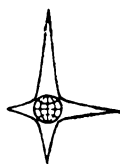


Swiss Germany

«M I R»  
PUBLISHERS



ИЗДАТЕЛЬСТВО  
«МИР»



**NOTES ON QUANTUM MECHANICS**

**A Course Given by  
ENRICO FERMI**

**at the University of Chicago**

**The University of Chicago Press**

**ЭНРИКО ФЕРМИ**

# **КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА**

**(конспект лекций)**

**ИЗДАТЕЛЬСТВО «МИР» • МОСКВА 1968**



## FROM THE PUBLISHERS

In this book we present the notes of lectures delivered to students of the University of Chicago by the distinguished Italian physicist Enrico Fermi.

Despite the many courses in quantum mechanics published in recent years, it was thought desirable to issue a new edition of the original notes not only because Fermi was an eminent physicist combining the qualities of a brilliant theoretician and experimenter, but also because of the unique nature of the book. These lectures have reached us in the form of a precis, that is, as an extremely brief outline of quantum mechanics (including Dirac's electron theory), but the principal mathematical calculations are given in full. Students will find here not merely concise notes, but an exceedingly lucid guide to quantum physics, while lecturers will find the book a good guide to reasonable proportions for the different sections of quantum mechanics, and a superb reminder of many details. These two classes of user, and all physicists for that matter, can follow with interest the line of thought of one of the greatest scientists of our time (which is particularly vividly revealed in these notes).

Parallel with a facsimile of Fermi's English notes, the present edition includes a Russian translation, which enables the Russian reader to compare translation and original. The publication of parallel texts will also increase the number of readers of the volume—physicists and students—since they can use whichever text they understand better. Finally, foreign physicists studying Russian will find the notes useful as a study aid.

The author treats many questions with maximum brevity, omitting explanations, which he undoubtedly presented to his audience in one form or another. Therefore in the Russian translation we have sometimes "restored" the text by filling gaps where the author "wrote between the lines". These insertions, and certain explanations which the editor found indispensable, are set in small type. Both methods of translation have occasionally been combined in one phrase, but this has only been done where it appeared highly probable that the author had omitted a word or a sentence solely for brevity; these phrases are set in normal type. Editorial remarks and comments aimed chiefly at facilitating use of the notes—and which are usually more detailed—are given only in Russian, and will be found at

## ОТ ИЗДАТЕЛЬСТВА

Вниманию читателей предлагается конспект лекций, прочитанных знаменитым итальянским физиком Энрико Ферми студентам Чикагского университета.

Несмотря на большое число опубликованных за последние годы курсов квантовой механики, новое издание оригинального конспекта лекций Ферми представляется весьма целесообразным. Дело здесь не только в том, что Ферми был выдающимся физиком, сочетавшим в себе одинаково блестящего теоретика и экспериментатора, но еще и в исключительно своеобразном характере этой книги. Эти лекции дошли до нас в виде конспекта, т. е. предельно краткого изложения квантовой механики (включая теорию электрона Дирака), причем содержащего основные математические выкладки полностью. Студенты найдут в этой книге не просто компактный конспект, но и предельно ясный путеводитель по квантовой физике. Лекторы получают хорошего помощника, указывающего разумные пропорции между различными разделами квантовой механики и превосходно освежающего в памяти многие детали. И те и другие — и вообще все физики — с интересом смогут следить за ходом мысли одного из крупнейших ученых нашего времени (именно в конспектах это становится особенно зримым).

Параллельно факсимиле конспекта Ферми на английском языке в настоящем издании дается русский перевод, что представляет читателю возможность по мере чтения сравнить перевод с оригиналом. Кроме того, параллельное издание английского и русского текста расширит круг читателей — физиков и студентов физических специальностей, поскольку они могут пользоваться тем текстом, который им более доступен по языку. Наконец, для иностранных физиков, изучающих русский язык, книга может послужить своеобразным учебным пособием.

Автор пишет о многих вопросах предельно кратко, опуская пояснения, которые он, несомненно, в той или иной форме излагал своей аудитории. Поэтому иногда в русском переводе для связности текста приходилось «восстанавливать» то, что автор «писал между строк». Такого рода дополнения и некоторые необходимые, по мнению редактора, пояснения даны петитом. Иногда приходилось в одной фразе сочетать оба способа перевода, однако этот путь использовался лишь в тех случаях,

the end of the book, the sentences in the Russian text to which they apply being marked with an asterisk.

Enrico Fermi began his teaching activity in 1923 at the University of Rome where he read a course in mathematics. From then on he delivered many survey lectures and courses; the present notes come from the last course in quantum mechanics he gave in the spring of 1954.

As with any other course in theoretical physics, the notes have a mathematical argument, and many paragraphs are examples of nontrivial representation of the respective sections of mathematical physics, for instance the theory of the Hilbert space.

It should be stressed (especially for students) that in studying quantum mechanics one cannot restrict oneself to these notes. Therefore supplementary literature has been cited in many cases.

когда было уже в высшей степени вероятно, что автор опустил то или иное слово или выражение исключительно ради краткости; для таких фраз сохранен основной шрифт. Те обычно более подробные редакционные примечания и комментарии, основной целью которых было облегчить читателям пользование конспектами, помещены в конце книги и даются только на русском языке; отсылка к ним обозначается в русском тексте значком «\*».

Как педагог Энрико Ферми начал свою деятельность в 1923 г. в Римском университете с чтения курса математики. Впоследствии он прочел немало обзорных лекций и учебных курсов, в том числе и по квантовой механике. Издаваемый конспект относится к последнему из подготовленных им курсов квантовой механики, прочитанному весной 1954 г.

Как всякий курс теоретической физики, эта книга насыщена математическим аппаратом, и многие параграфы конспекта в этом отношении представляют собой пример нетривиального изложения соответствующих разделов математической физики, например теории гильбертова пространства.

Следует подчеркнуть (особенно для студентов), что при изучении квантовой механики нельзя ограничиться лишь этими конспектами. Поэтому во многих случаях указана дополнительная литература.



## PREFACE

Enrico Fermi taught courses on quantum mechanics on many occasions. In the earliest days, when Schroedinger's papers were appearing in the *Annalen der Physik*, Fermi explained them to his students in private seminars; later he recast some of Dirac's papers in more familiar form. As time went on, his treatment and his courses became more systematic.

Early in 1954, less than a year before his untimely death, Fermi again gave a course in quantum mechanics at the University of Chicago. This time, however, he prepared the notes for the students himself by writing the outlines of the lectures on duplicator master sheets and delivering copies to the students in advance of each lecture.

The publisher, advised by friends and former pupils of Fermi, has decided to reproduce these lecture outlines in an inexpensive edition, in order to make them available to a larger group of students than those who had the privilege of attending the original lectures.

We hope that young physicists of the coming generation who have never come in direct contact with Fermi, and for whom he must be little more than a name among the great scientists of the century, will enjoy having a notebook on such an important topic as quantum mechanics written for them by such a master in his own hand.

Having pointed out the genesis of these notes, we do not need to emphasize that they cannot be construed in any way as the final presentation of quantum mechanics by Fermi, such as he could have given in a more elaborate text. Heisenberg, Pauli, Dirac, de Broglie, Jordan, Kramers, to mention only some of the creators of quantum mechanics, have all presented their own versions of quantum mechanics in books which are justly famous. The notes by Fermi are not to be compared in any way with these texts. They are written in a spirit and for a purpose completely different from that of the works mentioned above.

Fermi in the last ten or fifteen years of his life scarcely read any book on physics. He kept abreast of scientific developments mainly by hearing the results of investigations and reconstructing them on his own. It is practically certain that he did not consult any text of quantum mechanics while compiling these notes, except perhaps in a very minor fashion. If sections of the notes are very similar to some standard treatments, we must assume that, in rethinking the subject, Fermi arrived in his own way at the formulations contained in these notes.

We repeat that the notes were clearly prepared only for the lectures and that their distribution beyond the class group was not intended by the author. It is only because we know his great interest in teaching that we think it is not irreverent to his memory to publish the notes for the benefit of other students.

E. Segrè

Berkeley, California  
January 1960

## ПРЕДИСЛОВИЕ К АМЕРИКАНСКОМУ ИЗДАНИЮ

Энрико Ферми читал курсы лекций по квантовой механике неоднократно. Еще в то время, когда только стали появляться в журнале «Annalen der Physik» статьи Шредингера, Ферми разбирал их содержание со своими студентами на неофициальных семинарах; позднее он дал изложение нескольких статей Дирака в более привычной форме. С течением времени его трактовка теории и курсы становились все более систематическими.

