

Оглавление

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1 | Дираковская формулировка квантовой механики | 6 |
| 1.1 | Введение | 6 |
| 1.2 | Дираковская формулировка квантовой механики | 8 |
| 1.3 | Временная эволюция состояний. | 15 |
| 1.4 | Гамильтоновы системы. Квантование. | 20 |
| 1.5 | Представления Шредингера и Гайзенберга | 26 |
| 1.6 | Представление взаимодействия | 30 |
| 1.7 | Представления основных операторов | 32 |
| 1.8 | Матрица перехода, волновая функция свободной частицы. | 37 |
| 1.9 | Уравнение Шредингера в произвольном представлении | 46 |
| 2 | Гармонический осциллятор | 49 |
| 2.1 | Гамильтониан | 49 |
| 2.2 | Операторы a и a^+ | 50 |
| 2.3 | Спектр и состояния осциллятора. Энергетическое представление | 52 |
| 2.4 | Волновые функции | 55 |
| 2.5 | Когерентные состояния осциллятора | 58 |

| | | |
|----------|--|------------|
| 3 | Матрица плотности | 62 |
| 3.1 | Определение матрицы плотности | 62 |
| 3.2 | Свойства матрицы плотности | 69 |
| 3.3 | Эволюция во времени. Уравнение Лиувилля | 71 |
| 3.4 | Равновесная матрица плотности | 73 |
| 4.5 | Уравнение для матрицы плотности в координатном представлении | 77 |
| 4 | Представления матрицы плотности | 79 |
| 4.1 | Функция Вигнера | 79 |
| 4.2 | Некоторые свойства преобразования Фурье. Уравнение Мойала для функции Вигнера . . | 83 |
| 4.3 | Томографическое распределение | 88 |
| 4.4 | Уравнение эволюции для томографического распределения | 95 |
| 5 | Представление вероятностей для дискретного спектра на примере момента количества движения | 99 |
| 5.1 | Оператор момента импульса, собственные состояния | 99 |
| 5.2 | Углы Эйлера и матрица поворота | 105 |
| 5.3 | Сложение моментов. Коэффициенты Клебша-Гордана | 108 |
| 5.4 | Матрица поворота для $j = 1/2$ и 1 | 116 |
| 5.5 | Угловой момент и система двух осцилляторов | 120 |
| 5.6 | Представление матрицы плотности для системы с моментом j | 122 |
| 5.7 | Инвариантная формулировка томографии состояний момента | 126 |
| 6 | Перепутанные состояния (entanglement) | 128 |
| 6.1 | Сепарабельные и перепутанные состояния . . | 128 |
| 6.2 | Критерий сепарабельности | 131 |

| | | |
|----------|--|------------|
| 6.3 | Состояние Вернера | 132 |
| 7 | Системы многих частиц | 135 |
| 7.1 | Система связанных гармонических осцилляторов | 135 |
| 7.2 | Системы тождественных частиц | 139 |
| 7.3 | Операторы рождения и уничтожения. | 143 |
| 7.4 | Представление чисел заполнения | 147 |
| 7.5 | Представление основных операторов | 152 |
| 7.6 | Матрица плотности в представлении чисел заполнения | 155 |
| 7.7 | Большой канонический ансамбль | 158 |
| 7.8 | Понятие о парастатистике | 163 |

Глава 1

Дираковская формулировка квантовой механики

1.1 Введение

Один из основных постулатов квантовой механики – принцип суперпозиции. Вспомним его суть: пусть задан какой-либо базис. Этот базис можно связать с собственными функциями соответствующего оператора физической величины. Тогда разложение функции состояния (волновой функции) системы по данным базисным функциям будет определять состояние в "системе координат", которая определена данной физической величиной. В таком случае состояние полностью определяется коэффициентами разложения Фурье. Соответственно, вместо функции состояния достаточно рассмотреть только коэффициенты разложения, которые представляют его в данном базисе. Иными словами, выбирая базис, мы выбираем представление, в котором описываем любое состояние квантовой системы. Выбор базиса неод-

нозначен, причем не только с формальной стороны, но и постольку поскольку физических величин много и им соответствуют, вообще говоря, различные базисные функции. В соответствии с этим и выбор представления данного состояния неоднозначен.

Перейдем к операторам. Задавая базис представления (состояния), мы полностью определим действие оператора на произвольное состояние, если известна матрица оператора в данном базисе или, что то же, в данном представлении. Действительно, пусть ψ_n – базисные функции представления, тогда оператор \hat{f} , действуя на них, вообще говоря, изменяет их:

$$\hat{f}\psi_n = \varphi = \sum_m f_{mn}\psi_m, \quad (1.1)$$

где

$$f_{mn} = \int \psi_m^* \varphi \, d\mathbf{r} = \int \psi_m^* \hat{f}\psi_n \, d\mathbf{r}. \quad (1.2)$$

Подействуем на произвольное состояние

$$\Psi = \sum_n a_n \psi_n \quad (1.3)$$

оператором \hat{f} :

$$\hat{f}\Psi = \Phi = \sum_n a_n \hat{f}\psi_n = \sum_{n,m} f_{mn} a_n \psi_m. \quad (1.4)$$

Как видно из этого примера, вместо волновой функции Ψ достаточно рассмотреть вектор-столбец

$$\mathbf{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \vdots \\ a_n \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (1.5)$$

Тогда действие оператора на состояние полностью определяется правилами умножения матрицы оператора на столбец, стоящий справа. Рассмотрим теперь среднее значение оператора в данном состоянии. Сперва заметим, что

$$\Psi^* = \sum_m a_m^* \psi_m^*. \quad (1.6)$$

Получаем:

$$\langle \hat{f} \rangle = \int \Psi^* \hat{f} \Psi \, d\mathbf{r} = \sum_{m,n} a_m^* a_n \int \psi_m^* \hat{f} \psi_n \, d\mathbf{r} = \sum_{m,n} a_m^* f_{mn} a_n. \quad (1.7)$$

Таким образом, сопряженная волновая функция полностью определяется вектором-строкой с элементами

$$\mathbf{a}^* = (a_1^*, a_2^*, \dots, a_m^*, \dots). \quad (1.8)$$

Далее видим, что необходимое число получается опять в соответствии с правилами матричного умножения линейной алгебры.

1.2 Дираковская формулировка квантовой механики

Итак, в предыдущем параграфе мы увидели, что, во-первых, описание состояния квантовой системы с помощью волновой функции не представляется единственным способом, во-вторых, необходимые физические величины получаются в линейном векторном пространстве, в котором состояния представлены векторами, а операторы – матрицами. Таким образом, основные постулаты квантовой механики можно сформулировать в более общем виде: в виде *дираковской формулировки квантовой механики*.

1. Множество всех состояний квантовой системы составляет пространство состояний, элементы этого пространства – вектора состояний – будем обозначать как $|\psi\rangle$.

2. В силу принципа суперпозиции, пространство состояний линейно. Т.е. если два состояния $|\psi_1\rangle$ и $|\psi_2\rangle$ – какие-либо два вектора состояний, то линейная комбинация $|\psi\rangle = c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle$ тоже вектор состояния из этого же пространства. Пространство состояний полное.

3. Согласно представлениям о взаимодействии макроскопической системы с микросистемой измерение какой-либо физической величины связано, вообще говоря с изменением состояния квантовой системы. Иными словами, при извлечении значения физической величины f состояние $|\psi\rangle \rightarrow |\varphi\rangle$. Процедуре изменения состояния должен соответствовать оператор \hat{f} , определенный в этом же пространстве состояний, который соответствующим образом изменяет состояние: $\hat{f}|\psi\rangle = |\varphi\rangle$.

4. Значение физической величины получается в результате сравнения состояния системы до и после измерения. Как хорошо понятно, существенной характеристикой вектора является его *направление*, поэтому от несущественных характеристик следует избавиться. В линейной алгебре для выделения существенной характеристики вводится понятие скалярного произведения. Мы видели, что при задании состояния в виде векторов нам понадобились вектора-столбцы и сопряженные к ним вектора-строки. Соответственно, наряду с "прямым" пространством состояний следует определить также и сопряженное пространство состояний, элементы которого будем обозначать как $\langle\psi|$. Тогда

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

Вектор $|\psi\rangle$ называют кет-вектором, а сопряженный к нему $\langle\psi|$ – бра-вектором в соответствии с двумя "половинка-

ми "английского слова *bracket*".¹

Теперь можно ввести скалярное произведение двух векторов $|\psi\rangle$ и $|\varphi\rangle$ в комплексном векторном пространстве состояний как

$$C = \langle\varphi|\psi\rangle; \quad C^* = \langle\psi|\varphi\rangle.$$

Соответственно, если

$$|\psi\rangle = c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle, \quad \text{то} \quad \langle\psi| = c_1^*\langle\psi_1| + c_2^*\langle\psi_2|.$$

Согласно определению скалярного произведения

$$1) \quad \langle\varphi|(c|\psi\rangle) = c\langle\varphi|\psi\rangle,$$

$$2) \quad \langle\varphi|(c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle) = c_1\langle\varphi|\psi_1\rangle + c_2\langle\varphi|\psi_2\rangle.$$

Поскольку число $\langle\psi|\psi\rangle = \|\psi\|^2$ конечно, будем полагать все вектора состояний нормированными на единицу $\|\psi\|^2 = 1$.

Вновь вернемся к действию оператора на вектор состояния: $\hat{f}|\psi\rangle = |\varphi\rangle$, очевидно, что, вообще говоря, изменяется как "направление" вектора, так и его норма: $\|\varphi\|^2 \neq 1$. Поэтому число

$$\langle\psi|\varphi\rangle = \langle\psi|\hat{f}|\psi\rangle = f \tag{2.1}$$

непосредственно связано с соответствующей физической величиной. Положим, что так получаемое число и есть искомая физическая величина, поэтому соотношение (2.1) надо понимать как определение оператора соответствующей физической величины.

Дальнейшие постулаты о полноте описания квантовой системы и об уравнении, которому подчиняются состояния, сформулируем так.

¹Как рассказывают очевидцы, на семинаре в институте Физических Проблем во время выступления П.А.М.Дирака сам Л.Д.Ландау переводил тогда новые термины как "ско" и "бка".

Постулат о степени полноты описания квантовой системы : существует максимально возможное число физических величин, которые могут быть одновременно точно измерены для данной системы. Совокупность этих физических величин называется *полным набором*. Обычно число величин, входящих в полный набор, меньше того, который следовал бы из классических соображений. Как правило, поэтому выбор физических величин, входящих в полный набор, неоднозначен. Тем не менее, задав какой-либо полный набор, мы задаем полное (с точки зрения квантовой механики) описание состояния системы. Возможность различных выборов полных наборов имеет глубокий смысл. Действительно, выбирая различные наборы, мы по-разному (с разных позиций) описываем одно и то же состояние квантовой системы, или иными словами, по-разному представляем состояние системы. С этой неоднозначностью связано очень большое удобство и преимущество квантовой механики: существование различных представлений.

Уравнение, которому подчиняется волновая функция. В нерелятивистской квантовой механике это – уравнение Шрёдингера:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle \quad (2.2)$$

Здесь \hat{H} – оператор Гамильтона (энергии). Суть постулата заключается в том, что эволюция состояния квантовой системы полностью определяется ее энергией. Таким образом, гамильтониан – “главный” оператор в квантовой механике.

Перечисленные постулаты не исчерпывают всех постулатов квантовой механики. Более того, в различных пособиях (или учебниках) система постулатов может быть сформулирована в другой последовательности и в большем объеме, однако здесь представлены наиболее общие

постулаты. Расширение данной системы связано с развитием уже отдельных постулатов.

Вновь вернемся к определению (2.1). Очевидно, что

$$f = \langle \psi | (\hat{f} | \psi \rangle) \equiv (\langle \psi | \hat{f} | \psi \rangle), \quad (2.3)$$

т.е. оператор может действовать как вправо на вектор кет, так и влево на вектор бра. Очевидно также, что, вообще говоря,

$$\langle \psi | \hat{f} \neq \langle \varphi |,$$

однако можно найти соответствующий оператор

$$\langle \varphi | \psi \rangle = (\langle \psi | \varphi \rangle)^* = (\langle \psi | \hat{f} | \psi \rangle)^* \equiv \langle \psi | \hat{f}^+ | \psi \rangle, \quad (2.4)$$

т.е.

$$\langle \psi | \hat{f}^+ = \langle \varphi |,$$

где \hat{f}^+ – эрмитовски сопряженный оператор, действующий в сопряженном пространстве так же, как \hat{f} в "прямом".

Поскольку физические величины действительны, соответствующие им операторы эрмитовы. Как и для волновых функций вновь поставим задачу на собственные значения:

$$\hat{f} | \psi \rangle = f | \psi \rangle. \quad (2.5)$$

Для оператора физической величины собственные вектора составляют базис, а собственные значения действительны. Поскольку состояние (2.5) определяется значением физической величины f , вместо "абстрактной" буквы ψ удобно поставить соответствующее значение физической величины, тогда уравнение (2.5) переписется в виде

$$\hat{f} | f \rangle = f | f \rangle. \quad (2.5a)$$

Например, для оператора энергии следовало бы собственные вектора записать так:

$$\hat{H} | E \rangle = E | E \rangle. \quad (2.6)$$

Если спектр оператора дискретен, удобно вместо собственного значения записывать его “номер”, т.е. если, например, $E \rightarrow E_n$, тогда $|E_n\rangle \equiv |n\rangle$. Соответственно

$$\hat{H}|E_n\rangle \rightarrow \hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle. \quad (2.7)$$

Любой вектор состояния можно задать в "системе отсчета"(базисе) оператора \hat{f} :

$$|\psi\rangle = \sum_n a_n |f_n\rangle$$

$$|\psi\rangle = \int a(f) |f\rangle df \quad (2.8)$$

$$|\psi\rangle = \sum_n a_n |f_n\rangle + \int a(f) |f\rangle df.$$

В таком случае говорят, что состояние $|\psi\rangle$ задано в представлении f . Причем

$$a_n = \langle f_n | \psi \rangle, \quad \text{а} \quad a(f) = \langle f | \psi \rangle. \quad (2.9)$$

Если для дискретного спектра все просто и очевидно, то для непрерывного спектра возникает вопрос, а именно. Умножим скалярно вторую строчку выражения (2.8) слева на бра-вектор $\langle f|$, чтобы определить соответствующий коэффициент Фурье:

$$a(f) = \langle f | \psi \rangle = \int a(f') \langle f | f' \rangle df'. \quad (2.10)$$

Чтобы удовлетворить это равенство, Дираку потребовалось ввести δ -функцию. Таким образом, соотношение ортогональности для базисных векторов непрерывного спектра должно иметь вид

$$\langle f | f' \rangle = \delta(f - f'). \quad (2.11)$$

Напомним некоторые свойства δ -функции:

$$\int f(x)\delta(x-a)dx = f(a); \quad (2.12)$$

$$\int f(x)\delta(ax)dx = \frac{1}{a}f(0), \quad \text{т.е.} \quad \delta(ax) = \frac{1}{a}\delta(x); \quad (2.13)$$

$$\int f(x)\delta(\varphi(x))dx = \frac{1}{(d\varphi/dx)_0}f(x_0), \quad (2.14)$$

В последнем соотношении производная берется в точке x_0 : $\varphi(x_0) = 0$.

Кроме того следует обязательно помнить интегральное представление δ -функции:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\alpha x} dx = 2\pi\delta(\alpha). \quad (2.15)$$

Устроим теперь такую конструкцию:

$$P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|. \quad (2.16)$$

Умножение строки на столбец дает число, а умножение столбца на строку – матрицу. Таким образом составленное выражение поэтому представляет оператор. Посмотрим, как он действует на произвольное состояние:

$$P_\psi|\chi\rangle = (|\psi\rangle\langle\psi|)|\chi\rangle = c|\psi\rangle, \quad (2.17)$$

где $c = \langle\psi|\chi\rangle$. Как видим, оператор (2.16) проецирует произвольное состояние на состояние $|\psi\rangle$ с весом c – это проекционный оператор.

Вернемся теперь к разложению (2.8) и подставим явный вид коэффициентов Фурье:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_n \langle f_n|\psi\rangle|f_n\rangle = \\ &= \sum_n |\psi\rangle|f_n\rangle\langle f_n| = \left(\sum_n |f_n\rangle\langle f_n| \right) |\psi\rangle. \end{aligned} \quad (2.18)$$

Видно, что выражение в скобках – единичный оператор:

$$\sum_n |f_n\rangle\langle f_n| = \hat{1}. \quad (2.19)$$

1.3 Временная эволюция состояний.

Как следует из постулата, определяющего эволюцию состояния системы, необходимо решить временное дифференциальное уравнение (2.2), а для этого следует задать начальное условие. Выберем формально начальный момент времени $t_0 = 0$, тогда начальное условие запишется в виде

$$|\Psi(t)\rangle|_{t=0} = |\Psi_0\rangle. \quad (3.1)$$

Рассмотрим сперва случай консервативной системы, когда гамильтониан явно от времени не зависит. Проинтегрируем формально уравнение (2.2) и учтем, что гамильтониан от времени не зависит:

$$|\Psi(t)\rangle = |\Psi_0\rangle - \frac{i}{\hbar} \hat{H} \int_0^t dt' |\Psi(t')\rangle \quad (3.2)$$

Получившееся интегральное уравнение будем решать методом итераций. В нулевом приближении вектор состояния от времени не зависит и совпадает с начальным условием: $|\Psi^{(0)}(t)\rangle = |\Psi_0\rangle$. Первое приближение получим, подставив в уравнение (3.2) вектор состояния в нулевом приближении:

$$|\Psi^{(1)}(t)\rangle = |\Psi_0\rangle - \frac{i}{\hbar} \hat{H} t |\Psi_0\rangle = \left(1 - \frac{i}{\hbar} \hat{H} t\right) |\Psi_0\rangle$$

Второе приближение получится после подстановки первого приближения в исходное уравнение (3.2):

$$|\Psi^{(2)}(t)\rangle = \left[1 - \frac{i}{\hbar} \hat{H} t + \left(-\frac{i}{2!\hbar}\right)^2 \hat{H}^2 t^2\right] |\Psi_0\rangle.$$

Продолжая так до ∞ , получаем ряд:

$$|\Psi(t)\rangle = \left\{ \sum_{n=0}^{n=\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t \right)^n \right\} |\Psi_0\rangle \equiv U(t, 0) |\Psi_0\rangle. \quad (3.3)$$

Оператор $U(t, 0)$ определяет эволюцию состояния от заданного начального значения, до значения в текущий момент времени t и называется *оператором эволюции*. Обычно ряд в формуле (3.3) записывают в виде операторной экспоненты:

$$U(t, 0) = \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t \right). \quad (3.4)$$

Таким образом, *будем понимать* под функцией от оператора ряд Тейлора по степеням оператора, а именно:

$$F(\hat{f}) = \sum_{n=0}^{n=\infty} \frac{1}{n!} F^{(n)}(0) \hat{f}^n. \quad (3.5)$$

Пусть $|\phi_n\rangle$ – собственная вектор оператора \hat{f} с собственным значением f_n , тогда он будет и собственным вектором оператора $F(\hat{f})$. Действительно, пусть $\hat{f}|\phi_n\rangle = f_n|\phi_n\rangle$, тогда и $\hat{f}^2|\phi_n\rangle = f_n\hat{f}|\phi_n\rangle = f_n^2|\phi_n\rangle$. Соответственно, $\hat{f}^k|\phi_n\rangle = f_n^k|\phi_n\rangle$, и

$$\begin{aligned} F(\hat{f})|\phi_n\rangle &= \sum_{n=0}^{n=\infty} \frac{1}{n!} F^{(n)}(0) (\hat{f}^n|\phi_n\rangle) = \\ &= \sum_{n=0}^{n=\infty} \frac{1}{n!} F^{(n)}(0) f_n^n |\phi_n\rangle = F(f_n)|\phi_n\rangle. \end{aligned}$$

Теперь легко видеть, что для собственной функции гамильтониана выполняется соотношение

$$U(t, 0)|\psi_E\rangle = e^{-i\hbar^{-1}Et}|\psi_E\rangle.$$

Разлагая *произвольное* начальное состояние в ряд по собственным функциям гамильтониана (т.е. по решениям стационарного уравнения Шредингера), получаем общий вид временной зависимости волновой функции консервативной системы:

$$U(t, 0)|\Psi_0\rangle = e^{-i\hbar^{-1}\hat{H}t} \sum_E a_E |\psi_E\rangle = \sum_E a_E e^{-i\hbar^{-1}Et} |\psi_E\rangle. \quad (3.6)$$

Легко убедиться, что оператор, обратный к оператору эволюции совпадает с эрмитовски сопряженным:

$$U^+(t) = \left(e^{-i\hbar^{-1}\hat{H}t} \right)^+ = e^{i\hbar^{-1}\hat{H}t} = e^{i\hbar^{-1}\hat{H}t},$$

поскольку $U^+U = 1$. Такие операторы называются *унитарными*.

Пусть есть \hat{f} – оператор некоторой физической величины². Тогда *по определению* среднее значение (наблюдаемая) равно:

$$\langle \hat{f} \rangle \equiv \bar{f} = \langle \Psi(t) | \hat{f} | \Psi(t) \rangle. \quad (3.7)$$

В общем случае полученная величина зависит от времени: $\bar{f} = \bar{f}(t)$. Найдем производную по времени от выражения (3.7). Например, если в качестве рассматриваемой физической величины выбрать координату частицы \mathbf{r} , тогда

$$\frac{d}{dt} \bar{\mathbf{r}} = \bar{\mathbf{v}} \quad \longrightarrow \quad \frac{d}{dt} \langle \mathbf{r} \rangle = \langle \mathbf{v} \rangle.$$

Определим производную по времени от оператора как

$$\frac{d}{dt} \hat{f}, \quad \text{если} \quad \left\langle \frac{d}{dt} \hat{f} \right\rangle = \frac{d}{dt} \langle \hat{f} \rangle. \quad (3.8)$$

²Вообще говоря, может быть взят произвольный оператор, однако для физической величины дальнейшее изложение будет иметь не столь абстрактный характер.

Перепишем выражение (3.7), определив временную зависимость волновой функции через оператор эволюции:

$$\langle \hat{f} \rangle = \langle \Psi_0 | U^+(t) \hat{f} U(t) | \Psi_0 \rangle$$

и продифференцируем по времени. Получаем:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{f} \rangle = \langle \Psi_0 | \left\{ \left(\frac{\partial}{\partial t} U^+(t) \right) \hat{f} U(t) + U^+(t) \hat{f} \left(\frac{\partial}{\partial t} U(t) \right) + \right. \\ \left. + U^+(t) \left(\frac{\partial \hat{f}}{\partial t} \right) U(t) \right\} | \Psi_0 \rangle. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Получим частную производную по времени от оператора эволюции:

$$\frac{\partial}{\partial t} U(t) = \frac{\partial}{\partial t} e^{-i\hbar^{-1} \hat{H} t} = -i\hbar^{-1} \hat{H} U(t),$$

или

$$i\hbar^{-1} \frac{\partial}{\partial t} U(t) = \hat{H} U(t). \quad (3.10)$$

Уравнение (3.10) имеет вид, аналогичный уравнению Шредингера для волновой функции. Для эрмитовски сопряженного оператора легко записать уравнение, эрмитовски сопряженное полученному:

$$-i\hbar^{-1} \frac{\partial}{\partial t} U^+(t) = U^+(t) \hat{H}.$$

Подставим теперь полученное уравнение (3.10) в выражение (3.9) и получим:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{f} \rangle = \langle \Psi_0 | U^+(t) \left\{ \frac{i}{\hbar} (\hat{H} \hat{f} - \hat{f} \hat{H}) + \frac{\partial \hat{f}}{\partial t} \right\} U(t) | \Psi_0 \rangle = \\ \langle \Psi(t) | \left\{ \frac{i}{\hbar} (\hat{H} \hat{f} - \hat{f} \hat{H}) + \frac{\partial \hat{f}}{\partial t} \right\} | \Psi(t) \rangle. \end{aligned}$$

Согласно принципу соответствия мы должны *отождествить* с производной оператора по времени следующее выражение

$$\frac{d\hat{f}}{dt} = \frac{\partial \hat{f}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} (\hat{H}\hat{f} - \hat{f}\hat{H}) \equiv \frac{\partial \hat{f}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{f}]. \quad (3.11)$$

Выражение в квадратных скобках называется *коммутатором* операторов. Итак, мы встретились с новым важным понятием. Для любых двух операторов коммутатором называется *оператор*, который действует на произвольную функцию так же, как действуют два оператора на эту же функцию в разной последовательности:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{F}, \quad \text{причем} \quad \hat{F}\Psi = \hat{A}(\hat{B}\Psi) - \hat{B}(\hat{A}\Psi). \quad (3.12)$$

Легко видеть, что в общем случае производная по времени от оператора отлична от нуля, даже если сам оператор явно от времени не зависит. В этом случае производная по времени есть просто коммутатор оператора с гамильтонианом:

$$\frac{d\hat{f}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{f}]. \quad (3.13)$$

Производная по времени отлична от нуля лишь в том случае, когда оператор коммутирует с гамильтонианом. Это очень важный случай, поскольку тогда и среднее значение величины (наблюдаемой) не зависит от времени. Величина, сохраняющаяся во времени называется интегралом движения. Мы знаем, что интегралы движения в классической механике играют важную роль. Не менее важную (может быть даже более важную) роль играют интегралы движения и в квантовой механике.

Рассмотрим в качестве примера оператор скорости, который по определению есть производная по времени от оператора координаты. Поскольку последний явно от времени

не зависит, имеем:

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

где \hat{T} – оператор кинетической энергии. Очевидно, второй коммутатор равен нулю, поскольку оператор координаты коммутирует сам с собой, с любой степенью i , соответственно, с произвольной функцией оператора координаты. Осталось вычислить коммутатор с оператором кинетической энергии:

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

Мы здесь воспользовались очень полезной формулой:

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B} + \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] \quad (3.14)$$

Окончательно получаем:

$$\hat{\mathbf{v}} = \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m}.$$

1.4 Гамильтоновы системы. Квантование.

Итак, мы видим, что оператор Гамильтона играет исключительную роль в описании эволюции квантовых систем. Однако, как мы знаем, функция Гамильтона играет очень важную роль и в задачах классической механики. Действительно, как мы знаем, состояние классической системы полностью определяется заданием точки в ее фазовом пространстве, т.е. заданием совокупности пар обобщенных координат и импульсов:

$$(q, p) = (q_1, q_2, \dots, q_N; p_1, p_2, \dots, p_N), \quad (4.1)$$

где N – число степеней свободы системы.

Все физические величины такой системы (энергия, импульс, момент импульса и т.п.) будут выражаться в виде некоторых функций обобщенных координат и импульсов, которые имеют вполне определенное значение в каждом состоянии системы (4.1). Это так называемые динамические функции, которые обозначим как $b(q, p)$. Если это аналитические функции, их можно представить в виде степенных рядов вида:

$$\begin{aligned} b(q, p) &= \\ &= \sum_{n_1=0}^{\infty} \dots \sum_{n_N=0}^{\infty} \sum_{m_1=0}^{\infty} \dots \sum_{m_N=0}^{\infty} \tilde{\beta}_{n_1 \dots m_N} q_1^{n_1} \dots q_N^{n_N} p_1^{m_1} \dots p_N^{m_N}, \end{aligned} \quad (4.2)$$

где $\tilde{\beta}_{n_1 \dots m_N}$ – некоторые вещественные постоянные. Функции такого вида всегда могут быть представлены в виде ряда или интеграла Фурье:

$$\begin{aligned} b(q, p) &= \\ &= \int dk_1 \dots dk_N dl_1 \dots dl_N \beta_{k_1 \dots l_N} \exp \left[i \sum_{n=1}^N (k_n q_n + l_n p_n) \right], \end{aligned} \quad (4.3)$$

где $\beta_{k_1 \dots l_N}$ – некоторые, вообще говоря сингулярные, функции k и l .

В результате эволюции системы физические величины классической системы могут изменяться, поскольку изменяется положение точки в фазовом объеме. Изменение положения точки задается траекторией, которая определяется как решение системы уравнений Гамильтона:

$$\begin{aligned} \dot{q}_n &= \frac{\partial H(q, p)}{\partial p_n}, \\ \dot{p}_n &= - \frac{\partial H(q, p)}{\partial q_n}. \end{aligned} \quad (4.4)$$

Если заданы условия в начальный момент времени $t_0 = 0$: $q_n(0) = q_n^0$, $p_n(0) = p_n^0$, решение (q, p) определяется единственным образом, причем через каждую точку фазового пространства *проходит одна и только одна траектория*, удовлетворяющая уравнению (4.4).

Рассмотрим теперь как изменяется во времени динамическая функция системы на траектории. Будем считать, что коэффициенты $\tilde{\beta}_{n_1 \dots m_N}$ в уравнении (4.2) явно от времени не зависят, тогда

$$\begin{aligned} \dot{b}(q, p) &= \sum_{n=1}^N \left(\frac{\partial b}{\partial q_n} \dot{q}_n + \frac{\partial b}{\partial p_n} \dot{p}_n \right) = \\ &= \sum_{n=1}^N \left(\frac{\partial b}{\partial q_n} \frac{\partial H}{\partial p_n} - \frac{\partial b}{\partial p_n} \frac{\partial H}{\partial q_n} \right) = [b, H]_P. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Здесь введено определение *скобки Пуассона*:

$$[b, c]_P = \sum_{n=1}^N \left(\frac{\partial b}{\partial q_n} \frac{\partial c}{\partial p_n} - \frac{\partial b}{\partial p_n} \frac{\partial c}{\partial q_n} \right). \quad (4.6)$$

Упражнения.

1. Показать, что скобки Пуассона антисимметричны относительно перестановки динамических функций:

$$[b, c]_P = -[c, b]_P.$$

2. Доказать тождество Якоби:

$$[b, [c, d]_P]_P + [c, [d, b]_P]_P + [d, [b, c]_P]_P = 0. \quad (4.7)$$

3. Показать, что для любого скалярного, не зависящего от q и p , параметра скобка Пуассона равна нулю:

$$[b, \alpha]_P = 0.$$

Наконец, легко убедиться, что скобки Пуассона удовлетворяют следующим соотношениям (правилам):

$$\begin{aligned} [(b+c), d]_P &= [b, d]_P + [c, d]_P, \\ [\alpha b, c]_P &= \alpha [b, c]_P, \\ [bc, d]_P &= [b, d]_P c + b [c, d]_P. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Используя правила (4.8) можно вычислить скобку Пуассона *любых* двух динамических функций, если известна таблица скобок Пуассона обобщенных координат и импульсов – *канонически сопряженных переменных*. Эту таблицу легко получить:

$$[q_n, q_m]_P = 0, \quad [p_n, p_m]_P = 0, \quad [q_n, p_m]_P = \delta_{nm}. \quad (4.9)$$

Итак, мы видим, что производная по времени динамической функции в классической механике определяется скобкой Пуассона этой функции с гамильтонианом. Согласно принципу соответствия динамическим функциям – физическим величинам в квантовой механике соответствуют операторы. Изменение оператора во времени определяет изменение во времени соответствующей физической величины. Мы видели, что производные операторов во времени определяются *коммутатором* – квантовым аналогом скобки Пуассона. Легко видеть, что основные правила для классических скобок Пуассона справедливы и для коммутаторов в квантовой механике. Тогда чисто формально, согласно принципу соответствия следует переписать полученные для классических динамических функций соотношения для операторов в квантовой механике, заменив везде классические скобки Пуассона на “квантовые”:

$$[a, b]_P \longrightarrow -\frac{i}{\hbar} [\hat{A}, \hat{B}], \quad (4.10)$$

где \hat{A} и \hat{B} – операторы, соответствующие физическим величинам a и b .

В соответствии с этим мы теперь можем *дополнить нашу систему постулатов* еще одним, представляющим квантовое выражение классических соотношений (4.9), выражающим одновременно и фундаментальный принцип неопределенностей Гайзенберга:

$$[\hat{q}_l, \hat{q}_k] = 0, \quad [\hat{p}_l, \hat{p}_k] = 0, \quad [\hat{q}_l, \hat{p}_k] = i\hbar\delta_{lk}. \quad (4.11)$$

Если операторы каких-либо физических величин не коммутируют, говорят, что такая классическая система “квантуется”. Заметим также, что соотношения (4.8) для скобок Пуассона остаются справедливыми и для коммутаторов операторов в квантовой механике.

Упражнения.

Используя коммутационные соотношения (4.11) и правила (4.8), вычислить коммутаторы:

1. $[\hat{x}, \hat{p}_x^l] = i\hbar \frac{\partial}{\partial \hat{p}_x} \hat{p}_x^l;$
2. $[\hat{p}_x, \hat{x}^l] = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \hat{x}} \hat{x}^l;$

Легко видеть, что, исходя из определения функции от оператора, можно обобщить результаты упражнения:

$$\begin{aligned} [\hat{x}, F(\hat{p}_x)] &= i\hbar \frac{\partial F(\hat{p}_x)}{\partial \hat{p}_x}, \\ [\hat{p}_x, G(\hat{x})] &= -i\hbar \frac{\partial G(\hat{x})}{\partial \hat{x}}. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Рассмотрим теперь как реализовать на практике принцип соответствия, иными словами, как сопоставить динамическим функциям классической механики операторы в квантовой механике. Проблема состоит в том, что в отличие от физических величин операторы неперестановочны, однако всем физическим величинам должны соответствовать эрмитовы операторы, тогда как *не любая комбинация*

некоммутирующих операторов будет эрмитовым оператором. Действительно, пусть два эрмитовых оператора \hat{A} и \hat{B} соответствующие физическим величинам a и b не коммутируют между собой: $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$, тогда физической величине ab нельзя поставить в соответствие оператор $\hat{A}\hat{B}$, поскольку он неэрмитов. Легко в этом убедиться, взяв эрмитово сопряжение от произведения $(\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{B}^+\hat{A}^+ = \hat{B}\hat{A} = \hat{A}\hat{B} - i\hat{C}$. Ситуацию можно поправить, симметризовав операторное выражение: $(\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A})/2$, которое теперь уже эрмитово.

В этом простом примере не возникло сложностей и неоднозначностей, однако стоит взять более сложное выражение, например, a^2b , как сразу же возникает альтернатива: эрмитовыми будут $(\hat{A}^2\hat{B} + \hat{B}\hat{A}^2)/2$, $\hat{A}\hat{B}\hat{A}$, а также их линейная комбинация. Какое выражение будет правильным? Для адекватного описания систем не может быть никакой неоднозначности, должно существовать однозначное правило сопоставления. Правило соответствия постулируется, его нельзя доказать. Можно постулировать по-разному, но на протяжении всех рассуждений и вычислений это правило не может изменяться. Наиболее часто используется правило, сформулированное Г. Вейлем и имеющее вид, аналогичный представлению в виде интеграла Фурье для классических динамических функций (4.3).

