2,A_i]]|J'M'\rangle =$$

$$= \langle JM|2(\vec J^2 A_i + A_i \vec J^2)|J'M'\rangle$$

$\langle JM|J_i(\vec J\vec A)|J'M'\rangle = 0$ при $J\neq J'$

это коммутир. с $\vec J^2 \Rightarrow$ диаг. по J

Окончательный результат:

$$\underbrace{[(J'-J)^2-1]}_{\text{равна 0 если } J \text{ и } J' \text{ отличаются на } \pm1}\underbrace{[(J'+J+1)^2-1]}_{\text{никогда не равна 0}}\langle JM|A_i|J'M'\rangle = 0$$

$\Downarrow$ Правило отбора:

$\langle JM|A_i|J'M'\rangle \neq 0$ только при $\Delta J = \pm 1$

Правило отбора для M → Ландау-Лифшиц

Четность.

Четность – операция отражения осей $\vec r\to -\vec r$

$$(P\Psi)(\vec r) = \Psi(-\vec r)$$

$P = P^+$ (эрмитов), $P^2=1$

$P\Psi = \lambda\Psi$

$\lambda = \pm1 \Rightarrow$ состояния классифицируются на четные и нечетные.

Четность орбитального состояния

$|lm\rangle$ $\quad \vec l^2$ l_z

$$P|lm\rangle = (-1)^l|lm\rangle$$

Проверка.

$$|lm\rangle \longrightarrow Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

$$\downarrow$$

$$P_l^m(\cos\theta)\cdot e^{im\varphi}$$

Отражение $\vec r\to-\vec r$ означает $\theta\to\pi-\theta$, $\varphi\to\varphi+\pi$.

Тогда $e^{im\varphi}\to e^{im(\varphi+\pi)} = (-1)^m e^{im\varphi}$

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

при $\theta\to\pi-\theta$ $\quad \sin\theta\to\sin\theta$, $\cos\theta\to-\cos\theta$

$$P_l^m(\cos\theta)\to(-1)^{l-m}P_l^m(\cos\theta).$$

Т. обр., $Y_{lm}(\theta,\varphi)\to(-1)^l Y_{lm}(\theta,\varphi)$ ч.т.д.

Если сис-ма состоит из неск. подсистем, каждая из кот. обл. своим орб. моментом, то

$$PΨ = (-1)^{l_1+l_2+\dots l_n} Ψ$$

$$Ψ = Ψ_1 \dots Ψ_n$$

∃ внутренняя четность. Напр., у фотона (−1).

Для таких объектов имеются свои правила отбора по четности

$$\mathcal{F} \to \mathcal{F}' = P^+ \mathcal{F} P$$

∃ истинные и псевдоскаляры;
∃ истинные скаляры переходят в себя, псевдоскаляры меняют знак:

$\mathcal{F}' = \mathcal{F}$ — скаляр, напр. $\vec{r}^2, \vec{p}^2, (\vec{r}\vec{p})+(\vec{p}\vec{r})$;

$\mathcal{F}' = -\mathcal{F}$ — псевдоскаляр, напр. $(\vec{r}\vec{l}), (\vec{p}\vec{l})$.

Вектора. $\vec{A} \Rightarrow \vec{A}' = P^+ \vec{A} P$

истинные вектора: $\vec{A}' = -\vec{A}$, напр. $\vec{r}, \vec{p}$;

псевдовектора: $\vec{A}' = \vec{A}$, напр. $\vec{l}$ (орбит. момент), $\vec{S}, \vec{J}$

Какова физ. система по четности — вопрос эксперимента (напр., оказалось, что гам-н не сохр. чет. в слабом вз-ии). Можно ув., что в рамках нерел. физики четность сохраняется (т.к. э-м. вз-ие сохраняет четность)

Правила отбора по четности.

Пусть есть сост. 1 с четностью $λ_1$ и сост. 2 с $λ_2$:

$$PΨ_{1,2} = λ_{1,2} Ψ_{1,2}$$

$$\langle Ψ_1 | \mathcal{F} | Ψ_2 \rangle = \langle Ψ_1 | P \underbrace{P^+ \mathcal{F} P}_{\mathcal{F}' = η\mathcal{F}} P^+ | Ψ_2 \rangle =$$

$$= \underbrace{λ_1 λ_2}\, η \langle Ψ_1 | \mathcal{F} | Ψ_2 \rangle$$

Если велич. обл. положит. четностью, т.е. $η = 1$, то если $λ_1 \cdot λ_2 = -1$, то (скаляр или псевдовектор)

$$\langle Ψ_1 | \mathcal{F} | Ψ_2 \rangle = -\langle Ψ_1 | \mathcal{F} | Ψ_2 \rangle = 0$$

Если $η = -1$, то чтобы $\langle Ψ_1 | \mathcal{F} | Ψ_2 \rangle$ был отличен от 0, необх., чтобы $λ_1$ и $λ_2$ были разные

22.05.07 Лекция 21.