В начале 1954 г., менее чем за год до своей преждевременной кончины, Ферми снова прочел курс лекций по квантовой механике в Чикагском университете. Однако на этот раз он лично подготавливал конспекты для слушателей, размножая записи основных положений лекций на копировальном станке и раздавая их студентам перед каждой лекцией.

Следуя совету друзей и бывших учеников Ферми, мы решили выпустить эти конспекты в виде недорогого издания, с тем чтобы сделать их доступными более широкому кругу студентов, а не только тем, кому посчастливилось лично присутствовать на этих лекциях.

Мы надеемся, что молодые физики нового поколения, которые никогда не встречались с Ферми и для которых имя Ферми является лишь одним из имен великих ученых нашего века, будут рады приобрести конспекты по столь важному предмету, как квантовая механика, сделанные для них собственной рукой такого мастера.

Обрисовав происхождение этих заметок, нет нужды объяснять, что их ни в коей мере нельзя рассматривать как окончательную трактовку квантовой механики, какую Ферми мог бы дать в более отточенном тексте. Гейзенберг, Паули, Дирак, Де Бройль, Йордан, Крамерс — если упомянуть лишь некоторых из создателей квантовой механики — все они дали свои собственные варианты изложения этой теории в книгах, пользующихся заслуженной известностью. Предлагаемые заметки Ферми ни в каком отношении нельзя сравнивать с этими трудами. Дух, в котором они написаны, и цели, которые они преследовали, в корне отличны от духа и целей упомянутых книг.

Ферми в последние десять-пятнадцать лет жизни прочел едва ли одну-две книги по физике. Тем не менее он стоял на переднем крае науки, непосредственно получая информацию от исследователей и осмысливая ее по-своему. Практически с достоверностью известно, что при составлении этого конспекта он не прибегал к помощи учебников по квантовой механике, за исключением, быть может, очень немногих пунктов. Если все же отдельные места в этом конспекте окажутся очень близкими к тексту некоторых общепринятых учебников, мы должны заключить из этого, что, обдумывая предмет заново, Ферми самостоятельно пришел к этим традиционным формулировкам, содержащимся в его конспектах.

Мы повторяем, что эти конспекты были подготовлены только для лекций и что их распространение за пределами учебных групп не входило в намерения автора. Лишь зная его большой интерес к преподаванию, мы надеемся не погрешить против памяти Энрико Ферми, опубликовав эти заметки с пользой для других студентов.

*Э. Сегре*

## CONTENTS

|  |     |
|--|-----|
| <i>From the Publishers</i>                                       | 4   |
| <i>Preface</i>   | 8   |
| 1. Optics—Mechanics Analogy                                      | 14  |
| 2. Schroedinger Equation   | 20  |
| 3. Simple One-dimensional Problems                               | 26  |
| 4. Linear Oscillator   | 32  |
| 5. W.K.B. Method   | 36  |
| 6. Spherical Harmonics   | 42  |
| 7. Central Forces  | 46  |
| 8. Hydrogen Atom   | 50  |
| 9. Orthogonality   | 62  |
| 10. Linear Operators   | 68  |
| 11. Eigenvalues and Eigenfunctions                               | 76  |
| 12. Operators for Mass Point                                     | 86  |
| 13. Uncertainty Principle  | 100 |
| 14. Matrices   | 104 |
| 15. Hermithian Matrices—Eigenvalue Problems                      | 122 |
| 16. Unitary Matrices—Transformations                             | 132 |
| 17. Observables  | 146 |
| 18. The Angular Momentum   | 160 |
| 19. Time Dependence of Observables—Heisenberg Representation     | 166 |
| 20. Conservation Theorems  | 174 |
| 21. Time Independent Perturbation Theory—Ritz Method             | 190 |
| 22. Case of Degeneracy or Quasi-degeneracy—Hydrogen Stark Effect | 204 |
| 23. Time Dependent Perturbation Theory—Born Approximation        | 210 |
| 24. Emission and Absorption of Radiation                         | 218 |
| 25. Pauli Theory of Spin   | 228 |
| 26. Electron in Central Field                                    | 234 |
| 27. Anomalous Zeeman Effect                                      | 248 |
| 28. Addition of Angular Momentum Vectors                         | 252 |
| 29. Atomic Multiplets  | 264 |
| 30. Systems with Identical Particles                             | 274 |
| 31. Two Electron System  | 284 |
| 32. The Hydrogen Molecule  | 290 |
| 33. Collision Theory   | 300 |
| 34. Dirac Theory of the Free Electron                            | 306 |
| 35. Dirac Electron in Electromagnetic Field                      | 322 |
| 36. Dirac Electron in Central Field—Hydrogen Atom                | 330 |
| 37. Transformations of Dirac Spinors                             | 338 |

## СОДЕРЖАНИЕ

|  |     |
|--|-----|
| <i>От издательства</i>   | 5   |
| <i>Предисловие к американскому изданию</i>                             | 9   |
| 1. Аналогия между оптикой и механикой                                  | 15  |
| 2. Уравнение Шредингера  | 21  |
| 3. Простейшие одномерные задачи  | 27  |
| 4. Линейный осциллятор   | 33  |
| 5. Метод Вентцеля — Крамерса — Бриллюэна                               | 37  |
| 6. Сферические функции   | 43  |
| 7. Случай центральных сил  | 47  |
| 8. Атом водорода   | 51  |
| 9. Ортогональность волновых функций                                    | 63  |
| 10. Линейные операторы   | 69  |
| 11. Собственные функции и собственные значения                         | 77  |
| 12. Операторы материальной точки                                       | 87  |
| 13. Принцип неопределенности   | 101 |
| 14. Матрицы  | 105 |
| 15. Эрмитовы матрицы. Задача на собственные значения                   | 123 |
| 16. Унитарные матрицы и преобразования                                 | 133 |
| 17. Наблюдаемые  | 147 |
| 18. Момент импульса  | 161 |
| 19. Зависимость наблюдаемых от времени. Гейзенберговское представление | 167 |
| 20. Законы сохранения и сохраняющиеся величины                         | 175 |
| 21. Стационарная теория возмущений. Метод Ритца                        | 191 |
| 22. Случай вырождения и квазивырождения. Эффект Штарка на водороде     | 205 |
| 23. Нестационарная теория возмущений. Борновское приближение           | 211 |
| 24. Испускание и поглощение излучения                                  | 219 |
| 25. Теория спина Паули   | 229 |
| 26. Электрон в центральном поле  | 235 |
| 27. Аномальный эффект Зеемана  | 249 |
| 28. Сложение векторов момента  | 253 |
| 29. Атомные мультиплеты  | 265 |
| 30. Системы тождественных частиц                                       | 275 |
| 31. Двухэлектронная система (атом гелия)                               | 285 |
| 32. Молекула водорода  | 291 |
| 33. Теория столкновений  | 301 |



|  |            |
|--|------------|
| <b>34. Теория свободного электрона Дирака</b>                        | <b>307</b> |
| <b>35. Электрон Дирака в электромагнитном поле</b>                   | <b>323</b> |
| <b>36. Электрон Дирака в центральном поле. Водородоподобный атом</b> | <b>331</b> |
| <b>37. Преобразование дираковских спиноров</b>                       | <b>339</b> |
| <b><i>Комментарии</i></b>  | <b>355</b> |

# **КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА**

**(конспект лекций)**

# Quantum Mechanics

E. Fermi Physics 341  
Winter 1954

1-1

## 1- Optics - Mechanics analogy.

### Dictionary

|                                       |   |
|---------------------------------------|---|
| Mass point                            | Wave packet                                     |
| Trajectory                            | Ray   |
| Velocity ( $v$ )                      | Group velocity ( $V$ )                          |
| No simple analog                      | Phase velocity ( $v$ )                          |
| Potential function of position $U(x)$ | Refractive index (or $v$ ) function of position |
| (1) Energy ( $W$ ) $W = W(v)$         | Frequency ( $\nu$ ) of $\psi(x, t)$             |