Правило соответствия. Всем классическим динамическим функциям в квантовой механике соответствуют операторы, которые могут быть представлены в виде:

$$\hat{B}(\hat{q}, \hat{p}) = \int dk dl \beta(k, l) \exp(ik\hat{q} + il\hat{p}), \quad (4.13)$$

где $\beta(k, l)$ — некоторая числовая, возможно сингулярная, функция чисел k, l . Здесь для простоты опустили индексы у N -мерных векторов. Требование эрмитовости накладывает ограничения на функцию β

$$\beta^*(k, l) = \beta(-k, -l). \quad (4.14)$$

Следует заметить, что согласно правилу соответствия, функция $\beta(k, l)$ в уравнении (4.13) *та же самая*, что в уравнении (4.3). Отметим также, что данная функция может явно зависеть от времени: $\beta(k, l; t)$.

Упражнения.

1. Показать, что классической динамической функции $x^2 p_x$ соответствует эрмитов оператор $(\hat{x}^2 \hat{p}_x + \hat{x} \hat{p}_x \hat{x} + \hat{p}_x \hat{x}^2)/3$.

2. Доказать, что если коммутатор двух операторов \hat{A} и \hat{B} есть c -число, справедливо представление (“расцепление” экспонент):

$$\exp(\hat{A} + \hat{B}) = \exp(\hat{A}) \exp(\hat{B}) \exp\left(-\frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}]\right).$$

1.5 Представления Шредингера и Гайзенберга

Рассмотрим теперь формальное решение временного уравнения Шредингера в произвольном случае, когда гамильтониан может явно зависеть от времени.

Проинтегрируем вновь формально уравнение (2.2) по времени, однако теперь мы не имеем права выносить оператор Гамильтона из-под знака интеграла:

$$|\Psi(t)\rangle = |\Psi(0)\rangle - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H} |\Psi(t')\rangle dt'. \quad (5.1)$$

Подставим под интеграл формальное решение (5.1) и получим вновь интегральное уравнение:

$$|\Psi(t)\rangle = |\Psi(0)\rangle + \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \int_{t_0}^t \hat{H}(t') |\Psi(0)\rangle dt' +$$

$$+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t \widehat{H}(t') dt' \int_{t_0}^{t'} \widehat{H}(t'') |\Psi(t'')\rangle dt''. \quad (5.2)$$

Продолжая эту процедуру бесконечно, получим ряд:

$$|\Psi(t)\rangle = \left(1 + \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \int_{t_0}^t \widehat{H}(t') dt' + \right. \\ \left. + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t \widehat{H}(t') dt' \int_{t_0}^{t'} \widehat{H}(t'') dt'' + \dots \right) |\Psi(0)\rangle. \quad (5.3)$$

Обозначим получившийся операторный ряд $U(t, t_0)$, тогда выражение (5.3) можно записать в виде

$$|\Psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\Psi(0)\rangle \equiv U(t, t_0) |\Psi(t_0)\rangle. \quad (5.4)$$

Здесь $U(t, t_0)$ – оператором эволюции для системы, которая может быть неконсервативной. Начальный момент времени не обязательно выбирается $t_0 = 0$. В частности,

$$|\Psi(t)\rangle = U(t, -\infty) |\Psi(-\infty)\rangle. \quad (5.5)$$

Если $\widehat{H}(t)$ не зависит от t (т.е. равен \widehat{H}_0), ряд (5.3) можно формально свернуть, и мы получаем уже известный результат для консервативной системы. По аналогии с этим принято записывать и общий ряд в виде экспоненты. Сделаем все верхние пределы интегрирования в ряде (5.3) одинаковыми. Поскольку при этом увеличивается область интегрирования, следует поделить каждое слагаемое на соответствующее число перестановок:

$$U(t, t_0) = \left(1 + \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \int_{t_0}^t \widehat{H}(t') dt' + \right. \\ \left. + \frac{1}{2!} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^t dt'' \widehat{H}(t') \widehat{H}(t'') + \dots \right)$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{3!} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^3 \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^t dt'' \int_{t_0}^t dt''' \hat{H}(t') \hat{H}(t'') \hat{H}(t''') + \dots = \\
& = \hat{T} \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}(t') dt' \right).
\end{aligned}$$

Итак, динамическое поведение квантовой системы определяется оператором эволюции.

Упражнение

Показать, что оператор эволюции унитарен и для неконсервативных систем.

Как хорошо известно из курса линейной алгебры, унитарные операторы определяют некоторые линейные унитарные преобразования. В частности, мы видели, что переход от одного представления к другому также осуществляется унитарными преобразованиями. Пусть в каком-либо представлении $|f\rangle$ произвольное состояние $|\Psi(t)\rangle$ имеет вид

$$|\Psi(t)\rangle = \sum a_f(t) |f\rangle.$$

С другой стороны,

$$\begin{aligned}
|\Psi(t)\rangle &= U(t, 0) |\Psi(0)\rangle = \\
&= \sum a_f(0) U(t, 0) |f\rangle = \sum a_f(0) |f(t)\rangle. \quad (5.6)
\end{aligned}$$

Мы видим, что можно свести действие оператора эволюции к воздействию на базисные состояния представления. Но состояния $|f(t)\rangle$ отличаются от состояний $|f\rangle$, поэтому полученное представление отличается от первоначального. В соответствии с этим различают два представления состояния: *представление Шредингера*, когда во времени изменяется состояние, но не изменяются базисные вектора: состояние $|\Psi(t)\rangle$ определяется набором $a_f(t)$. И соответственно *представление Гейзенберга*, когда изменяются во

времени базисные вектора представления, но само состояние остается неизменным: состояние $|\Psi(t)\rangle$ определяется набором чисел $a_f(0)$, которые от времени не зависят. Как помним из линейной алгебры, преобразование базисных векторов и преобразование вектора (физической системы) взаимно обратны. Поэтому если мы определим представление Шредингера, как преобразование вектора состояния во времени с помощью оператора эволюции, то вид вектора состояния в представлении Гейзенберга $|\Psi_H(t)\rangle$ получается в результате обратного преобразования:

$$\begin{aligned} |\Psi_H(t)\rangle &= U^+(t, 0)|\Psi(t)\rangle = \\ &= U^+(t, 0)U(t, 0)|\Psi(0)\rangle = |\Psi(0)\rangle, \end{aligned} \quad (5.7)$$

т.е. действительно, вектор состояния квантовой системы в представлении Гейзенберга *не зависит от времени*.

При переходе от представления Шредингера к представлению Гейзенберга следует также проделать унитарное преобразование для всех операторов. Действительно, поскольку вид оператора определяется из условия соответствия его среднего значения физической величине, имеем:

$$\begin{aligned} \langle \hat{A} \rangle &= \langle \Psi(t) | \hat{A} | \Psi(t) \rangle = \\ &= \langle \Psi(0) | U^+(t, 0) \hat{A} U(t, 0) | \Psi(0) \rangle = \langle \hat{A}_H(t) \rangle. \end{aligned} \quad (5.8)$$

Здесь $\hat{A}_H(t) = U^+(t, 0)\hat{A}U(t, 0)$ – оператор в представлении Гейзенберга.

Как видим, в представлении Гейзенберга оператор обязательно зависит от времени, даже если в представлении Шредингера он от времени не зависел. Таким образом, поскольку в представлении Гейзенберга вектор состояния не зависит от времени, вся временная эволюция квантовой системы переносится на операторы. Поэтому следует напи-

сать уравнение движения для операторов:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \hat{A}_H(t) = U^+(t, 0) \left(\frac{\partial}{\partial t} \hat{A} \right) U(t, 0) + \\ + \left(\frac{\partial}{\partial t} U^+(t, 0) \right) \hat{A} U(t, 0) + U^+(t, 0) \hat{A} \left(\frac{\partial}{\partial t} U(t, 0) \right). \end{aligned} \quad (5.9)$$

Легко видеть, что оператор эволюции подчиняется уравнению

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, 0) = \hat{H} U(t, 0). \quad (5.10)$$

Поэтому получаем уравнение Гайзенберга, определяющее изменение операторов во времени и "заменяющее" уравнение Шредингера для вектора состояния:

$$\frac{d\hat{A}_H(t)}{dt} = \frac{\partial \hat{A}_H}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}_H]. \quad (5.11)$$

Упражнения.

1. Найти в представлении Гайзенберга операторы координаты и импульса свободной частицы.

2. Найти оператор спина электрона в однородном магнитном поле \mathbf{B} в представлении Гайзенберга. Считать, что других взаимодействий, изменяющих спиновое состояние электрона нет.

1.6 Представление взаимодействия

Представление взаимодействия широко используется при решении нестационарных задач теории возмущений, когда гамильтониан системы имеет вид

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t) \quad (6.1)$$

Очевидно, стационарная задача, когда возмущение от времени не зависит $\widehat{V}(t) = \widehat{V}(0)$ представляется частным случаем. Однако надо помнить, что в нестационарном случае рассматриваются совсем другие задачи. В отсутствие зависящего от времени оператора $V(t)$ уравнение Шредингера сводилось к стационарному, а временная зависимость вектора состояния определялась с помощью "простого" оператора эволюции

$$U_0(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\widehat{H}_0 t\right). \quad (6.2)$$

В случае, когда гамильтониан зависит от времени, теряет смысл говорить об уровнях энергии, поскольку энергия системы E не сохраняется. Поэтому в нестационарном случае и задача формулируется *об изменении состояний*. Пусть возмущение мало, тогда видно, что в каждый момент времени основное поведение системы определяется невозмущенным гамильтонианом H_0 , а $V(t)$ слегка "подправляет" изменение во времени $\Psi^{(0)}(t)$. Исходя из этих соображений будем искать *точную* волновую функцию $\Psi(t)$ в виде

$$\Psi(t) = U_0(t)\Psi_I(t), \quad (6.3)$$

где $\Psi_I(t) = \Psi_I(0)$, если $V(t) = 0$.

Поскольку оператор эволюции подчиняется уравнению

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U_0(t, t_0) = \widehat{H}_0U_0(t, t_0) \quad (6.4)$$

уравнение Шредингера принимает вид

$$i\hbar\frac{\partial U_0}{\partial t}\Psi_I(t) + i\hbar U_0\frac{\partial \Psi_I(t)}{\partial t} = \widehat{H}_0U_0\Psi_I(t) + V(t)U_0\Psi_I(t). \quad (6.5)$$

В силу уравнения (6.4) остается только два слагаемых. Умножим получившееся уравнение слева на U_0^+ и получим

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi_I(t) = U_0^+\widehat{V}(t)U_0\Psi_I(t) \equiv V_I(t)\Psi_I(t). \quad (6.6)$$

Это так называемое *представление взаимодействия*. Как и следовало ожидать, $\Psi_I(t)$ изменяется только за счет возмущения $V_I(t)$, но на "собственное" изменение оператора $V_I(t)$ "накладывается" эволюция невозмущенной системы:

$$V_I(t) = U_0^+(t)\hat{V}(t)U_0(t) = e^{i\hbar^{-1}\hat{H}_0t}\hat{V}(t)e^{-i\hbar^{-1}\hat{H}_0t} \quad (6.7)$$

1.7 Представления основных операторов

Рассмотрим теперь некоторые основные физические величины и соответствующие им операторы. Прежде всего заметим, что состояние частицы (квантовой системы) в точке \mathbf{r} по определению задается вектором состояния $|\mathbf{r}\rangle$, состояние частицы с импульсом \mathbf{p} – вектором $|\mathbf{p}\rangle$.

Поскольку координата – физическая величина, согласно введенным определениям, ей соответствует оператор $\hat{\mathbf{r}}$, для которого вектора $|\mathbf{r}\rangle$ – собственные вектора с соответствующими собственными значениями:

$$\hat{\mathbf{r}}|\mathbf{r}\rangle = \mathbf{r}|\mathbf{r}\rangle. \quad (7.1)$$

Здесь \mathbf{r} – собственное значение оператора координаты, и оно соответствует тому, что частица находится в точке с координатами \mathbf{r} .

Те же самые слова можно произнести и для импульса частицы:

$$\hat{\mathbf{p}}|\mathbf{p}\rangle = \mathbf{p}|\mathbf{p}\rangle. \quad (7.2)$$

Здесь \mathbf{p} – собственное значение оператора импульса, и оно соответствует тому, что частица обладает импульсом \mathbf{p} .

Оператор

$$\hat{P}_{\mathbf{r}} = |\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}| \quad (7.3)$$

проектирует любой вектор на базисный вектор состояния с координатой \mathbf{r} :

$$\hat{P}_{\mathbf{r}}|\psi\rangle = |\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}|\psi\rangle = \langle\mathbf{r}|\psi\rangle|\mathbf{r}\rangle \quad (7.4)$$

Здесь проекция $\langle \mathbf{r} | \psi \rangle$ показывает, как выглядит состояние $|\psi\rangle$ в точке \mathbf{r} . Но это не что иное как *по определению* волновая функция. Таким образом

$$\psi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \psi \rangle. \quad (7.5)$$

Соответственно мы рассматриваем состояние в координатном представлении. Полное разложение вектора $|\psi\rangle$ представляется в виде интеграла

$$|\psi\rangle = \int \langle \mathbf{r} | \psi \rangle |\mathbf{r}\rangle d\mathbf{r}. \quad (7.6)$$

Пусть теперь $|\psi\rangle \equiv |\mathbf{p}\rangle$, тогда

$$\hat{P}_{\mathbf{r}} |\mathbf{p}\rangle = |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle = \langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle |\mathbf{r}\rangle. \quad (7.7)$$

Но волновая функция $\langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle$ описывает состояние частицы с определенным импульсом, т.е. свободную частицу, а потому это есть не что иное как волна де Бройля³:

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle = \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = A e^{i\hbar^{-1} \mathbf{p} \mathbf{r}}. \quad (7.8)$$

Теперь мы понимаем, что волновая функция непрерывного спектра должна быть нормирована на δ -функцию:

$$\begin{aligned} \int \psi_{\mathbf{p}'}^*(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} &= |A|^2 \int e^{i\hbar^{-1}(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\mathbf{r}} d\mathbf{r} = \\ &= |A|^2 (2\pi\hbar)^3 \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'). \end{aligned} \quad (7.9)$$

Таким образом

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\hbar^{-1} \mathbf{p} \mathbf{r}}. \quad (7.10)$$

³Это утверждение будет доказано строго ниже, исходя из коммутационных соотношений

Действие операторов на собственные вектора представляется тривиальным: получаются собственные значения. Вся проблема состоит в том, чтобы определить, как действуют операторы на произвольные вектора состояний. Сперва определим, как действие операторов выглядит в собственном базисе (в "собственной системе отсчета"), а затем увидим, как они выглядят в "несобственной системе отсчета". Подействуем сперва на произвольный вектор состояния оператором координаты $\hat{\mathbf{r}}$:

$$\hat{\mathbf{r}}|\varphi\rangle = |\varphi\rangle, \quad (7.11)$$

где $|\varphi\rangle$ неизвестный пока вектор. В базисе собственных состояний оператора координаты вид "неизвестного" состояния получается разложением его по базису состояний $|\mathbf{r}\rangle$. Проекция этого разложения *по определению* дают значения (вид) состояния $|\varphi\rangle$ в точке с координатой \mathbf{r} , т.е. волновую функцию. Имеем:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} | \varphi \rangle &= \varphi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \hat{\mathbf{r}} | \varphi \rangle = \langle \mathbf{r} | \hat{\mathbf{r}} \hat{1}_{\mathbf{r}} | \varphi \rangle = \langle \mathbf{r} | \hat{\mathbf{r}} \int d\mathbf{r}' |\mathbf{r}'\rangle \langle \mathbf{r}' | \varphi \rangle = \\ &= \int d\mathbf{r}' \langle \mathbf{r} | \hat{\mathbf{r}} | \mathbf{r}' \rangle \langle \mathbf{r}' | \varphi \rangle = \int d\mathbf{r}' \mathbf{r} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \varphi(\mathbf{r}') = \mathbf{r} \varphi(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (7.12)$$

Как видим, действие оператора координаты на произвольное состояние в собственном представлении сводится к умножению состояния на значение координаты. Причем мы видим, что при переходе от векторов состояний к волновым функциям интегрирование по всем матричным элементам и проекциям "уходит" и можно говорить о том, что оператор координаты есть простая операция умножения на саму координату. Такое свойство связано с локальностью оператора. Тем не менее, строго говоря, мы всегда должны помнить, что оператор в каком-либо представлении есть вполне определенная матрица. Однако, как только что мы

видели, для волновых функций этот факт оказывается "спрятанным". Поэтому общепринято говорить, что действие оператора координаты (а соответственно и любой функции от оператора координаты) на волновую функцию сводится к простому умножению.

Упражнение

Используя свойство функции от оператора $F(\hat{f})\psi_n = F(f_n)\psi_n$, если $\hat{f}\psi_n = f_n\psi_n$, показать, что

$$\langle \mathbf{r} | U(\hat{\mathbf{r}}) | \mathbf{r}' \rangle = U(\mathbf{r})\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (7.13)$$

Пример

Определим оператор трансляции $\hat{T}_{\mathbf{a}}$ на расстояние \mathbf{a} его действием на вектора состояний с определенной координатой $|\mathbf{r}\rangle$ следующим образом:

$$\hat{T}_{\mathbf{a}}|\mathbf{r}\rangle = |\mathbf{r} + \mathbf{a}\rangle.$$

Посмотрим теперь, как действует этот оператор на произвольный вектор состояния $|\psi\rangle$. По определению

$$\hat{T}_{\mathbf{a}}|\psi\rangle = |\phi\rangle.$$

Теперь надо найти связь двух состояний $|\psi\rangle$ и $|\phi\rangle$ в координатном представлении, т.е. волновых функций. Вновь будем действовать по определению. Спроектируем полученные состояния на состояние $|\mathbf{r}\rangle$:

$$\langle \mathbf{r} | \hat{T}_{\mathbf{a}} | \psi \rangle = \langle \mathbf{r} | \phi \rangle = \phi(\mathbf{r}).$$

Выражение слева "расщепим" единичным оператором $\hat{1}_{\mathbf{r}}$:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} | \hat{T}_{\mathbf{a}} \hat{1}_{\mathbf{r}} | \psi \rangle &= \int d\mathbf{r}' \langle \mathbf{r} | \hat{T}_{\mathbf{a}} | \mathbf{r}' \rangle \langle \mathbf{r}' | \psi \rangle = \int d\mathbf{r}' \langle \mathbf{r} | \mathbf{r}' + \mathbf{a} \rangle \psi(\mathbf{r}') = \\ &= \int d\mathbf{r}' \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}' - \mathbf{a}) \psi(\mathbf{r}') = \psi(\mathbf{r} - \mathbf{a}). \end{aligned}$$

Или окончательно в координатном представлении

$$\widehat{T}_{\mathbf{a}}\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} - \mathbf{a}).$$

Заметим, что полученный результат отличается от "привычного". Все дело в том, что привычное определение оператора трансляции его действием на волновую функцию обратно нашему определению. Как видно, мы здесь определили оператор трансляции его действием на базисные вектора, что в линейной алгебре означает преобразование системы координат. Определяя же оператор трансляции его действием на волновую функцию, мы не изменяем базисные вектора, но смещаем саму физическую систему, что в линейной алгебре означает преобразование пространства. Как хорошо известно, это обратные друг по отношению к другу преобразования. Такая ситуация часто встречается не только в квантовой механике, но и вообще в физике, поэтому следует быть очень внимательным при выполнении каких-либо преобразований. Ясно, что окончательный (физический) результат не зависит от того, что преобразуется, но *ни в коем случае нельзя смешивать различные преобразования в одной задаче!* Поэтому лучше всего придерживаться всегда какого-либо одного типа преобразований: либо преобразовывать базисные вектора (систему координат, отсчета), либо преобразовывать физическую систему (пространство).

Упражнения

1. Найти эрмитовски сопряженный оператор трансляции $\widehat{T}_{\mathbf{a}}^+$.

2. Найти вектор кет:

$$\widehat{T}_{\mathbf{a}}^+|\mathbf{r}\rangle.$$

3. Найти бра-векторы:

$$\langle\mathbf{r}|\widehat{T}_{\mathbf{a}} \quad \langle\mathbf{r}|\widehat{T}_{\mathbf{a}}^+.$$

Подействуем теперь оператором импульса на произвольный вектор:

$$\hat{\mathbf{p}}|\psi\rangle = |\chi\rangle. \quad (7.14)$$

В базисе собственных состояний $|\mathbf{p}\rangle$ вид "неизвестного" состояния получается разложением его по данному базису. Проекции этого разложения *по определению* дают значения (вид) состояния $|\chi\rangle$ в точке с импульсом \mathbf{p} . Имеем:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p}|\chi\rangle &= \chi_{\mathbf{p}} = \langle \mathbf{p}|\hat{\mathbf{p}}|\psi\rangle = \langle \mathbf{p}|\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{1}}_{\mathbf{p}}|\psi\rangle = \langle \mathbf{p}|\hat{\mathbf{p}} \sum_{\mathbf{p}'} |\mathbf{p}'\rangle \langle \mathbf{p}'|\psi\rangle = \\ &= \sum_{\mathbf{p}'} \langle \mathbf{p}|\hat{\mathbf{p}}|\mathbf{p}'\rangle \langle \mathbf{p}'|\psi\rangle = \sum_{\mathbf{p}'} \mathbf{p} \delta_{\mathbf{p},\mathbf{p}'} \psi_{\mathbf{p}'} = \mathbf{p} \psi_{\mathbf{p}}. \end{aligned} \quad (7.15)$$

Таким образом, получаем, что, как и для оператора координаты в координатном представлении, действие оператора импульса в собственном представлении сводится к простому умножению функции в импульсном представлении на значение импульса.

1.8 Матрица перехода, волновая функция свободной частицы.

Посмотрим теперь, какой вид имеет состояние $|\chi\rangle$ в координатном представлении. Для этого спроектируем его на произвольный базисный вектор $|\mathbf{r}\rangle$:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}|\chi\rangle &= \chi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r}|\hat{\mathbf{p}}|\psi\rangle = \langle \mathbf{r}|\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{1}}_{\mathbf{r}}|\psi\rangle = \langle \mathbf{r}|\hat{\mathbf{p}} \int d\mathbf{r}' |\mathbf{r}'\rangle \langle \mathbf{r}'|\psi\rangle = \\ &= \int d\mathbf{r}' \langle \mathbf{r}|\hat{\mathbf{p}}|\mathbf{r}'\rangle \langle \mathbf{r}'|\psi\rangle = \int d\mathbf{r}' \langle \mathbf{r}|\hat{\mathbf{p}}|\mathbf{r}'\rangle \psi(\mathbf{r}'). \end{aligned} \quad (8.1)$$

Как видим, для дальнейшего продвижения вперед следует понять, что представляет собой матрица оператора импульса в координатном представлении $\langle \mathbf{r} | \hat{\mathbf{p}} | \mathbf{r}' \rangle$. Для ответа на этот вопрос нужно воспользоваться уже известными соотношениями, а именно: нам известен вид матрицы оператора импульса в собственном представлении и вид собственных состояний оператора импульса в координатном представлении. Поэтому "расцепим" матричный элемент оператора импульса в координатном представлении двумя единичными операторами:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} | \hat{\mathbf{p}} | \mathbf{r}' \rangle &= \langle \mathbf{r} | \hat{\mathbf{1}}_{\mathbf{p}} \hat{\mathbf{p}} \hat{\mathbf{1}}_{\mathbf{p}'} | \mathbf{r}' \rangle = \langle \mathbf{r} | \int d\mathbf{p} |\mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p} | \hat{\mathbf{p}} \int d\mathbf{p}' |\mathbf{p}'\rangle \langle \mathbf{p}' | \mathbf{r}' \rangle = \\ &= \iint d\mathbf{p} d\mathbf{p}' \langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | \hat{\mathbf{p}} | \mathbf{p}' \rangle \langle \mathbf{p}' | \mathbf{r}' \rangle. \end{aligned} \quad (8.2)$$

В последней формуле осталось неизвестным только выражение $\langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle$, которое с формальной стороны есть *матрица перехода* от координатного к импульсному представлению. С другой стороны, если рассматривать вектор $|\mathbf{p}\rangle$ как состояние системы с определенным импульсом, данный матричный элемент есть *не что иное, как волновая функция частицы с определенным импульсом*. но определенным импульсом обладает свободная частица, следовательно это – волновая функция свободной частицы. Можно постулировать вид этой волновой функции, тем более, что исторически это и был один из первых постулатов квантовой механики: волна де-Бройля, однако мы останемся на более общих позициях и останемся в рамках принятых постулатов, а именно: коммутационных соотношений (4.11), исходя из которых получим выражение для искомой матрицы перехода-плоской волны.

Решение задачи носит формальный характер и получается с помощью некоторого искусственного приема. Введем

оператор

$$\widehat{Q}(\mathbf{a}) = \exp(-i\hbar^{-1}\mathbf{a}\widehat{\mathbf{p}}), \quad (8.3)$$

где \mathbf{a} – пока некоторый произвольный параметр.

Вычислим коммутатор, используя соотношение (4.12):

$$[\widehat{\mathbf{r}}, \widehat{Q}] = i\hbar \frac{\partial \widehat{Q}}{\partial \widehat{\mathbf{p}}} = \mathbf{a}\widehat{Q}. \quad (8.4)$$

Подействуем теперь на собственный вектор оператора координаты произведением операторов:

$$\widehat{\mathbf{r}}\widehat{Q}|\mathbf{r}_0\rangle = \left(\widehat{Q}\widehat{\mathbf{r}} + \mathbf{a}\widehat{Q}\right)|\mathbf{r}_0\rangle = (\mathbf{r}_0 + \mathbf{a})\widehat{Q}|\mathbf{r}_0\rangle$$

Таким образом видим, что *вектор* $\widehat{Q}|\mathbf{r}_0\rangle$ есть собственный вектор оператора координаты с собственным значением $(\mathbf{r}_0 + \mathbf{a})$. Из эрмитовости оператора координаты сразу вытекает требование *действительности параметра* \mathbf{a} . Таким образом оператор (8.3) оказывается унитарным, а, следовательно, обратный совпадает с эрмитовски сопряженным. Никаких других ограничений на параметр \mathbf{a} нет, поэтому спектр оператора координаты оказывается непрерывным и неограниченным. Соответственно получаем:

$$\langle \mathbf{r}_0 + \mathbf{a} | \mathbf{r}_0 + \mathbf{a} \rangle = \langle \mathbf{r}_0 | \widehat{Q}^+ \widehat{Q} | \mathbf{r}_0 \rangle = \langle \mathbf{r}_0 | \mathbf{r}_0 \rangle. \quad (8.5)$$

Собственные векторы с непрерывным спектром нормированы на δ -функцию, а из последнего соотношения видно, что нормировка не зависит от собственного значения оператора координаты.

Выберем в качестве параметра какое-либо собственное значение оператора координаты (радиус-вектор) и подействуем оператором (8.3) на собственный вектор оператора координаты с собственным значением, равным нулю:

$$\widehat{Q}(\mathbf{r})|0\rangle_r = \exp(-i\hbar^{-1}\mathbf{r}\widehat{\mathbf{p}})|0\rangle_r = |\mathbf{r}\rangle. \quad (8.6)$$

Таким образом любой собственный вектор оператора координаты может быть получен действием оператора сдвига (8.3) на “основной” собственный вектор оператора координаты.

Упражнение.

Чему равен оператор $\hat{Q}^+(\mathbf{a})\hat{r}\hat{Q}(\mathbf{a})$?

Проделаем теперь аналогичные выкладки для собственных векторов оператора импульса. Введем оператор сдвига в импульсном пространстве:

$$\hat{P}(\mathbf{k}) = \exp(i\hbar^{-1}\mathbf{k}\hat{\mathbf{r}}). \quad (8.7)$$

Легко показать, что

$$[\hat{\mathbf{p}}, \hat{P}(\mathbf{k})] = \mathbf{k}\hat{P}(\mathbf{k})$$

и, соответственно,

$$\hat{P}(\mathbf{k})|\mathbf{p}_0\rangle = |\mathbf{k} + \mathbf{p}_0\rangle. \quad (8.8)$$

Как и для собственных векторов оператора координаты, любой собственный вектор оператора импульса (состояние с определенным импульсом) можно получить, подействовав оператором сдвига (8.7) на “основной” собственный вектор оператора импульса:

$$\hat{P}(\mathbf{p})|0\rangle_p = |\mathbf{p}\rangle. \quad (8.9)$$

Теперь мы готовы вычислить матричный элемент искомой матрицы перехода:

$$\langle \mathbf{r}|\mathbf{p}\rangle = \langle \mathbf{r}|e^{(i\hbar^{-1}\mathbf{p}\hat{\mathbf{r}})}|0\rangle_p.$$

Далее вспомним, что если $\hat{f}|f\rangle = f|f\rangle$, то $F(\hat{f})|f\rangle = F(f)|f\rangle$, поэтому

$$\langle \mathbf{r}|e^{(i\hbar^{-1}\mathbf{p}\hat{\mathbf{r}})} = e^{(i\hbar^{-1}\mathbf{p}\mathbf{r})}\langle \mathbf{r}|.$$

Таким образом получаем:

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle = e^{(i\hbar^{-1}\mathbf{p}\mathbf{r})} \langle \mathbf{r} | 0 \rangle_p.$$

Выразим в полученной формуле вектор бра через “основной” и получим

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle = e^{(i\hbar^{-1}\mathbf{p}\mathbf{r})} {}_r \langle 0 | e^{(i\hbar^{-1}\mathbf{r}\hat{\mathbf{p}})} | 0 \rangle_p = e^{(i\hbar^{-1}\mathbf{p}\mathbf{r})} {}_r \langle 0 | 0 \rangle_p. \quad (8.10)$$

Осталось найти константу ${}_r \langle 0 | 0 \rangle_p$. Для этого воспользуемся условием нормировки и полноты системы собственных векторов:

$$\delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') = \langle \mathbf{p} | \mathbf{p}' \rangle = \int d\mathbf{r} \langle \mathbf{p} | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \mathbf{p}' \rangle.$$

Подставляя полученное выражение для матрицы перехода (8.10), получаем:

$$|{}_r \langle 0 | 0 \rangle_p|^2 \int d\mathbf{r} e^{(i\hbar^{-1}(\mathbf{p}' - \mathbf{p})\mathbf{r})} = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}').$$

Подставляя известное значение интеграла, получаем искомый нормировочный множитель:

$$|{}_r \langle 0 | 0 \rangle_p|^2 = (2\pi\hbar)^{-3}. \quad (8.11)$$

Теперь можем записать окончательное выражение для матрицы перехода или нормированной на δ -функцию волновую функцию свободной частицы:

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle = \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\hbar^{-1}\mathbf{p}\mathbf{r}}. \quad (8.12)$$

Подставим теперь в формулу (8.5) полученное выражение для матрицы перехода (8.12). Поскольку матрица оператора импульса в собственном представлении есть δ -функция, один интеграл по \mathbf{p}' сразу “снимается” и получаем:

$$\langle \mathbf{r} | \hat{\mathbf{p}} | \mathbf{r}' \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p} \mathbf{p} e^{i\hbar^{-1}\mathbf{p}(\mathbf{r}' - \mathbf{r})} =$$

$$= i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}'} \left(\frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p} e^{i\hbar^{-1}\mathbf{p}(\mathbf{r}'-\mathbf{r})} \right) = i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (8.13)$$

Итак, матрица оператора импульса в координатном представлении есть производная от δ -функции.

Упражнение

Показать, что

$$\langle \mathbf{p} | \hat{\mathbf{r}} | \mathbf{p}' \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}'} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'). \quad (8.14)$$

Теперь можно вернуться к определению вида неизвестной функции $\chi(\mathbf{r})$. Подставляя формулу (3.12) в подынтегральное выражение (3.17), получаем

$$\chi(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r}' \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \right) \psi(\mathbf{r}') = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \psi(\mathbf{r}). \quad (8.15)$$

Таким образом действие оператора импульса на волновую функцию сводится к ее дифференцированию.

Упражнение

Показать, что

$$\langle \mathbf{r} | \hat{\mathbf{p}}^2 | \mathbf{r}' \rangle = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}'^2} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (8.16)$$

Запишем теперь уравнение Шредингера в координатном представлении. Для этого спроектируем уравнение (2.2) на произвольный базисный вектор оператора координаты. Получаем

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{r} | \Psi \rangle = \langle \mathbf{r} | \hat{H} | \Psi \rangle. \quad (8.17)$$

Оператор, стоящий справа, следует преобразовать по уже знакомой схеме. "Расщепим" его единичным оператором

$$\langle \mathbf{r} | \hat{H} | \Psi \rangle = \langle \mathbf{r} | \hat{H} \hat{1}_{\mathbf{r}} | \Psi \rangle = \int d\mathbf{r}' \langle \mathbf{r} | \hat{H} | \mathbf{r}' \rangle \langle \mathbf{r}' | \Psi \rangle = \int d\mathbf{r}' H(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}').$$

Как и следовало ожидать, уравнение формально имеет интегральный вид, однако подставляя результаты, полученные в упражнениях, легко видеть, что уравнение Шредингера в координатном представлении имеет "привычный" дифференциальный вид

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\mathbf{r}, t) + U(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (8.18)$$

Рассмотрим теперь уравнение Шредингера в импульсном представлении. Как мы видели только что, необходимо просто получить вид стационарного уравнения Шредингера, поскольку оператор дифференцирования по времени никаких проблем не вызывает. Итак, по известной схеме проводим преобразования:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p} | \hat{H} | \Psi \rangle &= \langle \mathbf{p} | \hat{H} \hat{1}_{\mathbf{p}} | \Psi \rangle = \int d\mathbf{p}' \langle \mathbf{p} | \hat{H} | \mathbf{p}' \rangle \langle \mathbf{p}' | \Psi \rangle = \\ &= \int d\mathbf{p}' \left(\langle \mathbf{p} | \hat{T} | \mathbf{p}' \rangle + \langle \mathbf{p} | \hat{U} | \mathbf{p}' \rangle \right) \Psi'_{\mathbf{p}}. \end{aligned}$$

С оператором кинетической энергии разобраться так же просто, как и с оператором потенциальной в координатном представлении:

$$\int d\mathbf{p}' \langle \mathbf{p} | \hat{T} | \mathbf{p}' \rangle \Psi'_{\mathbf{p}} = \int d\mathbf{p}' \frac{\mathbf{p}'^2}{2m} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \Psi'_{\mathbf{p}} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \Psi_{\mathbf{p}}. \quad (8.19)$$

Немного сложнее обстоит дело с оператором потенциальной энергии, поскольку матричный элемент $\langle \mathbf{p} | \hat{U}(\hat{\mathbf{r}}) | \mathbf{p}' \rangle$ нам

пока неизвестен. Вновь поступим в соответствии со знакомой схемой: "расщепим" его единичными операторами

$$\langle \mathbf{p} | \widehat{U}(\hat{\mathbf{r}}) | \mathbf{p}' \rangle = \langle \mathbf{p} | \hat{1}_{\mathbf{r}} \widehat{U}(\hat{\mathbf{r}}) \hat{1}_{\mathbf{r}'} | \mathbf{p}' \rangle = \int \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \langle \mathbf{p} | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \widehat{U}(\hat{\mathbf{r}}) | \mathbf{r}' \rangle \langle \mathbf{r}' | \mathbf{p}' \rangle.$$

Вновь появился знакомый матричный элемент оператора потенциальной энергии в координатном представлении и соответствующие волновые функции. После одного интегрирования по координате \mathbf{r}' получаем

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p} | \widehat{U}(\hat{\mathbf{r}}) | \mathbf{p}' \rangle &= \int d\mathbf{r} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} e^{-i\hbar^{-1}(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\mathbf{r}} U(\mathbf{r}) = \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} U_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}. \end{aligned} \quad (8.20)$$

Итак, матричный элемент оператора потенциальной энергии в импульсном представлении есть образ Фурье. Уравнение Шредингера становится интегральным. Сделаем замену переменной: $\mathbf{p} - \mathbf{p}' = \mathbf{q}$, тогда $\mathbf{p}' = \mathbf{p} - \mathbf{q}$ и $d\mathbf{p}' = d\mathbf{q}$. Получаем

$$\frac{\mathbf{p}^2}{2m} \Psi_{\mathbf{p}} + \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi\hbar)^3} U_{\mathbf{q}} \Psi_{\mathbf{p}-\mathbf{q}} = E \Psi_{\mathbf{p}}. \quad (8.21)$$

Как видно из структуры уравнения, в потенциале частица получает или передает импульс, но так, чтобы полный импульс сохранился.