Уравнение Дирака.

До этого занимались нерел. кв. мех. Осн. ур-ие — ур-ие Шр.: $H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r})$.

При переходе к кв. мех:

$$E \to i\hbar \frac{\partial}{\partial t},$$

$$\vec{p} \to \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}.$$

Восп.-ся соотн. Эйнштейна:

$$E^2 = \vec{p}^2 c^2 + m^2 c^4$$

$$E = \sqrt{\vec{p}^2 c^2 + m^2 c^4}$$

$$\downarrow$$

$$i\hbar \frac{\partial Ψ}{\partial t} = \sqrt{-\hbar^2 c^2 Δ + m^2 c^4}\; Ψ(\vec{r}, t) \text{ — релят. ур-ие,}$$

но оно плохое т.к. корень из опер-ра — это оператор, кот. нужно еще доопределить. чтобы это сделать нужно разложить корень в степенной ряд:

$$\sqrt{} = mc^2 - \frac{\hbar^2}{2m}c^2\Delta - \frac{\hbar^4}{8m^2c^3}\Delta^2 + \dots$$

Неизв. сх-ся этот ряд или нет; он содержит все производные ψ до любой степени, т.е. получаем нелокальное разложение ф-ции ψ, т.е. в пр. и левой частях будут ф-ции в разных простр.-временных точках (нарушается локальность)

Поэтому это ур-ие не будем использовать.

Будем исп-ть квадрат исх. ур-ия:

$$-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial t^2}\psi = \left(-c^2\hbar^2\Delta + m^2c^4\right)\psi$$

Введем $\lambda_c = \frac{\hbar}{mc}$ (компт. дл. волны)

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial (ct)^2} - \Delta\right)\psi + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\psi = 0$$

Перейдем к 4х векторам $x^\mu = (ct, \vec r)$:

$$g^{\mu\nu} = g_{\mu\nu} = diag(1, -1, -1, -1)$$

$$x_\mu = g_{\mu\nu}x^\nu = (ct, \vec r)$$

$$\left[\Box + \left(\frac{1}{\lambda_c^2}\right)\right]\psi(x^\mu) = 0 \quad (*)$$ ур-ие Клейна-Гордона-Фока

$\Box = \partial_\mu\partial^\mu$ — деламбертиан

138 Но это ур-ие также не очень хорошее, т.к.

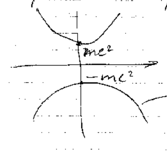
если будем искать реш. в виде плоской волны:

$$\psi = e^{\frac{i}{\hbar}p^\mu x_\mu},$$

получим

$$-\frac{1}{\hbar^2}p^\mu p_\mu + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2 = 0$$

$p^0 = E = \pm\sqrt{p^2c^2 + m^2c^4}$ — возникнут 2 реш. с 2мя знач-ми энергии положит. и отриц.



что это такое, мы не знаем ⇒ это ур-ие мы пока рассм. не будем

(Вообще отриц. знач. эн. → античастицы)

В нерел. кв. мех. следствием ур. Шр.

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V\right)\psi$$

являлось ур-ие непрерывности

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + div\,\vec j = 0$$

$$\rho = |\psi|^2 \qquad \vec j = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*\right).$$

Содержит ли ур-ие Кл.-Г.-Ф. что-нибудь подобное? Оказывается, нет.

139

Умножим ур-ие (*) на Ψ^*, а потом сопрям. ур-ие умножим на Ψ и вычтем друг из друга

$$\Psi^*[\quad]\Psi - \Psi[\quad]\Psi^* = 0$$

$$\Psi^*\Box\Psi - \Psi\Box\Psi^* = 0$$

$$\partial_\mu(\Psi^*\partial^\mu\Psi - \Psi\partial^\mu\Psi^*) = 0$$

Отделяя врем. часть от простр., получим:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[\frac{i\hbar}{2mc^2}\underbrace{\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t} - \Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\right)}\right] + \operatorname{div}\vec{j} = 0$$

то же, что в нерел. случае

Но! величина [ ] действ., но не явл. положит. определенной, она может быть любой, т.е. это не вероятность.