First: Trajectory = Ray  
                     ↓                      ↓  
                     from Maupertuis    from Fermat

$$(2) \int \sqrt{W-U} ds = \min; \quad \int \frac{ds}{v} = \min \quad (3)$$

Proof of Maupertuis:

$$\delta \int \sqrt{W-U} ds = \int (\sqrt{W-U} \delta ds - \frac{\delta U}{2\sqrt{W-U}} ds) = 0$$

$$\text{use } \delta ds = \int \frac{dx}{ds} \delta dx, \quad \delta U = \int \frac{\partial U}{\partial x} \delta x$$

and part. integr., Find minimum equations

$$\frac{d}{ds} \left( \sqrt{W-U} \frac{dx}{ds} \right) = - \frac{1}{2\sqrt{W-U}} \frac{\partial U}{\partial x}$$

$$\text{use } V = \sqrt{\frac{2}{m}} \sqrt{W-U}, \quad dt = \frac{ds}{V} = \sqrt{\frac{m}{2}} \frac{ds}{\sqrt{W-U}}$$

$$\rightarrow m \frac{d^2 x}{dt^2} = - \frac{\partial U}{\partial x} \quad \text{Therefore; (2) is true}$$

Proof of Fermat

because of eq. of motion

$$\int \frac{ds}{v} = \min \rightarrow \nu \int \frac{ds}{v} = \min \rightarrow \int \frac{ds}{\lambda} = \min \rightarrow \text{No of waves} = \min$$

means: no of waves stationary: hence positive interference

# АНАЛОГИЯ МЕЖДУ ОПТИКОЙ И МЕХАНИКОЙ

1

Между основными представлениями механики и оптики существует глубокая и нетривиальная аналогия. Это обстоятельство дает возможность составить следующий „словарь“, позволяющий переводить утверждения механики на язык оптики и наоборот.

## Словарь

| Механика  | Оптика   |
|---|--|
| Материальная точка  | Волновой пакет   |
| Траектория  | Луч  |
| Скорость ( $V$ )  | Групповая скорость ( $V$ )   |
| Простой аналогии нет  | Фазовая скорость ( $v$ )   |
| Потенциальная энергия —<br>функция координат:<br>$U = U(x)$ | Показатель преломления (или<br>фазовая скорость $v$ ) как<br>функция координат |
| Энергия $E$   | Частота $\nu$ [В диспергирующей<br>среде $v = v(\nu, x)$ ]                     |

В оптике

$$E = E(\nu). \quad (1.1)$$

Разберем прежде всего следующее сопоставление:

$$\text{Траектория} = \text{Луч}$$

из принципа Мопертюи

$$\int \sqrt{E - U} ds = \min. \quad (1.2)$$

из принципа Ферма

$$\int \frac{ds}{v} = \min. \quad (1.3)$$

**Доказательство принципа Мопертюи.** Варьируя интеграл (1.2) (в предположении его экстремума):

$$\delta \int \sqrt{E - U} ds = \int \left\{ \sqrt{E - U} \delta ds - \frac{\delta U}{2 \sqrt{E - U}} ds \right\} = 0,$$

пользуясь равенствами  $\delta ds = \frac{dx}{ds} \delta dx$ ,  $\delta U = \frac{\partial U}{\partial x} \delta x$ , а затем

проводя в первом слагаемом полученного таким образом равенства интегрирование по частям\*, мы приходим к виду произвольности вариаций  $\delta x^i$  внутри области интегрирования к уравнению экстремали,

$$\frac{d}{ds} \left[ \sqrt{E - U} \frac{dx}{ds} \right] = - \frac{1}{2 \sqrt{E - U}} \frac{\partial U}{\partial x}.$$

Используя равенства

$$v = \sqrt{\frac{2}{m}} \sqrt{E - U}, \quad dt = \frac{ds}{v} = \sqrt{\frac{m}{2}} \frac{ds}{\sqrt{E - U}},$$

получим окончательно:

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = - \frac{\partial U}{\partial x}.$$

Отсюда следует справедливость принципа (1.2), так как из него вытекают правильные уравнения движения.



From (1) (2) Trajectory - Ray if

$$(4) \quad \frac{1}{v(\nu, x)} = f(\nu) \sqrt{W(\nu) - U(x)}$$

$f(\nu)$  and  $W = W(\nu)$  so far arb. fcts

Determine  $f$  &  $W$  from:

Vel. of mass pt  $V = \sqrt{\frac{2}{m}} \sqrt{W - U}$  equals

Group vel. of pkt  $V = 1 / \frac{d}{d\nu} \left( \frac{\nu}{v} \right)$

Proof of group vel. formula

Wave packet with small frequency spread ~~then~~

$$\sum a \cos 2\pi \nu \left( t - \frac{x}{v(\nu)} \right)$$

If all  $a$ 's  $> 0$  constructive interf at  $x=0$  and  $t=0$ . Locate now packet for  $t \neq 0$  by demanding constructive interference

Required  $\frac{d}{d\nu} \left\{ \nu \left( t - \frac{x}{v(\nu)} \right) \right\} = 0$

or  $t = x \frac{d}{d\nu} \frac{\nu}{v}$  identify this to  $t = \frac{x}{V}$

Find

(5)

~~$$\frac{d}{d\nu} \left( \nu \left( t - \frac{x}{v(\nu)} \right) \right) = 0$$~~

$$\frac{1}{V} = \frac{d}{d\nu} \frac{\nu}{v(\nu)}$$

Condition becomes

(6)  ~~$\frac{d}{d\nu} \left( \nu \left( t - \frac{x}{v(\nu)} \right) \right) = 0$~~   $\frac{d}{d\nu} \frac{\nu}{v} = \sqrt{\frac{m}{2}} \frac{1}{\sqrt{W(\nu) - U}}$

Use (4)

$$\sqrt{\frac{m}{2}} \frac{1}{\sqrt{W-U}} = \frac{d}{d\nu} \left\{ \nu f \sqrt{W(\nu) - U} \right\} = \frac{d(\nu f)}{d\nu} \sqrt{W-U} + \frac{\nu f}{\nu} \frac{dW/d\nu}{\sqrt{W-U}}$$

**Доказательство принципа Ферма.** Заметим сначала, что очевидно следующее соответствие:

$$\int \frac{ds}{v} = \min \rightarrow v \int \frac{ds}{v} = \min \rightarrow \int \frac{ds}{\lambda} = \min.$$

Самое правое из этих равенств констатирует минимальность числа длин волн, укладывающихся на протяжении луча. Таким образом, определяемое принципом Ферма направление соответствует положительной интерференции (главному максимуму), т. е. действительному направлению распространения света. Тем самым подтверждена вся серия равенств, включая и самое левое — собственно принцип Ферма.

Из сопоставления принципов (1.2) и (1.3) следует, что

$$Траектория \equiv Луч,$$

если выполняется соотношение

$$\frac{1}{v(v, x)} = f(v) \sqrt{E(v) - U(x)}, \quad (1.4)$$

где  $f(v)$  и  $E(v)$  — произвольные пока функции частоты.

Вид функций  $f(v)$  и  $E(v)$  определим из условия, что скорость материальной точки

$$V = \sqrt{\frac{2}{m}} \sqrt{E - U}$$

эквивалентна групповой скорости волнового пакета:

$$V = \left[ \frac{d}{dv} \left( \frac{v}{v} \right) \right]^{-1}.$$

**Вывод формулы для групповой скорости**<sup>1)</sup>. Волновой пакет, гармоники которого укладываются в малом интервале частот, можно представить как

$$\sum_v a_v \cos 2\pi v \left( t - \frac{x}{v(v)} \right).$$

Если все  $a_v > 0$ , то в точке  $x=0$  и  $t=0$  должна иметь место положительная интерференция всех гармоник (главный максимум). Найдем теперь положение волнового пакета при любом  $t \neq 0$ , имея в виду, что оно всегда определяется координатой его максимума. Для максимума пакета справедливо равенство

$$\frac{d}{dv} \left\{ v \left( t - \frac{x}{v(v)} \right) \right\} = 0,$$

из которого следует, что  $t = x \frac{d}{dv} \left( \frac{v}{v} \right)$ . В духе нашей оптико-механической аналогии эта связь между  $x$  и  $t$  эквивалентна равенству  $t = x/V$ . Сравнение двух последних выражений дает формулу для групповой скорости

$$\frac{1}{V} = \frac{d}{dv} \left( \frac{v}{v(v)} \right). \quad (1.5)$$

<sup>1)</sup> Подробнее о групповой скорости см., например, курс Д. И. Блохинцева, Основы квантовой механики, М., 1962, стр. 35.— *Прим. ред.*