Пример

Найти уровень энергии и волновую функцию связанного состояния частицы в поле одномерной δ -ямы:

$$V(x) = -\frac{\hbar^2}{m} \kappa_0 \delta(x)$$

Решим задачу в p -представлении. Для этого прежде всего заметим, что образ Фурье от потенциала есть просто *const*:

$$V_q = \int e^{-iqx/\hbar} V(x) dx = -\frac{\hbar^2}{m} \chi_0.$$

Таким образом, уравнение Шредингера в импульсном представлении принимает простой вид

$$\frac{p^2}{2m} \psi_p - \frac{\hbar \chi_0}{2\pi m} \int_{-\infty}^{+\infty} dq \psi_{p-q} = E \psi_p.$$

Обозначим

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dq \psi_{p-q} = \int_{-\infty}^{+\infty} dp \psi_p = C.$$

Поскольку $E < 0$, получаем выражение для функции

$$\psi_p = \frac{\hbar \chi_0 C}{2\pi m(p^2/2m + |E|)}.$$

Согласно определению константы C , получаем уравнение, из которого находится уровень энергии:

$$C = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\hbar \chi_0 C}{2\pi m(p^2/2m + |E|)} dp.$$

Вводя безразмерную переменную $p/\sqrt{2m|E|} = z$, получаем

$$\frac{\hbar \chi_0}{\pi \sqrt{2m|E|}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dz}{z^2 + 1} = 1.$$

Поскольку интеграл равен π , получаем уровень энергии:

$$E = -\frac{\hbar^2 \chi_0^2}{2m}.$$

Волновая функция равна

$$\psi_p = \frac{\hbar\kappa_0 C}{\pi(p^2 + \hbar^2\kappa_0^2)}.$$

Неизвестная константа C определяется из условий нормировки:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_p|^2 dp = 1, \quad \text{или} \quad |C|^{-2} = \left(\frac{\hbar\kappa}{\pi}\right)^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp}{(p^2 + \hbar^2\kappa_0^2)^2}.$$

Интеграл легко вычисляется с помощью методов ТФКП: следует взять вычет в полюсе второго порядка, например в верхней полуплоскости в точке $z = i\hbar\kappa_0$, после чего получаем $C = \sqrt{2\pi\hbar\kappa_0}$, и, соответственно, нормированная волновая функция в p -представлении имеет вид

$$\psi_p = \sqrt{\frac{2}{\pi\hbar\kappa_0}} \cdot \frac{1}{p^2/\hbar^2\kappa_0^2 + 1}.$$

1.9 Уравнение Шредингера в произвольном представлении

Мы получили вид основных операторов в координатном (x -представлении) и в импульсном (p -представлении). Используя стандартную схему, нетрудно получить и другие результаты, позволяющие связать общий подход дираковского формализма с представлениями волновой функции.

Изложенное выше можно применить для произвольного представления. Пусть есть некоторый базис $|f_n\rangle$, скажем, набор собственных векторов эрмитова оператора (оператора какой-либо физической величины) \hat{f} :

$$\hat{f}|f_n\rangle = f_n|f_n\rangle. \quad (9.1)$$

Пусть нужно решить стационарное уравнение Шредингера

$$\widehat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle,$$

тогда вектор состояния $|\psi\rangle$ в представлении собственных состояний оператора \hat{f} имеет вид

$$|\psi\rangle = \sum a_n |f_n\rangle, \quad \text{где} \quad a_n = \langle f_n | \psi \rangle. \quad (9.2)$$

Запишем стационарное уравнение Шредингера в “ f -представлении”. Для этого спроектируем его на произвольный вектор базиса $|f_n\rangle$ так же, как мы это делали для p - или x -представлений:

$$\langle f_n | \widehat{H} | \psi \rangle = E \langle f_n | \psi \rangle = a_n E. \quad (9.3)$$

В уравнении (9.3) “расцепим” матричный элемент единичным оператором

$$\langle f_n | \widehat{H} \hat{1}_n | \psi \rangle = \sum_{n'} \langle f_n | \widehat{H} | f_{n'} \rangle \langle f_{n'} | \psi \rangle = \sum_{n'} H_{nn'} a_{n'}.$$

Подставляя результат в уравнение (9.3), получаем однородную систему алгебраических уравнений относительно “переменных” a_n :

$$\sum_{n'} (H_{nn'} - E \delta_{n,n'}) a_{n'} = 0, \quad (9.4)$$

которое имеет нетривиальное решение, если

$$\det (H_{nn'} - E \delta_{n,n'}) = 0. \quad (9.5)$$

Уравнение (9.5), как хорошо известно, называется секулярным. Собственные значения матрицы $H_{nn'}$ определяют энергетический спектр, а коэффициенты a_n определяют нужные суперпозиции для собственных состояний гамильтониана. Эта схема очень полезна для численных расчетов.

Рассмотрим теперь, как осуществляется формальный переход от одного представления к другому. Иными словами, если заданы состояние $|\psi\rangle$ и оператор \widehat{F} в представлении состояний $|f_n\rangle$ (f -представлении), какой вид они имеют в представлении состояний $|g_\alpha\rangle$ (g -представлении)? Вновь сделаем стандартное преобразование:

$$\langle f_n|F|f_{n'}\rangle = F_{nn'}^f = \sum_{\alpha, \text{alpha}'} \langle f_n|g_\alpha\rangle \langle g_\alpha|F|g_{\alpha'}\rangle \langle g_{\alpha'}|f_{n'}\rangle. \quad (9.6)$$

С другой стороны очевидно, что

$$|f_n\rangle = \sum_{\alpha} \langle g_\alpha|f_n\rangle \cdot |g_\alpha\rangle = \sum_{\alpha} S_{\alpha n} |g_\alpha\rangle, \quad (9.7)$$

где $S_{\alpha n}$ – матрица перехода от одного базиса к другому. Тогда уравнение (7.16) перепишется в виде

$$F_{nn'}^f = \sum_{\alpha, \text{alpha}'} S_{n\alpha}^{-1} F_{\alpha\alpha'}^g S_{\alpha' n}, \quad (9.8)$$

где

$$F_{\alpha\alpha'}^g = \langle g_\alpha|F|g_{\alpha'}\rangle \quad - \quad (9.9)$$

– g -представление оператора \widehat{F} .

Иными словами:

$$\widehat{F}(f) = S^{-1}(f \leftarrow g) \widehat{F}(g) S(f \leftarrow g). \quad (9.10)$$

Очевидно, S – унитарная матрица.

Глава 2

Гармонический осциллятор

2.1 Гамильтониан

Эта система хорошо всем известна из классической механики: частица движется под действием гармонической силы $\mathbf{F} = -k\mathbf{r}$. Поскольку $\mathbf{F} = -\nabla U(\mathbf{r})$, в этом случае потенциальная энергия есть $U(\mathbf{r}) = k\mathbf{r}^2/2$. Это изотропный гармонический осциллятор. Нам нужно определить спектр и состояния осциллятора, а для этого необходимо решить стационарное уравнение Шрёдингера:

$$\left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \hat{U}(r) \right) \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}). \quad (1.1)$$

Видно, что в данной задаче разделяются переменные, поскольку

$$\left(\frac{1}{2m}(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) + \frac{1}{2}k(x^2 + y^2 + z^2) \right) \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}). \quad (1.2)$$

Будем искать решение в виде произведения $\psi(\mathbf{r}) = \psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z)$, тогда задача (1.1) распадается на три совершенно одина-

ковых одномерных задачи

$$\left(\frac{\hat{p}_\alpha^2}{2m} + \frac{1}{2} k x_\alpha^2 \right) \psi_\alpha(x_\alpha) = E_\alpha \psi_\alpha(x_\alpha); \quad E = \sum_\alpha E_\alpha. \quad (1.3)$$

Таким образом задача свелась к решению одномерного уравнения Шредингера, которое в координатном представлении имеет вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{kx^2}{2} \psi(x) = E\psi(x). \quad (1.4)$$

Прежде чем приступить к решению уравнения, вспомним основные свойства решения одномерного уравнения Шредингера.

1. Поскольку $U(x)|_{x \rightarrow \infty} \rightarrow \infty$, движение финитно (существуют только связанные состояния);
2. спектр только дискретный и
3. при этом невырожден.

2.2 Операторы a и a^+

Как хорошо известно, классический осциллятор колеблется с частотой $\omega = \sqrt{k/m}$, при этом потенциальная энергия равна $U(x) = m\omega^2 x^2/2$. Уравнение удобно решать, введя безразмерные ("осцилляторные") единицы. Начнем с энергии. Поскольку $\hbar\omega$ имеет размерность энергии, тогда единица энергии

$$E_0 = \hbar\omega, \quad \text{соответственно} \quad E = E_0 \varepsilon. \quad (2.1)$$

Далее обезразмерим уравнение (1.4) на единицу энергии:

$$\left(\frac{p^2}{2m\hbar\omega} + \frac{m\omega^2}{2\hbar} x^2 \right) \psi = \varepsilon \psi. \quad (2.2)$$

Таким образом получаем единицы длины и импульса

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \quad p_0 = \sqrt{\hbar\omega m}. \quad (2.3)$$

Соответственно

$$\hat{x} = x_0 Q, \quad \hat{p} = p_0 P.$$

Гамильтониан осциллятора принимает вид

$$\hat{H} = \frac{1}{2} (\hat{P}^2 + \hat{Q}^2). \quad (2.4)$$

Вычислим коммутатор безразмерных операторов Q и P :

$$[\hat{P}, \hat{Q}] = \frac{1}{p_0 x_0} [\hat{x}, \hat{p}] = -i. \quad (2.5)$$

Гамильтониан (2.4) есть квадратичная форма, которую удобно факторизовать линейным преобразованием. Для простых чисел факторизация элементарна, если ввести комплексные линейные комбинации, например, $a^2 + b^2 = (a + ib)(a - ib)$. Для операторов можно проделать аналогичное линейное преобразование, но при этом надо помнить, что, в отличие от чисел, операторы некоммутативны. Введем *неэрмитовы* операторы

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{Q} + i\hat{P}), \quad \text{и} \quad \hat{a}^+ \equiv (\hat{a})^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{Q} - i\hat{P}). \quad (2.6)$$

Соответственно, обратное преобразование есть:

$$\hat{Q} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a} + \hat{a}^+), \quad \hat{P} = \frac{1}{i\sqrt{2}} (\hat{a} - \hat{a}^+). \quad (2.7)$$

Подставим это линейное преобразование в квадратичную форму:

$$\hat{P}^2 + \hat{Q}^2 = \hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a}. \quad (2.8)$$

Вычислим коммутационное соотношение для операторов \hat{a} и \hat{a}^+ :

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = \frac{1}{2} \left[(\hat{Q} + i\hat{P}), (\hat{Q} - i\hat{P}) \right] = \frac{i}{2} \left([\hat{P}, \hat{Q}] - [\hat{Q}, \hat{P}] \right). \quad (2.9)$$

С учетом коммутатора (2.9) гамильтониан (2.4) принимает вид:

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^+ \hat{a} + \frac{1}{2} \right). \quad (2.10)$$

2.3 Спектр и состояния осциллятора. Энергетическое представление

Итак, нам нужно решить стационарное уравнение Шредингера, т.е. найти спектр и собственные состояния гамильтониана (2.10). Решим эту задачу, используя дираковский формализм в энергетическом представлении:

$$\hat{H}|\nu\rangle = E_\nu|\nu\rangle, \quad (3.1)$$

где E_ν собственные значения состояний $|\nu\rangle$. Значение энергии в собственном состоянии есть просто среднее значение гамильтониана (2.10):

$$E_\nu = \langle \nu | \hat{H} | \nu \rangle = \hbar\omega \left(\langle \nu | \hat{a}^+ \hat{a} | \nu \rangle + \frac{1}{2} \right). \quad (3.2)$$

Очевидно $\langle \nu | \hat{a}^+ \hat{a} | \nu \rangle = \|\hat{a}|\nu\rangle\|^2 = \nu \geq 0$.¹ Итак, спектр осциллятора имеет вид

$$E_\nu = \hbar\omega \left(\nu + \frac{1}{2} \right). \quad (3.3)$$

Осталось только определить, какие значения может принимать неотрицательное число ν . Для этого воспользуемся

¹Напомним, что $(\hat{f}|\psi\rangle)^+ = \langle \psi | \hat{f}^+$.

коммутационными соотношениями (2.9), тем самым покажем, какую важную роль играют коммутационные соотношения для операторов в квантовой механике. Ответим на вопрос, как действуют операторы \hat{a} и \hat{a}^+ на собственные состояния гамильтониана? Для этого достаточно вычислить коммутатор

$$[\hat{a}, \hat{a}^+ \hat{a}] = [\hat{a}, \hat{a}^+] \hat{a} + \hat{a}^+ [\hat{a}, \hat{a}] = \hat{a}. \quad (3.4)$$

Совершенно аналогично получаем

$$[\hat{a}^+, \hat{a}^+ \hat{a}] = -\hat{a}^+. \quad (3.5)$$

Итак, нам нужно определить вектор $\hat{a}|\nu\rangle = |\phi\rangle$. Поскольку состояния $|\nu\rangle$ составляют базис, очевидно можно записать

$$|\phi\rangle = \sum_{\nu} \alpha_{\nu} |\nu\rangle. \quad (3.6)$$

Подействуем на него оператором $\hat{\nu} = \hat{a}^+ \hat{a}$:

$$\hat{\nu}|\phi\rangle = \hat{\nu}\hat{a}|\nu\rangle = (\hat{a}\hat{\nu} - \hat{a}|\nu\rangle) = \hat{a}(\nu-1)|\nu\rangle = (\nu-1)\hat{a}|\nu\rangle = (\nu-1)|\phi\rangle,$$

Итак, в сумме (3.6) осталось только одно слагаемое:

$$|\phi\rangle = \alpha_{\nu-1} |\nu-1\rangle, \quad \text{или} \quad \hat{a}|\nu\rangle = \alpha_{\nu-1} |\nu-1\rangle. \quad (3.7)$$

Таким образом оператор \hat{a} уменьшает квантовое число ν на единицу, это *понижающий* оператор.

Совершенно аналогично имеем

$$\hat{a}^+|\nu\rangle = \tilde{\alpha}_{\nu+1} |\nu+1\rangle. \quad (3.8)$$

Подействовав n раз оператором \hat{a} на состояние $|\nu\rangle$, получим состояние $|\nu-n\rangle$. Поскольку спектр гамильтониана (2.10) дискретен и невырожден, а также $E > 0$, получаем, что

должно существовать *минимальное число* $\nu_0 \geq 0$, соответствующее минимальному значению энергии E_0 . Поскольку это минимальное число соответствует низшему уровню энергии, должно обязательно выполняться условие

$$\hat{a}|\nu_0\rangle = 0 \quad \text{и, соответственно} \quad \langle \nu_0|\hat{a}^+ = 0. \quad (3.9)$$

Тогда получаем

$$\langle \nu_0|\hat{a}^+\hat{a}|\nu_0\rangle = \nu_0 = 0. \quad (3.10)$$

Согласно соотношениям (3.7) получаем, что квантовые числа ν должны быть целыми и неотрицательными: $\nu = n$ и

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle, \quad E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.11)$$

Итак, соотношения (3.11) есть решение задачи в энергетическом представлении.

Найдем теперь коэффициенты в соотношениях (3.7). Поскольку

$$\hat{a}|n\rangle = \alpha_{n-1}|n-1\rangle \rightarrow |\alpha_{n-1}|^2 = n, \quad \text{и} \quad \alpha_{n-1} = e^{i\varphi}\sqrt{n}.$$

Выберем фазу $\varphi = 0$, чтобы коэффициенты были действительными, тогда

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle. \quad (3.12)$$

Коэффициенты $\tilde{\alpha}_n$ определяются следующим образом:

$$\hat{a}^+\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\hat{a}^+|n-1\rangle = \sqrt{n}\tilde{\alpha}_{n-1}|n\rangle = n|n\rangle.$$

Таким образом $\tilde{\alpha}_{n-1} = \sqrt{n}$ или

$$\hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle. \quad (3.13)$$

Состояние $|\nu = 0\rangle \equiv |0\rangle$ для осциллятора основное. Согласно соотношению (3.13) с его помощью можно определить любое возбужденное состояние осциллятора. Действительно,

$$\begin{aligned}\hat{a}^+|0\rangle &= |1\rangle, \\ \hat{a}^+|1\rangle &= \sqrt{2}|2\rangle, & |2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{a}^+|1\rangle = \frac{(\hat{a}^+)^2}{\sqrt{2}}|0\rangle, \\ \hat{a}^+|2\rangle &= \sqrt{3}|3\rangle, & |3\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}}\hat{a}^+|2\rangle = \frac{(\hat{a}^+)^3}{\sqrt{3!}}|0\rangle, \dots\end{aligned}\quad (3.14)$$

Таким образом получаем простое соотношение:

$$|n\rangle = \frac{(\hat{a}^+)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle. \quad (3.15)$$

2.4 Волновые функции

Найдем теперь волновые функции состояний осциллятора, т.е. получим решение задачи в координатном представлении: $\psi_n(x) = \langle x|n\rangle$. Перейдем к координатному представлению в условии

$$\hat{a}|0\rangle = 0 \rightarrow \langle x|\hat{a}|0\rangle = 0.$$

Для этого воспользуемся *стандартной* процедурой теории представлений:

$$\langle x|\hat{a} \int dx'|x'\rangle\langle x'|0\rangle = \int dx' \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle x|\hat{x}|x'\rangle + i\langle x|\hat{p}|x'\rangle) \psi_0(x') = 0.$$

Удобнее сперва решить задачу в безразмерных единицах. Как помним из предыдущих лекций, операторы координаты и импульса в координатном представлении локальны,

поэтому интегральное уравнение преобразуется к дифференциальному:

$$\left(Q + i\left(-i\frac{d}{dQ}\right)\right)\psi(Q) = 0. \quad (4.1)$$

Обыкновенное дифференциальное уравнение первого порядка (4.1) легко решается: получается гауссова экспонента. Нормированная волновая функция равна:

$$\psi_0(Q) = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-\frac{1}{2}Q^2}. \quad (4.2)$$

В размерных единицах:

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{x_0}} e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}} = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}. \quad (4.3)$$

Зная основное состояние, легко построить любое возбужденное:

$$\psi_n(x) = \langle x \left| \frac{(\hat{a}^+)^n}{\sqrt{n!}} \right| x \rangle.$$

В безразмерных единицах получаем:

$$\psi_n(Q) = \frac{1}{2^{n/2}\sqrt{n!}} \left(Q - \frac{d}{dQ}\right)^n e^{-Q^2/2}. \quad (4.4)$$

Соответственно, в размерных единицах

$$\begin{aligned} \psi_n(x) &= \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{n/2} \left(x - \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d}{dx}\right)^n \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right). \end{aligned} \quad (4.5)$$

Как хорошо известно, в результате выполнения дифференцирования появляется предэкспоненциальный многочлен n -й степени – полином Эрмита $H_n(Q)$, для которого гауссова экспонента $\exp(-Q^2/2)$ есть производящая функция.

Совершенно аналогично определяется вид волновой функции осциллятора в импульсном представлении $\langle p|n\rangle = a_n(p)$. Опять сперва определим вид волновой функции основного состояния:

$$\langle p|0\rangle = \langle p|\hat{a} \int dp'|p'\rangle a_0(p') = 0. \quad (4.6)$$

В p -представлении в безразмерных переменных получается такое же дифференциальное уравнение

$$\left(i\frac{d}{dP} + iP\right) a_0(P) = 0, \quad \text{и} \quad a_0(P) = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-P^2/2}. \quad (4.7)$$

В размерных единицах легко получаем

$$a_0(p) = \frac{1}{(\pi m \hbar \omega)^{1/4}} e^{-p^2/2m\hbar\omega}.$$

Результат, впрочем, вполне очевиден, если вспомнить, что образ Фурье от гауссовой экспоненты также есть гауссова экспонента.

Посмотрим теперь, как выглядит соотношение неопределенностей для координаты и импульса в произвольном состоянии осциллятора. Поскольку

$$\langle m|\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\delta_{m,n-1}, \quad \langle m|\hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\delta_{m,n+1}, \quad (4.8)$$

легко получить

$$\langle m|\hat{x}|n\rangle = \frac{x_0}{\sqrt{2}} (\sqrt{n}\delta_{m,n-1} + \sqrt{n+1}\delta_{m,n+1}) \quad (4.9)$$

и аналогичное выражение для оператора импульса.

Таким образом видим, что $\langle n|\hat{x}^{2k+1}|n\rangle = 0$, но $\langle n|\hat{x}^{2k}|n\rangle \neq 0$. Иными словами, средние значения координат и импульса в любом состоянии осциллятора равны нулю. Поэтому определение дисперсии сводится к вычислению средних значений от квадратов этих операторов: $\overline{\Delta x^2} = \overline{x^2}$ и

$\overline{\Delta p^2} = \overline{p^2}$. Получаем:

$$\langle n | \hat{x}^2 | n \rangle = \frac{x_0^2}{2} \langle n | ((\hat{a}^+)^2 + \hat{a}^+ \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^+ + \hat{a}^2) | n \rangle = x_0^2 \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

Совершенно аналогично имеем:

$$\langle n | \hat{p}^2 | n \rangle = p_0^2 \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

Таким образом соотношение неопределенностей принимает вид:

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p)^2 \rangle \equiv \langle x^2 \rangle \langle p^2 \rangle = \hbar^2 \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (4.10)$$

Как видно из формулы (4.10), в основном состоянии достигается минимум соотношения неопределенностей. Иными словами, основное состояние осциллятора представляет собой наиболее классическую систему.

2.5 Когерентные состояния осциллятора

Мы видели, что оператор \hat{a} неэрмитов, однако ни что не мешает нам рассмотреть формально задачу на собственные значения и состояния этого оператора:

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle. \quad (5.1)$$

Здесь α – любое, в общем случае комплексное, число.

Решим сразу эту задачу в координатном представлении. Используем для простоты безразмерные переменные

$$\langle Q | \hat{a} | \alpha \rangle = \alpha \langle Q | \alpha \rangle, \quad (5.2)$$

или

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(Q + \frac{d}{dQ} \right) \psi_\alpha(Q) = \alpha \psi_\alpha(Q). \quad (5.3)$$

Уравнение практически ничем не отличается от уравнения (4.1), поэтому сразу получаем (нормированное) решение

$$\psi_\alpha(Q) = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{\alpha^2 - (\Re\alpha)^2} e^{-\frac{1}{2}(Q - \sqrt{2}\alpha)^2}. \quad (5.4)$$

Как видим, это основное состояние осциллятора, у которого "положение равновесия" (среднее значение координаты x) сдвинуто на $\sqrt{2}\alpha$. Поэтому в этом состоянии минимизируется соотношение неопределенностей. Состояние (5.4) называется *когерентным*. Рассмотрим некоторые его замечательные свойства.

Разложим "неизвестное" состояние $|\alpha\rangle$ по известным базисным состояниям гармонического осциллятора

$$|\alpha\rangle = \sum_n C_{\alpha,n} |n\rangle. \quad (5.5)$$

Подействуем на разложение (5.5) оператором \hat{a} :

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha \sum_n C_{\alpha,n} |n\rangle = \sum_n C_{\alpha,n} \hat{a}|n\rangle = \sum_n C_{\alpha,n} \sqrt{n} |n-1\rangle.$$

Откуда получаем рекуррентное соотношение

$$C_{\alpha,n} = \frac{\alpha}{\sqrt{n}} C_{\alpha,n-1}, \quad \text{или} \quad C_{\alpha,n} = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} C_{\alpha,0}.$$

Таким образом разложение (5.5) принимает вид

$$|\alpha\rangle = C_{\alpha,0} \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle.$$

Отнормируем полученное выражение:

$$1 = \langle\alpha|\alpha\rangle = |C_{\alpha,0}|^2 \sum_n \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} = |C_{\alpha,0}|^2 e^{|\alpha|^2}.$$

Таким образом нормированное разложение (5.5) для когерентного состояния принимает вид

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle. \quad (5.6)$$

Согласно принципу суперпозиции квадраты модулей коэффициентов в разложении (5.6) определяют вероятности обнаружить n -е возбужденное состояние осциллятора с энергией $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$. Видно, что вероятности обнаружения соответствующего состояния осциллятора определяются *распределением Пуассона*:

$$w_n = |C_{\alpha,n}|^2 = \frac{(|\alpha|^2)^n}{n!} e^{-|\alpha|^2}. \quad (5.7)$$

Согласно свойствам распределения Пуассона среднее значение возбужденного n -го уровня (или энергии) определяется как

$$\bar{n} = |\alpha|^2. \quad (5.8)$$

Система когерентных состояний $|\alpha\rangle$ неортогональна, но полна. Действительно,

$$\begin{aligned} \langle\alpha'|\alpha\rangle &= e^{-(1/2)(|\alpha'|^2+|\alpha|^2)} \sum_{n',n} \frac{\alpha'^n (\alpha'^*)^{n'}}{\sqrt{n'!n!}} \langle n'|n\rangle = \\ &= e^{-(1/2)(|\alpha'|^2+|\alpha|^2)} \sum_n \frac{(\alpha\alpha'^*)^n}{n!} = e^{-(1/2)(|\alpha|^2-2\alpha'^*\alpha+|\alpha|^2)} = \\ &= e^{-(1/2)|\alpha-\alpha'|^2}. \end{aligned}$$

Проверим теперь свойство полноты системы состояний. Параметр-переменная $\alpha = \Re\alpha + i\Im\alpha$ принимает все возможные значения в комплексной плоскости, поэтому условие полноты выглядит как

$$\int \frac{d^2\alpha}{\pi} |\alpha\rangle\langle\alpha| = \hat{1}. \quad (5.9)$$

Действительно, убедимся, что оператор (5.9) единичный. Прделаем стандартные выкладки из теории представлений:

$$\langle m|n\rangle = \delta_{mn} = \langle m|\int \frac{d^2\alpha}{\pi} |\alpha\rangle\langle\alpha||n\rangle = \int \frac{d^2\alpha}{\pi} \langle m|\alpha\rangle\langle\alpha|n\rangle.$$

Далее воспользуемся выражением (5.6) и подставим его в подынтегральное выражение:

$$\langle m|n\rangle = \int \frac{\alpha^m(\alpha^*)^n}{\sqrt{m!}\sqrt{n!}} e^{-|\alpha|^2} \frac{d^2\alpha}{\pi}.$$

Сделаем в комплексной плоскости стандартную замену переменных:

$$\alpha = |\alpha|e^{i\varphi}; \quad |\alpha|^2 = y; \quad d^2\alpha = |\alpha|d|\alpha|d\varphi = \frac{1}{2}dyd\varphi.$$

Продолжая выкладки, получаем:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2\pi\sqrt{m!}\sqrt{n!}} \int_0^\infty y^{(m+n)/2} e^{-y} dy \int_0^{2\pi} e^{i(m-n)\varphi} d\varphi = \\ & = \frac{\delta_{mn}}{n!} \int_0^\infty y^n e^{-y} dy = \delta_{mn}. \end{aligned}$$

Таким образом показали, что неортогональная система когерентных состояний полна.

Когерентные состояния широко используются для описания свободного электромагнитного поля в квантовой механике, однако убедиться в этом мы сможем после того, как увидим, как описывается квантованное электромагнитное поле.

Глава 3

Матрица плотности

3.1 Определение матрицы плотности

Вернемся к формуле (1.7) главы 1, определяющей среднее значение оператора, но перепишем ее в дираковских обозначениях, полагая, что можно выбрать какой-либо дискретный базис $|n\rangle$:

$$\bar{f} = \sum_{n,n'} \langle n' | c_{n'}^* \hat{f} c_n | n \rangle = \sum_{n,n'} c_{n'}^* c_n \langle n' | \hat{f} | n \rangle = \sum_{n,n'} f_{n'n} c_{n'}^* c_n. \quad (1.1)$$

В формуле (1.1) произведение коэффициентов разложения (параметров, определяющих состояние в данном базисе) можно рассматривать как матрицу. Обозначим ее так:

$$\rho_{nn'} = c_n c_{n'}^*, \quad (1.2)$$

тогда определение (1.1) перепишется в виде следа произведения матриц оператора и вновь введенной (1.2):

$$\bar{f} = \sum_{n,n'} f_{n'n} \rho_{nn'} \equiv \sum_{n,n'} \rho_{nn'} f_{n'n} = \text{Tr} \hat{f} \hat{\rho}_c, \quad (1.3)$$

где введен новый оператор:

$$\hat{\rho}_c : \rho_{nn'} = \langle n | \hat{\rho} | n' \rangle. \quad (1.4)$$

Вспомним, что произведение векторов состояния в “обратном” порядке (вектор *кет* слева от вектора *бра*), представляет собой оператор, и перепишем определение оператора $\hat{\rho}_c$ в другом виде:

$$\hat{\rho}_c = \sum_{n,n'} c_n c_{n'}^* |n\rangle \langle n'| = \sum_n c_n |n\rangle \sum_{n'} c_{n'}^* \langle n'| = |\Psi\rangle \langle \Psi|. \quad (1.5)$$

Действительно, для так введенного оператора получаем:

$$\langle n | \hat{\rho}_c | n' \rangle = \sum_{k,k'} c_k c_{k'}^* \langle n' | k \rangle \langle k' | n \rangle = \sum_{k,k'} c_k c_{k'}^* \delta_{n',k} \delta_{k',n} = c_n c_{n'}^*.$$

Заметим, что выполняется условие нормировки состояния:

$$\sum_n |c_n|^2 = 1.$$

Введенная нами матрица $\hat{\rho}_c$ эрмитова, действительно:

$$\hat{\rho}_c^+ = \sum_{n,n'} (c_n c_{n'}^*)^* (|n\rangle \langle n'|)^+ = \sum_{n,n'} c_n^* c_{n'} |n'\rangle \langle n| = \hat{\rho}_c. \quad (1.6)$$

Видно, что след матрицы оператора $\hat{\rho}_c$ равен единице:

$$\text{Tr} \hat{\rho}_c = \sum_n c_n c_n^* |n\rangle \langle n| = \sum_n |c_n|^2 \langle n | n \rangle = \sum_n |c_n|^2 = 1, \quad (1.7)$$

соответственно, диагональные матричные элементы определяют *вероятности* обнаружения системы в данном собственном состоянии.

Если квантовая система может быть описана вектором состояния $|\Psi\rangle$, говорят, что она *находится в чистом состоянии*. Для замкнутых систем такая ситуация имеет место

всегда *по определению*. Введенная выше матрица (1.2) называется *матрицей плотности* чистого состояния, а оператор (1.4), соответственно *оператором плотности* или *статистическим оператором*, который удовлетворяет условию чистого состояния:

$$\hat{\rho}_c^2 = (|\Psi\rangle\langle\Psi|)^2 = |\Psi\rangle(\langle\Psi|\Psi\rangle)\langle\Psi| = |\Psi\rangle\langle\Psi| = \hat{\rho}_c. \quad (1.8)$$

Вообще говоря, для чистого состояния введение матрицы плотности совершенно не обязательно, поскольку приводит к переписыванию привычных выражений в другом виде. Однако ситуация радикально изменяется, если мы рассматриваем *незамкнутую систему* или *статистический ансамбль* одинаковых систем. В этом случае систему (ансамбль) уже нельзя описать вектором состояния. Представим себе ансамбль *совершенно одинаковых* замкнутых систем. Мы понимаем, что состояние *каждой* системы определяется вектором состояния $|\Psi\rangle$. В собственных состояниях этой системы определен полный набор квантовых чисел, однако само состояние может быть и несобственным, а некоторой суперпозицией:

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle, \quad (1.9)$$

где n обозначает полный набор величин, определяющих собственное состояние системы. Иными словами, в данном состоянии $|\Psi\rangle$, вообще говоря значения физических величин не определены, а получаются в результате измерений с *определенными* вероятностями $|c_n|^2$. Соответственно, каждая система в рассматриваемом ансамбле *одинаковых* систем тоже может находиться в своем состоянии $|\Psi_a\rangle$ с некоторой вероятностью w_a , уже не имеющей отношения к чисто квантовым свойствам системы, а определяемой *способом создания* (приготовления) данной системы в ансамбле.