Т. обр., придать ур-ию **Кл-Г-Ф** кв.-мех. интерпретацию и работать с Ψ как с волн.-ф. мы не можем.

Выход был найден Дираком в 1928 году. Он предложил нек-то другое ур-ие, кот. оказалось совместимо с кв. мех.

Рассужд. Дирака: раз ур-ие второго пор-ка не подходит, нужно нек. ур-ие 1-го (причем и по вр., и по коорд., т.к.

они равноправны):

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \left[c(\vec{\alpha}\vec{p}) + \beta mc^2\right]\Psi$$ — для своб. m и приводит к соотн-ию Эйнш.

$$H = c(\vec{\alpha}\vec{p}) + \beta mc^2$$

Нужно потребовать, чтобы H интерпретировался как энергия, но это не так просто. α, β — не просто числа, это объекты другой структуры.

$$E^2 = H^2 = \vec{p}^2c^2 + m^2c^4 = m^2c^4\beta^2 + mc^3(\alpha_i\beta + \beta\alpha_i)p_i + c^2\cdot\frac{1}{2}\cdot(\alpha_i\alpha_j + \alpha_j\alpha_i)p_ip_j$$

$$\begin{cases} \beta^2 = 1 \\ \alpha_i\beta + \beta\alpha_i = 0 \quad (\text{т.е. } \alpha \text{ и } \beta \text{ — не числа}) \\ \alpha_i\alpha_j + \alpha_j\alpha_i = 2\delta_{ij} \end{cases}$$

Тогда из ур-ия Дирака ⇒ соотн-ие Эйнштейна

$$\alpha_i\beta = -\beta\alpha_i \quad |\times\beta$$

$$\beta\alpha_i\beta = -\alpha_i$$

Для матриц вып-ся: $abc = (ab)c = a(bc)$ (ассоц. закон)

$\mathrm{Tr}\,\alpha_i = -\mathrm{Tr}(\beta\alpha_i\beta)$, но в Tr матр. можно передвигать по циклу;

$$\Rightarrow \mathrm{Tr}\,\alpha_i = -\mathrm{Tr}\,\alpha_i = 0$$

$$\rightarrow \alpha_i^2 = 1,$$

$$\mathrm{Tr}\,\beta = 0$$

Мы также должны потребовать чтобы гам-н был эрмитовым ⇒ α и β — тоже эрмитовы матрицы

$\Rightarrow \alpha_i = \alpha_i^+ \qquad \beta_i = \beta_i^+$

т.к. $\alpha_i^2 = 1$ $\beta^2 = 1$, то $C_3 = \pm 1$, но т.к. $\mathrm{Tr} = 0$, то число $+1$ и -1 одинаково, т.е. разм-ть матриц - четная, миним. - 2.

$$A = 1 + \vec a \vec\sigma_{\text{матр. Паули}}$$

Сигма-Матрицы ~~Паули~~ подходят, но их только 3, а нам нужно 4 $\Rightarrow$ возьмем размерность $N=4$. Тогда $\exists$ матрицы и

$$\alpha_i \to O\alpha_i O^+, \qquad OO^+ = 1$$
$$\beta \to O\beta O^+,$$

$$\vec\alpha = \begin{pmatrix} 0 & \vec\sigma \\ \vec\sigma & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

разм-ть 2×2

разм-ть 2×2

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1(\vec r, t) \\ \vdots \\ \psi_4(\vec r, t) \end{pmatrix} \text{ — би-спинор}$$

Но нам еще нужно ур-ие непр-ти.

$$\text{УД:} \to i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t} = \left(c(\vec\alpha\vec p) + \beta mc^2\right)\psi \quad \Big| \times\psi^+ = (\psi_1^* \dots \psi_4^*)$$

$$\psi^+ i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \psi^+\left(c\vec\alpha\frac{\hbar}{i}\vec\nabla + \beta mc^2\right)\psi \qquad (1)$$

Сопряж. к УД: $\quad -i\hbar\frac{\partial\psi^+}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar}{i}\vec\nabla\psi^+\vec\alpha c + mc^2\psi^+\beta\right) \Big|\cdot\psi$

$$-i\hbar\frac{\partial\psi^+}{\partial t}\psi = (\quad\dots\quad)\psi \qquad (2)$$