$U$  varies from place to place indep. of  $v$  therefore  $\sqrt{W-U}$  is cons. as indep. Find then conditions:

$$\frac{d(\psi f)}{dv} = 0$$

$$\downarrow$$

$$vf = \text{constant}$$

$$\sqrt{\frac{m}{2}} = \frac{vf}{2} \frac{dW}{dv}$$

$$\downarrow$$

$$\frac{dW}{dv} = \text{constant} = h$$

$$W = hv + \text{const} = hv$$

set this  $\rightarrow 0$  by suitable choice of energy constant

Therefore results

(7)  $W = hv$

(8)  $f = \frac{\sqrt{2m}}{h} v$

(9)  $v = \frac{hv}{\sqrt{2m}} \frac{1}{\sqrt{hv - U}}$  determines refractive index and dispersion everywhere

Change to angular frequency

(10)  $\omega = 2\pi v$  also put  $\hbar = h/2\pi$

Final result

$$W = \hbar \omega$$

$$v = \frac{\hbar \omega}{\sqrt{2m}} \frac{1}{\sqrt{\hbar \omega - U}}$$

$$v = \frac{\sqrt{\frac{2m}{\hbar}}}{\sqrt{\hbar \omega - U}}$$

(11)  $\lambda = \frac{\lambda}{2\pi} = \frac{v}{\omega} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{1}{\sqrt{\hbar \omega - U}} = \frac{\hbar}{mv} = \frac{\hbar}{p}$

(de Broglie wave length)

Experiments on material particle diffraction may be used to determine  $\lambda$  hence  $h$  or  $\hbar$

$$h = 6.6252(5) \times 10^{-27} \text{ ergs sec } (L^2 M T^{-1})$$

$$\hbar = 1.05444(9) \times 10^{-27} \text{ "}$$

Вернемся теперь к условию эквивалентности скорости материальной точки и групповой скорости волнового пакета. Его можно записать в виде

$$\frac{d}{dv} \left( \frac{v}{v(v)} \right) = \sqrt{\frac{m}{2}} \frac{1}{\sqrt{E(v)-U(x)}}. \quad (1.6)$$

Отсюда, используя условие (1.4), получаем:

$$\begin{aligned} \sqrt{\frac{m}{2}} \frac{1}{\sqrt{E-U}} &= \frac{d}{dv} \{ v f(v) \sqrt{E-U} \} = \\ &= \frac{d(vf(v))}{dv} \sqrt{E-U} + \frac{vf(v)}{2\sqrt{E-U}} \frac{dE}{dv}. \end{aligned} \quad (1.6a)$$

Рассмотрим полученный результат. Функция  $U(x)$  изменяется от точки к точке независимо от  $v$ ; следовательно, величину  $\sqrt{E-U}$  также можно рассматривать как независимую переменную. Сравнивая коэффициенты при одинаковых степенях  $\sqrt{E-U}$  в уравнении (1.6a), находим условия

$$\frac{d}{dv} (vf(v)) = 0, \quad \sqrt{\frac{m}{2}} = \frac{vf(v)}{2} \frac{dE}{dv}.$$

Первое из них дает  $vf(v) = \text{const}$ ; тогда  $\sqrt{\frac{m}{2}} = \frac{vf(v)}{2} \frac{dE}{dv} = \text{const}$ , следовательно,  $dE/dv = \text{const}$ .

Введем обозначение  $\frac{dE}{dv} = \text{const} = h$ ; тогда  $E = hv + \text{const}$ .

Положим здесь  $\text{const} = 0$ , выбрав подходящим образом начало отсчета энергии. В результате имеем следующие формулы:

$$E = hv, \quad (1.7)$$

$$f(v) = 2m/hv, \quad (1.8)$$

$$v = \frac{hv}{\sqrt{2m} \sqrt{hv - U}}. \quad (1.9)$$

Фазовая скорость (1.9) определяет во всех точках значения показателя преломления и дисперсию.

Перейдем теперь к циклической частоте и введем обозначения

$$\omega = 2\pi\nu, \quad \hbar = \frac{h}{2\pi}, \quad \lambda = \frac{\lambda}{2\pi}. \quad (1.10)$$

**Окончательный результат.**

$$E = \hbar\omega, \quad v = \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2m} \sqrt{\hbar\omega - U}}, \quad V = \sqrt{\frac{2}{m}} \sqrt{\hbar\omega - U}.$$

$$\text{Далее} \quad \lambda = \frac{\lambda}{2\pi} = \frac{v}{\omega} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m} \sqrt{\hbar\omega - U}} = \frac{\hbar}{mV} = \frac{\hbar}{p}. \quad (1.11)$$

Величину  $\lambda$  называют *дебройлевской длиной волны*. Исследование явления дифракции материальных частиц позволяет определить  $\lambda$ , а следовательно,  $h$  и  $\hbar$ . Приведем их численные значения:

$$h = 6,6252(5) \cdot 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{сек} [L^2 MT^{-1}],$$

$$\hbar = 1,05444(9) \cdot 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{сек} [L^2 MT^{-1}].$$

Константа  $h$  (или  $\hbar$ ) называется *постоянной Планка*.



## 2 - Schrodinger equation.

$$(1) \quad v = v(\omega, P) = \frac{\hbar \omega}{\sqrt{2m} \sqrt{\hbar \omega - U}}$$

Monochromatic wave equation

$$\nabla^2 \psi - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = 0 \quad \left( \text{Comments: need to assume fixed } \omega \right)$$

$$(2) \quad \psi = u e^{-i\omega t} = u e^{-\frac{i}{\hbar} \hbar \omega t} = u e^{-\frac{i}{\hbar} W t}$$

$$\nabla^2 u + \frac{\omega^2}{v^2} u = 0 \quad \nabla^2 u + \frac{2m}{\hbar^2} (\hbar \omega - U) u = 0$$

write  $\omega u \sim -\frac{1}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t}$

Time dependent Schrodinger equation

$$(3) \quad \nabla^2 \psi + \frac{2mi}{\hbar} \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{2m}{\hbar^2} U \psi = 0$$

Written also as

$$(4) \quad i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U \psi \quad \left( \text{Comments: } \psi \text{ complex} \right)$$

Time dep. equation (Assuming (2))

$$(5) \quad W u = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} + U \psi$$

Valid only for states of fixed energy  $W = \hbar \omega$

Continuity equation for (4)

Write conjugate equation

$$(6) \quad -i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^* + U \psi^*$$

(4)  $\times \psi^* - (6) \times \psi$  yields

$$(7) \quad \frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \psi) + \nabla \cdot \left\{ \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \right\}$$

Получим основное уравнение квантовой механики — уравнение Шредингера. Выражение для фазовой скорости волны было найдено в предыдущей лекции:

$$v = v(\omega, p) = \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2m}} \frac{1}{\sqrt{\hbar\omega - U}}. \quad (2.1)$$

Такая монохроматическая волна удовлетворяет уравнению

$$\nabla^2 \psi - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = 0, \quad (a)$$

частное решение которого имеет вид

$$\psi = u e^{-i\omega t} = u e^{-\frac{i}{\hbar} E t}; \quad (2.2)$$

здесь по смыслу монохроматичности необходимо брать постоянную частоту  $\omega$ .

Функция  $\psi$  представляет собой произведение двух функций:  $u$ , зависящей от пространственных координат, и экспоненты, зависящей только от времени. Подставив решение (2.2) в волновое уравнение (a), получим:

$$\nabla^2 u + \frac{\omega^2}{v^2} u = 0,$$

или с учетом (2.1):

$$\nabla^2 u + \frac{2m}{\hbar^2} (\hbar\omega - U) u = 0.$$

Заменяя  $\omega u$  с помощью соответствия

$$\omega u \rightarrow -\frac{1}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t},$$

мы приходим к зависящему от времени уравнению Шредингера,

$$\nabla^2 \psi + i \frac{2m}{\hbar} \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{2m}{\hbar^2} U \psi = 0. \quad (2.3)$$

Перепишем его несколько иначе:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U \psi. \quad (2.4)$$

Заметим, что  $\psi$  — комплексная функция\*.

В случае решения (2.2) мы имеем уравнение для стационарных состояний

$$E \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U \psi. \quad (2.5)$$

Это уравнение имеет смысл только для состояний с фиксированной энергией\*\*  $E = \hbar\omega$ .

Suggested provisional interpretation

(8)  $\psi^* \psi = |\psi|^2 = \text{density of probability}$

(9)  $\frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) = \text{average value of flow density}$

Normalization: (8) suggests to determine  $\psi$  such that

(10)  $\int |\psi|^2 d\tau = \int \psi^* \psi d\tau = 1$

This requires certain conditions

a) Near singular pt.  $\psi$  less so than  $r^{-3/2}$

b) Limit of infinite distance  $\psi \rightarrow 0$  faster than  $r^{-3/2}$

Exceptions to rule (b) will have to be considered later

Generalizations.