Если мы теперь зададимся вопросом: чему равно среднее значение данной физической величины *по ансамблю*?, мы должны будем усреднить выражение (1.1) по всему ансамблю, т.е. просуммировать средние значения данной величины в *каждой системе* ансамбля с вероятностью существования системы в данном состоянии в ансамбле:

$$\bar{f}_{\text{ans}} = \sum_a w_a \bar{f}_a = \sum_a w_a \langle \Psi_a | \hat{f} | \Psi_a \rangle, \quad \sum_a w_a = 1. \quad (1.10)$$

Подставим в определение (1.10) разложение вектора $|\Psi\rangle$ по собственным состояниям (1.9):

$$\bar{f}_{\text{ans}} = \sum_a w_a \sum_{n_a, n'_a} c_{n'_a}^* c_{n_a} \langle n'_a | \hat{f} | n_a \rangle. \quad (1.11)$$

Поскольку все системы ансамбля *совершенно одинаковы*, это означает, что

$$\langle n'_a | \hat{f} | n_a \rangle = \langle n'_{a'} | \hat{f} | n_{a'} \rangle = \langle n' | \hat{f} | n \rangle = f_{n'n}.$$

Следовательно матричный элемент оператора не зависит от суммирования по системам ансамбля, но зависит только от состояния, в котором находится данная система, и его можно вынести из-под знака суммирования по ансамблю:

$$\bar{f}_{\text{ans}} = \sum_{n, n'} \langle n' | \hat{f} | n \rangle \sum_a w_a c_{n'_a}^* c_{n_a} = \sum_{n', n} f_{n'n} \rho_{nn'} = \text{Tr}(\hat{f} \hat{\rho}). \quad (1.12)$$

Здесь введено обозначения для матрицы плотности ансамбля систем (подсистем):

$$\rho_{nn'} = \sum_a w_a c_{n'_a}^* c_{n_a}, \quad (1.13)$$

Соответственно,

$$\hat{\rho} = \sum_{n, n'} \sum_a w_a c_{n'_a}^* c_{n_a} |n\rangle \langle n'|.$$

Вычислим, как и в случае чистого состояния, след матрицы (1.13):

$$\text{Tr} \hat{\rho} = \sum_n \rho_{nn} = \sum_a w_a \sum_n |c_{na}|^2 = \sum_a w_a = 1. \quad (1.14)$$

Здесь мы учли условие нормировки состояния каждой системы в ансамбле и вновь получили условие (1.7).

Вычислим теперь квадрат матрицы (1.13):

$$\hat{\rho}^2 = \sum_{a,a'} \sum_{n_a, n'_a} \sum_{m_a, m'_a} w_a w_{a'} c_{n'_a}^* c_{n_a} c_{m'_a}^* c_{m_a} |n_a\rangle \langle n'_a| |m_a\rangle \langle m'_a|.$$

Поскольку состояния в *различных системах ансамбля* ортогональны $\langle n'_a | m_a \rangle = \delta_{n'm}$, получаем

$$\begin{aligned} \hat{\rho}^2 &= \sum_a w_a^2 \sum_{n_a, m_a, m'_a} c_{m_a}^* c_{n_a} c_{m'_a}^* c_{m_a} |n\rangle \langle m'| = \\ &= \sum_a w_a^2 \sum_{n_a, m'_a} c_{n_a} c_{m'_a}^* |n\rangle \langle m'| \sum_m |c_{m_a}|^2 = \\ &= \sum_a w_a^2 \sum_{n_a, m'_a} c_{m'_a}^* c_{n_a} |n\rangle \langle m'| \neq \rho. \end{aligned}$$

Возьмем теперь след от квадрата матрицы плотности:

$$\text{Tr} \rho^2 = \sum_a w_a^2 \sum_{n_a} |c_{n_a}|^2 = \sum_a w_a^2 \leq 1 \quad (1.15)$$

Как видим, при определении различных физических величин ансамбль систем можно теперь рассматривать как одну систему находящуюся в некотором состоянии, которое, однако нельзя выразить в виде суперпозиции (1.9), и поэтому оно не может быть определено в виде некоторого вектора. Действительно, при исследовании системы

мы получаем не просто собственные значения с определенными *квантовыми вероятностями*, но еще с вероятностями *статистическими*, определяющими вклад данной системы в ансамбль. Такие состояния называют *смешанными*, их можно описать матрицей плотности, которую *всегда* можно представить в виде:

$$\hat{\rho} = \sum_a w_a |\chi\rangle\langle\chi|, \quad (1.16)$$

где $|\chi\rangle$ собственные состояния подсистем – суперпозиции (1.9). Если все $w_a = 0$ за исключением одного, приходим к представлению матрицы плотности для чистого состояния (1.5).

Смешанные состояния возникают и при рассмотрении незамкнутых систем, т.е. подсистем некоторых систем. Естественно, в общем случае рассматриваемая подсистема взаимодействует со всей системой, однако вектор состояния *полной* системы можно всегда представить в виде суперпозиции состояний *двух не взаимодействующих* систем: интересующей нас подсистемы и остальной части полной системы. Обозначим состояния подсистемы латинскими буквами $|n\rangle$, а состояния остальной части системы – греческими $|\alpha\rangle$, тогда состояние *всей* системы можно записать в виде:

$$|\Psi\rangle = \sum_{n,\alpha} c_{n\alpha} |n\rangle|\alpha\rangle. \quad (1.17)$$

Пусть теперь нам нужно определить значение какой-либо величины f , описывающей подсистему, тогда этой величине соответствует оператор, действующий *только на состояния подсистемы*. Однако среднее значение данного

оператора мы должны взять *по состоянию всей системы*:

$$\begin{aligned}\bar{f} &= \langle \Psi | \hat{f} | \Psi \rangle = \sum_{n', \alpha', n, \alpha} c_{n'\alpha'}^* c_{n\alpha} \langle \alpha' | \langle n' | \hat{f} | n \rangle | \alpha \rangle = \\ &= \sum_{n', n} |\langle n' | \hat{f} | n \rangle| \sum_{\alpha', \alpha} c_{n'\alpha'}^* c_{n\alpha} \langle \alpha' | \alpha \rangle.\end{aligned}\quad (1.18)$$

Во второй сумме формулы (1.18) стоит скалярное произведение ортогональных векторов, поэтому ее можно рассматривать как усреднение коэффициентов суперпозиции (1.17) по состояниям части системы *внешней*, по отношению к подсистеме. В результате такого усреднения остается матрица, зависящая только от состояний подсистемы:

$$\rho_{n, n'} = \sum_{\alpha} c_{n'\alpha}^* c_{n\alpha}, \quad (1.19)$$

которую теперь можно также рассматривать как матрицу оператора $\hat{\rho}$ по состояниям подсистемы:

$$\rho_{n, n'} = \langle n | \hat{\rho} | n' \rangle.$$

Соответственно, перепишем выражение (1.18) с помощью так введенной *матрицы плотности подсистемы*:

$$\begin{aligned}\bar{f} &= \langle \hat{f} \rangle = \sum_{n', n} \langle n | \hat{f} | n' \rangle \langle n' | \hat{\rho} | n \rangle = \\ &= \sum_n \langle n | \hat{f} \left(\sum_{n'} |n'\rangle \langle n'| \right) \hat{\rho} | n \rangle \equiv Tr(\hat{f} \hat{\rho}).\end{aligned}\quad (1.20)$$

Здесь мы воспользовались свойством полноты системы состояний:

$$\sum_{n'} |n'\rangle \langle n'| = \hat{I}.$$

Как из формулы (1.19), так и из определения (1.20) легко получить, что

$$Tr \rho = \sum_{n, \alpha} |c_{n\alpha}|^2 = 1, \quad (1.21)$$

и для $\hat{f} = 1$:

$$\langle 1 \rangle = 1 = \text{Tr} \rho \hat{1} = \text{Tr} \rho.$$

3.2 Свойства матрицы плотности

Сформулируем полученные результаты в виде общей сводки свойств матрицы плотности.

1. Матрица плотности эрмитова:

$$\hat{\rho}^+ = \hat{\rho}, \quad \text{т.е.} \quad \rho_{n'n} = \rho_{nn'}^*. \quad (2.1)$$

Из эрмитовости матрицы плотности следует действительность диагональных матричных элементов ρ_{nn} .

2. След матрицы плотности равен единице:

$$\text{Tr} \hat{\rho} = \sum_n \rho_{nn} = 1. \quad (2.2)$$

3. Эрмитова матрица плотности всегда может быть приведена к диагональному виду с помощью некоторого унитарного преобразования \hat{S} :

$$\rho_n \delta_{nn'} \equiv w_n \delta_{nn'} = \sum_{kk'} S_{kn} \rho_{kk'} S_{k'n'}^+. \quad (2.3)$$

Следовательно, оператор $\hat{\rho}$ *всегда* можно представить в диагональной форме:

$$\hat{\rho} = \sum_{\nu} \rho_{\nu} |\nu\rangle \langle \nu|. \quad (2.4)$$

4. Матрица плотности положительно определена. Это следует из требования неотрицательности среднего значения оператора с неотрицательными собственными значениями. Действительно, рассмотрим среднее

значение оператора $\hat{\rho}$ в произвольном состоянии системы $|\chi\rangle$, выбрав диагональное представление (1.6):

$$\langle\chi|\hat{\rho}|\chi\rangle = \sum_{\nu} \rho_{\nu} \langle\chi|\nu\rangle \langle\nu|\chi\rangle = \sum_{\nu} \rho_{\nu} |\langle\nu|\chi\rangle|^2 \geq 0, \quad (2.5)$$

в силу эрмитовости матрицы плотности.

Из этого свойства следует физический смысл диагональных матричных элементов. Поскольку рассмотренный оператор выделяет определенное состояние системы (подсистемы), его среднее значение имеет смысл вероятности обнаружения системы в данном состоянии, следовательно, диагональные матричные элементы матрицы плотности имеют смысл *вероятности* нахождения системы в чистом состоянии $|k\rangle$, т.е.

$$\rho_{kk} = w_k. \quad (2.6)$$

Соответственно, $Tr\rho = \sum_k w_k = 1$ – есть полная вероятность нахождения системы в каком-либо из всех возможных ортогональных состояний.

5. Свойство 3) с учетом свойств 2) и 4) приводит к важному следствию:

$$\begin{aligned} \sum_n \rho_{nn}^2 &= \sum_n w_n^2 \leq \left(\sum_n w_n \right)^2 = \\ &= \left(\sum_n \rho_{nn} \right)^2 = (Tr\rho)^2 = 1. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Понимая, что левую часть соотношения (7.14) можно записать в представлении, когда матрица плотности недиагональна, получаем обобщение:

$$Tr(\hat{\rho})^2 = \sum_{nn'} |\rho_{nn'}|^2 \leq 1. \quad (2.8)$$

Равенство выполняется только в единственном случае, когда система находится в *чистом состоянии*.

Величина (2.8) таким образом имеет очень важное значения для характеристики системы, поэтому имеет свое обозначение:

$$\text{Tr}(\hat{\rho})^2 = \mu \quad - \quad \text{параметр чистоты.} \quad (2.9)$$

В квантовой механике большую роль играют амплитуды перехода между различными состояниями. Например, пусть система находится в состоянии $|\psi\rangle$, тогда амплитуда перехода в состояние $|\varphi\rangle$ есть скалярное произведение этих двух состояний, соответственно, вероятность перехода из исходного состояния в другое есть квадрат модуля амплитуды перехода:

$$w_{\psi \rightarrow \varphi} = |\langle \psi | \varphi \rangle|^2.$$

Как помним, матрица плотности чистого состояния определяется простой формулой (1.5), поэтому для вероятности перехода можно записать:

$$\begin{aligned} w_{\psi \rightarrow \varphi} &= \langle \psi | \varphi \rangle \langle \psi | \varphi \rangle^* = \langle \psi | (|\varphi\rangle\langle\varphi|) | \psi \rangle = \\ &= \text{Tr} |\varphi\rangle\langle\varphi| |\psi\rangle\langle\psi| = \text{Tr} \left(\rho_{\varphi} \rho_{\psi}^+ \right). \end{aligned} \quad (2.10)$$

Для определения вероятности перехода (2.10) есть свой термин *fidelity*.

3.3 Эволюция во времени. Уравнение Лиувилля

Уравнение, определяющее временную эволюцию матрицы плотности получим, выбрав *для определенности* вид матрицы плотности для ансамбля подсистем (некогерентной

смеси) (1.13), указав явную зависимость состояний от времени:

$$\hat{\rho}(t) = \sum_a w_a |\psi_a(t)\rangle \langle \psi_a(t)|. \quad (3.1)$$

Вспомним, что изменение состояния во времени определяется оператором эволюции, и перепишем выражение (3.1) в виде:

$$\begin{aligned} \hat{\rho}(t) &= \sum_a w_a U(t) |\psi_a(t_0)\rangle \langle \psi_a(t_0)| U^\dagger(t) = \\ &= U(t) \left(\sum_a w_a |\psi_a(t_0)\rangle \langle \psi_a(t_0)| \right) U^\dagger(t) = U(t) \hat{\rho}(t_0) U^\dagger(t). \end{aligned} \quad (3.2)$$

Продифференцируем уравнение (3.2) по времени, подставим определение производных по времени для оператора эволюции и получим:

$$\frac{\partial \hat{\rho}(t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}(t)]. \quad (3.3)$$

Уравнение (3.3) называется *уравнением Лиувилля* и оно эквивалентно уравнению Шредингера для состояния.

Запишем теперь определение среднего значения какой-либо величины:

$$\langle A \rangle = Tr \left(\hat{A} \hat{\rho}(t) \right) \equiv Tr \left(\hat{A} U(t) \hat{\rho}(t_0) U^\dagger(t) \right).$$

Вспоминая, что под знаком Tr операторы можно циклически переставлять, получим:

$$\langle A \rangle = Tr \left(U^\dagger(t) \hat{A} U(t) \hat{\rho}(t_0) \right) = Tr \left(\hat{A}_H(t) \hat{\rho}(t_0) \right), \quad (3.4)$$

где $\hat{A}_H(t)$ – оператор в представлении Гейзенберга.

Для консервативной системы, когда гамильтониан явно от времени не зависит, оператор эволюции имеет простой вид, и можно записать:

$$\hat{\rho}(t) = e^{-i\hbar^{-1}\hat{H}t} \hat{\rho}(t_0) e^{i\hbar^{-1}\hat{H}t}. \quad (3.5)$$

Если состояния, представляющие матрицу плотности обладают определенной энергией (собственные состояния гамильтониана – решения стационарного уравнения Шредингера), получаем, что диагональные матричные элементы не зависят от времени, а недиагональные осциллируют с частотами перехода между соответствующими уровнями энергии:

$$\rho_{nk}(t) = \rho_{nk}(t_0)e^{i\hbar^{-1}(E_k - E_n)t} = \rho_{nk}(t_0)e^{i\omega_{kn}t}. \quad (3.6)$$

Среднее значение величины (3.4) теперь можно записать как:

$$\langle A \rangle = \sum_{k,n} A_{kn} \rho_{nk}(t_0) e^{i\omega_{kn}t}. \quad (3.7)$$

В заключение этого параграфа полезно записать операторное уравнение (3.3) в виде системы уравнений в каком-либо определенном дискретном базисе:

$$i\hbar \frac{\partial \rho_{nk}}{\partial t} = \sum_m (H_{nm} \rho_{mk} - \rho_{nm} H_{mk}). \quad (3.8)$$

3.4 Равновесная матрица плотности

Итак, мы видели, что матрица плотности позволяет описывать свойства ансамбля систем и, таким образом, имеет то же значение, что и вектор состояния в квантовой механике при описании замкнутых систем. Следовательно, матрица плотности должна содержать всю необходимую информацию с точки зрения статистической механики. Статистические свойства систем характеризуются такой важнейшей характеристикой как *энтропия*, которая определяется как

$$S = - \sum_k w_k \ln w_k, \quad (4.1)$$

где w_k – вероятность нахождения системы в *состоянии* k . Естественно, поэтому выполняются условия

$$\sum_k w_k = 1, \quad 0 \leq w_k \leq 1, \quad (4.2)$$

где суммирование ведется *по всем состояниям*.

Смысл энтропии состоит в том, что ее можно интерпретировать как некоторую меру *недостатка информации* о системе. В частности, если система находится в чистом состоянии $|\nu_0\rangle$, отлично от нуля только $w_{\nu_0} = 1$. В этом случае энтропия равна нулю: информация максимальна, т.е. полная с точки зрения (квантовой) механики.

Представим себе теперь ансамбль систем, которые с равными вероятностями находятся *во всех возможных* состояниях. В таком случае энтропия максимальна, поскольку мы обладаем минимальной информацией. Убедимся в этом, воспользовавшись методом неопределенных множителей Лагранжа, проварьировав выражение (4.1) при условии (4.2):

$$\sum_k (1 + \ln w_k + \lambda) \delta w_k = 0, \quad (4.3)$$

где λ – неопределенный множитель.

Поскольку каждая из вариаций δw_k независима, уравнение (4.3) удовлетворяется, если

$$\ln w_k = -(1 + \lambda).$$

Как видим, вероятность не зависит от состояния, мы не можем различить состояния систем в ансамбле, а поэтому не обладаем никакой информацией. Поскольку λ не зависит от состояния, энтропия с полученными вероятностями максимальна.

Вспомним теперь основные свойства матрицы плотности, рассмотренные в параграфе (3.2), а именно, свойство

(7.7) и (7.8). Следовательно можно выразить энтропию согласно определению (4.1) через матрицу плотности в *диагональном представлении*:

$$S = - \sum_{\nu} \rho_{\nu} \ln \rho_{\nu}. \quad (4.4)$$

Обратим внимание, что выражение (4.4) можно переписать, используя выражение (1.6):

$$S = - \sum_{\nu, \nu', \nu''} \langle \nu' | (\rho_{\nu} | \nu \rangle \langle \nu |) | \nu'' \rangle \langle \nu'' | (\ln \rho_{\nu} | \nu \rangle \langle \nu |) | \nu' \rangle = -Tr \hat{\rho}_{\nu} \ln \hat{\rho}_{\nu}.$$

Здесь $\hat{\rho}_{\nu}$ обозначает матрицу плотности, записанную в диагональном представлении.

Поскольку от диагонального представления всегда можно перейти к произвольному, запишем теперь определение энтропии через *оператор* $\hat{\rho}$ в общем виде:

$$S = -Tr \hat{\rho} \ln \hat{\rho}. \quad (4.5)$$

В дальнейшем будем использовать термины как *матрица плотности*, так и *статистический оператор*.

Определим теперь вид статистического оператора в рассмотренном выше случае, когда все состояния ансамбля систем равновероятны. Проварьируем определение (4.5) при условии равенства единице следа оператора:

$$Tr(1 + \ln \hat{\rho} + \lambda) \delta \hat{\rho} = 0,$$

или

$$\hat{\rho} = \frac{1}{1 + \lambda} \quad - \quad c - \text{число}. \quad (4.6)$$

Зададим теперь дополнительные сведения об ансамбле систем. А именно, пусть ансамбль характеризуется *энергией*, которая согласно свойствам матрицы плотности *по определению* есть

$$\langle E \rangle = E = Tr \hat{\rho} \hat{H}, \quad (4.7)$$

где \hat{H} – гамильтониан систем ансамбля.

Вновь потребуем максимума энтропии, но теперь еще при одном дополнительном условии (4.7):

$$Tr(1 + \ln \hat{\rho} + \lambda + \beta \hat{H}) \delta \hat{\rho} = 0.$$

Поскольку все вариации произвольны, получаем

$$\ln \hat{\rho} = -1 - \lambda - \beta \hat{H},$$

или

$$\hat{\rho} = e^{-(1+\lambda)} e^{-\beta \hat{H}}. \quad (4.8)$$

Первая экспонента в формуле (4.8) может быть выражена через *статистическую сумму* из условия нормировки матрицы плотности $Tr \hat{\rho} = 1$:

$$e^{1+\lambda} Tr e^{-\beta \hat{H}} \equiv Z. \quad (4.9)$$

Можно теперь переписать выражение (4.8), используя определение (4.9):

$$\hat{\rho} = Z^{-1} e^{-\beta \hat{H}}. \quad (4.10)$$

Оставшийся неопределенный параметр β находится из условия (4.7):

$$\langle E \rangle = Z^{-1} Tr \hat{H} e^{-\beta \hat{H}} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z. \quad (4.11)$$

Таким образом, параметр β определяется величиной средней энергии. В термодинамическом пределе

$$\beta = \frac{1}{T}. \quad (4.12)$$

Здесь и далее мы измеряем температуру в единицах энергии (или полагаем постоянную Больцмана $k = 1.$)

4.5 Уравнение для матрицы плотности в координатном представлении

Запишем уравнение Лиувилля (3.3) для матрицы плотности в координатном представлении, воспользовавшись методами теории представлений, изложенными в главе 1¹:

$$\langle x | \hat{\rho}(t) | x' \rangle + i \langle x | \hat{H} \hat{\rho}(t) | x' \rangle - i \langle x | \hat{\rho}(t) \hat{H} | x' \rangle = 0. \quad (5.1)$$

Обозначим для краткости матричные элементы в координатном представлении как:

$$\langle x | \hat{A} | x' \rangle \equiv A_{xx'}. \quad (5.2)$$

В обозначениях (7.5) уравнение (5.1) принимает вид:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_{xx'}(t) + i \sum_y H_{xy} \rho_{yx'} - i \sum_y \rho_{xy} H_{yx'} = 0 \quad (5.3)$$

Для непрерывного базиса все суммы имеют смысл интегральных и поэтому заменяются интегралами, а матричные элементы представляются ядрами этих интегральных операторов. Следовательно, можно записать в координатном представлении:

$$\hat{H}(x) \rho(x, y) \equiv \int H(x, x') \rho(x', y) dx' = \sum_{x'} H_{xx'} \rho_{x'y}. \quad (5.4)$$

Иными словами, можно суммирование обозначить как

$$\sum_{x'} H_{xx'} \rho_{x'y} = \hat{H}(x) \rho(x, y). \quad (5.5)$$

¹В этом параграфе мы полагаем все константы единицами: $\hbar = 1$, $m = 1$ и т.д.

Совершенно аналогично записывается это соотношение в “обратном” порядке:

$$\sum_y \rho_{xy} H_{yx'} = \widehat{H}^{tr}(x') \rho(x, x', t). \quad (5.6)$$

Таким образом, уравнение Лиувилля в координатном представлении (5.3) принимает вид:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, x', t) + i\widehat{H}(x) \rho(x, x', t) - i\widehat{H}^{tr}(x') \rho(x, x', t) = 0 \quad (5.7)$$

Гамильтониан частицы в координатном представлении имеет дифференциальную форму:

$$\widehat{H}(x) = \frac{\hat{p}^2}{2} + U(x) = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \quad (5.8)$$

и в силу эрмитовости

$$\widehat{H}^{tr}(x) = \widehat{H}(x),$$

поэтому уравнение (5.7) можно переписать в форме дифференциального уравнения:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho(x, x', t) - \frac{i}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x'^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \rho(x, x', t) + \\ + (U(x) - U(x')) \rho(x, x', t) = 0. \end{aligned} \quad (5.9)$$

Глава 4

Представления матрицы плотности

4.1 Функция Вигнера

В предыдущих главах мы видели, что между классическим и квантовым описанием систем существует принципиальное отличие: вместо физических величин, задаваемых числовыми функциями, определены операторы, подчиняющиеся определенной алгебре. Физические величины определяются средними значениями соответствующих операторов. Принципиальное отличие заключается в том, что операторы между собой не всегда коммутируют, что означает невозможность одновременной измеримости соответствующих физических величин. В классической механике таких проблем нет. Однако в 1932 году Е. Вигнер открыл такое представление в квантовой механике, которое оказывается наиболее близким к классическим представлениям. Подход Вигнера затем в 1949 году был более полно развит Дж. Мойалем. Такое представление задается функцией Вигнера $W(q, p)$, где q и p – обобщенные координаты и импульс

частицы (физические величины).

Запишем (одночастичную) матрицу плотности в координатном представлении, считая спектр дискретным:

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_n w_n \varphi_n(\mathbf{r}) \varphi_n^*(\mathbf{r}'). \quad (1.1)$$

Как помним, диагональный элемент матрицы плотности в координатном представлении определяет вероятность обнаружить частицу в точке с координатой \mathbf{r} .

Совершенно аналогично в импульсном представлении диагональный элемент $\rho(\mathbf{p}, \mathbf{p})$ определяет вероятность обнаружить частицу с значением импульса \mathbf{p} . Установим связь между этими величинами.

Запишем матрицу плотности в импульсном представлении:

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{p}, \mathbf{p}') &= \sum_n w_n \varphi_n(\mathbf{p}) \varphi_n^*(\mathbf{p}') = \\ &= \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \exp\left(\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\mathbf{r} - \mathbf{p}'\mathbf{r}')\right). \end{aligned} \quad (1.2)$$

Матрица плотности в координатном представлении удобна для вычисления средних значений функций координат:

$$\langle V(\mathbf{r}) \rangle = \frac{Tr \widehat{V} \rho}{Tr \rho} = \frac{\int d\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}) V(\mathbf{r})}{\int d\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r})}. \quad (1.3)$$

Импульсное представление удобно для вычисления средних значений функций импульсов (например, кинетической энергии):

$$\langle W(\mathbf{p}) \rangle = \frac{Tr \widehat{W} \rho}{Tr \rho} = \frac{\int (d\mathbf{p}/(2\pi\hbar)^3) \rho(\mathbf{p}, \mathbf{p}) W(\mathbf{p})}{\int (d\mathbf{p}/(2\pi\hbar)^3) \rho(\mathbf{p}, \mathbf{p})}. \quad (1.4)$$

В классической механике такая задача решалась бы с помощью *одной* функции распределения в *фазовом* пространстве $F(\mathbf{p}, \mathbf{r})$, которая имеет смысл плотности вероятности.

Причем распределение вероятности в координатном пространстве определяется просто частичным интегрированием по импульсному пространству:

$$f(\mathbf{r}) = \int F(\mathbf{p}, \mathbf{r}) \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}, \quad (1.5)$$

а распределение вероятности в импульсном пространстве, соответственно, интегрированием по координатной части фазового пространства:

$$f(\mathbf{p}) = \int F(\mathbf{p}, \mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (1.6)$$

Возникает естественное желание построить и в квантовой механике такую функцию распределения, которая бы удовлетворяла условиям (1.5) и (7.2). Для этого рассмотрим диагональные компоненты матрицы плотности в импульсном представлении (1.2), которые определяют вероятности и должны соответствовать функции распределения. Поскольку искомая функция должна одновременно зависеть как от импульсов, так и от координат, проведем “частичное” преобразование Фурье в формуле (1.2), рассматривая формально матрицу плотности в координатном представлении как функцию переменных $(\mathbf{x} + \mathbf{x}')/2$ и $(\mathbf{x} - \mathbf{x}')/2$. Переходя затем к новым обозначениям $\mathbf{x}/2 \rightarrow \mathbf{r}$, $\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{u}$, и оставляя преобразование только по переменной \mathbf{u} , получаем *функцию Вигнера*:

$$W(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = \int d\mathbf{u} \rho \left(\mathbf{r} + \frac{\mathbf{u}}{2}, \mathbf{r} - \frac{\mathbf{u}}{2} \right) e^{-i\hbar^{-1}\mathbf{p}\mathbf{u}}. \quad (1.7)$$

Формула (1.7) обратима, и для матрицы плотности можно записать выражение через функцию Вигнера:

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} W \left(\mathbf{p}, \frac{\mathbf{r} + \mathbf{r}'}{2} \right) e^{i\hbar^{-1}\mathbf{p}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}. \quad (1.8)$$

Упражнение. Получить обратное преобразование (1.8).

Убедимся, что функция Вигнера удовлетворяет необходимым условиям. Прежде всего проинтегрируем по импульсу:

$$\begin{aligned} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} W(\mathbf{p}, \mathbf{r}) &= \int d\mathbf{u} \rho\left(\mathbf{r} + \frac{\mathbf{u}}{2}, \mathbf{r} - \frac{\mathbf{u}}{2}\right) \left(\int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} e^{-i\hbar^{-1}\mathbf{p}\mathbf{u}} \right) = \\ &= \int d\mathbf{u} \rho\left(\mathbf{r} + \frac{\mathbf{u}}{2}, \mathbf{r} - \frac{\mathbf{u}}{2}\right) \delta(\mathbf{u}) = \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}) = f(\mathbf{r}). \end{aligned}$$

Таким образом, получили, что первое условие (1.5) выполняется. Для проверки выполнения второго условия (7.2) сделаем выкладки в “обратном” порядке:

$$\begin{aligned} f(\mathbf{p}) = \rho(\mathbf{p}, \mathbf{p}) &= \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\right) = \\ &= \int d\mathbf{x} d\mathbf{u} \rho\left(\mathbf{x} + \frac{\mathbf{u}}{2}, \mathbf{x} - \frac{\mathbf{u}}{2}\right) e^{-i\hbar^{-1}\mathbf{p}\mathbf{u}} = \int d\mathbf{x} W(\mathbf{p}, \mathbf{x}). \end{aligned}$$

При преобразовании интеграла мы сделали замену переменных:

$$\mathbf{r} = \mathbf{x} + \frac{\mathbf{u}}{2}, \quad \mathbf{r}' = \mathbf{x} - \frac{\mathbf{u}}{2}.$$

Легко видеть, что введенная таким образом функция Вигнера $W(\mathbf{p}, \mathbf{r})$ позволяет получать средние значения величин, зависящих только либо от координат, либо от импульсов. Нельзя получить правильный результат для функций, зависящих одновременно и от импульсов, и от координат. В этом нет ничего удивительного, поскольку координаты и импульс в квантовой механике связаны соотношением неопределенностей. Рассмотрим этот вопрос более подробно.

4.2 Некоторые свойства преобразования Фурье. Уравнение Мойяла для функции Вигнера

Дальнейшее изложение материала в той или иной степени будет связано с преобразованием Фурье матрицы плотности, а также соответствующих операторов. Поэтому удобно вспомнить некоторые полезные соотношения. Для простоты будем рассматривать одномерное преобразование. На многомерный случай все результаты можно легко распространить.

Пусть дано преобразование Фурье некоторой функции $f(x)$, т.е.¹

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \tilde{f}(k) e^{ikx} dk \quad (2.1)$$

и, соответственно,

$$\tilde{f}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int f(x) e^{-ikx} dx. \quad (2.2)$$

Продифференцируем выражение (7.3) по координате и получим:

$$\frac{\partial}{\partial x} f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int [ik \tilde{f}(k)] e^{ikx} dk.$$

Иными словами, мы можем формально установить соответствие:

$$\frac{\partial}{\partial x} f(x) \longrightarrow ik \tilde{f}(k). \quad (2.3)$$

Умножим теперь выражение (7.3) на x :

$$xf(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \tilde{f}(k) x e^{ikx} dk. \quad (2.4)$$

¹Мы здесь применяем так называемое симметричное преобразование Фурье, хотя в физике при переходе от координатного к импульсному представлению чаще всего используется несимметричное преобразование.

Поскольку можно представить

$$xe^{ikx} = -i \frac{\partial}{\partial k} \left(e^{ikx} \right),$$

выражение (2.4) можно переписать как

$$xf(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \tilde{f}(k) \left(-i \frac{\partial}{\partial k} \right) e^{ikx} dk. \quad (2.5)$$

Беря интеграл по частям и считая значение подынтегральной функции на бесконечно удаленных пределах равным нулю, получаем:

$$xf(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \left(i \frac{\partial}{\partial k} \tilde{f}(k) \right) e^{ikx} dk. \quad (2.6)$$

Следовательно, имеет место соответствие:

$$xf(x) \longrightarrow i \frac{\partial}{\partial k} \tilde{f}(k). \quad (2.7)$$

Можно сказать, если имеется некоторое выражение

$$\Phi \left(x, \frac{\partial}{\partial x} \right) f(x), \quad (2.8)$$

его образ Фурье дается выражением

$$\Phi \left(i \frac{\partial}{\partial k}, ik \right) \tilde{f}(k). \quad (2.9)$$

Применим теперь полученные соотношения для матрицы плотности в координатном представлении и функции Вигнера. Действительно, как следует из формул (1.7) и (1.8), рассматриваемые функции связаны между собой преобразованием Фурье. Запишем указанные соотношения в

одномерном случае в безразмерной форме, как и все остальное в этом параграфе, в момент времени $t = 0$:

$$W(q, p) = \int \rho \left(q + \frac{u}{2}, q - \frac{u}{2} \right) e^{-ipu} du \quad (2.10)$$

и обратное преобразование:

$$\rho(x, x') = \int W \left(\frac{x + x'}{2}, p \right) e^{ip(x-x')} dp. \quad (2.11)$$

Умножим соотношение (2.11) на x и занесем эту переменную под знак интеграла:

$$x\rho(x, x') = \int W \left(\frac{x + x'}{2}, p \right) x e^{ip(x-x')} dp. \quad (2.12)$$

Возникает соблазн поступить так же, как и в предыдущем случае: продифференцировать по p а затем проинтегрировать по частям. Однако такая простая процедура в данном случае привела бы к ошибке, поскольку функция Вигнера зависит от q и p , следовательно прежде, чем дифференцировать, следует перейти от переменной x к *собственным* переменным. Согласно определению мы должны под интегралом сделать замену: $x = q + (x - x')/2$, после чего выполнить дифференцирование по импульсу p . Итак, перепишем соотношение (2.12) с учетом замечания:

$$\begin{aligned} x\rho(x, x') &= \int W \left(\frac{x + x'}{2}, p \right) \left(q + \frac{x - x'}{2} \right) e^{ip(x-x')} dp = \\ &= \int W(q, p) \left(q - \frac{i}{2} \frac{\partial}{\partial p} \right) e^{ip(x-x')} dp. \end{aligned} \quad (2.13)$$

Теперь в формуле 2.13) можно выполнить интегрирование по частям и получить искомое соотношение:

$$x\rho(x, x') \longrightarrow \left(q + \frac{i}{2} \frac{\partial}{\partial p} \right) W(q, p). \quad (2.14)$$

Совершенно аналогично выглядит соотношение для второй переменной x' :

$$x' \rho(x, x') \longrightarrow \left(q - \frac{i}{2} \frac{\partial}{\partial p} \right) W(q, p). \quad (2.15)$$

Выполним теперь дифференцирование матрицы плотности по координатам:

$$\frac{\partial}{\partial x} \rho(x, x') = \int \frac{\partial}{\partial x} \left[W \left(\frac{x + x'}{2}, p \right) e^{ip(x-x')} \right] dp. \quad (2.16)$$

Вновь, учитывая связь переменной x с собственными переменными функции Вигнера $q = (x + x')/2$, получаем:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left[W \left(\frac{x + x'}{2}, p \right) e^{ip(x-x')} \right] &= \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial q} W(q, p) e^{ip(x-x')} + \\ + ip W(q, p) e^{ip(x-x')} &= \left(\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial q} + ip \right) W(q, p) e^{ip(x-x')}. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Подставляя полученное соотношение (2.17) в формулу (2.16), имеем:

$$\frac{\partial}{\partial x} \rho(x, x') \longrightarrow \left(\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial q} + ip \right) W(q, p). \quad (2.18)$$

Дифференцирование по “штрихованной” переменной дает аналогичное соответствие:

$$\frac{\partial}{\partial x'} \rho(x, x') \longrightarrow \left(\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial q} - ip \right) W(q, p). \quad (2.19)$$

Теперь можно получить уравнение Мойала для функции Вигнера. Очевидно, полученные соотношения (2.12)-(2.19) остаются справедливыми в произвольный момент времени t , поэтому уравнение Лиувилля-фон Ноймана для матрицы плотности в координатном представлении (см. формулу (5.9) глава 3) можно легко переписать для функции Вигнера.