$(1) - (2)$:

$$i\hbar\left(\psi^+\frac{\partial\psi}{\partial t} + \frac{\partial\psi^+}{\partial t}\psi\right) =$$

$$= c\frac{\hbar}{i}\left(\psi^+\cdot\vec\alpha\vec\nabla\psi + \vec\nabla\psi^+\cdot\vec\alpha\psi\right)$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\psi^+\psi) = -i\hbar\vec\nabla(\psi^+ c\vec\alpha\psi)$$

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \operatorname{div}\vec j = 0,$$

$$\rho = \psi^+\psi = \sum_{i=1}^4 |\psi_i|^2 \geq 0$$

$$\vec j = \psi^+ c\vec\alpha\psi$$

$$H = c(\vec\alpha\vec p) + \beta mc^2$$

$$\dot{\vec r} = \frac{d\vec r}{dt} = \vec V = \frac{i}{\hbar}[H, \vec r] = c\vec\alpha,$$

а в нерел. случае

$$\vec j = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\vec\nabla\psi - \psi\vec\nabla\psi^*\right) =$$

$$= \frac{1}{2}\Big(\psi^*\frac{1}{m}\underbrace{\left(\frac{\hbar}{i}\vec\nabla\psi\right)}_{\vec p} - \dots\Big) = \frac{1}{2}(\psi^*\vec V\psi - \dots),$$

$$\frac{\vec p}{m} = \vec v$$

т.е. наши выраж. похожи на аналогич. в нерел. кв. мех., что хорошо.

Но нам нужно записать все это в релятивистских ковар. соотношениях (оказывается, что это возможно)

$\vec{\gamma} = \beta\vec{\alpha} \qquad \gamma^0 = \beta$

$\gamma^\mu = (\gamma^0, \vec{\gamma})$

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left((\vec{\alpha}\vec{p}) + \beta mc \right)\psi$$

$$i\hbar\beta\frac{\partial\psi}{\partial t} = (\beta(\vec{\alpha}\vec{p}) + mc)\psi$$

$(\gamma^\mu p_\mu - mc)\psi = 0$ – ковариант. вид

$p_\mu = i\hbar\frac{\partial}{\partial x^\mu}$

$\gamma^\mu p_\mu$ - лоренцев скаляр, кот. выглядит одинаково во всех сис-мах коорд.

// Подробнее - см. Дж. Бьеркен, С. Дрелл „Релятивистская квантовая теория" Т.1 - Релятивистская квантовая механика. //

Ур-ию непр-ти тоже можно придать ковар. форму:

$$\partial_\mu j^\mu = 0,$$

где $j^\mu = \psi^+\gamma^0\gamma^\mu\psi$

Т.обр. ур-ие Д. можно интерпретировать квантовомех-ки, причем оно ковариантно. 2 вопроса: 1) почему в.ф. 4-х мерна
2) как мин. по нин. ур-ие рассм-ть с точки зр. инв-ти отн. вращения

Вернемся к форме $H = c(\vec{\alpha}\vec{p}) + \beta mc^2$.

Пусть мы совершаем поворот на угол $\vec{\varphi}$.

Тогда $\vec{p} \to \vec{p}' = U^+(\vec{\varphi})\,\vec{p}\,U(\vec{\varphi})$,

$$U(\vec{\varphi}) = e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{J}\vec{\varphi}}$$

Если в кач-ве $\vec{J}$ возьмем $\vec{l}$, то

$\vec{p} \longrightarrow \vec{p}' = R(\vec{\varphi})\vec{p}$
матрица поворота

$$[l_i, p_j] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk}p_k$$

Но α - матрицу никак поворачиваться не будет ⇒ гам-н не будет инвариантен отн. поворотов. Значит $\vec{J} \neq \vec{l}$, а имеет более сложную структуру - он должен поворачивать и $\vec{p}$, и α - матрицу:

$$\vec{J} = \vec{l} + \vec{s}$$

$$[l_i, s_j] = 0$$

$$\vec{s} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}\vec{\sigma} & 0\\ 0 & \vec{\sigma}\end{pmatrix}$$

$$[s_i, \alpha_j] = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}\sigma_i & 0\\ 0 & \sigma_i\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & \sigma_j\\ \sigma_j & 0\end{pmatrix} - \ldots =$$

$$= \frac{1}{2}\begin{pmatrix}0 & \sigma_i\sigma_j - \sigma_j\sigma_i\\ \sigma_i\sigma_j - \sigma_j\sigma_i & 0\end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}0 & 2\varepsilon_{ijk}\sigma_k\\ 2\varepsilon_{ijk}\sigma_k & 0\end{pmatrix} =$$