Point on line

(11)  $\begin{cases} i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + U(x) \psi \\ \text{or} \\ E u(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dx^2} + U(x) u \end{cases}$

Rotator with fixed axis

$A = \text{mom. of inertia}$

(12)  $\begin{cases} i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2A} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \alpha^2} + U(\alpha) \psi(\alpha, t) \\ \text{or} \\ E u(\alpha) = -\frac{\hbar^2}{2A} \frac{d^2 u}{d\alpha^2} + U(\alpha) u(\alpha) \end{cases}$

Point on sphere or dumbbell with fixed c. of grav.

(13)  $\Delta \psi = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2}$

**Уравнение непрерывности.** Уравнению (2.4) можно сопоставить соответствующее уравнение непрерывности. Для этого запишем уравнение комплексно сопряженное (2.4):

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^* + U \psi^*. \quad (2.6)$$

Умножим (2.4) на  $\psi^*$ , а (2.6) — на  $\psi$  и вычтем из первого второе:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \psi) + \nabla \cdot \left\{ \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \right\} = 0. \quad (2.7)$$

Представляется естественным дать следующее истолкование фигурирующим в уравнении (2.7) величинам\*:

$$\psi^* \psi = |\psi|^2 = \text{Плотность вероятности}, \quad (2.8)$$

$$\frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) = \text{Плотность потока вероятности}. \quad (2.9)$$

**Нормировка.** С точки зрения интерпретации величины (2.8) функцию  $\psi$  следует определить так, чтобы

$$\int |\psi|^2 d\tau = \int \psi^* \psi d\tau = 1. \quad (2.10)$$

Это в свою очередь приводит к следующим условиям:

а) вблизи сингулярной точки  $\psi$  возрастает медленнее, чем  $r^{-3/2}$ ;

б) на бесконечности  $\psi$  стремится к нулю быстрее, чем  $r^{-3/2}$ .  
Исключения из правила „б“ будут рассмотрены позднее.

**Обобщения.** Рассмотрим ряд специальных случаев уравнения Шредингера.

*Точка на линии (одномерная задача):*

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + U(x) \psi, \quad (2.11)$$

или в стационарном случае [уравнение (2.5)]

$$Eu = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dx^2} + Uu.$$

*Вращение вокруг неподвижной оси (A — момент инерции):*

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\alpha, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2A} \frac{\partial^2 \psi(\alpha, t)}{\partial \alpha^2} + U(\alpha) \psi(\alpha, t), \quad (2.12)$$

или (стационарный случай)

$$Eu(\alpha) = -\frac{\hbar^2}{2A} \frac{d^2 u(\alpha)}{d\alpha^2} + U(\alpha) u(\alpha).$$

*Точка на сфере (или „гантели“) с фиксированным центром тяжести.*

$$\Delta \psi(\varphi, \theta, t) = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[ \sin \theta \frac{\partial \psi(\varphi, \theta, t)}{\partial \theta} \right] + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi(\varphi, \theta, t)}{\partial \varphi^2}. \quad (2.13)$$

где  $\Delta$  — угловая часть лапласиана в сферических координатах\*\*. Получаем:

$$(14) \begin{cases} \Lambda \psi - \frac{2A}{\hbar^2} U(\vartheta, \varphi) \psi = - \frac{2A i}{\hbar} \frac{\partial \psi}{\partial t} \\ \Lambda u + \frac{2A}{\hbar^2} (E - U) u = 0 \end{cases} \quad A = \begin{cases} \hbar^2 m \text{ or} \\ \text{mom of} \\ \text{inertia} \end{cases}$$

Several mass points

$$\psi(t, x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, \dots, x_n, y_n, z_n)$$

$$(15) \begin{cases} i \hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = - \frac{\hbar^2}{2} \sum_j \frac{1}{m_j} \nabla_j^2 \psi + U \psi \\ E u = - \frac{\hbar^2}{2} \sum_j \frac{1}{m_j} \nabla_j^2 u + U u \end{cases}$$

General dynamical system

$$(16) \quad T = \frac{1}{2} m_{ik} \dot{q}_i \dot{q}_k$$

Sum over equal indices

Define

$$m^{ik} m_{il} = \delta_{kl}$$

$$(17) \quad D = \det |m_{ik}|$$

$$(18) \quad \nabla^2 \psi = \frac{1}{\sqrt{D}} \frac{\partial}{\partial q_k} \left( \sqrt{D} m^{kl} \frac{\partial \psi}{\partial q_l} \right)$$

Volume element

$$(19) \quad d\tau = \sqrt{D} dq_1 dq_2 \dots dq_n$$

Equation

$$(20) \begin{cases} - \frac{\hbar^2}{2} \nabla^2 \psi + U \psi = i \hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \\ - \frac{\hbar^2}{2} \nabla^2 u + U u = E u \end{cases}$$

$$m^{ik} = \frac{\text{mass of } m_i}{A}$$

$$\begin{aligned} \wedge \psi(\varphi, \theta, t) - \frac{2A}{\hbar^2} U(\theta, \varphi) \psi(\varphi, \theta, t) = -i \frac{2A}{\hbar} \frac{\partial \psi(\varphi, \theta, t)}{\partial t}, \\ \text{или (стационарный случай)} \end{aligned} \quad (2.14)$$

$$\wedge u(\varphi, \theta) + \frac{2A}{\hbar^2} (E - U) u(\varphi, \theta) = 0.$$

Здесь  $A$  — момент инерции (в случае точки  $A = mr^2$ ).

*Система  $n$  материальных точек.* Волновая функция берется в виде  $\psi = \psi(t; x_1, y_1, z_1; \dots; x_n, y_n, z_n)$ .

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{j=1}^n \frac{1}{m_j} \nabla_j^2 \psi + U\psi, \quad (2.15)$$

или (стационарный случай)

$$Eu = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{j=1}^n \frac{1}{m_j} \nabla_j^2 u + Uu.$$

*Общий случай динамической системы.* Для такой системы кинетическая энергия (в обобщенных координатах) записывается в виде

$$T = \frac{1}{2} m_{ik} \dot{q}_i \dot{q}_k \quad (2.16)$$

(по одинаковым индексам подразумевается суммирование). Определим матрицу  $m^{ik}$ , обратную матрице  $m_{ik}$ , следующим образом:

$$\begin{aligned} m^{ik} m_{il} &= \delta_{kl}, \\ \text{где } \delta_{kl} &= 1 \text{ при } k=l \text{ и } \delta_{kl}=0 \text{ при } k \neq l. \text{ Как известно,} \\ m^{il} &= \frac{\text{adj}(m_{il})}{\det[m_{jk}]}, \end{aligned}$$

где в числителе стоит алгебраическое дополнение элемента  $m_{il}$ , а в знаменателе — детерминант матрицы  $m_{jk}$ . В дальнейшем обозначим

$$\det[m_{jk}] = \mathcal{D}. \quad (2.17)$$

В таких обозначениях  $\nabla^2 \psi$  запишется как

$$\nabla^2 \psi(q_1, \dots, q_n, t) = \frac{1}{V \mathcal{D}} \frac{\partial}{\partial q_k} \left[ V \mathcal{D} \cdot m^{kl} \frac{\partial \psi(q_1, \dots, q_n, t)}{\partial q_l} \right], \quad (2.18)$$

а элемент объема — как

$$d\tau = V \mathcal{D} dq_1 dq_2 \dots dq_n. \quad (2.19)$$

Уравнение Шредингера в этом случае принимает вид

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi(q_1, \dots, q_n, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2} \nabla^2 \psi(q_1, \dots, q_n, t) + \\ + U\psi(q_1, \dots, q_n, t), \end{aligned} \quad (2.20)$$

или (стационарный случай)

$$Eu(q_1, \dots, q_n) = -\frac{\hbar^2}{2} \nabla^2 u(q_1, \dots, q_n) + Uu(q_1, \dots, q_n).$$

### 3- Simple one dimensional problems

Time indep. equation.

$$(1) \quad u'' + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) u = 0$$

a) Closed line, length  $a$ ,  $U(x) = 0$

$$(2) \quad u \sim e^{\pm i \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x}$$

Periodicity condition requires  $u \sim e^{\frac{2\pi i}{a} l x}$

Therefore

$l = \text{integer}$

$$(3) \quad E_l = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{m a^2} l^2$$