Запишем уравнение (5.9), формально заменив соответствующие произведения и производные соотношениями (2.12)-(2.19). При этом оператор потенциальной энергии, будучи функцией оператора координаты понимается, как обычно в квантовой механике, в смысле ряда Тейлора по степеням оператора. Имеем:

$$i\frac{\partial}{\partial t}W(q,p,t) = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial q} + ip \right)^2 - \left(\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial q} - ip \right)^2 \right] W(q,p,t) + \left[U \left(q + \frac{i}{2} \frac{\partial}{\partial p} \right) - U \left(q - \frac{i}{2} \frac{\partial}{\partial p} \right) \right] W(q,p,t). \quad (2.20)$$

Первая квадратная скобка уравнения (2.20) сильно упрощается, и получаем:

$$i\frac{\partial}{\partial t}W = ip\frac{\partial}{\partial q}W + \left[U \left(q + \frac{i}{2} \frac{\partial}{\partial p} \right) - U \left(q - \frac{i}{2} \frac{\partial}{\partial p} \right) \right] W. \quad (2.21)$$

Здесь для простоты опущены аргументы функции Вигнера.

Мы предполагаем, что функция потенциальной энергии может быть разложена в ряд Тейлора, поэтому:

$$U \left(q + \frac{i}{2} \frac{\partial}{\partial p} \right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{U^{(n)}(q)}{n!} \frac{i^n}{2^n} \frac{\partial^n}{\partial p^n}. \quad (2.22)$$

Разность потенциальных энергий дает чисто мнимую функцию:²

$$\left[U \left(q + \frac{i}{2} \frac{\partial}{\partial p} \right) - U \left(q - \frac{i}{2} \frac{\partial}{\partial p} \right) \right] = i \sum_{n=0}^{\infty} \frac{U^{(2n+1)}(q)}{(2n+1)!} \frac{(-1)^n}{4^n} \frac{\partial^{2n+1}}{\partial p^{2n+1}}. \quad (2.23)$$

²Ряд (2.22) по сути дела представляет собой разложение по степеням \hbar (напомним, что в данном параграфе мы положили постоянную Планка $\hbar = 1$).

Таким образом, уравнение Мойала (2.21) действительно, что соответствует уравнению для наблюдаемой величины.

4.3 Томографическое распределение

Рассмотрим простой пример: одномерный гармонический осциллятор с массой $m = 1$, частотой $\omega = 1$ и положим также постоянную Планка $\hbar = 1$. В дальнейшем будем придерживаться (если особо не оговорено) такой системы единиц. Как хорошо известно (см. Гл. 2), волновая функция основного состояния есть:

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-x^2/2}. \quad (3.1)$$

Матрица плотности осциллятора в каком-либо (чистом) состоянии ψ равна

$$\rho_\psi(x, x') = \psi(x)\psi^*(x'), \quad \text{или} \quad \rho_\psi(x, x) = |\psi(x)|^2. \quad (3.2)$$

Формулу (3.2) можно “обратить”, выразив волновую функцию через матрицу плотности:

$$\psi(x) = \frac{\rho_\psi(x, x')}{\rho_\psi(0, x')} \sqrt{\rho_\psi(0, 0)}. \quad (3.3)$$

Заметим, что для чистого состояния, которое есть суперпозиция состояний, такой же простой формулы (3.3) не существует: для матрицы плотности принцип суперпозиции не выполняется, поскольку она определяется квадратичной связью. Действительно, пусть есть чистое состояние в виде суперпозиции:

$$\psi(x) = \alpha\psi_1(x) + \beta\psi_2(x),$$

тогда такому чистому состоянию соответствует матрица плотности

$$\rho_\psi(x, x') = |\alpha|^2 \psi_1(x) \psi_1^*(x') + |\beta|^2 \psi_2(x) \psi_2^*(x') + \alpha \beta^* \psi_1(x) \psi_2^*(x') + \alpha^* \beta \psi_2(x) \psi_1^*(x').$$

Отсутствие принципа суперпозиции для матрицы плотности вовсе не означает, что матрица плотности не описывает квантовой интерференции чистых состояний: он может быть представлен в более сложном виде.

Запишем теперь матрицу плотности основного осциллятора, находящегося в основном состоянии:

$$\rho_0(x, x') = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2/2 - (x')^2/2}. \quad (3.4)$$

Запишем функцию Вигнера (1.7) одномерного гармонического осциллятора, находящегося в основном состоянии:

$$W_0(q, p) = \int du e^{-ipu} \rho_0\left(q + \frac{u}{2}, q - \frac{u}{2}\right) = 2e^{-q^2 - p^2}. \quad (3.5)$$

Функция Вигнера действительна и нормирована:

$$\int \frac{dq dp}{2\pi} W_0(q, p) = 1$$

Функция Вигнера позволяет также определить квадрат модуля волновой функции основного состояния как в координатном, так и импульсном представлении:

$$\int \frac{dp}{2\pi} W_0(q, p) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-q^2} = |\psi_0(q)|^2, \quad (3.6)$$

$$\int \frac{dq}{2\pi} W_0(q, p) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-p^2} = |\psi_0(p)|^2. \quad (3.7)$$

Иными словами, интегрируя функцию Вигнера, можно получить функцию распределения по импульсу или координате. Таким же свойством обладает совместная функция

распределения вероятностей в фазовом пространстве классического осциллятора. Поскольку Вигнер использовал преобразование Фурье, имеет место обратное преобразование от функции Вигнера к матрице плотности:

$$\frac{1}{2\pi} \int dp W_0 \left(\frac{x+x'}{2}, p \right) e^{ip(x-x')} = \rho_0(x, x'). \quad (3.8)$$

Таким образом, информация, содержащаяся в функции Вигнера такая же, как и в матрице плотности, однако интерпретация ее не так проста и очевидна, как это могло бы показаться из предыдущего примера.

Рассмотрим первое возбужденное состояние осциллятора

$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{\sqrt{\pi}}} x e^{-x^2/2}. \quad (3.9)$$

Матрица плотности осциллятора в первом возбужденном состоянии есть

$$\rho_1(x, x') = \frac{2}{\sqrt{\pi}} x x' \exp \left(-\frac{x^2}{2} - \frac{(x')^2}{2} \right). \quad (3.10)$$

Легко получить функцию Вигнера этого же состояния:

$$W_1(q, p) = 2(2q^2 + 2p^2 - 1) \exp(-q^2 - p^2). \quad (3.11)$$

Функция Вигнера по-прежнему нормирована на единицу и обладает свойством (3.6), однако при малых значениях q и p она становится отрицательной и поэтому не может быть интерпретирована как функция распределения вероятностей. Это объясняется принципиальной невозможностью описания квантовых систем в фазовом пространстве из-за соотношения неопределенностей для импульса и координаты. Таким образом параметры q и p в функции Вигнера не есть настоящие координата и импульс осциллятора. Сама

же функция Вигнера не имеет смысла распределения вероятностей, однако ее часто называют *квазивероятностью* и она широко используется в квантовой оптике.

Тем не менее, распределение вероятностей ввести можно. Рассмотрим гауссово распределение для координаты, зависящее от двух параметров μ и ν :

$$w_0(x, \mu, \nu) = \frac{1}{\sqrt{\pi(\mu^2 + \nu^2)}} \exp\left(-\frac{x^2}{\mu^2 + \nu^2}\right), \quad (3.12)$$

связанное с функцией Вигнера основного состояния осциллятора обратимым преобразованием Фурье:

$$w_0(x, \mu, \nu) = \int \frac{dkdqdp}{(2\pi)^2} W_0(q, p) e^{-ik(x-\mu q-\nu p)}. \quad (3.13)$$

Обратное преобразование формулы (3.13) дает функцию Вигнера:

$$W_0(q, p) = \int \frac{dx d\mu d\nu}{2\pi} w_0(x, \mu, \nu) e^{i(x-\mu q-\nu p)}. \quad (3.14)$$

Можно непосредственным вычислением убедиться, что для первого возбужденного состояния также существует распределение

$$w_1(x, \mu, \nu) = w_0(x, \mu, \nu) \frac{2x^2}{\mu^2 + \nu^2}, \quad (3.15)$$

связанное с функцией Вигнера $W_1(q, p)$ такими же формулами (3.13) и (3.14):

$$w_1(x, \mu, \nu) = \int \frac{dkdqdp}{(2\pi)^2} W_1(q, p) e^{-ik(x-\mu q-\nu p)}. \quad (3.16)$$

и

$$W_1(q, p) = \int \frac{dx d\mu d\nu}{2\pi} w_1(x, \mu, \nu) e^{i(x-\mu q-\nu p)}. \quad (3.17)$$

Заметим, что эмпирически найденная связь функций Вигнера с распределениями для основного (3.13) и (3.14) и первого возбужденного состояний осциллятора (3.16) и (3.17) совершенно не зависит от состояния осциллятора, поэтому она может быть распространена как на другие состояния, так и на другие системы. Таким образом можно записать для произвольной функции Вигнера произвольной системы связь с *томографическим распределением*:

$$W(q, p) = \frac{1}{2\pi} \int dx d\mu d\nu w(x, \mu, \nu) \exp(-i(\mu q + \nu p - x)). \quad (3.18)$$

Обратное преобразование есть:

$$w(x, \mu, \nu) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int dk dq dp W(q, p) \exp(-ik(x - \mu q - \nu p)). \quad (3.19)$$

Учитывая связь функции Вигнера с матрицей плотности, запишем также связь матрицы плотности с томографическим распределением:

$$\rho(x, x') = \frac{1}{2\pi} \int d\mu dy w(y, \mu, x - x') \exp \left[i \left(y - \mu \frac{x + x'}{2} \right) \right]. \quad (3.20)$$

Упражнение Получить формулу (3.20), подставив в выражение матрицы плотности через функцию Вигнера (3.8) определение (3.18).

Определение функции Вигнера через матрицу плотности (1.7) можно записать в несколько иной форме. Запишем его через матрицу плотности в координатном представлении в одномерном случае, убрав явную зависимость аргументов от параметра интегрирования u :

$$W(q, p) = \int dz dz' du \rho(z, z') \delta \left(z - q - \frac{u}{2} \right) \delta \left(z' - q + \frac{u}{2} \right) e^{-ipu}.$$

Выполняя интегрирование по параметру u , получаем интеграл только по аргументам матрицы плотности:

$$W(q, p) = 2 \int dz dz' \rho(z, z') e^{-i2p(z-q)} \delta(z + z' - 2q). \quad (3.21)$$

Теперь можно получить обратное преобразование для (3.20), выразив томографическое распределение через матрицу плотности:

$$\begin{aligned} w(x, \mu, \nu) &= \\ &= \frac{1}{2\pi|\nu|} \int dz dz' \rho(z, z') \exp \left[-i \frac{z-z'}{\nu} \left(x - \mu \frac{z+z'}{2} \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.22)$$

Упражнение Получить формулу (3.22), подставив в выражение томографического распределения (3.19) определение функции Вигнера в форме (3.21).

Сравнивая формулы (3.21) и (3.22), можно заметить, что функция квазираспределения Вигнера $W(q, p)$ и классическое (томографическое) распределение вероятностей $w(X, \mu, \nu)$, причем последнее есть положительная нормированная функция, получены путем похожих интегральных преобразований матрицы плотности.

Разница между двумя рассматриваемыми функциями определяется разницей ядер интегральных преобразований. Как видно из формулы (3.21) ядро интегрального преобразования для функции Вигнера есть

$$K_W(z, z'; q, p) = 2e^{-i2p(z-q)} \delta(z + z' - 2q). \quad (3.23)$$

В случае преобразования симплектической томографии (3.22) ядро имеет вид:

$$K_w(z, z'; x, \mu, \nu) = \frac{1}{2\pi|\nu|} \exp \left[-i \frac{z-z'}{\nu} \left(x - \mu \frac{z+z'}{2} \right) \right]. \quad (3.24)$$

Ключ к решению задачи о построении распределения вероятностей, задающего квантовое состояние, дает анализ диагональных элементов матрицы плотности. Поскольку *только диагональные* элементы матрицы плотности определяют распределение вероятностей, очевидно, что из распределения вероятностей нельзя найти недиагональные элементы матрицы плотности, поскольку для этого требуется знание не только модуля, *но и фазы*. Поэтому уместно задать такой вопрос: мы знаем модуль (квадрат модуля) волновой функции только в одной системе отсчета в фазовом пространстве. Что изменится, если мы будем знать модуль волновой функции во многих системах отсчета, описываемых набором параметров (например, параметров поворота)?

В таком случае распределение $w(x, \theta) = |\psi(\theta)|^2$ зависит от двух переменных, а задача восстановления по функции двух переменных другой функции двух переменных $\rho(x, x')$ уже не представляется заведомо невыполнимой. Именно эта программа и реализуется при задании квантовых состояний функциями распределения вероятностей. А именно, строятся только диагональные элементы матрицы плотности, но в ансамблях систем отсчета, задаваемых достаточным набором параметров. Затем по известной диагонали матрицы плотности как функции параметров систем отсчета вычисляются недиагональные элементы матрицы плотности с использованием нетривиальных, но не очень сложных интегральных преобразований.

Данная программа проходит как для непрерывных переменных типа координаты, так и для дискретных наблюдаемых типа спина, но со своими особенностями при использовании ансамблей систем отсчета, в которых задается диагональ матрицы плотности. Для координаты системы отсчета задаются в фазовом пространстве, причем используются такие параметры, отличающие системы, как

поворот осей и изменение масштаба. В случае спина используются системы отсчета в обычном (конфигурационном) пространстве, а в качестве параметров, отличающих эти системы, выбираются углы Эйлера.

4.4 Уравнение эволюции для томографического распределения

Уравнение эволюции для томографического распределения получается из уравнения Мойяла (2.21) после установления соответствий дифференцирования и умножения между функцией Вигнера $W(q, p, t)$ по своим переменным и соответствующими операциями для томографической вероятности $w(X, \mu, \nu, t)$ по своим собственным переменным. Это соответствие устанавливается аналогично соответствиям (2.12)-(2.19) между операциями для матрицы плотности и функции Вигнера.

Установим сперва чему соответствует операция умножения функции Вигнера на обобщенную координату для томографической вероятности. Запишем формально (рассматриваем момент времени $t = 0$):

$$qW(q, p) = \frac{1}{2\pi} \int dx d\mu d\nu w(x, \mu, \nu) q e^{-i(\mu q + \nu p - x)}. \quad (4.1)$$

Умножение экспоненты под знаком интеграла можно заменить дифференцированием по параметру μ . Это можно сделать, поскольку сама экспонента зависит только от комбинации μq . После этого проинтегрируем по частям и получим:

$$qW(q, p) = \frac{1}{2\pi} \int dx d\mu d\nu \left(-i \frac{\partial}{\partial \mu} w(x, \mu, \nu) \right) e^{-i(\mu q + \nu p - x)}. \quad (4.2)$$

Здесь, однако, мы не можем сказать, что умножению на обобщенную координату функции Вигнера соответствует

взятие производной от томографической вероятности, поскольку интегральное преобразование связывает между собой все три аргумента томографического распределения с двумя аргументами функции Вигнера. Поэтому пойдем теперь в обратном направлении и определим, чему соответствует взятие производной от томографического распределения по одному из параметров:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial \mu} w(x, \mu, \nu) &= \frac{\partial}{\partial \mu} \frac{1}{(2\pi)^2} \int dq dp dk W(q, p) e^{-ik(x-\mu q-\nu p)} = \\
 &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int dq dp dk W(q, p) \left(ikq e^{-ik(x-\mu q-\nu p)} \right) = \\
 &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int dq dp dk W(q, p) \left(iq i \frac{\partial}{\partial x} e^{-ik(x-\mu q-\nu p)} \right) = \\
 &= - \frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{(2\pi)^2} \int dq dp dk q W(q, p) e^{-ik(x-\mu q-\nu p)}. \quad (4.3)
 \end{aligned}$$

Теперь можно записать искомое соответствие:

$$qW(q, p) = - \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^{-1} \frac{\partial}{\partial \mu} w(x, \mu, \nu). \quad (4.4)$$

Здесь смысл обратной производной определен выражением (4.3).

Как видно из формулы (4.3) умножению функции Вигнера на обобщенную координату соответствует взятие производной от томографической вероятности по “сопряженной” переменной (с определенным “довеском”). Можно предположить, что взятию производной от функции Вигнера по обобщенной координате будет соответствовать операция умножения на соответствующую сопряженную переменную томографической вероятности. Иными словами, возникает соответствие, аналогичное соответствию между различными представлениями операторов в квантовой механике (например, вид оператора координаты в координат-

ном и импульсном представлении). Поэтому сразу рассмотрим обратное соотношение, а именно:

$$\begin{aligned} \mu w(x, \mu, \nu) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int dq dp dk W(q, p) \mu e^{-ik(x-\mu q-\nu p)} = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int dq dp dk W(q, p) \left(\frac{1}{ik} \frac{\partial}{\partial q} \right) e^{-ik(x-\mu q-\nu p)}. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Продифференцируем выражение (4.5) по координате:

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial x} w(x, \mu, \nu) &= \\ &= -\frac{1}{(2\pi)^2} \int dq dp dk W(q, p) \frac{\partial}{\partial q} e^{-ik(x-\mu q-\nu p)}. \end{aligned} \quad (4.6)$$

Интегрируя по частям правую часть выражения (4.6), получаем искомое соотношение:

$$\frac{\partial}{\partial q} W(q, p) = \mu \frac{\partial}{\partial x} w(x, \mu, \nu). \quad (4.7)$$

Полученные соответствия можно условно записать в виде:

$$q \longrightarrow - \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^{-1} \frac{\partial}{\partial \mu}, \quad \frac{\partial}{\partial q} \longrightarrow \mu \frac{\partial}{\partial x}. \quad (4.8)$$

Здесь взятие “обратной производной” $(\partial/\partial x)^{-1}$ следует понимать как взятие неопределенного интеграла по соответствующей переменной.

Упражнение.

Получить соответствия умножению на обобщенный импульс и взятию по нему производной:

$$pW(q, p) = - \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^{-1} \frac{\partial}{\partial \nu} w(x, \mu, \nu); \quad (4.9)$$

$$\frac{\partial}{\partial p} W(q, p) = \nu \frac{\partial}{\partial x} w(x, \mu, \nu). \quad (4.10)$$

Уравнение для томографического распределения получается в результате подстановки полученных соотношений (4.8) и (4.9) в уравнение Мойала (2.21):

$$\begin{aligned} \frac{\partial w}{\partial t} - \mu \frac{\partial}{\partial \nu} w - i \left[U \left(- \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^{-1} \frac{\partial}{\partial \mu} - i \frac{\nu}{2} \frac{\partial}{\partial x} \right) - \right. \\ \left. - U \left(- \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^{-1} \frac{\partial}{\partial \mu} + i \frac{\nu}{2} \frac{\partial}{\partial x} \right) \right] w = 0. \end{aligned} \quad (4.11)$$

Так же, как и в формуле (2.23) видно, что в выражении в квадратных скобках уравнения (4.11) остается только мнимая часть функции потенциальной энергии, поэтому можно записать:

$$\frac{\partial w}{\partial t} - \mu \frac{\partial}{\partial \nu} w - 2\text{Im}U \left(i \frac{\nu}{2} \frac{\partial}{\partial x} - \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^{-1} \frac{\partial}{\partial \mu} \right) w = 0. \quad (4.12)$$

Упражнение.

Показать, что для одномерного гармонического осциллятора с гамильтонианом (в безразмерных единицах)

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2} + \frac{\hat{q}^2}{2} \quad (4.13)$$

уравнение эволюции для томографического распределения вероятности имеет вид:

$$\dot{w} - \mu \frac{\partial}{\partial \nu} w + \nu \frac{\partial}{\partial \mu} w = 0. \quad (4.14)$$

Глава 5

Представление вероятностей для дискретного спектра на примере момента количества движения

Прежде чем начать изложение соответствующего представления напомним основные положения квантовой теории момента количества движения.

5.1 Оператор момента импульса, собственные состояния

В последующем изложении мы часто будем рассматривать примеры, связанные с преобразованием поворота систем отсчета. Как хорошо известно из курса квантовой механики (и механики вообще), с преобразованиями поворота свя-

зано понятие *момента количества движения*. Свойства момента импульса нами будет часто использоваться, поэтому напомним некоторые основные свойства оператора момента импульса, его значения и собственные состояния, а также рассмотрим некоторые важные понятия, связанные со сложением моментов различных систем.

В качестве определения момента импульса квантовой системы примем выражение для оператора поворота на некоторый угол Ω относительно оси, направление которой задается единичным вектором \mathbf{N} :

$$\hat{R}_{\mathbf{N}}(\Omega) = e^{i\Omega(\mathbf{N}\hat{\mathbf{j}})}, \quad \text{при} \quad [\hat{j}_{\alpha}, \hat{j}_{\beta}] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{j}_{\gamma}, \quad (1.1)$$

где $\hat{\mathbf{j}}$ – есть оператор полного момента квантовой системы и, соответственно, $[\hat{\mathbf{j}}^2, \hat{j}_{\alpha}] = 0$.

Состояния с *определенным* значением момента в *стандартном представлении* $\{\hat{\mathbf{j}}^2, \hat{j}_z\}$ определяются из системы уравнений:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{j}}^2|\Lambda, m\rangle &= \Lambda|\Lambda, m\rangle, \\ \hat{j}_z|\Lambda, m\rangle &= m|\Lambda, m\rangle. \end{aligned} \quad (1.2)$$

Очевидно, квадрат проекции не может превосходить квадрат всего момента, поэтому оператор $\hat{\mathbf{j}}^2$ можно считать "главным" в системе уравнений (1.2), и на возможные значения квантового числа m накладываются ограничения $|m|^2 \leq \Lambda$. Для решения системы (1.2) поступим так же, как при решении задачи для изотропного гармонического осциллятора. Введем вместо эрмитовых операторов \hat{j}_x и \hat{j}_y неэрмитовы операторы

$$\hat{j}_{\pm} = \hat{j}_x \pm i\hat{j}_y,$$

которые, как легко убедиться, удовлетворяют коммутационным соотношениям

$$[\hat{j}_z, \hat{j}_{\pm}] = \pm\hat{j}_{\pm}, \quad [\hat{j}_+, \hat{j}_-] = 2\hat{j}_z, \quad [\hat{\mathbf{j}}^2, \hat{j}_{\pm}] = 0. \quad (1.3)$$

Квадрат момента при этом выражается через так введенные операторы следующим образом

$$\hat{\mathbf{j}}^2 = \hat{j}_z^2 + \frac{1}{2} (\hat{j}_+ \hat{j}_- + \hat{j}_- \hat{j}_+) = \hat{j}_z^2 + \hat{j}_z + \hat{j}_- \hat{j}_+ = \hat{j}_z^2 - \hat{j}_z + \hat{j}_+ \hat{j}_-. \quad (1.4)$$

Подействуем оператором \hat{j}_+ на произвольное состояние в системе (1.2):

$$\hat{j}_+ |\Lambda, m\rangle = |\Phi\rangle = \sum_{m'} a_{m'} |\Lambda, m'\rangle, \quad (1.5)$$

поскольку оператор \hat{j}_+ коммутирует с оператором $\hat{\mathbf{j}}^2$ и не коммутирует с \hat{j}_z . Подействуем теперь оператором \hat{j}_z на "неизвестное" состояние $|\Phi\rangle$ и воспользуемся коммутационным соотношением:

$$\hat{j}_z |\Phi\rangle = \hat{j}_z \hat{j}_+ |\Lambda, m\rangle = (\hat{j}_+ \hat{j}_z + \hat{j}_+) |\Lambda, m\rangle = (m+1) |\Phi\rangle.$$

Таким образом получили, что неизвестное состояние $|\Phi\rangle$ есть собственное состояние оператора \hat{j}_z с собственным значением $(m+1)$, поэтому в сумме (1.5) остается только одно слагаемое с $m' = m+1$:

$$\hat{j}_+ |\Lambda, m\rangle = a_{m+1} |\Lambda, m+1\rangle. \quad (1.6)$$

Таким образом, оператор \hat{j}_+ повышает проекцию момента на ось квантования на единицу – повышающий оператор. Совершенно аналогично получим, что

$$\hat{j}_- |\Lambda, m\rangle = \tilde{a}_{m-1} |\Lambda, m-1\rangle, \quad (1.7)$$

и \hat{j}_- – понижающий оператор.

Обозначим максимальное значение проекции момента буквой j :

$$\max\{m\} = j, \quad (1.8)$$

тогда обязательно должны получить

$$\hat{j}_+|\Lambda, j\rangle = 0. \quad (1.9)$$

Поскольку для все возможных m при заданной величине момента импульса значение Λ одно и то же, для $m = j$ получаем

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{j}}^2|\Lambda, j\rangle &= \\ &= \left(\hat{j}_z^2 + \hat{j}_z + \hat{j}_- \hat{j}_+\right)|\Lambda, j\rangle = (j^2 + j)|\Lambda, j\rangle = j(j+1)|\Lambda, j\rangle, \end{aligned} \quad (1.10)$$

т.е. $\Lambda = j(j+1)$ – определяется максимальной проекцией на ось квантования. Исходя из полученного результата легко видеть, что минимальное значение проекции момента на ось квантования $\min\{m\} = -j$. Таким образом в дираковском векторе состояния обычно указывают не квадрат момента, а максимальное значение его проекции:

$$|\Lambda, m\rangle \equiv |j(j+1), m\rangle \equiv |j, m\rangle. \quad (1.11)$$

Найдем теперь матричные элементы a_m . Вспомним, что

$$\left(\hat{j}_+|j, m\rangle\right)^+ = \langle j, m|\hat{j}_-, \quad \text{тогда} \quad \langle j, m|\hat{j}_- \hat{j}_+|j, m\rangle = |a_{m+1}|^2.$$

С другой стороны

$$\hat{j}_- \hat{j}_+|j, m\rangle (j(j+1) - m(m+1))|j, m\rangle \equiv (j-m)(j+m+1)|j, m\rangle,$$

соответственно

$$a_{m+1} = e^{i\phi} \sqrt{(j-m)(j+m+1)}. \quad (1.12)$$

Обычно выбирают значение фазы $\phi = 0$. Таким образом, можно записать

$$\begin{aligned} \hat{j}_+|j, m\rangle &= \sqrt{(j-m)(j+m+1)}|j, m+1\rangle, \\ \hat{j}_-|j, m\rangle &= \sqrt{(j+m)(j-m+1)}|j, m-1\rangle. \end{aligned} \quad (1.13)$$

Проекция момента может принимать значения $-j \leq m \leq j$, а поскольку при этом "соседние" значения проекции отличаются на единицу, всего при данном значении момента может быть $N = 2j$ различных состояний. Или иными словами максимальная проекция равна

$$j = \frac{N}{2}, \quad \text{т.е.} \quad j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots \quad (1.14)$$

Соответственно, проекция момента может принимать только *либо целые, либо полуцелые* значения.

Теперь можно выразить любое состояние $|j, m\rangle$ через одно состояние с максимальной проекцией $|j, j\rangle$. Действительно,

$$\begin{aligned} |j, j-1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2j}} (\hat{j}_- |j, j\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2j} \cdot 1} (\hat{j}_- |j, j\rangle), \\ |j, j-2\rangle &= \frac{1}{2\sqrt{2j-1}} (\hat{j}_- |j, j-1\rangle) = \frac{1}{2! \sqrt{2j(2j-1)}} (\hat{j}_-)^2 |j, j\rangle, \end{aligned}$$

Полученные результаты легко обобщить:

$$|j, m\rangle = \sqrt{\frac{(j+m)!}{(2j)!(j-m)!}} (\hat{j}_-)^{j-m} |j, j\rangle. \quad (1.15)$$

Итак, исходя только из коммутационных соотношений, получили вектора состояний и значения квантовых чисел, описывающих систему, обладающую *определённым* моментом количества движения. Однако, вспоминая результаты, полученные при решении задачи о движении частицы в центральном поле в координатном представлении, вспоминаем, что проекция орбитального момента *по своему физическому смыслу* может принимать *только целые* значения. Полученные нами полуцелые значения не могут быть связаны с орбитальным моментом, а, значит, с вращением квантовой системы (частицы). Вместе с тем мы видим,

что при *преобразованиях поворота* имеется две возможности преобразования вектора состояния системы: с помощью как целого, так и полуцелого значения момента. Если преобразование состояния системы с помощью целого момента может быть интерпретирована как вращение системы, то в другом случае ни о каком вращении речи быть не может, поскольку при вращении на угол 2π система должна была бы вернуться в исходное положение, а в нашем случае состояние отличается знаком. Таким образом, для полуцелых значений j мы обязаны допустить, что система обладает внутренними степенями свободы, которые проявляются при преобразовании поворота в состоянии системы и по своим свойствам аналогичны моменту количества движения. Такой момент называют собственным моментом или *спином* системы. Очевидно, что с такой позиции собственный момент может принимать также и целые значения. Иными словами, спин системы может быть как целым, так и полуцелым, но орбитальный момент может быть только целым. Поскольку спин системы описывает внутренние степени свободы квантовой системы, он имеет *всегда определенное для данной системы значение*, которое не может изменяться, поскольку в противном случае его изменение означало бы изменение внутренних степеней свободы, а значит и *самой системы*. Таким образом спин – чисто квантовая характеристика системы.

В отличие от спина, орбитальный момент может принимать самые разные значения, а поскольку размерная физическая величина есть $\mathcal{M} = \hbar l$, в классическом пределе ($\hbar \rightarrow 0$) должна соответствовать “обычному” моменту количества движения, значения квантового числа, описывающего орбитальный момент должны стремиться к бесконечности $l \rightarrow \infty$ так, что величина \mathcal{M} оставалась конечной.

5.2 Углы Эйлера и матрица поворота

Вновь вернемся к оператору конечных вращений. Как следует из предыдущего параграфа, оператор поворота относительно некоторой оси \mathbf{n} на угол ϕ для состояний с моментом j определяемый формулой (1.1), “не перемешивает” базисные вектора состояний с различными моментами (оператор \mathbf{jn} коммутирует с со всеми проекциями оператора момента). Поэтому, можно записать

$$\widehat{R}_{\mathbf{n}}(\phi)|j, m_j\rangle = \sum_{m'} D_{m'm}^{(j)}(\mathbf{n}, \phi)|j, m'_j\rangle, \quad (2.1)$$

где

$$D_{m'm}^{(j)}(\mathbf{n}, \phi) = \langle j, m'_j | \widehat{R}_{\mathbf{n}}(\phi) | j, m_j \rangle - \quad (2.2)$$

матричные элементы соответствующего разложения “нового” вектора состояния, получившегося в результате преобразования поворота по “старым” состояниям (базису). Операцию поворота относительно некоторой оси \mathbf{n} на угол ϕ можно выразить через три угла Эйлера α, β, γ , совокупность которых обычно обозначают одной буквой o . В этом случае матричные элементы (2.2) называются функциями Вигнера (или просто D -функциями).

Напомним (на всякий случай) определение углов Эйлера, которые позволяют совместить две произвольно ориентированные системы координат, имеющие общее начало. Обычно считают одну из систем координат неподвижной (лабораторной), а другую – подвижной (или связанной с какой-либо физической системой) (см рис.) Будем совмещать лабораторную систему с подвижной.

1. Сперва делают поворот на угол α относительно оси z , который описывается оператором $R_z(\alpha)$.
2. Затем поворачивают на угол β относительно оси y' :

$$R_{y'}(\beta) = R_z(\alpha)R_y(\beta)R_z^{-1}(\alpha)$$

Рис. 2.1: Схема поворотов на углы Эйлера

или

$$R_{y'}(\beta)R_z(\alpha) = R_z(\alpha)R_y(\beta). \quad (2.3)$$

3. Последний поворот совершается на угол γ относительно оси z'' :

$$R_{z''}(\gamma) = (R_z(\alpha)R_y(\beta)) R_z(\gamma) (R_z(\alpha)R_y(\beta))^{-1},$$

т.е.

$$\begin{aligned} R_{z''}(\gamma)R_z(\alpha)R_y(\beta) &= R_{z''}(\gamma)R_{y'}(\beta)R_z(\alpha) = \\ &= R_z(\alpha)R_y(\beta)R_z(\gamma). \end{aligned} \quad (2.4)$$

Поскольку выше описан поворот системы координат, поворот физической системы для которой записан оператор поворота (1.1), описывается оператором, обратным по отношению к оператору. Получаем:

$$\widehat{R}_{\mathbf{n}}(\phi) = e^{-ij_z\gamma} e^{-ij_y\beta} e^{-ij_z\alpha}. \quad (2.5)$$

Таким образом для определения D -функции получаем формулу

$$\begin{aligned} D_{m'm}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) &= \langle j, m'_j | e^{-ij_z\gamma} e^{-ij_y\beta} e^{-ij_z\alpha} | j, m_j \rangle = \\ &= e^{-im'\gamma} \langle j, m' | e^{-ij_y\beta} | j, m \rangle e^{-im\alpha} = e^{-im'\gamma} e^{-im\alpha} d_{m'm}^j(\beta). \end{aligned} \quad (2.6)$$

Как видим, основная сложность – получить выражения для функции $d_{m'm}^{(j)}(\beta)$. Мы здесь не будем приводить общее выражение для D -функций: его можно найти в любой книге, в которой рассматривается группа вращений. Мы покажем, как ее можно относительно легко получить самостоятельно в некоторых частных случаях на двух примерах.