$= i\varepsilon_{ijk}\alpha_k$

Т.е. если в $\vec{J}$ добавим такой спиновый опер-р, то он поворачивает α-матрицы так же, как $\vec{p}$

$$[J_i, \alpha_j] = i\varepsilon_{ijk}\alpha_k.$$

Значит, у ч-цы описыв. ур-ем Дирака, обязательно должен быть спин:

$\vec{S}^2 = s(s+1) \qquad s = \frac{1}{2}$

То, почему в.ф. - ~~4х мерная~~ 4х мер., следует из решения.

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \left(c(\vec{\alpha}\vec{p}) + \beta mc^2\right)\Psi$$

$\Psi = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\,\Phi(\vec{r})$ - в ур-ние:

$$E\Phi = \left[c\begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma}\vec{p} \\ \vec{\sigma}\vec{p} & 0\end{pmatrix} + \begin{pmatrix} mc^2 & 0 \\ 0 & -mc^2\end{pmatrix}\right]\Phi$$

$\Phi = \begin{pmatrix}\varphi \\ \chi\end{pmatrix} \qquad \varphi, \chi$ - 2х компонент столбцы

$$E\varphi = c\vec{\sigma}\vec{p}\chi + mc^2\varphi$$
$$E\chi = c\vec{\sigma}\vec{p}\varphi + -mc^2\chi$$

или

$$\begin{cases}(mc^2 - E)\varphi + c\vec{\sigma}\vec{p}\chi = 0 \\ c\vec{\sigma}\vec{p}\,\varphi - (mc^2 + E)\chi = 0\end{cases}$$

Условие самосогласов-ти сис-мы:

$\det(\quad) = 0$

$$-(mc^2 - E)(mc^2 + E) - c^2(\vec{\sigma}\vec{p})^2 = 0$$

$E^2 = m^2c^4 + c^2\vec{p}^2$ - т.е. соотн-ие Эйнш.

По-прежнему будет 2 реш. : $E>0$, $E<0$.

1) $E > mc^2$

$\chi = \frac{c\vec{\sigma}\vec{p}}{mc^2 + E}\varphi$, φ - произв. 2х компон. столбец-спинор

При этом $\chi \simeq \frac{c\vec{\sigma}\vec{p}}{2mc^2}\varphi = \frac{\vec{\sigma}\vec{p}}{2mc}\varphi \ll \varphi$

$\varphi = \vec{a}$ - произв. пост. спинор

$$\Phi = \begin{pmatrix}\vec{a} \\ \frac{c\vec{\sigma}\vec{p}}{mc^2+E}\vec{a}\end{pmatrix}$$

Пусть мы находимся в сис-ме $\vec{p} = 0$

Тогда $\Phi_\uparrow = \begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\end{pmatrix}$ или $\Phi_\downarrow = \begin{pmatrix}0\\1\\0\\0\end{pmatrix}$

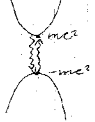
Эти два вект. явл. СЗ опер-ра S_z:

$$S_z\Phi_{\uparrow\downarrow} = \left(\pm\frac{1}{2}\right)\Phi_{\uparrow\downarrow}$$

2) $E < -mc^2$

Тогда верхние возрастают через нижние (φ через χ):

$$\varphi = -\frac{c\vec\sigma\vec p}{mc^2+|E|}\chi \approx \frac{\vec\sigma\vec p}{2mc}\chi \ll \chi$$



В перв. случае „перепрыгнуть" с ним. поля гиперболоида на верхнюю нельзя.

В пн случае возможен переход с ним. поля на верх. и наоборот (при опред. пот-ле).

Каким частицам соотв-т наше ур-ние Дирака?

Для этого расм. задачу.