Normalized functions

Comments on quantization of energy

$$(4) \quad u_l = \frac{1}{\sqrt{a}} e^{\frac{2\pi i l}{a} x}$$

b) Rotator with fixed axis. As above

with  $m \rightarrow A = \text{mom. of inertia}$

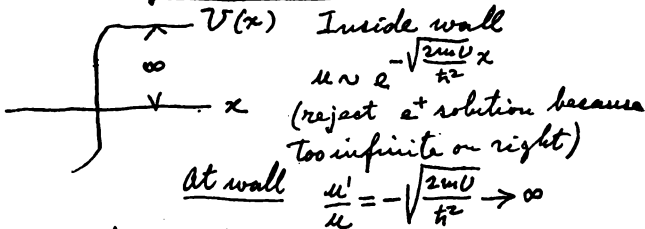
$$a \rightarrow 2\pi$$

$$x \rightarrow \alpha$$

(5)

$$\begin{cases} E_l = \frac{\hbar^2}{2A} l^2 \\ u_l = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i l \alpha} \end{cases}$$

c) Boundary condition where  $U = \infty$



(b) Therefore, at wall take  $\begin{cases} u = 0 \\ u' \text{ finite} \end{cases}$

## ПРОСТЕЙШИЕ ОДНОМЕРНЫЕ ЗАДАЧИ | 3

Рассмотрим несколько частных случаев применения уравнения Шредингера, не зависящего от времени,

$$u'' + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) u = 0. \quad (3.1)$$

*а. Замкнутая линия*<sup>1)</sup>. Обозначим ее длину через  $a$ ; пусть потенциальная энергия  $U(x) = 0$ . Частные решения (3.1) суть

$$u(x) \sim e^{\pm i \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x}. \quad (3.2)$$

Условие периодичности требует, чтобы функция  $u$  имела вид

$$u \sim e^{i \frac{2\pi}{a} l x},$$

где  $l$  принимает любые целочисленные значения (положительные, отрицательные и нуль). Сравнивая это выражение с решением (3.2), легко определить  $E$ :

$$E_l = \frac{2\pi^2 \hbar^2 l^2}{ma^2}. \quad (3.3)$$

Мы пришли к важному заключению. Значения энергии оказываются квантованными уже в этом простейшем случае! Нормированные функции имеют при этом вид

$$u_l(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} e^{i \frac{2\pi}{a} l x}. \quad (3.4)$$

*б. Вращение вокруг фиксированной оси.* Чтобы перейти к этому случаю, достаточно в предыдущем решении произвести замену

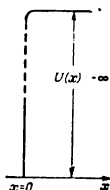
$$m \rightarrow A \text{ (момент инерции)}, \quad a \rightarrow 2\pi, \quad x \rightarrow \alpha;$$

тогда формулы (3.3) и (3.4) примут вид

$$E_l = \frac{\hbar^2}{2A} l^2, \quad u_l(\alpha) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i l \alpha}. \quad (3.5)$$

*в. Потенциальный барьер бесконечной высоты.*

[Граничное условие вида  $U(x) = 0$  при  $x \leq 0$  и  $U(x) = \infty$  при  $x > 0$  (фиг. 1)] Чтобы найти решение при  $x > 0$ , мы сначала положим, что потенциальная энергия конечна и равна  $U(x) \gg E$  при  $x > 0$ . Получим:



Фиг. 1.

$$u \sim e^{-\sqrt{\frac{2mU}{\hbar^2}} x}, \quad (3.6a)$$

<sup>1)</sup> Такую линию можно рассматривать как отрезок прямой, введя топологическое условие, заключающееся в том, что его начало и конец совпадают друг с другом, откуда следует условие периодичности. — *Прим. ред.*



d) Point on segment (from  $x=0$  to  $x=a$ )

Potential = 0 on segment, becomes  $\infty$  at ends

Therefore  $u(0) = u(a) = 0$  are boundary conditions

Solution of  $u'' + \frac{2mE}{\hbar^2} u = 0$

$u \sim \frac{\sin \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x}{\cos \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x}$  (because of  $u(0)=0$  reject cosine)

$u \sim \sin \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x$  Because of  $u(a)=0$  must be  $\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} a = n\pi$  ( $n$  integer)

Therefore

$$(7) \begin{cases} E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2a^2 m} n^2 \\ u_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi n x}{a} \end{cases} \text{normalization factor}$$

yes  
e)

Point on infinite line - Zero potential

$$(8) \quad u'' + \frac{2mE}{\hbar^2} u = 0$$

has solutions

$$(9) \quad e^{\pm i \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x}$$

None of these is normalizable!

Get around difficulty in two ways:

1 - As limit of case a)

$$u_\ell = \frac{1}{\sqrt{a}} e^{\frac{2\pi i \ell}{a} x} \quad a \rightarrow \infty$$

$$E_\ell = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{m} \left( \frac{\ell}{a} \right)^2$$

(решение с положительным знаком показателя экспоненты мы отбросили, так как при  $x \rightarrow +\infty$  оно расходится быстрее, чем это допустимо). Теперь устремим  $U$  в точке  $x=0$  к бесконечности. На границе барьера ( $x=0$ )

$$\frac{u'}{u} = - \sqrt{\frac{2mU}{\hbar^2}} \rightarrow -\infty. \quad (3.6б)$$

Отсюда ясно, что на границе ( $x=0$ ) следует принять

$$u=0, \quad u' = \text{конечная величина}. \quad (3.6в)$$

г. *Потенциальная яма с бесконечно высокими стенками* (движение в сегменте  $[0, a]$ ). Потенциальная энергия  $U(x) \equiv 0$  внутри сегмента и становится бесконечно большой на его концах. Следовательно, граничные условия для функции  $u(x)$  имеют вид  $u(0) = u(a) = 0$ . Общее решение уравнения

$$u''(x) + \frac{2mE}{\hbar^2} u(x) = 0$$

в этом случае можно представить как  $u(x) \sim \begin{pmatrix} \sin \\ \cos \end{pmatrix} \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x$ .

Граничное условие  $u(0) = 0$  исключает решение с косинусом; таким образом, в нашем случае остается

$$u(x) \sim \sin \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x.$$

Граничное условие  $u(a) = 0$  дает:

$$\sin \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} a = 0, \quad \text{т. е.} \quad \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} a = \pi n,$$

где  $n$  — любое положительное целое число. Следовательно,

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2a^2 m} n^2, \quad u_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi n x}{a}. \quad (3.7)$$

Здесь  $\sqrt{2/a}$  — нормировочный множитель.\*

д. *Точка на бесконечной линии* [ $U(x) \equiv 0$ ]

$$u''(x) + \frac{2mE}{\hbar^2} u(x) = 0. \quad (3.8)$$

Решение этого уравнения имеет вид

$$u(x) \sim e^{\pm i \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x}. \quad (3.9)$$

Это решение ни при каком знаке в экспоненте не может быть обычным образом нормировано! Существуют две возможности обойти это затруднение:

Energy levels are quasi-continuous



No of levels in  $dE$  is obtained

from

$$\frac{dE}{d\ell} = \frac{4\pi^2\hbar^2}{a^2m} \ell = \frac{2\pi\hbar}{a} \sqrt{\frac{2}{m}} \sqrt{E}$$

$$\text{No of levels} = \frac{2}{dE/d\ell} dE = \frac{a}{\pi\hbar} \sqrt{\frac{m}{2}} \frac{dE}{\sqrt{E}}$$

factor 2 because  $\ell$  may be positive or negative

In limit: Continuous spectrum (becomes so for  $a \rightarrow \infty$ ) with all values  $E \geq 0$  allowable

Note, Same result could be found by limit  $a \rightarrow \infty$  in case d)

Alternate approach: Sharp energy levels do not exist but wave packets like

$$u_{\delta k} = \int_{k_0 - \frac{\delta k}{2}}^{k_0 + \frac{\delta k}{2}} e^{ikx} dx = \frac{2}{x} \sin \frac{x\delta k}{2} e^{ik_0 x}$$



are normalizable for  $\delta k$  very small. They correspond to almost definite energy.