5.3 Сложение моментов. Коэффициенты Клебша-Гордана

Рассмотрим две не взаимодействующие системы (частицы) с моментами j_1 и j_2 . Тогда состояние первой системы определяется вектором $|n_1, j_1, m_1\rangle$, а состояние второй — $|n_2, j_2, m_2\rangle$. Здесь n_1 и n_2 обозначают остальные квантовые числа из полного набора физических величин. Состояние системы двух не взаимодействующих частиц определяется вектором

$$\begin{aligned} |n_1, j_1, m_1; n_2, j_2, m_2\rangle &= |n_1, j_1, m_1\rangle |n_2, j_2, m_2\rangle \equiv \\ &\equiv |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle. \end{aligned} \quad (3.1)$$

Очевидно, операторы, действующие на первую систему, не действуют на вторую и наоборот (соответственно они между собой коммутируют)

$$\begin{aligned} \hat{f}_1 |n_1, j_1, m_1\rangle &= |\Phi_1\rangle \equiv \\ &\equiv \sum_{n'_1, j'_1, m'_1} \langle n'_1, j'_1, m'_1 | \hat{f}_1 |n_1, j_1, m_1\rangle |n'_1, j'_1, m'_1\rangle. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Аналогично и для второй системы:

$$\hat{f}_2 |n_2, j_2, m_2\rangle = |\Phi_2\rangle, \quad (3.3)$$

но

$$\hat{f}_1 |n_2, j_2, m_2\rangle = |n_2, j_2, m_2\rangle \hat{f}_1. \quad (3.4)$$

Поэтому имеем:

$$\hat{f}_1 |n_1 j_1 m_1; n_2 j_2 m_2\rangle = |\Phi_1; n_2 j_2 m_2\rangle \equiv |\Phi_1\rangle |n_2, j_2, m_2\rangle, \quad (3.5)$$

$$\hat{f}_2 |n_1 j_1 m_1; n_2 j_2 m_2\rangle = |n_1 j_1 m_1; \Phi_2\rangle \equiv |n_1, j_1, m_1\rangle |\Phi_2\rangle. \quad (3.6)$$

Соответственно, если оператор $\hat{f}_{12} = \hat{f}_1 \hat{f}_2$, то согласно формуле (3.4)

$$\begin{aligned} \hat{f}_1 \hat{f}_2 |n_1, j_1, m_1; n_2, j_2, m_2\rangle &= \hat{f}_1 |n_1, j_1, m_1\rangle \hat{f}_2 |n_2, j_2, m_2\rangle = \\ &= |\Phi_1\rangle |\Phi_2\rangle \equiv |\Phi_1; \Phi_2\rangle. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Как видим, действие оператора $\hat{f}_1 \hat{f}_2$ на вектор состояния $|n_1, j_1, m_1; n_2, j_2, m_2\rangle = |n_1, j_1, m_1\rangle |n_2, j_2, m_2\rangle$ определяется согласно правилу прямого произведения. Действительно, пространство состояний всей системы имеет ранг, равный произведению рангов пространств состояний каждой системы. Количество базисных векторов равно произведению соответствующих чисел для каждой системы. Таким образом, вектор состояния всей системы есть прямое произведение векторов состояний каждой подсистемы. Соответственно и произведение операторов отличается от обычного (внутреннего) матричного произведения, поскольку это опять прямое произведение операторов. Обычно знак прямого произведения (или суммы) не выделяют особо, считая этот факт очевидным, однако об этом всегда нужно помнить. Иными словами, строже было бы записать определение (s2) так:

$$|n_1, j_1, m_1; n_2, j_2, m_2\rangle = |n_1, j_1, m_1\rangle \otimes |n_2, j_2, m_2\rangle. \quad (3.8)$$

То же самое уточнение следует сделать и для произведения операторов. Итак, будем сейчас рассматривать только состояния с определенным моментом и для простоты опустим набор остальных квантовых чисел (но они всегда есть!). Для изолированной замкнутой системы, каковой и представляется наша система двух невзаимодействующих частиц, E , \mathbf{P} , \mathbf{M} – интегралы движения. Поэтому в нашем случае должен сохраняться полный (суммарный) момент количества движения

$$\mathbf{M} = \mathbf{M}_1 + \mathbf{M}_2; \quad \mathbf{M} \rightarrow \hbar \hat{\mathbf{J}}; \quad \mathbf{M}_{1,2} \rightarrow \hbar \hat{\mathbf{j}}_{1,2}. \quad (3.9)$$

Состояния системы описываются линейными комбинациями $(2j_1 + 1) \cdot (2j_2 + 1)$ независимых векторов $|j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle$. Это есть размерность пространства состояний системы двух частиц с моментами j_1 и j_2 . Наша задача состоит в том, чтобы описать состояния всей системы с полным моментом \mathbf{J} , образованным двумя независимыми моментами \mathbf{j}_1 и \mathbf{j}_2 , которые в свою очередь сами по себе в отдельности сохраняются, поскольку частицы между собой не взаимодействуют. Иными словами, мы здесь имеем интегралы движения $\mathbf{j}_1^2, \mathbf{j}_2^2, \mathbf{J}^2, J_z$, которые и должны быть включены в полный набор физических величин. Или, как принято говорить, задать представление, в котором описывается наша система.

Легко показать, что операторы

$$\hat{J}_z = \hat{j}_{1z} + \hat{j}_{2z}; \quad \mathbf{J}^2 = \mathbf{j}_1^2 + \mathbf{j}_2^2 + 2(\mathbf{j}_1 \mathbf{j}_2)$$

между собой коммутируют, а остальные компоненты удовлетворяют известным коммутационным соотношениям для момента:

$$[\mathbf{J}^2, \hat{J}_z] = 0, \quad [\hat{J}_\alpha, \hat{J}_\beta] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{J}_\gamma. \quad (3.10)$$

Соответственно

$$\left. \begin{aligned} \hat{\mathbf{J}}^2 |j_1, j_2, J, M\rangle &= J(J+1) |j_1, j_2, J, M\rangle, \\ \hat{J}_z |j_1, j_2, J, M\rangle &= M |j_1, j_2, J, M\rangle \end{aligned} \right\}. \quad (3.11)$$

Прежде всего заметим, что, по определению $J = \max\{M\} = j_1 + j_2$. Такое состояние одно:

$$\left. \begin{aligned} |J, J\rangle &= |j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle = |j_1, j_1\rangle |j_2, j_2\rangle, \\ |J, J-1\rangle &= |j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle \propto \hat{J}_- |J, J\rangle \end{aligned} \right\}. \quad (3.12)$$

Поддействуем оператором J_- на состояние с максимальной проекцией

$$\begin{aligned} \hat{J}_- |J, J\rangle &= \sqrt{2J} |J, J-1\rangle = \\ &= \sqrt{2j_1} |j_1, j_1 - 1\rangle |j_2, j_2\rangle + \sqrt{2j_2} |j_1, j_1\rangle |j_2, j_2 - 1\rangle. \end{aligned}$$

Получаем состояние с проекцией на 1 меньше:

$$\begin{aligned}
 & |J, J - 1\rangle = \\
 & = \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} |j_1, j_1 - 1\rangle |j_2, j_2\rangle + \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} |j_1, j_1\rangle |j_2, j_2 - 1\rangle. \quad (3.13)
 \end{aligned}$$

Легко видеть, что существует вторая линейно независимая (ортогональная к первой) линейная комбинация

$$\begin{aligned}
 & |\tilde{J}, j_1 + j_2 - 1\rangle = \\
 & = \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} |j_1, j_1 - 1\rangle |j_2, j_2\rangle - \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} |j_1, j_1\rangle |j_2, j_2 - 1\rangle. \quad (3.14)
 \end{aligned}$$

Поскольку это состояние не относится к состоянию с полным моментом $J = j_1 + j_2$, оно должно соответствовать состоянию с другим полным моментом. Поскольку максимальная проекция равна $j_1 + j_2 - 1$, по определению следует положить $\tilde{J} = j_1 + j_2 - 1$.

Действуя теперь понижающим оператором на состояния $|J = j_1 + j_2, M = j_1 + j_2 - 1\rangle$ и $|\tilde{J} = j_1 + j_2 - 1, \tilde{M} = j_1 + j_2 - 1\rangle$, получим два линейно независимых состояния, относящихся к соответствующим полным моментам. Однако, если $J - 1 \neq 0$, наряду с получающимися векторами можно построить третий, линейно независимый, ортогональный к двум полученным вектор. Как и прежде, этот вектор должен быть отнесен к состоянию с полным моментом $J = j_1 + j_2 - 2$. Продолжая процедуру, видим, что новые линейно независимые вектора могут быть построены до тех пор, пока проекция не понизится до значения $M = |j_1 - j_2|$. Таким образом, получаем, что полный момент системы двух частиц с моментами j_1 и j_2 может принимать значения

$$|j_1 - j_2| \leq J \leq (j_1 + j_2). \quad (3.15)$$

Это так называемое неравенство треугольника. Если $j_2 < j_1$, получается всего $2j_2 + 1$ различных значений, которые может принимать полный момент системы двух частиц. Полное же число состояний всей системы остается неизменным:

$$\sum_{J=|j_1-j_2|}^{J=j_1+j_2} (2J+1) = (2j_1+1)(2j_2+1). \quad (3.16)$$

Таким образом, пространство $(2j_1+1)(2j_2+1)$ состояний с базисными векторами $|j_1, m_1\rangle|j_2, m_2\rangle$ разбилось на $2j_2+1$ инвариантных подпространства независимых состояний с базисными векторами соответственно:

$$|J = j_1 + j_2, j_1, j_2, M\rangle, \dots, |J = |j_1 - j_2|, j_1, j_2, M\rangle.$$

Этот результат можно представить в виде

$$|j_1, j_2, J, M\rangle = \sum_{m_1+m_2=M} C_{j_1, m_1; j_2, m_2}^{J, M} |j_1, m_1\rangle|j_2, m_2\rangle. \quad (3.17)$$

Коэффициенты $C_{j_1, m_1; j_2, m_2}^{J, M}$ составляют матрицу, которая осуществляет необходимое разбиение пространства. Они называются коэффициентами Клебша-Гордана. Остановимся кратко на их свойствах.

Согласно общему правилу, коэффициенты разложения (3.17) определяются при помощи скалярного произведения на соответствующий сопряженный вектор:

$$C_{j_1, m_1; j_2, m_2}^{J, M} = \langle j_1, m_1 | \langle j_2, m_2 | |J, M\rangle. \quad (3.18)$$

Обратный переход от описания состояний в базисе $|j_1, j_2, J, M\rangle$ к описанию состояний в базисе $|j_1, m_1\rangle|j_2, m_2\rangle$ осуществля-

ется с помощью обратной матрицы

$$\begin{aligned}
 & |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle = \\
 & = \sum_{M = m_1 + m_2; |j_1 - j_2| \leq J \leq |j_1 + j_2|} (C^{-1})_{j_1, m_1; j_2, m_2}^{J, M} |j_1, j_2, J, M\rangle, \quad (3.19)
 \end{aligned}$$

которая также находится по определению

$$\begin{aligned}
 (C^{-1})_{j_1, m_1; j_2, m_2}^{J, M} & = \langle j_1, j_2, J, M | j_1, m_1 \rangle |j_2, m_2\rangle = \\
 & = \left(\langle j_2, m_2 | \langle j_1, m_1 | j_1, j_2, J, M \rangle \right)^*. \quad (3.20)
 \end{aligned}$$

Можно показать, что коэффициенты Клебша-Гордана могут быть выбраны все действительными. Имея обратную матрицу (3.20), сразу получаем соотношения ортогональности:

$$\begin{aligned}
 & \langle j_1 j_2; JM | j_1 m_1 \rangle |j_2 m_2\rangle \langle j_2 m_2 | \langle j_1 m_1 | j_1 j_2; J' M' \rangle = \\
 & = \delta_{JJ'} \delta_{MM'}, \quad (3.21)
 \end{aligned}$$

и наоборот:

$$\begin{aligned}
 & \langle j_2 m_2 | \langle j_1 m_1 | j_1 j_2; JM \rangle \langle j_1 j_2; JM | j_1 m'_1 \rangle |j_2 m'_2\rangle = \\
 & = \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2}. \quad (3.22)
 \end{aligned}$$

Итак, $C_{j_1, m_1; j_2, m_2}^{J, M}$ – унимодулярная матрица ортогонального преобразования базиса.

Матрица коэффициентов Клебша-Гордана разбивает полное пространство $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ на инвариантные подпространства меньшего ранга, соответствующие данному значению полного момента.

Пример. Построить состояния с определенным полным моментом $|l_1, l_2, L, M\rangle$ для случая $l_1 = l_2 = 1$.

В данном примере мы должны получить 9 состояний: 5 состояний с $L = 2$; 3 – с $L = 1$ и 1 – с $L = 0$. Прежде всего следует построить состояния с максимальным значением $L = 2$. Состояния с максимальной и минимальной проекциями мы знаем:

$$|1, 1, 2, \pm 2\rangle = |1, \pm 1\rangle|1, \pm 1\rangle.$$

Далее, согласно изложенной процедуре, получаем состояния с проекциями ± 1 :

$$|1, 1, 2, \pm 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1, 0\rangle|1, \pm 1\rangle + |1, \pm 1\rangle|1, 0\rangle).$$

Вновь действуя понижающим оператором на состояние с $M = +1$, получим последнее из состояний с $L = 2$:

$$|1, 1, 2, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} (|1, -1\rangle|1, +1\rangle + |1, +1\rangle|1, -1\rangle + 2|1, 0\rangle|1, 0\rangle).$$

Для построения состояний с моментом $L = 1$, воспользуемся соотношениями ортогональности для коэффициентов Клебша-Гордана (2.19) и (2.20). Вначале выпишем явный вид уже известных коэффициентов:

$$C_{1,\pm 1,1,\pm 1}^{2,\pm 2} = 1, \quad C_{1,\pm 1,1,0}^{2,\pm 1} = C_{1,0,1,\pm 1}^{2,\pm 1} = \frac{1}{\sqrt{2}},$$

$$C_{1,\pm 1,1,\mp 1}^{2,0} = \frac{1}{\sqrt{6}}, \quad C_{1,0,1,0}^{2,0} = \sqrt{\frac{2}{3}}.$$

Теперь запишем соотношение ортогональности для $M' = M = +1$, $L' = 2$, $L = 1$:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (C_{1,+1,1,0}^{1,+1} + C_{1,0,1,+1}^{1,+1}) = 0.$$

Для значений $M' = M = 1$ и $L' = L = 1$ соотношение ортогональности есть просто условие нормировки, и мы получаем

$$|1, 1, 1, +1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|1, 0\rangle|1, +1\rangle - |1, +1\rangle|1, 0\rangle \right).$$

Вектор состояния $|1, 1, 1, -1\rangle$ получается отсюда тривиально. Теперь применим понижающий оператор \hat{L}_- к полученному состоянию:

$$|1, 1, 1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|1, -1\rangle|1, +1\rangle - |1, -1\rangle|1, +1\rangle \right).$$

Осталось построить последний вектор с $L = 0$. Вновь воспользуемся соотношениями ортогональности для состояний с $M' = M = 0$:

$$\begin{aligned} L' = 2, L = 0 &: \frac{1}{\sqrt{6}} \left(C_{1,+1,1,-1}^{0,0} + C_{1,-1,1,+1}^{0,0} \right) + \frac{2}{\sqrt{6}} C_{1,0,1,0}^{0,0} = 0; \\ L' = 1, L = 0 &: \frac{1}{\sqrt{2}} \left(C_{1,+1,1,-1}^{0,0} - C_{1,-1,1,+1}^{0,0} \right) = 0. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Решая уравнения (3.17) и используя условия нормировки, получаем

$$|1, 1, 0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(|1, -1\rangle|1, +1\rangle + |1, -1\rangle|1, +1\rangle - |1, 0\rangle|1, 0\rangle \right).$$

Очень часто вместо коэффициентов Клебша-Гордана удобно использовать их выражение через $3j$ -символы Вигнера, которые связаны соотношением:

$$C_{j_1, m_1; j_2, m_2}^{J, M} = (-1)^{j_1 - j_2 + M} \sqrt{2J + 1} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & J \\ m_1 & m_2 & -M \end{pmatrix}. \quad (3.24)$$

$3j$ -символы обладают свойствами симметрии, некоторые из которых мы перечислим.

Симметрия по отношению к перестановке столбцов:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j_3} \begin{pmatrix} j_2 & j_1 & j_3 \\ m_2 & m_1 & m_3 \end{pmatrix}. \quad (3.25)$$

Симметрия по отношению к замене знака проекций:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -m_1 & -m_2 & -m_3 \end{pmatrix}. \quad (3.26)$$

Сумма проекций равна нулю:

$$m_1 + m_2 + m_3 = 0. \quad (3.27)$$

Кроме перечисленных важных свойств, приведем очевидную, но очень полезную формулу:

$$\begin{pmatrix} j & j & 0 \\ m & -m & 0 \end{pmatrix} = (-1)^{j-m} \frac{1}{\sqrt{2j+1}}. \quad (3.28)$$

Более подробное изложение свойств $3j$ -символов можно найти в учебниках по квантовой механике или в специальной литературе, посвященной представлениям группы вращений.

Упражнения.

1. Записать соотношения ортогональности для $3j$ -символов.
2. Получить формулу (3.28).

5.4 Матрица поворота для $j = 1/2$ и 1

Получим сперва матрицу конечных вращений – функцию $d_{m'm}^j(\beta)$ – для системы с моментом $j = 1/2$. Матричные элементы определяются для оператора поворота относительно оси y . Воспользуемся результатами из курса квантовой механики для спина $1/2$:

$$e^{-i\Omega(\sigma\mathbf{n})} = \cos \frac{\Omega}{2} - i(\sigma\mathbf{n}) \sin \frac{\Omega}{2}.$$

Для того, чтобы получить вид матричных элементов оператора поворота, достаточно записать в соответствующем представлении спиновые операторы. Поэтому для функции $d_{m'm}^{1/2}(\beta)$ получаем:

$$d_{m'm}^{1/2}(\beta) = \begin{pmatrix} \cos \beta/2 & -\sin \beta/2 \\ \sin \beta/2 & \cos \beta/2 \end{pmatrix}. \quad (4.1)$$

Упражнение.

Получить выражение для функции $D^{1/2}(\alpha, \beta, \gamma)$.

Для момента $j = 1$ выражение для d -функции можно получить двумя способами. Поскольку они весьма поучительны, рассмотрим оба.

Первый способ состоит в установлении соответствия между векторами и собственными функциями оператора момента. Вновь сошлемся на сведения из курса квантовой механики: при преобразовании поворота собственные функции оператора момента выражаются линейными комбинациями этих же функций, записанных в “новой” системе координат. Собственно, это утверждение лежит в основе определения матрицы конечных вращений. Посмотрим на данное утверждение с несколько иных позиций. Для момента $j = 1$ существуют всего три линейно независимых функции: $Y_0^1(\theta, \varphi)$ и $Y_{\pm 1}^1(\theta, \varphi)$. Можно рассматривать эти три функции как компоненты трехмерного вектора, закон преобразования компонентов которого определяется матрицей $D^1(\theta, \varphi)$.

Рассмотрим теперь компоненты обычного радиус-вектора $\mathbf{r} = (x, y, z)$, которые преобразуются в соответствии с матрицей поворота в декартовой системе координат. Матрица поворота на угол β относительно оси y имеет вид:

$$P_y(\beta) = \begin{pmatrix} \cos \beta & 0 & \sin \beta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \beta & 0 & \cos \beta \end{pmatrix}. \quad (4.2)$$

Заметим, что матрица (4.2) определяет преобразование *действительных* компонент и поэтому действительна. Сферические функции комплексны, поскольку записаны не в действительных декартовых, а в комплексных “циркулярных” координатах. Поэтому следует перевести компоненты радиус-вектора в декартовых координатах в компоненты в циркулярных координатах:

$$\rho_0 = z, \quad \rho_{\pm 1} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (x \pm iy). \quad (4.3)$$

Переход к представлению (4.3) осуществляется с помощью унитарной матрицы преобразования:

$$C = \begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2} \\ -i/\sqrt{2} & 0 & i/\sqrt{2} \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad C^+ = \begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} & i/\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1/\sqrt{2} & i/\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.4)$$

Теперь легко получить искомое выражение для матрицы конечных вращений $D^{(1)}$ на угол β относительно оси y :
 $d^{(1)}(\beta) = C^+ P_y(\beta) C$.

$$\begin{aligned} d^{(1)}(\beta) &= \begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} & i/\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1/\sqrt{2} & i/\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \cdot \\ &\cdot \begin{pmatrix} \cos \beta & 0 & \sin \beta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \beta & 0 & \cos \beta \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2} \\ -i/\sqrt{2} & 0 & i/\sqrt{2} \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} (1 + \cos \beta)/2 & -\sin \beta/\sqrt{2} & (1 - \cos \beta)/2 \\ \sin \beta/\sqrt{2} & \cos \beta & -\sin \beta/\sqrt{2} \\ (1 - \cos \beta)/2 & \sin \beta/\sqrt{2} & (1 + \cos \beta)/2 \end{pmatrix}. \quad (4.5) \end{aligned}$$

Результат (4.5) можно получить, используя результаты предыдущего параграфа, посвященного сложению моментов. Мы знаем, что в результате сложения двух моментов

$1/2$ получаются состояние с моментом 0 и три состояния с моментом 1. Эти четыре состояния получилось в результате разбиения пространства четырех состояний, образованного прямым произведением подпространств двух состояний на два инвариантных подпространства. Следовательно, для получения матрицы $d(1)$ следует прямое произведение матриц (4.1) привести к квазидиагональному виду двух подматриц. Запишем прямое произведение двух матриц (4.1):

$$\begin{aligned}
 d^{1/2}(\beta) \otimes d^{1/2}(\beta) &= \begin{pmatrix} \cos \frac{\beta}{2} & -\sin \frac{\beta}{2} \\ \sin \frac{\beta}{2} & \cos \frac{\beta}{2} \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} \cos \frac{\beta}{2} & -\sin \frac{\beta}{2} \\ \sin \frac{\beta}{2} & \cos \frac{\beta}{2} \end{pmatrix} = \\
 &= \begin{pmatrix} \cos^2 \frac{\beta}{2} & -\cos \frac{\beta}{2} \sin \frac{\beta}{2} & -\sin \frac{\beta}{2} \cos \frac{\beta}{2} & \sin^2 \frac{\beta}{2} \\ \cos \frac{\beta}{2} \sin \frac{\beta}{2} & \cos^2 \frac{\beta}{2} & -\sin^2 \frac{\beta}{2} & -\sin \frac{\beta}{2} \cos \frac{\beta}{2} \\ \sin \frac{\beta}{2} \cos \frac{\beta}{2} & -\sin^2 \frac{\beta}{2} & \cos^2 \frac{\beta}{2} & -\cos \frac{\beta}{2} \sin \frac{\beta}{2} \\ \sin^2 \frac{\beta}{2} & \sin \frac{\beta}{2} \cos \frac{\beta}{2} & \cos \frac{\beta}{2} \sin \frac{\beta}{2} & \cos^2 \frac{\beta}{2} \end{pmatrix} = \\
 &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \cos \beta & -\sin \beta & -\sin \beta & 1 - \cos \beta \\ \sin \beta & 1 + \cos \beta & -(1 - \cos \beta) & -\sin \beta \\ \sin \beta & -(1 - \cos \beta) & 1 + \cos \beta & -\sin \beta \\ (1 - \cos \beta) & \sin \beta & \sin \beta & 1 + \cos \beta \end{pmatrix}. \tag{4.6}
 \end{aligned}$$

При сложении двух моментов $1/2$ состояния с противоположными проекциями перемешиваются с одинаковыми “вещными” множителями $1/\sqrt{2}$. В матрице (4.6) состояниям с суммарной проекцией стоят во вторых и третьих строках и столбцах. Для того, чтобы привести нашу матрицу к квазидиагональному виду следует провести унитарное преобразование

$$C = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad C^+ = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{4.7}$$

Искомая матрица представлена матрицей третьего ранга в получающемся разбиении, которое записывается в виде прямой суммы:

$$C^+ \left(d^{1/2}(\beta) \otimes d^{1/2}(\beta) \right) C = d^{(0)} \oplus d^{(1)} =$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & (1 + \cos \beta)/2 & -\sin \beta/\sqrt{2} & (1 - \cos \beta)/2 \\ 0 & \sin \beta/\sqrt{2} & \cos \beta & -\sin \beta/\sqrt{2} \\ 0 & (1 - \cos \beta)/2 & \sin \beta/\sqrt{2} & (1 + \cos \beta)/2 \end{pmatrix}. \quad (4.8)$$

Очевидно, для состояния с нулевым моментом матрица сводится к числу $d^{(0)} = 1$.

5.5 Угловой момент и система двух осцилляторов

Теорию углового момента можно изложить на языке повышающих и понижающих операторов системы двух одномерных гармонических осцилляторов (операторов “рождения” и “уничтожения”). Этот метод изложения принадлежит Йордану и Швингеру. Введем операторы уничтожения и рождения двух осцилляторов, соответственно a , a^+ и b , b^+ , удовлетворяющие коммутационным соотношениям повышающих и понижающих операторов для гармонического осциллятора:

$$[a, a^+] = 1, \quad [b, b^+] = 1, \quad [a, b] = [a, b^+] = 0. \quad (5.1)$$

Определим теперь операторы из билинейных комбинаций:

$$j_+ = a^+b, \quad j_- = ab^+, \quad j_z = \frac{1}{2} (a^+a - b^+b), \quad (5.2)$$

а также оператор квадрата момента

$$\mathbf{j}^2 = \frac{a^+a + b^+b}{2} \left(\frac{a^+a + b^+b}{2} + 1 \right). \quad (5.3)$$

Упражнения

1 Убедиться путем прямого вычисления, что операторы (5.2) удовлетворяют коммутационным соотношениям для оператора углового момента: $[j_z, j_{\pm}] = \pm j_{\pm}$, $[j_+, j_-] = 2j_z$.

2 Прямыми вычислениями показать, что $j_z^2 + (j_+ j_- + j_- j_+)/2$ имеет вид (5.3).

Из определений (5.2) и (5.3) следует, что состояния момента j с определенной проекцией $|j, m\rangle$ можно выразить через состояния системы двух не взаимодействующих гармонических осцилляторов $|n_a, n_b\rangle$, где $n_a, n_b = 0, 1, 2, \dots$. В этом случае максимальная проекция j определяется из суммы квантовых чисел двух осцилляторов:

$$2j = n_a + n_b. \quad (5.4)$$

Иными словами, состояния системы двух осцилляторов с заданной энергией $E_N = n_a + n_b + 1$ отвечают набору базисных векторов углового момента $|j, m\rangle$, где

$$m = \frac{n_a - n_b}{2}, \quad j = \frac{n_a + n_b}{2}. \quad (5.5)$$

Задачи

1 Получить формулы 1.13), определяющие действие повышающего и понижающего операторов момента импульса, зная действие операторов рождения и уничтожения осцилляторов на собственные векторы:

$$a^+ a |n_a, n_b\rangle = n_a |n_a, n_b\rangle, \quad a^+ |n_a, n_b\rangle = \sqrt{n_a + 1} |n_a + 1, n_b\rangle, \dots$$

2 Получить выражение для оператора конечных вращений (2.5), используя определения (5.2).

3 Получить выражение для коэффициентов Клебша-Гордана $C_{j_1 m_1, j_2 m_2}^{j m}$, используя представление момента в виде системы двумерных осцилляторов.

5.6 Представление матрицы плотности для системы с моментом j

Для системы с определенным моментом количества движения j матрица плотности может быть представлена в виде матрицы ранга $2j + 1$ с матричными элементами в базисе собственных состояний момента:

$$\rho_{mm'}^{(j)} = \langle jm | \hat{\rho}^{(j)} | jm' \rangle, \quad m, m' = -j, -j+1, \dots, j-1, j. \quad (6.1)$$

Используя представление с помощью проекционных операторов, для оператора плотности можем записать:

$$\hat{\rho}^{(j)} = \sum_{m, m' = -j}^j \rho_{mm'}^{(j)} |jm\rangle \langle jm'|. \quad (6.2)$$

Диагональные элементы матрицы плотности определяют (положительное) распределение вероятности измерения соответствующего значения проекции на ось квантования z :

$$\rho_{mm}^{(j)} = w_0(m). \quad (6.3)$$

Очевидно, распределение (6.3) нормировано:

$$\sum_{m=-j}^j w_0(m) = 1. \quad (6.4)$$

Запишем теперь представление оператора плотности в другой, повернутой системе отсчета. Для этого следует проделать соответствующее преобразование базисных векторов:

$$\rho_{m_1 m_2}^{(j)} = \left(D^{(j)} \hat{\rho}^{(j)} D^{(j)+} \right)_{m_1 m_2}. \quad (6.5)$$

Диагональные матричные элементы матрицы (6.5) определяют вероятности измерения соответствующей проекции

момента на ось квантования z' в системе отсчета, повернутой относительно исходной на углы Эйлера α, β, γ . Таким образом, “новые” вероятности также зависят от этих углов. Обозначим их как:

$$\begin{aligned} \tilde{w}(m_1, \alpha, \beta, \gamma) &= \\ &= \sum_{m_1, m_2 = -j}^j D_{m_1 m_1}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) \rho_{m_1' m_2'}^{(j)} D_{m_1 m_2}^{(j)*}(\alpha, \beta, \gamma). \end{aligned} \quad (6.6)$$

Вспомним свойство D -функций:

$$D_{m'm}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) = (-1)^{m'-m} D_{-m' -m}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) \quad (6.7)$$

и получим, что распределение вероятности (6.6) не зависит от угла γ , поэтому:

$$\tilde{w}(m_1, \alpha, \beta, \gamma) \equiv w(m_1, \alpha, \beta). \quad (6.8)$$

Пример

Рассмотрим систему со спином $j = 1/2$, находящуюся в состоянии с проекцией $m = +1/2$. Это состояние описывается матрицей плотности

$$\rho_+ = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (6.9)$$

В этом случае томографическое распределение вероятности есть:

$$w\left(+\frac{1}{2}, \alpha, \beta\right) = \cos^2 \frac{\beta}{2}, \quad w\left(-\frac{1}{2}, \alpha, \beta\right) = \sin^2 \frac{\beta}{2}. \quad (6.10)$$

Обратим теперь выражение (6.6), т.е. выразим матрицу плотности через томографическое распределение вероятности. Поскольку рассматриваемое выражение представляет собой скаляр, умножим его на D -функцию Вигнера с

фиксированной нулевой проекцией в первом индексе и проинтегрируем по всем углам Эйлера:

$$\begin{aligned} & \int (-1)^{m_1} w(m_1, \alpha, \beta) D_{0m_3}^{(j_3)}(\alpha, \beta, \gamma) \frac{d\omega}{8\pi^2} = \sum_{m_1, m_2 = -j}^j \rho_{m'_1 m'_2}^{(j)} (-1)^{m_1} \\ & \int \frac{d\omega}{8\pi^2} D_{m_1 m'_1}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) D_{m_1 m'_2}^{(j)*}(\alpha, \beta, \gamma) D_{0m_3}^{(j_3)}(\alpha, \beta, \gamma) = (6.11) \\ & = \sum_{m_1, m_2 = -j}^j (-1)^{m'_2} \rho_{m'_1 m'_2}^{(j)} \begin{pmatrix} j & j & j_3 \\ m_1 & -m_1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j & j & j_3 \\ m'_1 & -m'_2 & m_3 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Здесь мы воспользовались известным свойством D -функций Вигнера:

$$\begin{aligned} & \int \frac{d\omega}{8\pi^2} D_{m_1 m'_1}^{(j_1)}(\omega) D_{m_2 m'_2}^{(j_2)}(\omega) D_{m_3 m'_3}^{(j_3)}(\omega) = \\ & = \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m'_1 & m'_2 & m'_3 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (6.12)$$

Здесь

$$\int d\omega = \int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^{\pi} \sin \beta d\beta \int_0^{2\pi} d\gamma. \quad (6.13)$$

Дальнейшие преобразования требуют применения соотношений ортогональности для $3j$ -символов:

$$\begin{aligned} (2j+1) \sum_{m_1 = -j_1}^{j_1} \sum_{m_2 = -j_2}^{j_2} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & -m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j' \\ m_1 & m_2 & -m' \end{pmatrix} = \\ = \delta_{j j'} \delta_{m m'}; \end{aligned} \quad (6.14)$$

$$\begin{aligned} \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \sum_{m=-j}^j (2j+1) \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & -m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m'_1 & m'_2 & -m \end{pmatrix} = \\ = \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2}. \end{aligned} \quad (6.15)$$

Умножим выражение (6.11) на соответствующий $3j$ -символ Вигнера и просуммируем по проекции m_1 :

$$(2j_3 + 1) \sum_{m_1=-j}^j \begin{pmatrix} j & j & j_3 \\ m'_1 & -m_1 & 0 \end{pmatrix} \int (-1)^{m_1} \frac{d\omega}{8\pi^2} w(m_1, \alpha, \beta) \cdot$$

$$\cdot D_{0m_3}^{(j_3)}(\alpha, \beta, \gamma) = \sum_{m'_1=-j}^j \sum_{m'_2=-j}^j (-1)^{m'_2} \rho_{m'_1 m'_2}^{(j)} \begin{pmatrix} j & j & j_3 \\ m'_1 & -m'_2 & m_3 \end{pmatrix}. \quad (6.16)$$

Умножим полученное выражение (6.16) на вигнеровский символ

$$(2j_3 + 1) \begin{pmatrix} j & j & j_3 \\ m''_1 & -m''_2 & m_3 \end{pmatrix}$$

просуммируем по переменным j_3 и m_3 и получим:

$$\sum_{j_3=0}^{2j} \sum_{m_3=-j_3}^{j_3} (2j_3 + 1)^2 \sum_{m_1=-j}^j \int (-1)^{m_1} w(m_1, \alpha, \beta) D_{0m_3}^{(j_3)}(\alpha, \beta, \gamma) \times$$

$$\times \begin{pmatrix} j & j & j_3 \\ m_1 & -m_1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j & j & j_3 \\ m'_1 & -m'_1 & m_3 \end{pmatrix} \frac{d\omega}{8\pi^2} =$$

$$= (-1)^{m'_2} \rho_{m_1 m'_1}^{(j)}. \quad (6.17)$$

Таким образом, задача обращения формулы (6.6) решена.

Итак, если дано томографическое распределение вероятности для произвольного момента (спина), можно реконструировать матрицу плотности состояния с помощью полученных соотношений. Этот результат позволяет измерять состояния момента, измеряя лишь проекцию на данную ось. Получаемая *экспериментальная функция распределения* вероятностей, зависящая от двух углов, позволяет полностью реконструировать информацию о квантовом состоянии момента. Это означает, что распределение вероятностей может быть использовано для описания квантового объекта вместо комплексных функций и матрицы плотности.

5.7 Инвариантная формулировка томографии состояний момента

Состояния момента могут быть определены в инвариантной форме связи распределения вероятностей и оператора плотности. Определим функцию на сфере единичного радиуса:

$$\begin{aligned} \Phi_{j,m'_1 m'_2}^{(j_3)}(\alpha, \beta) &= \\ &= (-1)^{m'_2} \sum_{m_3=-j_3}^{j_3} D_{0m_3}^{(j_3)}(\alpha, \beta, \gamma) \begin{pmatrix} j & j & j_3 \\ m'_1 & -m'_2 & m_3 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (7.1)$$

и, соответственно, оператор:

$$\widehat{A}_j^{(j_3)}(\alpha, \beta) = (2j_3 + 1)^2 \sum_{m'_1=-j}^j \sum_{m'_2=-j}^j \Phi_{j,m'_1 m'_2}^{(j_3)}(\alpha, \beta) |jm'_1\rangle \langle jm'_2|. \quad (7.2)$$

Если теперь, используя выражения (7.1) и (7.2) определить оператор на сфере

$$\widehat{B}_{m_1}^j(\alpha, \beta) = (-1)^{m_1} \sum_{j_3=0}^{2j} \begin{pmatrix} j & j & j_3 \\ m_1 & -m_1 & 0 \end{pmatrix} \widehat{A}_j^{(j_3)}(\alpha, \beta), \quad (7.3)$$

оператор плотности можно записать в виде:

$$\hat{\rho}^{(j)} = \sum_{m_1=-j}^j \int w(m_1, \alpha, \beta) \widehat{B}_{m_1}^j(\alpha, \beta) \frac{d\omega}{8\pi^2}. \quad (7.4)$$

Суммирование по всем возможным проекциям означает усреднение оператора (7.3) по распределению вероятностей:

$$\hat{\rho}^{(j)} = \int \frac{d\omega}{8\pi^2} \langle \widehat{B}_{m_1}^j(\alpha, \beta) \rangle, \quad (7.5)$$

где

$$\langle \widehat{B}_{m_1}^j(\alpha, \beta) \rangle = \sum_{m_1=-j}^j w(m_1, \alpha, \beta) \widehat{B}_{m_1}^j(\alpha, \beta). \quad (7.6)$$

Если некоторая наблюдаемая определяется оператором \widehat{K} , ее можно описать функцией

$$\phi_K^{(j)}(m_1, \alpha, \beta) = \text{Tr} \widehat{K} \widehat{B}_{m_1}^j(\alpha, \beta). \quad (7.7)$$

При таком определении среднее значение этой наблюдаемой определяется “обычной” формулой теории вероятностей:

$$\langle \widehat{K} \rangle = \sum_{m_1=-j}^j \int \frac{d\omega}{8\pi^2} w(m_1, \alpha, \beta) \phi_K^{(j)}(m_1, \alpha, \beta). \quad (7.8)$$

Таким образом, наблюдаемую величину – спин системы можно описать с помощью некоторой s -числовой функцией, зависящей от параметров системы отсчета. Средние значения при этом вычисляются, используя эту функцию так же, как в стандартной теории вероятностей.