Предположим, что у частицы есть заряд и посмотрим, как она себя будет вести во внеш. эл. полем.

$$(\gamma^\mu p_\mu - mc)\Psi = 0$$

$$A_\mu = (\overset{A_0}{\Phi}, \vec A)$$

$$p_\mu \to p_\mu - \frac{e}{c}A_\mu$$

Перейдем в физ. сис. коорд. и запишем для ч-цы с опред. энергией

$$\Psi = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\Phi(\vec r) = \begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix}$$

Вводим вектор. потенциал в наше ур-ие. Тогда

$$(E - e\Phi - mc^2)\varphi = c\vec\sigma(\vec p - \tfrac{e}{c}\vec A)\chi$$

$$(E - e\Phi + mc^2)\chi = c\vec\sigma(\vec p - \tfrac{e}{c}\vec A)\varphi$$

$E = mc^2 + \mathcal{E}$, $\mathcal{E} \ll mc^2$

$$\mathcal{E}\varphi = c\vec\sigma(\vec p - \tfrac{e}{c}\vec A)\chi + e\Phi\varphi$$

$E - e\Phi + mc^2 \to 2mc^2$ (т.к. $\mathcal{E} \ll mc^2$), тогда

$\chi \simeq \dfrac{\vec\sigma(\vec p - \frac{e}{c}\vec A)}{2mc}\varphi$ — в ур-ие для φ:

$$\mathcal{E}\varphi = \frac{1}{2m}\left(\vec\sigma(\vec p - \tfrac{e}{c}\vec A)\right)\left(\vec\sigma(\vec p - \tfrac{e}{c}\vec A)\right)\varphi + e\Phi\varphi$$

$(\vec\sigma\vec a)(\vec\sigma\vec b) = \vec a\vec b + i\vec\sigma[\vec a\times\vec b]$, тогда

$$(\vec\sigma(\ \ ))(\vec\sigma(\ \ )) =$$

$$= \underbrace{(\vec p - \tfrac{e}{c}\vec A)^2}_{\text{кин. перемещ. эл.-г-цы, движ. в пот. } \vec A} + i\varepsilon_{ijk}\sigma_k(p_i - \tfrac{e}{c}A_i)(p_j - \tfrac{e}{c}A_j)$$

$$= i\varepsilon_{ijk}\sigma_k(\underbrace{p_ip_j}_{0} - \tfrac{e}{c}A_ip_j - \tfrac{e}{c}p_iA_j + \underbrace{\tfrac{e^2}{c^2}A_iA_j}_{=0}) =$$

0, т.к. p – симм. тензор, а ε_{ijk} – антисимм.

аналогично

$p_i = \frac{\hbar}{i}\nabla_i$

$$= i\varepsilon_{ijk}\sigma_k\left(-\tfrac{e}{c}A_ip_j - \tfrac{e}{c}\tfrac{\hbar}{i}\partial_iA_j - \tfrac{e}{c}A_jp_i\right)$$

1е и 3е – симм. отн. перестановки $i \leftrightarrow j$ $\Rightarrow$ $=0$ при свертке с ε_{ijk}. Т. обр., остается

$$i\varepsilon_{ijk}\left(-\frac{e}{c}\cdot\frac{\hbar}{i}\partial_i A_j\right)\sigma_k = -\frac{e}{c}\cdot\hbar\boxed{\varepsilon_{ijk}\,\partial_i A_j\,\sigma_k} =$$

$$= -\frac{e}{c}\cdot\hbar\,\vec{\sigma}\cdot\mathrm{rot}\,\vec{A}$$

Т. обр., ур-ие Паули:

$$\mathcal{E}\varphi = \left[\frac{1}{2m}\left(\vec{p}-\frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 - \frac{e}{2mc}\hbar\,\vec{\sigma}\underbrace{\vec{H}}_{\text{напр. ть магн. поля}} + e\Phi\right]\varphi$$

$\hbar\vec{\sigma} = 2\vec{S}$, тогда

$$\mathcal{E}\varphi = \left[\frac{1}{2m}\left(\vec{p}-\frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 - \frac{e}{mc}\vec{S}\vec{H} + e\Phi\right]\varphi$$

введем магнетон Бора $\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc}$

$\mu_s = 2\mu_B$, тогда

$$\mathcal{E}\varphi = \left[\frac{1}{2m}\left(\vec{p}-\frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 - \mu_s\vec{S}\vec{H} + e\Phi\right]\varphi$$

спиновой магн. момент $\leftarrow$ $\vec{\mu}_s = \mu_s\vec{S}$

$$E - e\Phi + mc^2 \to 2mc^2$$

Релятивист. поправки к ур. Паули