More on this later with uncertainty principle

1. Рассмотреть решение (3.9) как предельный случай задачи „а“:

$$\left. \begin{aligned} u_l(x) &= \frac{1}{\sqrt{a}} e^{\frac{2\pi i l}{a} x}, \\ E_l &= \frac{2\pi^2 \hbar^2 l^2}{m a^2} \end{aligned} \right\} \text{при } a \rightarrow \infty.$$

Энергетические уровни при этом квазинепрерывны. Действительно (фиг. 2), число уровней в интервале  $dE$  можно найти следующим образом: расстояние (интервал энергий) между двумя соседними уровнями составляет

$$\frac{dE}{dl} = \frac{4\pi^2 \hbar^2 l}{a^2 m} = \frac{2\pi \hbar}{a} \sqrt{\frac{2}{m}} \sqrt{E},$$



так что число уровней в интервале  $dE$  равно

$$\frac{2}{dE/dl} dE = \frac{a}{\pi \hbar} \sqrt{\frac{m}{2}} \frac{dE}{\sqrt{E}}$$

Фиг. 2.

Энергетические уровни (для квазинепрерывного случая).

(множитель 2 вводится для учета того, что  $l$  может принимать как положительные, так и отрицательные значения). В предельном случае  $a \rightarrow \infty$  мы имеем непрерывный спектр, допускающий все значения  $E \geq 0$ .

Замечание. К этому же результату приводит предельный переход  $a \rightarrow \infty$  в случае „б“.

2. Альтернативная возможность: пусть резких дискретных энергетических уровней нет, но *вместо них имеются* „размазанные“ уровни, соответствующие „размазыванию“ волновой



Фиг. 3.

„Волновой пакет“ для функции  $u_{\delta k}$ .

функции  $u(x)$  по интервалу  $\delta k$  вокруг точки  $k = k_0$ , т. е. функция  $u$  представляется в форме „волнового пакета“ (фиг. 3):

$$u_{\delta k}(x) = \int_{k_0 - \frac{\delta k}{2}}^{k_0 + \frac{\delta k}{2}} e^{ikx} dk = \frac{1}{ix} e^{ik_0 x} \left[ e^{i(k_0 + \frac{\delta k}{2})x} - e^{i(k_0 - \frac{\delta k}{2})x} \right] = \frac{2}{x} \sin \frac{x \delta k}{2} e^{ik_0 x}.$$

Такое решение уже может быть нормировано при *весьма малых*  $\delta k$ . Тогда оно соответствует *почти* определенным значениям энергии. Обсуждение этого вопроса будет продолжено при рассмотрении принципа неопределенности<sup>1)</sup>.

<sup>1)</sup> В конспекте соответствующей (13-й) лекции прямое обсуждение вопроса об энергии такого волнового пакета отсутствует. — Прим. ред.

# 4 - Linear oscillator

$$(1) \quad U = \frac{m}{2} \omega^2 x^2$$

Schrodinger eq. .

$$(2) \quad u'' + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - \frac{m\omega^2}{2} x^2 \right) u = 0$$

Put

$$(3) \quad \xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \quad \epsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}$$

$$(4) \quad \frac{d^2 u}{d\xi^2} + (\epsilon - \xi^2) u = 0 \quad \leftarrow$$

$$(5) \quad u = v(\xi) e^{-\xi^2/2}$$

$$(6) \quad \frac{d^2 v}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dv}{d\xi} + (\epsilon - 1) v = 0$$

Series exp.

$$(7) \quad v = \sum a_n \xi^n \quad \text{yields}$$

$$(8) \quad a_{n+2} = \frac{2n+1-\epsilon}{(n+1)(n+2)} a_n$$

$n$  even and  $n$  odd yield two indep. solutions.  $v(\infty) \rightarrow e^{\xi^2}$  (not allowable) except for  ~~$\epsilon$~~

$$(9) \quad \epsilon = 2n+1$$

Then either even or odd solution is a polynomial (Hermite)

$$(10) \quad \begin{cases} H_0(\xi) = 1 & H_1(\xi) = 2\xi & H_2(\xi) = -2 + 4\xi^2 \\ H_3(\xi) = -12\xi + 8\xi^3 \end{cases}$$

General expression:

$$(11) \quad H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}$$

В ряде областей физики и особенно в квантовой теории фундаментальную роль играет задача о линейном гармоническом осцилляторе. Классически такой осциллятор реализуется в системе, лишенной трения и подчиняющейся законам Ньютона, если в этой системе действует идеальная „возвращающая“ упругая сила Гука ( $F = -m\omega^2 x$ ).

Потенциальная энергия линейного осциллятора имеет вид

$$U(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}, \quad (4.1)$$

и, следовательно, уравнение Шредингера записывается как

$$u''(x) + \frac{\gamma m}{\hbar^2} \left( E - \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) u(x) = 0. \quad (4.2)$$

Положим

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x, \quad \epsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}. \quad (4.3)$$

В этих обозначениях уравнение Шредингера принимает вид

$$\frac{d^2 u(\xi)}{d\xi^2} + (\epsilon - \xi^2) u(\xi) = 0. \quad (4.4)$$

Будем искать его решение в виде

$$u(\xi) = v(\xi) e^{-\xi^2/2}. \quad (4.5)$$

Подставляя решение (4.5) в уравнение (4.4), приходим к уравнению для функции  $v(\xi)$ :

$$\frac{d^2 v(\xi)}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dv(\xi)}{d\xi} + (\epsilon - 1) v(\xi) = 0; \quad (4.6)$$

решение его представим в виде ряда по степеням  $\xi$ :

$$v(\xi) = \sum_r a_r \xi^r. \quad (4.7)$$

Подстановка этого выражения в (4.6) дает рекуррентную формулу для коэффициентов  $a_r$ :

$$a_{r+2} = \frac{2r+1-\epsilon}{(r+1)(r+2)} a_r, \quad (4.8)$$

откуда видно, что существуют два независимых решения, соответствующих четным и нечетным  $r$ . При  $\xi \rightarrow \infty$  функция  $v$  ведет себя как  $\exp \xi^2$ , если только не выполнено условие

$$\epsilon = 2n + 1, \quad (4.9)$$

где  $n$  — любое неотрицательное целое число. Случай экспоненциальной асимптотики недопустим с физической точки зрения<sup>1)</sup>; в случае же (4.9) решение уравнения (4.6) представимо в виде полиномов Эрмита как для четных, так и для нечетных  $r$ .

**Полиномы Эрмита.** Рассмотрим некоторые свойства полиномов Эрмита

$$\left. \begin{aligned} H_0(\xi) &= 1, & H_1(\xi) &= 2\xi, \\ H_2(\xi) &= -2 + 4\xi^2, & H_3(\xi) &= -12\xi + 8\xi^3, \dots \end{aligned} \right\} \quad (4.10)$$

<sup>1)</sup> Такое решение (что совершенно неприемлемо) не поддается нормировке. — *Прим. ред.*

Proof: (5), that is

$$(12) \quad H_n'' - 2\xi H_n' + 2n H_n = 0$$

is equivalent (11) to

$$(13) \quad \left\{ \frac{d^{n+2}}{d\xi^{n+2}} + 2\xi \frac{d^{n+1}}{d\xi^{n+1}} + (2+2n) \frac{d^n}{d\xi^n} \right\} e^{-\xi^2/2} = 0$$

Verify for  $n=0$ ; then by successive derivations for  $n=1, 2, \dots$

Useful properties

$$(14) \quad \frac{dH_n}{d\xi} = 2n H_{n-1}(\xi)$$

(Proof: equivalent to (13) written for  $n-1$ )

Normalization property:

$$(15) \quad \int_{-\infty}^{\infty} H_n^2(\xi) e^{-\xi^2/2} d\xi = \sqrt{\pi} 2^n n!$$

[Proof: By induction - First directly for  $n=0$

Then use (11) + (14) to prove induction

$$\text{property} \quad \int_{-\infty}^{\infty} H_n^2 e^{-\xi^2/2} d\xi = 2n \int_{-\infty}^{\infty} H_{n-1}^2 e^{-\xi^2/2} d\xi]$$

Integral property

$$(16) \quad \int_{-\infty}^{\infty} H_n(x) e^{-x^2} e^{ipx} dx = i^n \sqrt{\pi} p^n e^{-p^2/4}$$

[Proof: directly for  $n=0$ ; then by induction with (11)]

Normalized oscillator eigenfunctions

$$(17) \quad u_n = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{\pi 2^n n!}} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2} \quad \xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$$

$$(18) \quad E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$$

(Comments)

Общее выражение для полинома Эрмита  $n$ -го порядка

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}. \quad (4.11)$$

Убедимся в том, что это и есть общий случай решения уравнения (4.6). Подставив в него (4.11), получим:

$$H_n''(\xi) - 2\xi H_n'(\xi) + 2n H_n(\xi) = 0, \quad (4.12)$$

что эквивалентно уравнению

$$\left[ \frac{d^{n+2}}{d\xi^{n+2}} + 2\xi \frac{d^{n+1}}{d\xi^{n+1}} + (2+2n) \frac{d^n}{d\xi^n} \right] e^{-\xi^2} = 0. \quad (4.13)$$

При  $n=0$  уравнение (4.13) удовлетворяется тождественно. Заметив теперь, что при дифференцировании по  $\xi$  тождество порядка  $n-1$  переходит в тождество порядка  $n$ , нетрудно применить метод индукции.