Глава 6

Перепутанные состояния (entanglement)

6.1 Сепарабельные и перепутанные состояния

Рассмотрим матрицу плотности системы двух частиц со спинами j_1 и j_2 соответственно. Состояния такой системы делятся на два принципиально различных типа: сепарабельные и перепутанные. *Сепарабельными* называются состояния, матрица плотности которых представима в виде суммы:

$$\rho = \sum_k p_k \rho_k^{j_1} \otimes \rho_k^{j_2}. \quad (1.1)$$

Здесь положительные числа $p_k \geq 0$ и удовлетворяют условию:

$$\sum_k p_k = 1. \quad (1.2)$$

Набор чисел k произволен. В частности, эти числа могут принимать непрерывные значения, в таком случае суммирование следует понимать в интегральном смысле и заменять суммирование интегрированием по области изменения непрерывной переменной – индекса k : $\int dk$. Матрицы плотности ρ_k как для подсистемы со спином j_1 , так и для подсистемы со спином j_2 . могут быть в общем случае неортогональными, т.е.:

$$\rho_k^{j_1} \rho_{k'}^{j_1} \neq 0, \rho_k^{j_2} \rho_{k'}^{j_2} \neq 0. \quad (1.3)$$

При усреднении сепарабельной матрицы плотности (1.1) по степеням свободы подсистемы со спином j_2 получается матрица плотности, которая описывает только подсистему со спином j_1 , при этом она равна:

$$\overline{\rho}_1 = \text{Tr}_{j_2} \rho = \sum_k p_k \rho_k^{j_1}. \quad (1.4)$$

Совершенно аналогично определяется матрица плотности второй подсистемы:

$$\overline{\rho}_2 = \text{Tr}_{j_1} \rho = \sum_k p_k \rho_k^{j_2}. \quad (1.5)$$

Здесь мы воспользовались условием нормировки матрицы плотности:

$$\text{Tr} \rho_k^{j_1} = 1, \quad \text{Tr} \rho_k^{j_2} = 1.$$

Рассмотрим случай, когда сепарабельная матрица плотности имеет вид:

$$\rho = \rho_1^{j_1} \otimes \rho_1^{j_2}. \quad (1.6)$$

Очевидно, для состояния системы с матрицей плотности (1.6) состояния двух подсистем полностью независимы, иными словами, корреляции подсистемы со спинами j_1 и j_2 отсутствуют. Это, в частности означает, что среднее от произведения любых двух операторов, действующих на состояния различных подсистем равны произведению средних

для каждой подсистемы:

$$\langle \hat{f}(j_1)\hat{g}(j_2) \rangle = \text{Tr} \rho \hat{f}(j_1)\hat{g}(j_2) = \langle \hat{f}(j_1) \rangle \langle \hat{g}(j_2) \rangle. \quad (1.7)$$

Здесь

$$\langle \hat{f}(j_1) \rangle = \text{Tr} \hat{f}(j_1)\rho_1^{(j_1)}, \quad \langle \hat{g}(j_2) \rangle = \text{Tr} \hat{g}(j_2)\rho_1^{(j_2)}.$$

В случае чистых состояний подсистем, матрица плотности (1.6) может быть выражена через собственные векторы состояний $|j_1\rangle$ и $|j_2\rangle$:

$$\rho = |j_1\rangle\langle j_1| \otimes |j_2\rangle\langle j_2|. \quad (1.8)$$

Для сепарабельной матрицы плотности общего вида (1.1) состояния двух подсистем уже не независимы и для средних величин возникают корреляции, которые, однако, имеют специальный вид:

$$\begin{aligned} \langle \hat{f}(j_1) \rangle &= \sum_k p_k \langle \hat{f}(j_1) \rangle_{(k)}, \\ \langle \hat{g}(j_2) \rangle &= \sum_k p_k \langle \hat{g}(j_2) \rangle_{(k)} \end{aligned} \quad (1.9)$$

и

$$\langle \hat{f}(j_1)\hat{g}(j_2) \rangle = \sum_k p_k \langle \hat{f}(j_1) \rangle_{(k)} \langle \hat{g}(j_2) \rangle_{(k)}. \quad (1.10)$$

Здесь

$$\langle \hat{f}(j_1) \rangle_{(k)} = \text{Tr} \hat{f}(j_1)\rho_k^{(j_1)}, \quad \langle \hat{g}(j_2) \rangle_{(k)} = \text{Tr} \hat{g}(j_2)\rho_k^{(j_2)}. \quad (1.11)$$

Состояния называются *перепутанными* (entangled states), если их матрицы плотности не могут быть представлены в виде суммы (1.1) ни для каких положительных чисел p_k , удовлетворяющих условию нормировки (1.2).

6.2 Критерий сепарабельности

Существует необходимое условие сепарабельности состояний (критерий Переса). Он основан на следующем свойстве произвольной матрицы плотности, а именно: если дана некоторая матрица плотности ρ , то транспонированная к ней матрица R , т.е.

$$R = \rho^t \quad (2.1)$$

удовлетворяет всем свойствам матрицы плотности. Действительно:

$$\text{Tr}R = \text{Tr}\rho^t = 1, \quad (2.2)$$

$$R^+ = (\rho^t)^+ = \rho_t = r, \quad (2.3)$$

$$R = \rho^t \geq 1. \quad (2.4)$$

Последнее условие неотрицательности матрицы следует из того, что собственные значения матрицы ρ и транспонированной к ней ρ^t одинаковы. Поскольку собственные значения матрицы плотности неотрицательны, следовательно они неотрицательны и для матрицы R .

Воспользуемся свойствами (2.2) и рассмотрим преобразованную сепарабельную матрицу плотности (1.1) вида $\rho^{\mathcal{P}}$, а именно:

$$\rho^{\mathcal{P}} = \sum_k p_k \rho_k^{(j_1)} \otimes (\rho_k^{(j_2)})^t. \quad (2.5)$$

Поскольку матрицы $(\rho_k^{(j_2)})^t$ являются допустимыми матрицами плотности (они удовлетворяют всем критериям!), новая матрица $\rho^{\mathcal{P}}$ также удовлетворяет всем требованиям по построению: эрмитова, неотрицательна и нормирована. Преобразование, которое мы сделали с матрицей плотности ρ называют преобразованием *частичного транспонирования*. Свойство сепарабельных состояний переходит при

частичном транспонировании в другую допустимую матрицу плотности называют *критерием сепарабельности Переса*. Это свойство оказывается необходимым условием, однако не достаточно в общем случае.

6.3 Состояние Вернера

Рассмотрим в качестве примера состояние системы двух спинов $1/2$, описываемых матрицей плотности вида (состояние Вернера):

$$\rho_W = \begin{pmatrix} \frac{1+p}{4} & 0 & 0 & \frac{p}{2} \\ 0 & \frac{1-p}{4} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1-p}{4} & 0 \\ \frac{p}{2} & 0 & 0 & \frac{1+p}{4} \end{pmatrix}. \quad (2.1)$$

Здесь p – непрерывный параметр.

Матрица плотности (2.1) соответствует оператору плотности $\hat{\rho}$, матричные элементы которого вычислены в стандартном базисе независимых состояний двух спинов:

$$\begin{aligned} |1\rangle &= |+\rangle|+\rangle, & |2\rangle &= |+\rangle|-\rangle, \\ |3\rangle &= |-\rangle|+\rangle, & |4\rangle &= |-\rangle|-\rangle. \end{aligned} \quad (2.2)$$

Собственные значения матрицы плотности ρ_W (2.2) равны:

$$\rho_1 = \frac{1+3p}{4}, \quad \lambda_{2,3,4} = \lambda_1 - p. \quad (2.3)$$

Для того, чтобы собственные значения матрицы плотности (2.3) были положительными, параметр p может принимать значения:

$$-\frac{1}{3} < p < 1. \quad (2.4)$$

Таким образом, интервал возможных значений параметра p (2.4) описывает состояния Вернера.

Можно убедиться, что операция частичного транспонирования переводит матрицу плотности состояния Вернера в матрицу

$$\rho_W^{\mathcal{P}} = \begin{pmatrix} \frac{1+p}{4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1-p}{4} & \frac{p}{2} & 0 \\ 0 & \frac{p}{2} & \frac{1-p}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1+p}{4} \end{pmatrix}. \quad (2.5)$$

Легко видеть, что так построенная матрица эрмитова и имеет единичный след.

Собственные значения матрицы (2.5) равны:

$$\lambda_1^{\mathcal{P}} = \frac{1-3p}{4}, \quad \lambda_{2,3,4}^{\mathcal{P}} = \frac{1+p}{4}. \quad (2.6)$$

Условие положительности матрицы $\rho_W^{\mathcal{P}}$ выполняется для интервала значений параметра

$$-1 < p < \frac{1}{3}. \quad (2.7)$$

Таким образом приходим к выводу, что при значениях

$$\frac{1}{3} < p < 1 \quad (2.8)$$

состояние Вернера оказывается перепутанным, поскольку необходимое условие сепарабельности (2.7) для этих значений параметра p нарушено.

В более общем виде матрица плотности такого типа может быть представлена в виде:

$$\rho = \begin{pmatrix} R_{11} & 0 & 0 & R_{12} \\ 0 & \rho_{11} & \rho_{12} & 0 \\ 0 & \rho_{21} & \rho_{22} & 0 \\ R_{21} & 0 & 0 & R_{22} \end{pmatrix}, \quad \text{Tr} \rho = 1, \quad \rho^+ = \rho. \quad (2.9)$$

Условие неотрицательности матрицы плотности ρ (2.9) дают неравенства:

$$\det \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{21} & \rho_{22} \end{pmatrix} \geq 0, \quad \det \begin{pmatrix} R_{11} & R_{12} \\ R_{21} & R_{22} \end{pmatrix} \geq 0. \quad (2.10)$$

Условия эрмитовости и неотрицательности означают:

$$\rho_{11} \geq 0, \quad \rho_{22} \geq 0, \quad R_{11} \geq 0, \quad R_{22} \geq 0. \quad (2.11)$$

Преобразование частичного транспонирования дает эрмитову матрицу с единичным следом:

$$\rho^{\mathcal{P}} = \begin{pmatrix} R_{11} & 0 & 0 & \rho_{12} \\ 0 & \rho_{11} & R_{12} & 0 \\ 0 & R_{21} & \rho_{22} & 0 \\ \rho_{21} & 0 & 0 & R_{22} \end{pmatrix}. \quad (2.12)$$

Условие неотрицательности матрицы $\rho^{\mathcal{P}}$ задает неравенствам:

$$R_{11}R_{22} \geq |\rho_{12}|^2, \quad \rho_{11}\rho_{22} \geq |R_{12}|^2. \quad (2.13)$$

При нарушении неравенств (2.13) матрица плотности (2.9), удовлетворяющая условиям (2.10) и (2.11) описывает перепутанные состояния. Как видим, состояние Вернера (2.1) представляет частный случай состояния (2.9).

Глава 7

Системы многих частиц

7.1 Система связанных гармонических осцилляторов

Прежде чем перейти к изучению систем многих частиц, рассмотрим систему с большим числом степеней свободы: N связанных одномерных гармонических осцилляторов. Для этой системы гамильтониан можно записать в виде

$$\hat{H} = \sum_k \frac{\hat{P}_k^2}{2m_k} + \sum_{k,l} V_{kl} \hat{Q}_k \hat{Q}_l, \quad (1.1)$$

где \hat{Q}_k и \hat{P}_k – операторы обобщенных координат и импульсов, которые удовлетворяют известным коммутационным соотношениям:

$$[\hat{Q}_k, \hat{Q}_l] = [\hat{P}_k, \hat{P}_l] = 0, \quad [\hat{Q}_k, \hat{P}_l] = i\hbar\delta_{kl}, \quad (1.2)$$

а матрица связи действительна и симметрична: $V_{kl} = V_{lk}$.

Приведем гамильтониан (1.1) к более симметричному виду, сделав замену переменных

$$\hat{q}_k = \sqrt{m_k} \hat{Q}_k, \quad \hat{p}_k = \frac{1}{\sqrt{m_k}} \hat{P}_k \quad (1.3)$$

и введя переопределение

$$U_{kl} = \frac{2}{\sqrt{m_k m_l}} V_{kl},$$

тогда коммутационные соотношения останутся прежними (1.2), а гамильтониан примет вид:

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_k \hat{p}_k^2 + \frac{1}{2} \sum_{k,l} U_{kl} \hat{q}_k \hat{q}_l. \quad (1.4)$$

Будем считать, что матрица U_{kl} невырождена и положительно определена, тогда ее можно диагонализировать. Диагонализация по сути дела означает переход к *нормальным координатам* \hat{q}_α . Пусть переход к нормальным координатам осуществляется с помощью ортогональной матрицы:

$$\hat{q}_\alpha = \sum_k C_{\alpha k} \hat{q}_k, \quad \hat{q}_k = \sum_\alpha C_{k\alpha} \hat{q}_\alpha \quad (1.5)$$

где

$$\sum_k C_{\alpha k} C_{\beta k} = \delta_{\alpha\beta}, \quad \sum_\alpha C_{\alpha k} C_{\alpha l} = \delta_{kl}.$$

Поскольку матрица $C_{\alpha k}$ диагонализует матрицу связи, можно записать¹:

$$\sum_{k,l} C_{k\alpha} V_{kl} C_{l\beta} = \omega_\alpha^2 \delta_{\alpha\beta}. \quad (1.6)$$

Следовательно

$$\sum_{k,l} U_{kl} \hat{q}_k \hat{q}_l = \sum_{k,l} U_{kl} \sum_\alpha C_{k\alpha} \hat{q}_\alpha \sum_\beta C_{l\beta} \hat{q}_\beta = \sum_\alpha \omega_\alpha^2 \hat{q}_\alpha^2.$$

Поскольку операторы координаты и импульса канонически сопряжены, нормальные компоненты импульса также определяются матрицей $C_{\alpha k}$:

$$\hat{p}_\alpha = \sum_k C_{\alpha k} \hat{p}_k, \quad \hat{p}_k = \sum_\alpha C_{k\alpha} \hat{p}_\alpha, \quad (1.7)$$

¹Матрица связи положительно определена!

причем

$$[\hat{q}_\alpha, \hat{p}_\beta] = i\hbar\delta_{\alpha\beta}. \quad (1.8)$$

Подставляя все введенные обозначения и определения в формулу (1.4), получаем гамильтониан в виде суммы гамильтонианов *несвязанных* осцилляторов:

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} (\hat{p}_{\alpha}^2 + \omega_{\alpha}^2 \hat{q}_{\alpha}^2). \quad (1.9)$$

Таким образом можно сделать вывод, что состояние системы осцилляторов можно представить в виде *прямого* произведения состояний одномерных осцилляторов, соответствующих нормальным степеням свободы. Поскольку состояние одномерного осциллятора определяется только *одним квантовым числом* n , имеем:

$$|\Psi\rangle = |n_1\rangle \otimes |n_2\rangle \otimes \cdots \otimes |n_N\rangle \equiv \prod_{\alpha=1}^N \otimes |n_{\alpha}\rangle. \quad (1.10)$$

Здесь мы явно написали знак *прямого произведения*, поскольку пространство состояний N осцилляторов имеет размерность *произведения размерностей* пространств состояний одномерных осцилляторов. Очень часто знак прямого произведения \otimes опускают для простоты, или считая это само собой разумеющимся, однако по крайней мере один раз все нужно написать в явном виде. Энергия системы осцилляторов равна сумме энергий. Соответственно, как и для одного одномерного осциллятора удобно ввести повы-

шающий и понижающий операторы:

$$\begin{aligned}\hat{a}_\alpha &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{\omega_\alpha}{\hbar}} \hat{q}_\alpha + \frac{i}{\sqrt{\hbar\omega_\alpha}} \hat{p}_\alpha \right), \\ \hat{a}_\alpha^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{\omega_\alpha}{\hbar}} \hat{q}_\alpha - \frac{i}{\sqrt{\hbar\omega_\alpha}} \hat{p}_\alpha \right),\end{aligned}\quad (1.11)$$

$$\hat{q}_\alpha = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_\alpha}} (\hat{a}_\alpha^+ + \hat{a}_\alpha), \quad \hat{p}_\alpha = i\sqrt{\frac{\hbar\omega_\alpha}{2}} (\hat{a}_\alpha^+ - \hat{a}_\alpha). \quad (1.12)$$

Так введенные нами операторы удовлетворяют коммутационным соотношениям:

$$[\hat{a}_\alpha, \hat{a}_\beta] = [\hat{a}_\alpha^+, \hat{a}_\beta^+] = 0, \quad [\hat{a}_\alpha, \hat{a}_\beta^+] = \delta_{\alpha\beta}. \quad (1.13)$$

Учитывая определения операторов и их коммутационные соотношения (1.13), запишем гамильтониан (1.1) в виде:

$$\hat{H} = \sum_\alpha \hbar\omega_\alpha \left(\hat{a}_\alpha^+ \hat{a}_\alpha + \frac{1}{2} \right). \quad (1.14)$$

Соответственно, собственные состояния задаются совокупностью N чисел n_α и их можно записать как

$$|\Psi\rangle \equiv |n_1 n_2, \dots, n_N\rangle = \left[\prod_\alpha \frac{(a_\alpha^+)^{n_\alpha}}{\sqrt{n_\alpha!}} \right] |00 \dots 0\rangle, \quad (1.15)$$

а уровни энергии равны:

$$E_{n_1, n_2, \dots, n_N} = \sum_\alpha (n_\alpha + 1/2) \hbar\omega_\alpha. \quad (1.16)$$

Энергия основного состояния $|00 \dots 0\rangle$ равна $\sum_\alpha \hbar\omega_\alpha/2$ и для системы с бесконечным числом степеней свободы обращается в бесконечность. Поэтому обычно энергию системы переопределяют, отсчитывая от энергии основного состояния. В таком случае в формулах (1.14) и (1.16) $1/2$ в скобках исчезает.

Подводя итог параграфа, можно сказать, что система связанных осцилляторов может быть представлена как *ансамбль независимых осцилляторов*, а энергия системы равна сумме энергий всех независимых подсистем. При этом заметим, что если рассматривать только энергию системы (1.16), ее можно представить как сумму энергий

$$\mathcal{N} = \sum_{\alpha} n_{\alpha}$$

осцилляторов, из которых n_{α} описываются одинаковой частотой ω_{α} и находятся *на первом возбужденном уровне*. Теперь в нашем описании получили, что все n_{α} осцилляторов *неразличимы*, что выражается множителем $\sqrt{n_{\alpha}!}$ в знаменателе. Заметим, что $n_{\alpha}!$ – число перестановок одинаковых (тождественных) осцилляторов.

7.2 Системы тождественных частиц

Перейдем к рассмотрению систем тождественных частиц. Как известно, есть два принципиально разных “сорта” частиц, которые отличаются своими свойствами относительно перестановки их в системе. Поскольку тождественные частицы *физически* неразличимы, отличие в описании этих двух сортов частиц может быть выражено только лишь в различном поведении состояний (волновых функций) относительно перестановки частиц местами. Мы видели в предыдущем параграфе, что состояние системы независимых частиц может быть записано в виде прямого произведения *одночастичных* состояний. Если мы условно пронумеруем все эти независимые различные частицы и в произведении место каждого сомножителя в прямом произведении будет соответствовать частице с данным номером, тогда такое

N -частичное состояние будет записано в виде:

$$|\psi\rangle = |\psi_1\rangle|\psi_2\rangle \dots |\psi_N\rangle. \quad (2.1)$$

Поскольку все одночастичные состояния определены в *своих одночастичных пространствах*, скалярное произведение двух N -частичных состояний есть

$$\begin{aligned} \langle\varphi|\psi\rangle &= (\langle\varphi_1|\langle\varphi_2|\dots\langle\varphi_N|)(|\psi_1\rangle|\psi_2\rangle|\dots|\psi_N\rangle) = \\ &= \langle\varphi_1|\psi_1\rangle\langle\varphi_2|\psi_2\rangle \dots \langle\varphi_N|\psi_N\rangle. \end{aligned} \quad (2.2)$$

Волновая функция N -частичного состояния (2.1) может быть записана как

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \langle\mathbf{r}_1|\langle\mathbf{r}_2|\dots\langle\mathbf{r}_N||\psi\rangle = \psi(\mathbf{r}_1)\psi(\mathbf{r}_2) \dots \psi(\mathbf{r}_N). \quad (2.3)$$

Волновая функция (2.3) не обладает никакой симметрией относительно перестановки частиц, поскольку они в данном случае все различимы.

Систему N независимых тождественных частиц также можно описать на языке *одночастичных* состояний, однако в силу неразличимости частиц мы теперь не можем пронумеровать их. Поэтому мы можем только констатировать факт, что в данном N -частичном состоянии представлены N , вообще говоря различных, одночастичных состояний. Сохраняя теперь вместо нумерации частиц нумерацию *состояний*, мы должны полностью симметризовать или антисимметризовать N -частичное состояние тождественных частиц. Как известно, симметричными состояниями описываются *бозе-частицы*, а антисимметричными – *ферми-частицы*. Введем параметр ζ , который принимает значения

$$\zeta = \begin{cases} +1 & \text{для бозе-частиц,} \\ -1 & \text{для ферми-частиц.} \end{cases} \quad (2.4)$$

Для тождественных частиц имеет место свойство:

$$|\psi_1\rangle \dots |\psi_i\rangle \dots |\psi_k\rangle \dots |\psi_N\rangle = \zeta |\psi_1\rangle \dots |\psi_k\rangle \dots |\psi_i\rangle \dots |\psi_N\rangle. \quad (2.5)$$

Теперь состояние (2.5) можно выразить через одночастичные состояния, проведя все возможные перестановки:

$$|\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N\rangle_\zeta = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P \zeta^P |\psi_{P(1)}\rangle |\psi_{P(2)}\rangle \dots |\psi_{P(N)}\rangle, \quad (2.6)$$

где символ P означает все перестановки N аргументов. Нам нужно уметь переходить от векторного представления (2.6) к волновым функциям. Для этого следует определить скалярное произведение таких (анти)симметризованных выражений. Запишем вектор бра:

$$\zeta \langle \varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_N | = \sum_Q \zeta^Q \langle \varphi_{Q(1)} | \langle \varphi_{Q(2)} | \dots \langle \varphi_{Q(N)} |$$

и найдем скалярное произведение его с вектором (2.6):

$$\begin{aligned} & \zeta \langle \varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_N | \psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N \rangle_\zeta = \\ &= \frac{1}{N!} \sum_{Q,P} \zeta^Q \zeta^P \langle \varphi_{Q(1)} | \langle \varphi_{Q(2)} | \dots \langle \varphi_{Q(N)} | |\psi_{P(1)}\rangle |\psi_{P(2)}\rangle \dots |\psi_{P(N)}\rangle = \\ &= \frac{1}{N!} \sum_{Q,P} \zeta^Q \zeta^P \langle \varphi_{Q(1)} | \psi_{P(1)} \rangle \langle \varphi_{Q(2)} | \psi_{P(2)} \rangle \dots \langle \varphi_{Q(N)} | \psi_{P(N)} \rangle = \\ &= \frac{1}{N!} \sum_{Q,P} \zeta^Q \zeta^P \langle \varphi_1 | \psi_{PQ^{-1}(1)} \rangle \langle \varphi_2 | \psi_{PQ^{-1}(2)} \rangle \dots \langle \varphi_N | \psi_{PQ^{-1}(N)} \rangle = \\ &= \frac{1}{N!} \sum_{PQ^{-1}} \zeta^{PQ^{-1}} \langle \varphi_1 | \psi_{PQ^{-1}(1)} \rangle \langle \varphi_2 | \psi_{PQ^{-1}(2)} \rangle \dots \langle \varphi_N | \psi_{PQ^{-1}(N)} \rangle. \end{aligned}$$

Обозначая перестановку $PQ^{-1} = R$ и учитывая, что остающееся независимое суммирование $\sum_Q = N!$, получаем:

$$\zeta \langle \varphi_1 \dots \varphi_N | \psi_1 \dots \psi_N \rangle_\zeta = \sum_R \zeta^R \langle \varphi_1 | \psi_{R(1)} \rangle \dots \langle \varphi_N | \psi_{R(N)} \rangle. \quad (2.7)$$

Можно заметить, что для ферми-частиц сумма (2.7) представляет собой детерминант матрицы

$$\begin{aligned}
 & -\langle \varphi_1, \dots, \varphi_N | \psi_1, \dots, \psi_N \rangle = \\
 & = \det \begin{pmatrix} \langle \varphi_1 | \psi_1 \rangle & \dots & \langle \varphi_1 | \psi_N \rangle \\ \dots & \dots & \dots \\ \langle \varphi_N | \psi_1 \rangle & \dots & \langle \varphi_N | \psi_N \rangle \end{pmatrix}. \quad (2.8)
 \end{aligned}$$

Легко видеть, что *никакие две ферми-частицы* не могут находиться в *одинаковом* состоянии.

Для бозе-частиц вместо детерминанта в выражении (2.7) стоит полностью симметричная сумма скалярных произведений, которая называется *перманентом*.

В дальнейшем остается условиться, как нумеровать одночастичные состояния. Очевидно, для описания одночастичных состояний удобно выбрать *ортонормированный базис* $|\beta_i\rangle$, где β_i полный набор квантовых чисел, необходимых для описания данных одночастичных состояний. Можно пронумеровать в порядке возрастания какой-либо величины, скажем, энергии. Тогда N -частичное состояние можно записать как $|\beta_1, \beta_2 \dots \beta_N\rangle$, где $\beta_1 \leq \beta_2 \dots \beta_N$ для бозе-частиц. Поскольку ферми-частицы не могут находиться в одинаковых состояниях $|\alpha_i\rangle$, следует оставить строгие неравенства в определении N -частичного состояния $|\alpha_1, \alpha_2, \dots \alpha_N\rangle$ и $\alpha_1 < \alpha_2 < \dots < \alpha_N$. Полученное так N -частичное состояние для ферми-частиц нормировано, а для бозе-частиц не будет нормированным, если в $|\beta_i\rangle$ состоянии находится $n_i > 1$ частиц. Нормировка достигается делением на корень квадратный из соответствующего числа перестановок. Таким образом можно записать:

$$\begin{aligned}
 & \frac{|\beta_1, \beta_2 \dots \beta_N\rangle}{\sqrt{n_1! n_2! \dots}}; \beta_1 \leq \beta_2 \leq \dots \leq \beta_N \text{ для бозе-частиц,} \quad (2.9) \\
 & |\alpha_1, \alpha_2, \dots \alpha_N\rangle; \alpha_1 < \alpha_2 < \dots < \alpha_N \text{ для ферми-частиц.}
 \end{aligned}$$

Итак, совокупность состояний (2.9) составляет базис в пространстве N -частичных состояний соответственно бозе-и ферми-систем. Если мы рассматриваем системы с переменным числом частиц, пространство состояний таких систем должно быть *прямой суммой* пространств всех возможных N -частичных состояний:

$$|\Psi\rangle = |\psi^{(1)}\rangle \oplus |\psi^{(2)}\rangle \oplus \dots \oplus |\psi^{(N)}\rangle \oplus \dots = \sum_{N=1} \oplus |\psi^{(N)}\rangle. \quad (2.10)$$

Очевидно, *по определению* состояния в подпространствах с разным числом частиц ортогональны. Обычно вместо знака прямой суммы пишут знак обычного суммирования, полагая такое представление очевидным. Мы также для простоты в дальнейшем будем писать вместо знака \oplus знак обычного суммирования, полагая, что это не приведет в дальнейшем к недоразумениям. Пространство состояний (2.10) называется *пространством Фока*.

7.3 Операторы рождения и уничтожения.

Вернемся к определению действия операторов на векторы состояний. Как помним, действие *любого оператора* на произвольный вектор состояния в общем случае приводит к изменению вектора. Для того, чтобы построить оператор, выбирают некоторое *представление*, в котором оператор всегда можно записать в виде матрицы. Вид матрицы определяется выбором базиса:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_n c_n |n\rangle, \\ \hat{f}|\psi\rangle &= \sum_{n,k} f_{kn} c_n |k\rangle. \end{aligned} \quad (3.1)$$

Здесь $f_{kn} = \langle k | \hat{f} | n \rangle$, и можно определить $\tilde{c}_k = \sum_n f_{kn} c_n$, тогда

$$\hat{f}|\psi\rangle \equiv |\varphi\rangle = \sum_k \tilde{c}_k |k\rangle.$$

На первый взгляд мы ничего нового не написали, а всего лишь занимались переобозначениями. Однако попробуем объяснить словами проведенные манипуляции. Как видно из формулы (3.1) действие оператора на состояние в выбранном представлении сводится к тому, что состояние $|n\rangle$ “заменяется” на другое состояние $|k\rangle$. Эту замену формально также можно описать, введя *новые* операторы, позволяющие заменять одно состояние на другое. Проще всего такую операцию определить, разбив ее на два этапа: на первом этапе избавляемся от “старого” состояния, а на втором этапе вводим “новое”. Определим оператор, который позволяет избавляться от *существующего* состояния:

$$\hat{a}_n |n\rangle = |0\rangle, \quad (3.2)$$

где новый вектор $|0\rangle$ будет обозначать, что это состояние *пустое*. Теперь из этого пустого состояния необходимо получить другое состояние. Для этого определим второй оператор, который создает искомое состояние:

$$\hat{a}_k^+ |0\rangle = |k\rangle. \quad (3.3)$$

Тогда состояние $|n\rangle$ переходит в состояние $|k\rangle$ простым действием:

$$|k\rangle = \hat{a}_k^+ \hat{a}_n |n\rangle.$$

Имея операторы \hat{a}_k^+ в количестве, равном числу состояний (вообще говоря бесконечном), можно построить все состояния из одного “пустого”, а произвольный вектор состояния и оператор в формуле (3.1), соответственно пред-

ставить в виде:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_n c_n \hat{a}_n^+ |0\rangle, \\ \hat{f}|\psi\rangle &= \sum_{n,k} c_n f_{kn} \hat{a}_k^+ \hat{a}_n |n\rangle. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Как видим из полученной формулы (3.4) роль базисных векторов взяли на себя операторы \hat{a}_k^+ и единственный вектор $|0\rangle$. В обычном случае смысл введения новых операторов кажется весьма сомнительным, однако при описании систем тождественных частиц аппарат, использующий такие операторы, становится наиболее адекватным.

Определим оператор $\hat{a}^+(\varphi)$ таким образом, что при действии на *любое* N -частичное состояние он переводит его в $N + 1$ -частичное следующим образом:

$$\hat{a}^+(\varphi)|\psi_1, \dots, \psi_N\rangle = |\varphi, \psi_1, \dots, \psi_N\rangle. \quad (3.5)$$

Такой оператор $\hat{a}^+(\varphi)$ называется *оператором рождения*. Введенный таким образом оператор неэрмитов, поскольку

$$(\hat{a}^+(\varphi)|\psi_1, \dots, \psi_N\rangle)^+ = \langle\psi_1, \dots, \psi_N|\hat{a}(\varphi) = \langle\varphi, \psi_1, \dots, \psi_N|.$$

Сопряженный оператор $\hat{a}(\varphi)$ называется *оператором уничтожения*. Действительно, по определению

$$\langle\psi_1 \dots \psi_N|\hat{a}(\varphi)\hat{a}^+(\varphi)|\psi_1 \dots \psi_N\rangle = \langle\psi_1 \dots \psi_N|\psi_1 \dots \psi_N\rangle = |c|^2,$$

следовательно вектор $\hat{a}(\varphi)\hat{a}^+(\varphi)|\psi_1, \dots, \psi_N\rangle$ N -частичный и, таким образом, оператор уничтожения переводит $N + 1$ -частичное состояние в N -частичное. Определим теперь действие оператора уничтожения на N -частичное состояние.

Вычислим матричный элемент

$$C(\varphi) = \langle\chi_1, \dots, \chi_{N-1}|\hat{a}(\varphi)|\psi_1, \dots, \psi_N\rangle =$$

$$= (\langle \psi_1 \dots \psi_N | \hat{a}^+(\varphi) | \chi_1 \dots \chi_{N-1} \rangle)^* = \langle \psi_1 \dots \psi_N | \varphi, \chi_1 \dots \chi_{N-1} \rangle^*.$$

Согласно определению скалярного произведения N -частичных состояний (2.7) получаем

$$C^*(\varphi) = \sum_{k=1}^N \zeta^{k-1} \langle \psi_k | \varphi \rangle \langle \psi_1 \dots \psi_{k-1} \psi_{k+1} \dots \psi_N | \chi_1 \dots \chi_{N-1} \rangle.$$

В силу произвольности $N-1$ -частичного состояния $\langle \chi_1 \dots \chi_{N-1} |$ окончательно имеем:

$$\hat{a}(\varphi) | \psi_1 \dots \psi_N \rangle = \sum_{k=1}^N \zeta^{k-1} \langle \varphi | \psi_k \rangle | \psi_1 \dots \psi_{k-1}, \psi_{k+1} \dots \psi_N \rangle. \quad (3.6)$$

Определим теперь перестановочные соотношения для введенных операторов рождения и уничтожения. Легко видеть, что

$$\hat{a}^+(\varphi_1) \hat{a}^+(\varphi_2) = \zeta \hat{a}^+(\varphi_2) \hat{a}^+(\varphi_1). \quad (3.7)$$

Соответственно для операторов уничтожения также

$$\hat{a}(\varphi_1) \hat{a}(\varphi_2) = \zeta \hat{a}(\varphi_2) \hat{a}(\varphi_1).$$

Иными словами операторы рождения и, соответственно, операторы уничтожения между собой коммутируют для бозе-частиц и антикоммутируют для ферми-частиц.

Получим теперь перестановочные соотношения между операторами рождения и уничтожения. Имеем:

$$\begin{aligned} \hat{a}(\varphi_1) \hat{a}^+(\varphi_2) | \psi_1 \dots \psi_N \rangle &= \hat{a}(\varphi_1) | \varphi_2, \psi_1 \dots \psi_N \rangle = \\ &= \langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle | \psi_1 \dots \psi_N \rangle + \\ &+ \sum_{k=1}^N \zeta^k \langle \varphi_1 | \psi_k \rangle | \varphi_2, \psi_1 \dots \psi_{k-1}, \psi_{k+1} \dots \psi_N \rangle. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Действие операторов в обратном порядке дает:

$$\begin{aligned}
 & \hat{a}^+(\varphi_2)\hat{a}(\varphi_1)|\psi_1, \dots, \psi_N\rangle = \\
 & = \sum_{k=1}^N \zeta^{k-1} \langle \varphi_1 | \psi_k \rangle \hat{a}^+(\varphi_2)|\psi_1, \dots, \psi_{k-1}, \psi_{k+1}, \dots, \psi_N\rangle = \\
 & = \sum_{k=1}^N \zeta^{k-1} \langle \varphi_1 | \psi_k \rangle |\varphi_2, \psi_1, \dots, \psi_{k-1}, \psi_{k+1}, \dots, \psi_N\rangle. \quad (3.9)
 \end{aligned}$$

Умножим выражение (3.9) на ζ и вычтем его из (3.8). В результате получим:

$$\hat{a}(\varphi_1)\hat{a}^+(\varphi_2) - \zeta\hat{a}^+(\varphi_2)\hat{a}(\varphi_1) = \langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle. \quad (3.10)$$

Если одночастичные состояния представляют собой ортонормированный базис $|\alpha\rangle$, коммутатор (3.10) принимает простой вид:

$$\hat{a}_\alpha\hat{a}_{\alpha'}^+ - \zeta\hat{a}_{\alpha'}^+\hat{a}_\alpha = \delta_{\alpha\alpha'}. \quad (3.11)$$

7.4 Представление чисел заполнения

Для системы тождественных частиц по сути дела *не имеет смысла* перечислять все одночастичные состояния, в которых находятся N частиц, тем более если мы рассматриваем состояние, которое представляется суперпозицией некоторых базисных состояний. Действительно, для системы ферми-частиц, никакое одночастичное состояние *не может повториться*, поэтому есть смысл только указать, представлено ли данное одночастичное состояние или нет. Для системы бозе-частиц никаких ограничений на этот счет нет, поэтому нам нужно знать только *сколько частиц* находится в данном одночастичном состоянии. Иными словами, нам следует перейти от избыточно детального представления (2.6) и, соответственно, базиса (2.9) к представлению, в

котором содержится информация только о том, представлено ли данное одночастичное состояние в рассматриваемом N частичном и сколько частиц в нем находится. Такое представление называется *представлением чисел заполнения*. Для построения данного представления следует рассмотреть случаи бозе- и ферми-частиц отдельно.

Бозе-частицы. Этот случай в некотором смысле проще, поэтому рассмотрим его первым. Как следует из вводных замечаний к этому параграфу, следует ограничиться только рассмотрением базисных состояний (2.9). Для бозе-частиц запишем:

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots}} |\underbrace{\beta_1 \dots \beta_1}_{n_1}, \underbrace{\beta_2 \dots \beta_2}_{n_2}, \dots\rangle. \quad (4.1)$$

Если теперь предположить, что каждое n_β может принимать *любое* целое неотрицательное значение ($n_\beta = 0, 1, 2, \dots$), множество всех векторов (4.1) составляет базис в пространстве состояний (2.10). Для базисных ортонормированных одночастичных состояний операторы рождения и уничтожения удовлетворяют простым коммутационным соотношения, которые в точности совпадают с коммутационными соотношениями для повышающих и понижающих операторов системы связанных гармонических осцилляторов:

$$[a_\beta, a_{\beta'}] = [a_\beta^+, a_{\beta'}^+] = 0, \quad [a_\beta, a_{\beta'}^+] = \delta_{\beta\beta'}. \quad (4.2)$$

Заметим, что в физике очень часто возбужденные состояния можно описать как системы элементарных возбуждений – квазичастиц, которые описываются бозевскими или фермиевскими функциями. Если эти возбуждения описываются гамильтонианом *осцилляторного* типа, состояния в такой системе, имеющей вообще говоря, переменное число частиц, описываются состояниями (4.1), однако для них

можно ввести операторы рождения и уничтожения, которые удовлетворяют коммутационным соотношениям (4.2), связав их с обобщенными импульсами и координатами. В общем случае коммутационные соотношения (4.2) следуют из свойств симметрии относительно перестановки частиц.

Поддействуем операторами рождения и уничтожения на состояния (4.1):

$$\begin{aligned} a_{\beta}^{+}|n_1, n_2, \dots\rangle &= \sqrt{n_{\beta} + 1}|n_1, n_2, \dots, n_{\beta} + 1, \dots\rangle, \\ a_{\beta}|n_1, n_2, \dots\rangle &= \sqrt{n_{\beta}}|n_1, n_2, \dots, n_{\beta} - 1, \dots\rangle. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Легко видеть, что эрмитов оператор

$$N_{\beta} = a_{\beta}^{+} a_{\beta} \quad (4.4)$$

есть оператор числа частиц в данном одночастичном состоянии. Соответственно оператор полного числа частиц есть

$$\hat{N} = \sum_{\beta} a_{\beta}^{+} a_{\beta}. \quad (4.5)$$

Для **ферми-частиц** базисное состояние (2.9) можно записать как

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = |\alpha_1, \alpha_2, \dots\rangle, \quad \text{где } n_{\alpha} = 0, 1. \quad (4.6)$$

Операторы рождения и уничтожения для ферми-частиц удовлетворяют *антикоммутационным* соотношениям:

$$\{a_{\alpha}, a_{\alpha'}\} = \{a_{\alpha}^{+}, a_{\alpha'}^{+}\} = 0, \quad \{a_{\alpha}, a_{\alpha'}^{+}\} = \delta_{\alpha\alpha'}, \quad (4.7)$$

где

$$\{A, B\} = AB + BA \quad - \quad \text{антикоммутатор.}$$

Подействуем теперь операторами рождения и уничтожения на базисные состояния ферми-системы в представлении чисел заполнения:

$$\begin{aligned}
 a_{\alpha}^{+}|n_1, n_2 \dots\rangle &= \begin{cases} 0, & \text{если } n_{\alpha} = 1, \\ |n_1, n_2 \dots \underbrace{1}_{\alpha} \dots\rangle, & \text{если } n_{\alpha} = 0, \end{cases} \\
 a_{\alpha}|n_1, n_2 \dots\rangle &= \begin{cases} 0, & \text{если } n_{\alpha} = 0, \\ |n_1, n_2 \dots \underbrace{0}_{\alpha} \dots\rangle, & \text{если } n_{\alpha} = 1. \end{cases} \quad (4.8)
 \end{aligned}$$

Легко видеть, то операторы числа частиц в одночастичном состоянии и полного числа частиц равны:

$$N_{\alpha} = a_{\alpha}^{+}a_{\alpha}, \quad N = \sum_{\alpha} a_{\alpha}^{+}a_{\alpha}, \quad (4.9)$$

Из антикоммутиационных соотношений (4.7) и определения (4.9) следует

$$a_{\alpha}a_{\alpha}^{+} = 1 - N_{\alpha}.$$

До сих пор мы рассматривали дискретные квантовые числа, между тем, с одной стороны, весьма часто базисные состояния могут определяться непрерывным спектром, а, с другой стороны, часто состояния удобно описывать непрерывными волновыми функциями. Заметим при этом, что состояния непрерывного спектра нормированы на δ -функцию. Например, пусть одночастичный базис определяет состояния с определенным значением импульса (свободные частицы) и $\langle \mathbf{p}' | \mathbf{p} \rangle = \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p})$, тогда коммутационные соотношения (3.10) переписутся

$$\hat{a}_{\mathbf{p}'}\hat{a}_{\mathbf{p}}^{+} - \zeta\hat{a}_{\mathbf{p}}^{+}\hat{a}_{\mathbf{p}'} = \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}). \quad (4.10)$$

Можно также определить операторы рождения и уничтожения частицы в точке пространства \mathbf{r} . В этом случае

принято вводить немного новое обозначение для *полевого ψ -оператора*, соответственно $\hat{\psi}^+(\mathbf{r})$ и $\hat{\psi}(\mathbf{r})$, тогда

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}')\hat{\psi}^+(\mathbf{r}) - \zeta\hat{\psi}^+(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (4.11)$$

Вспомним, что операторы рождения и уничтожения в определенном смысле эквивалентны состояниям, поэтому совершенно аналогично можно переходить от одного представления операторов к другому с помощью соответствующих матриц перехода. Например, мы помним, что переход от координатного к импульсному представлению осуществляется с помощью матрицы перехода, которая есть по сути дела волна де-Бройля, поэтому можно записать связь: ²

$$\begin{aligned} \hat{\psi}(\mathbf{r}) &= \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\hbar^{-1}\mathbf{p}\mathbf{r}} a_{\mathbf{p}}, \\ \hat{\psi}^+(\mathbf{r}) &= \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-i\hbar^{-1}\mathbf{p}\mathbf{r}} a_{\mathbf{p}}^+. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Обратное преобразование имеет вид:

$$\begin{aligned} a_{\mathbf{p}} &= \int \frac{d\mathbf{r}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-i\hbar^{-1}\mathbf{p}\mathbf{r}} \hat{\psi}(\mathbf{r}), \\ a_{\mathbf{p}}^+ &= \int \frac{d\mathbf{r}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\hbar^{-1}\mathbf{p}\mathbf{r}} \hat{\psi}^+(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (4.13)$$

Соотношения (4.12) можно обобщить и на *любой другой*, в частности дискретный, базис. При этом легко видеть что роль матрицы перехода будет играть соответствующая *волновая функция* дискретного одночастичного базиса $\varphi_n(\mathbf{r})$:

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}) = \sum_n \varphi_n(\mathbf{r}) a_n, \quad \hat{\psi}^+(\mathbf{r}) = \sum_n \varphi_n^*(\mathbf{r}) a_n^+. \quad (4.14)$$

²Иногда соотношения (4.12) определяют “несимметрично”, по отношению к обратному преобразованию, тогда знаменатель в подынтегральном выражении равен 1, а в формуле (4.13) равен $(2\pi\hbar)^3$.

Соотношения (4.12) и (4.14) определяют операторы уничтожения и рождения рождения частицы в точке \mathbf{r} , при описании ее состояний в соответствующих представлениях.

С помощью ψ -операторов можно записать оператор *плотности* числа частиц

$$\hat{\rho}(\mathbf{r}) = \hat{\psi}^+(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r}) \quad (4.15)$$

и соответственно полное число частиц есть

$$N = \int d\mathbf{r}\hat{\rho}(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r}\hat{\psi}^+(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r}).$$

7.5 Представление основных операторов

Получим теперь выражение основных операторов в представлении вторичного квантования. Основы для данного описания заложены в начале параграфа 5.3. Покажем, что *любой одночастичный* оператор \hat{f} можно записать в виде:

$$\hat{f} = \sum_{n,k} f_{nk}|n\rangle\langle k|, \quad (7.1)$$

где $|n\rangle$ - одночастичный базис. Действительно, подействуем оператором (7.1) на произвольную одночастичную функцию:

$$\hat{f}|\psi\rangle = \sum_{n,k} f_{nk}|n\rangle\langle k|\psi\rangle = \sum_{n,k} f_{nk}c_k|n\rangle$$

Получили выражение, совпадающее с формулой (3.1).

При описании *любой* многочастичной системы вводятся операторы, которые действуют только на состояние *одной* частицы – *одночастичные операторы*; операторы, которые описывают взаимодействие двух частиц – *двухчастичные операторы* и т.д. Очевидно, запись этих операторов в представлении вторичного квантования будет различной.

Определим действие одночастичных операторов на N -частичное состояние $|\psi\rangle_\zeta$. Очевидно, что в линейной комбинации (2.6) одночастичный оператор может действовать только на одну частицу. Поскольку в системе тождественных частиц она может находиться в любом состоянии, одночастичный оператор должен подействовать на все одночастичные состояния, в которых может находиться частица.

Мы видели, что одночастичный оператор заменяет одно базисное состояние на другое с весом, равным соответствующему матричному элементу (7.1). Поэтому мы должны обобщить такой подход на симметризованное многочастичное базисное состояние. Пусть $|\varphi\rangle$ – одно из нормированных одночастичных базисных состояний. Определим действие оператора $a^+(\varphi_1)a(\varphi_2)$ на N -частичное состояние $|\psi\rangle_\zeta$:

$$\begin{aligned} & a^+(\varphi_1)a(\varphi_2)|\psi\rangle_\zeta = \\ & = \sum_{k=1}^N \zeta^{k-1} \langle \varphi_2, \psi_k | \varphi_1, \psi_1, \dots, \psi_{k-1}, \psi_{k+1}, \dots, \psi_N \rangle. \end{aligned} \quad (7.2)$$

Заметим далее, что в формуле (7.2) можно поставить состояние $|\varphi_1\rangle$ на место состояния $|\psi_k\rangle$:

$$\begin{aligned} & \zeta^{k-1} |\varphi_1, \psi_1, \dots, \psi_{k-1}, \psi_{k+1}, \dots, \psi_N\rangle = \\ & = |\psi_1, \dots, \psi_{k-1}, \varphi_1, \psi_{k+1}, \dots, \psi_N\rangle. \end{aligned}$$

Таким образом, *любой* одночастичный оператор можно представить в виде:

$$\hat{f}^{(1)} = \sum_{m,n} f_{mn} a_m^+ a_n, \quad (7.3)$$

где $a_n \equiv a(\varphi_n)$.

Пример.

Пусть в качестве одночастичного базиса выбраны собствен-

ные состояния гамильтониана одной (невозмущаемой) частицы:

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle,$$

тогда в представлении вторичного квантования

$$\hat{H} = \sum_n E_n a_n^+ a_n. \quad (7.4)$$

Упражнения.

1. Записать оператор импульса в импульсном представлении.
2. Выразить оператор импульса через полевые операторы и записать его в координатном представлении.
3. Записать гамильтониан в импульсном представлении.
4. Выразить гамильтониан через полевые операторы и записать его в координатном представлении.

Рассмотрим теперь представление операторов, описывающих взаимодействие двух частиц – *двухчастичное взаимодействие*: $V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = V(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)$. Легко видеть, что сказанное об одночастичном операторе аналогичным образом обобщается и на двухчастичный случай: здесь одновременно должны измениться два одночастичных состояния в N -частичном состоянии $|\psi\rangle_\zeta$. Пусть в качестве одночастичного базиса выбраны состояния с дискретным спектром так же как и в формуле (7.3), тогда можно записать:

$$\hat{V}^{(2)} = \frac{1}{2!} \sum_{m,m',n,n'} V_{mn,m'n'} a_m^+ a_n^+ a_{n'} a_{m'}, \quad (7.5)$$

где матричный элемент

$$V_{mn,m'n'} = \langle m, n | V | m', n' \rangle \equiv \langle m | \left(\langle n | \hat{V} | n' \rangle \right) | m' \rangle,$$

а коэффициент перед знаком суммирования учитывает число перестановок одинаковых частиц.

Совершенно аналогично можно записать в представлении вторичного квантования любой оператор n -частичного взаимодействия, не забывая при этом число перестановок $n!$.

Упражнения.

1. Записать оператор парного взаимодействия через полевые операторы.
2. Записать оператор парного взаимодействия в импульсном представлении.
3. Записать оператор n -частичного взаимодействия в представлении вторичного квантования.

7.6 Матрица плотности в представлении чисел заполнения

Мы получили выражение для матрицы плотности (статистического оператора) для ансамбля систем с определенной полной энергией (*канонический ансамбль*), при этом мы считали, что в каждой подсистеме ансамбля число частиц (состояний) не может измениться. Матрица плотности имела вид

$$\rho = Z^{-1} e^{-\beta \hat{H}}, \quad (6.1)$$

где статистическая сумма определена как

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta \hat{H}}, \quad (6.2)$$

а $\beta > 0$ – некоторый параметр. Очевидно, вычислять след оператора удобно в представлении, когда операторная экспонента диагональна, т.е. в базисе *собственных* состояний гамильтониана. Такая возможность реально представляется в случае, когда можно рассматривать невзаимодействующие подсистемы. То же самое можно сказать и о самой

подсистеме, состоящей из многих тождественных частиц: корректно определить состояния можно только в приближении невзаимодействующих частиц, когда хорошо определены одночастичные состояния. Поскольку в дальнейшем для нас важное значение будет играть *тип частиц*, выделим в одночастичных наборах величин в явном виде *проекцию спина* частицы и определим полный набор величин для одночастичных состояний как $|\nu, \sigma\rangle$. Тогда гамильтониан \hat{H}_0 системы *невзаимодействующих* тождественных частиц имеет вид:

$$\hat{H}_0 = \sum_{\nu} \sum_{\sigma} \varepsilon_{\nu} a_{\nu, \sigma}^{+} a_{\nu, \sigma}. \quad (6.3)$$

Напомним, что энергия одночастичного состояния ε_{ν} не зависит от спинового состояния.

Запишем теперь матрицу плотности с гамильтонианом (6.3):

$$\rho = Z^{-1} \exp \left(-\beta \sum_{\nu} \sum_{\sigma} \varepsilon_{\nu} a_{\nu, \sigma}^{+} a_{\nu, \sigma} \right) \quad (6.4)$$

и, соответственно, статистическую сумму:

$$Z = \sum_{n_{\nu, \sigma}} \exp \left(-\beta \sum_{\nu} \sum_{\sigma} \varepsilon_{\nu} n_{\nu, \sigma} \right), \quad \sum_{\nu} \sum_{\sigma} n_{\nu, \sigma} = N. \quad (6.5)$$

Здесь мы учли, что

$$\zeta \langle \psi | a_{\nu, \sigma}^{+} a_{\nu, \sigma} | \psi \rangle_{\zeta} = n_{\nu, \sigma}.$$

Суммирование в формуле (6.5) при дополнительном условии *фиксированного* числа частиц не позволяет продвинуться далее этой записи, поскольку многочастичные состояния имеют определенную перестановочную симметрию, что делает невозможным факторизацию выражения и, соответственно, сведение его к вычислению одночастичных статистических сумм. Действительно, для бозе-частиц числа

$n_{\nu,\sigma}$ могут принимать любые целые неотрицательные значения, тогда как для ферми-частиц $n_{\nu,\sigma} = 0, 1$.

Для сравнения рассмотрим ансамбль N *различимых* частиц, которые тем не менее описываются совершенно одинаковыми наборами квантовых чисел и обладают одинаковым энергетическим спектром (в этом случае квантовое число $\sigma = 0$). Пусть в состоянии с набором чисел ν находится n_ν частиц, тогда число состояний в ансамбле для такой *одночастичной конфигурации* равно

$$\Gamma_\nu = \frac{N!}{n_{\nu_1}!n_{\nu_2}!\dots}, \quad (6.6)$$

а статистическая сумма такого канонического ансамбля равна

$$Z = \sum_{\substack{\{n_\nu\}; \\ \sum n_\nu = N}} \Gamma_\nu e^{-\beta \sum_\nu \varepsilon_\nu n_\nu} = \sum_{\substack{\{n_\nu\}; \\ \sum n_\nu = N}} \frac{N!}{\prod n_\nu!} \prod_\nu e^{-\beta \varepsilon_\nu n_\nu}.$$

Обратим теперь внимание на то, что числа состояний (6.6) есть полиномиальные коэффициенты, поэтому можем окончательно записать:

$$Z = \left(\sum_\nu e^{-\beta \varepsilon_\nu} \right)^N = Z_1^N. \quad (6.7)$$

Для ферми и бозе статистик полиномиальный коэффициент в результате суммирования *не возникает*, поэтому статистическая сумма не факторизуется, т.е. не содится к *одночастичной* статсумме Z_1 . Оказывается факторизацию можно провести, если снять ограничение на *фиксированное число частиц*. Но в таком случае рассматриваемые ансамбли частиц будут отличаться от канонических.

7.7 Большой канонический ансамбль

Рассмотрим теперь ансамбль подсистем большой замкнутой изолированной системы, который может обмениваться не только энергией, но и частицами с остальной частью системы. Такой ансамбль называется *большим каноническим*. Очевидно, распределение будет отличаться от полученного ранее канонического распределения, поскольку появилась дополнительная (макроскопическая) степень свободы, которая позволяет ввести дополнительное статистическое понятие. Поскольку речь идет об обмене частицами, число частиц в подсистемах ансамбля *не фиксировано*, следовательно нам придется определять наряду со средней энергией *среднее число частиц* $\langle N \rangle$:

$$\langle N \rangle = Tr \hat{N} \rho = Tr \left(\sum_{\nu, \sigma} a_{\nu, \sigma}^+ a_{\nu, \sigma} \right) \rho \equiv Tr \left(\sum_{\nu, \sigma} \hat{n}_{\nu, \sigma} \right) \rho. \quad (7.1)$$

Далее найдем экстремум энтропии при условии нормировки матрицы плотности и значений средних энергии и числа частиц. В результате вариации по матрице плотности получаем:

$$Tr \left(\ln \rho + 1 + \alpha + \beta \hat{H} + \lambda \hat{N} \right) \delta \rho = 0. \quad (7.2)$$

Здесь введен дополнительный неопределенный множитель Лагранжа λ , который удобно переопределить как $\lambda = -\beta\mu$. Такой выбор знака нового параметра μ будет понятен ниже. Решение уравнения (7.2) есть:

$$\rho = \mathcal{Z}^{-1} e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})}, \quad (7.3)$$

где нормировочный множитель есть *большая статистическая сумма*:

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \text{Tr} e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} = \\ &= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\substack{\{n_{\nu,\sigma}\}; \\ \sum n_{\nu,\sigma} = N}} \exp\left(\beta\mu \sum_{\nu,\sigma} n_{\nu,\sigma}\right) \exp\left(-\beta \sum_{\nu,\sigma} \varepsilon_{\nu,\sigma} n_{\nu,\sigma}\right). \end{aligned} \quad (7.4)$$

Дополнительное суммирование по числу частиц в формуле (7.4) позволяет факторизовать большую статистическую сумму для бозе- и ферми-частиц. Перепишем выражение (7.4) в виде

$$\mathcal{Z} = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\substack{\{n_{\nu,\sigma}\}; \\ \sum n_{\nu,\sigma} = N}} \prod_{\nu} \prod_{\sigma} \exp(\beta(\mu - \varepsilon_{\nu})n_{\nu,\sigma}). \quad (7.5)$$

Теперь нам нужно поменять местами знаки суммирования по всем без ограничения числам частиц N и произведения по одночастичным состояниям частиц в ансамбле. Такая перестановка напоминает сведение многомерного интеграла к произведению одномерных интегралов по независимым переменным. Итак, в нашем выражении (7.5) проводится двойное суммирование произведений двух сомножителей со степенями, зависящими от переменных суммирования, при этом во всем выражении встречаются сомножители *со всеми возможными степенями*. В такой сумме можно выбирать любой порядок суммирования, например, зафиксировав степень одного сомножителя провести суммирование по всем степеням другого сомножителя, а затем провести суммирование по всем степеням первого сомножителя. Легко видеть, что в этом случае сумма произведений сводится к произведению сумм. Эти рассуждения можно проиллюстрировать наглядной схемой.

Пусть ансамбль состоит из двухуровневых подсистем, т.е. $\nu = 1, 2$ и соответственно имеем $n_\nu = n_1, n_2$. Нам нужно вычислить сумму

$$\mathcal{Z}_2 = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\substack{n_1; n_2 \\ n_1 + n_2 = N}} a^{n_1} b^{n_2} = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{n=0}^N a^{N-n} b^n. \quad (7.6)$$

Представим полученную сумму (7.6) в виде схемы:

$$\begin{array}{l} 1 \\ a + b \\ a^2 + ab + b^2 \\ a^3 + a^2b + ab^2 + b^3 \\ \dots \end{array}$$

Легко видеть, что суммирование по строкам данной схемы есть суммирование произведений, а суммирование “по диагоналям”, дающее *тот же результат*, есть произведение сумм:

$$\mathcal{Z}_2 = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\substack{n_1; n_2 \\ n_1 + n_2 = N}} a^{n_1} b^{n_2} = \left(\sum_{n=0}^{\infty} a^n \right) \left(\sum_{k=0}^{\infty} b^k \right). \quad (7.7)$$

Для многоуровневых систем результат легко обобщается.

Применим полученный результат для систем бозе и ферми частиц:

$$\mathcal{Z} = \prod_{\nu} \prod_{\sigma} \sum_{n_{\nu, \sigma}} e^{\beta(\mu - \varepsilon_{\nu}) n_{\nu, \sigma}}. \quad (7.8)$$

Далее в формуле (7.8) проведем суммирование для двух сортов частиц раздельно. Для ферми-частиц $n_{\nu, \sigma} = 0, 1$, поэтому получаем

$$\mathcal{Z}_F = \prod_{\nu} \prod_{\sigma} \left(1 + e^{\beta(\mu - \varepsilon_{\nu})} \right). \quad (7.9)$$

Для бозе-частиц никаких ограничений на число частиц в данном одночастичном состоянии нет, поэтому суммирование приводит к сумме бесконечной геометрической прогрессии, однако для сходимости результата необходимо наложить ограничение на величину параметра μ . Поскольку энергия каждой частицы ограничена, необходимо, чтобы при достаточно больших n члены суммы убывали, поэтому

$$\mu_B < 0 \quad (7.10)$$

и получаем

$$\mathcal{Z}_B = \prod_{\nu} \prod_{\sigma} \left(1 - e^{\beta(\mu - \varepsilon_{\nu})} \right)^{-1}. \quad (7.11)$$

Ограничений на параметр μ_F ферми-системы нет. Результаты (7.9) можно (7.11) объединить одной записью, введя знакомый параметр ζ :

$$\mathcal{Z}_{\zeta} = \prod_{\nu} \prod_{\sigma} \left(1 - \zeta e^{\beta(\mu - \varepsilon_{\nu})} \right)^{-\zeta}. \quad (7.12)$$

Итак, для систем *невозмущенных* тождественных частиц факторизуется *большая статистическая сумма*, однако следует заметить, что теперь множители (одночастичные статсумы) соответствуют не реальным отдельным частицам, а *индивидуальным одночастичным состояниям*, поэтому в сумме всегда присутствует *бесконечное* число множителей. Такая, на первый взгляд абстрактная, ситуация на самом деле полностью отражает свойства систем тождественных частиц: не имеет значения *какая* частица находится в системе с данной энергией, важно *сколько частиц* и в каких состояниях составляют данный ансамбль.

Мы логично подошли к выводу, что для системы тождественных частиц важную роль (даже, может быть более

важное чем сама функция распределения) играет среднее число частиц в данном квантовом состоянии $\langle n_{\nu,\sigma} \rangle$.

Запишем матрицу плотности большого канонического ансамбля ρ_G в представлении вторичного квантования:

$$\begin{aligned} \rho_G &= \mathcal{Z}^{-1} \exp \left(\beta \sum_{\nu,\sigma} (\mu - \varepsilon_\nu) a_{\nu,\sigma}^+ a_{\nu,\sigma} \right) = \\ &= \mathcal{Z}^{-1} \exp \left(\beta \sum_{\nu,\sigma} (\mu - \varepsilon_\nu) \hat{n}_{\nu,\sigma} \right). \end{aligned} \quad (7.13)$$

По определению среднее число частиц в состоянии $|\nu, \sigma\rangle$ есть

$$\langle n_{\nu,\sigma} \rangle = Tr \hat{n}_{\nu,\sigma} \rho_G. \quad (7.14)$$

Запишем выражение (7.14) в явном виде и учтем, перестановочные соотношения для операторов рождения и уничтожения, а именно: операторы числа частиц в разных состояниях между собой перестановочны, поэтому при вычислении следа с оператором $\hat{n}_{\nu,\sigma}$ “защепится” только один сомножитель в факторизованной сумме. Получаем:

$$\begin{aligned} \langle n_{\nu,\sigma} \rangle &= \\ &= \left(\sum_{n_{\nu,\sigma}} n_{\nu,\sigma} e^{\beta(\mu - \varepsilon_\nu) n_{\nu,\sigma}} \right) \frac{\prod_{\{\nu', \sigma' \neq \nu, \sigma\}} \sum_{n_{\nu', \sigma'}} e^{\beta(\mu - \varepsilon_{\nu'}) n_{\nu', \sigma'}}}{\prod_{\{\text{все } (\nu, \sigma)\}} \sum_{n_{\nu, \sigma}} e^{\beta(\mu - \varepsilon_\nu) n_{\nu, \sigma}}} = \\ &= \frac{\sum_n n e^{\beta(\mu - \varepsilon_\nu) n}}{\sum_n e^{\beta(\mu - \varepsilon_\nu) n}} \end{aligned} \quad (7.15)$$

Последнее слагаемое в формуле (7.15) можно выразить в виде производной:

$$\langle n_{\nu,\sigma} \rangle = \frac{\partial}{\partial(\beta\mu)} \ln \left(\sum_n \exp(\beta(\mu - \varepsilon_\nu) n) \right). \quad (7.16)$$

Полученная в выражении (7.16) уже вычислена для ферми- и бозе-систем:

$$\langle n_{\nu,\sigma} \rangle_{\zeta} = \frac{\partial}{\partial(\beta\mu)} \ln \left(1 - \zeta e^{\beta(\mu - \varepsilon_{\nu})} \right)^{-\zeta} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{\nu} - \mu)} - \zeta}. \quad (7.17)$$

Таким образом получаем *распределение Бозе*

$$\langle n_{\nu,\sigma} \rangle_B = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{\nu} - \mu)} - 1} \quad (7.18)$$

и *распределение Ферми*:

$$\langle n_{\nu,\sigma} \rangle_F = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{\nu} - \mu)} + 1}. \quad (7.19)$$

Отметим, что в полученных формулах распределений среднее число частиц *не зависит* от проекции спина, однако нельзя забывать, что состояние обязательно определяется набором $\{\nu, \sigma\}$, поэтому в распределении Ферми (7.19) на данном уровне энергии могут находиться $2s + 1$ частицы с разными проекциями спина, а для бозе-частиц таких ограничений нет. Тем не менее при выполнении суммирования нельзя забывать *различные спиновые состояния*.

7.8 Понятие о парастатистике

Рассмотрим системы, описываемые статистикой, которую можно рассматривать как “гибрид” статистик Ферми и Бозе, т.е. в каждом состоянии ν такой системы может находиться не более p частиц. Если $p = 1$, имеем статистику Ферми, а если $p \rightarrow \infty$ – статистику Бозе. В таком случае говорят, что система описывается *парастатистикой*. Мы не будем здесь пытаться ввести многочастичный формализм чисел заполнения, как это делали для существующих ферми- и бозе-частиц, но получим только функцию распределения, аналогичную распределениям (7.1) и (3.3), исходя

из комбинаторных представлений для нахождения наиболее вероятного распределения.

Поскольку в каждом состоянии $|\nu\rangle$ может находиться не более p частиц ($p \geq 1$), следует сперва определить статистический вес каждого состояния. Статистический вес состояния, когда в нем находится n частиц есть: $\gamma_\nu(n)$. Таким образом каждое состояние обладает статистическим весом

$$\Gamma_\nu = \sum_{n=0}^p \gamma_\nu(n). \quad (8.1)$$

Соответственно, в каждом состоянии может находиться число частиц:

$$N_\nu = \sum_{n=0}^p n \gamma_\nu(n). \quad (8.2)$$

Полное число состояний в такой системе (статистический вес) равно:

$$\Gamma = \sum_\nu \frac{\Gamma_\nu!}{\gamma_\nu(0)! \gamma_\nu(1)! \dots \gamma_\nu(p)!}. \quad (8.3)$$

Найдем экстремум числа состояний (8.3) при условиях:

$$N = \sum_\nu N_\nu, \quad E = \sum_\nu \varepsilon_\nu N_\nu. \quad (8.4)$$

Обычно ищется экстремум не самой функции (8.3), а ее логарифма, т.е. статистической энтропии при вариации по переменным γ_ν . Составим функционал:

$$\begin{aligned} \Phi &= \ln \Gamma - \beta E + \beta \mu N = \\ &= \sum_\nu \left[\ln \Gamma_\nu! - \sum_n (\ln \gamma_\nu(n)! + \beta \varepsilon_\nu \gamma_\nu(n) n - \beta \mu \gamma_\nu(n) n) \right]. \end{aligned} \quad (8.5)$$

Далее заменим по формуле Стирлинга с точностью до предэкспоненциального множителя *все*

$$\ln \gamma_\nu(n)! \approx \gamma_\nu(n) \ln \gamma_\nu(n) - \gamma_\nu(n)$$

и проварьируем функционал (8.5) по переменным $\gamma_\nu(n)$:

$$\sum_\nu \left[\sum_\nu (\ln \gamma_\nu(n) + \beta \varepsilon_\nu n - \beta \mu n) \delta \gamma_\nu(n) \right] = 0. \quad (8.6)$$

Решением уравнения (8.6) будет экспонента

$$\gamma_\nu(n) = e^{-\beta(\varepsilon_\nu - \mu)n}, \quad (8.7)$$

а частная статистическая сумма (статистический вес Γ_ν) равна сумме *конечной* геометрической прогрессии:

$$\Gamma_\nu = \sum_{n=0}^p e^{-\beta(\varepsilon_\nu - \mu)n} = \frac{1 - e^{-\beta(\varepsilon_\nu - \mu)(p+1)}}{1 - e^{-\beta(\varepsilon_\nu - \mu)}}. \quad (8.8)$$

Теперь нам осталось определить *среднее* число частиц в состоянии ν . Процедура совершенно аналогична, проделанной для распределения Ферми и Бозе:

$$\begin{aligned} \langle n_\nu \rangle &= \sum_{n=0}^p n \Gamma_\nu^{-1} \gamma_\nu(n) = \frac{\sum_{n=0}^p n e^{-\beta(\varepsilon_\nu - \mu)n}}{\sum_{n=0}^p e^{-\beta(\varepsilon_\nu - \mu)n}} = \\ &= \frac{\partial}{\partial(\beta\mu)} \ln \left(\sum_{n=0}^p e^{-\beta(\varepsilon_\nu - \mu)n} \right). \end{aligned}$$

Сумма под знаком логарифма посчитана и равна (8.8), поэтому окончательно получаем

$$\langle n_\nu \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\mu - \varepsilon_\nu)} - 1} - \frac{p+1}{e^{\beta(\mu - \varepsilon_\nu)(p+1)} - 1}. \quad (8.9)$$

Как видно, формула (8.9) при $p = 1$ переходит в распределение Ферми (7.19), а при $p \rightarrow \infty$ – в распределение Бозе (7.18).