Приведем некоторые полезные свойства полиномов Эрмита.

*Рекуррентное свойство:* 
$$\frac{dH_n(\xi)}{d\xi} = 2n H_{n-1}(\xi). \quad (4.14)$$

*Доказательство.* Выражение (4.14) эквивалентно уравнению (4.13), если последнее записать для  $n-1$ .

*Нормировка:* 
$$\int_{-\infty}^{+\infty} H_n^2(\xi) e^{-\xi^2} d\xi = \sqrt{\pi} \cdot 2^n \cdot n! \quad (4.15)$$

Доказательство проводится методом индукции. Для  $n=0$  справедливость (4.15) очевидна. Используя (4.11) и (4.14), получаем рекуррентную формулу

$$\int_{-\infty}^{+\infty} H_n^2(\xi) e^{-\xi^2} d\xi = 2n \int_{-\infty}^{+\infty} H_{n-1}^2(\xi) e^{-\xi^2} d\xi,$$

с помощью которой по индукции доказывается (4.15).

*Интегральное свойство:* 
$$\int_{-\infty}^{+\infty} H_n(x) e^{-x^2} e^{ipx} dx = i^n \sqrt{\pi} \cdot p^n \cdot e^{-p^2/4}. \quad (4.16)$$

Доказательство для  $n=0$  очевидно; для  $n > 0$  оно проводится методом индукции с учетом (4.11).

**Вывод.** Нормированные собственные функции линейного осциллятора имеют вид

$$u_n(\xi) = \left( \frac{m\omega}{\hbar} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{\pi \cdot 2^n \cdot n!}} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}, \quad \text{где } \xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x. \quad (4.17)$$

Для значений энергии  $E$  получаем из (4.3) и (4.9):

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right). \quad (4.18)$$

Отсюда вытекает важный результат: энергия квантового линейного гармонического осциллятора в принципе не может обращаться в нуль (конечно, при отличной от нуля собственной частоте  $\omega$ ), причем минимальная энергия, соответствующая основному состоянию, равна  $\hbar\omega/2$  (в классической теории энергия основного состояния — состояния покоя — равна нулю). Возбуждение добавляет к энергии основного состояния величину, составляющую целое кратное величины  $\hbar\omega$  (квантование энергии).



5 - WKB method

$$(1) \quad u'' + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) u = 0 \quad g = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) = \frac{m^2 V^2}{\hbar^2}$$

$$(2) \quad u'' + g(x) u = 0 \quad V = \text{class. velocity}$$

Assume first  $g(x) > 0$

$$(3) \quad u = e^{i y(x)} \text{ into (2)}$$

$$(4) \quad y'^2 - i y'' = g \quad \text{First guess:}$$

$$y' \approx \sqrt{g} \quad \text{then} \quad \frac{y''}{y'^2} = \frac{g'}{2g^{3/2}}$$

Therefore: guess is fair approximation when

$$(5) \quad |g'| \ll 2g^{3/2}$$

Put then

$$(6) \quad y' = \sqrt{g} + \varepsilon$$

(Neglect  $\varepsilon^2$  and  $\varepsilon'$  or  $\varepsilon''$  terms to find)

$$g + 2\varepsilon\sqrt{g} \approx \frac{ig'}{2\sqrt{g}} = g \rightarrow \varepsilon = \frac{ig'}{4g}$$

$$(7) \quad y \approx \int \left( \sqrt{g} + \frac{ig'}{4g} \right) dx = \int \sqrt{g} dx + \frac{i}{4} \ln g$$

$$(8) \quad u = e^{iy} \approx \frac{1}{g^{1/4}} e^{i \int \sqrt{g} dx} \rightarrow \frac{1}{g^{1/4}} e^{-i \int \sqrt{g} dx} \text{ or real linear combination}$$

Other solutions

$$(9) \quad u \sim \frac{1}{g^{1/4}} \sin \left\{ \int \sqrt{g} dx + \text{const} \right\}$$

[Note:  $|u|^2 \sim \frac{1}{\sqrt{g}} \sim \frac{1}{V} \sim \text{time classically spent at location } x$ ]

Метод Вентцеля—Крамерса—Бриллюэна, называемый иначе квазиклассическим приближением, служит для приближенного решения некоторых задач квантовой механики, позволяя определить первые члены разложения волновой функции по постоянной Планка. ВКБ-метод применим только в тех случаях, когда уравнение Шредингера допускает разделение переменных, так что его можно взять в форме

$$u''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(x)] u(x) = 0. \quad (5.1)$$

Вводя обозначение

$$g(x) = \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(x)] = \frac{m^2 V^2}{\hbar^2},$$

где  $V$ —классическая скорость, перепишем (5.1) в виде

$$u''(x) + g(x) u(x) = 0. \quad (5.2)$$

**Первый случай,  $g(x) > 0$ .** Используя подстановку

$$u(x) = e^{iy(x)}, \quad (5.3)$$

запишем на основании (5.2) уравнение для  $y(x)$ :

$$y'^2 - iy'' = g. \quad (5.4)$$

Если в качестве первой прикидки взять  $y'(x) \approx \sqrt{g(x)}$ , то будет иметь место соотношение

$$\frac{y''}{y'^2} = \frac{g'}{2g^{3/2}};$$

следовательно, это предположение о виде  $y'$  дает хорошую аппроксимацию решения уравнения (5.2) тогда, когда

$$|g'| \ll 2g^{3/2}. \quad (5.5)$$

Теперь положим:

$$y'(x) = \sqrt{g(x)} + \varepsilon(x), \quad (5.6)$$

где добавка  $\varepsilon(x)$ —малая, медленно меняющаяся величина (поэтому членами  $\varepsilon^2$ ,  $\varepsilon'$  и  $\varepsilon''$  можно будет пренебречь). Уравнение (5.4) при подстановке в него (5.6) принимает вид

$$g + 2\varepsilon\sqrt{g} - i \frac{g'}{2\sqrt{g}} = g,$$

откуда  $\varepsilon = i(g'/4g)$ ; теперь интегрирование (5.6) дает:

$$y(x) \approx \int \left( \sqrt{g(x)} + i \frac{g'(x)}{4g(x)} \right) dx = \int \sqrt{g(x)} dx + \frac{i}{4} \ln g(x). \quad (5.7)$$

Переходя к исходной волновой функции  $u(x)$ , можно на основании (5.3) записать:

$$u(x) = e^{iy(x)} \approx \frac{1}{(g(x))^{1/4}} e^{i \int \sqrt{g(x)} dx}. \quad (5.8)$$

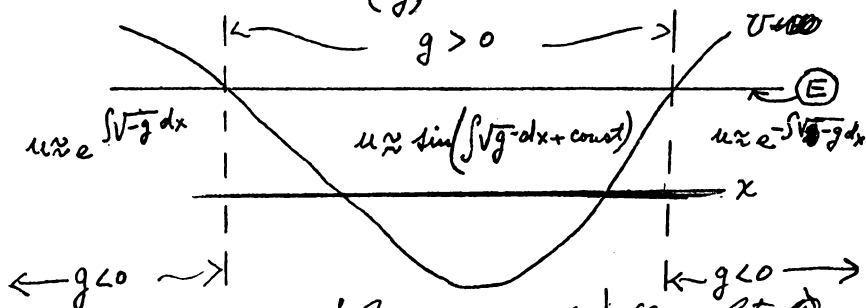
Таким образом, одно приближенное частное решение уравнения (5.2) найдено; другое его решение запишется как

$$u(x) = e^{-iy(x)} \approx \frac{1}{(g(x))^{1/4}} e^{-i \int \sqrt{g(x)} dx}. \quad (5.8a)$$

Case  $g(x) < 0$

Find similarly

$$(10) \quad u \sim \frac{1}{(-g)^{1/4}} e^{\pm \int \sqrt{-g(x)} dx} \quad \text{for } g < 0$$



~~Matching of solutions where g changes sign~~

Matching of solutions where  $g$  changes sign  
Equation

$$(11) \quad \omega'' + x\omega = 0$$

has solution

$$(12) \quad \omega = \sqrt{x} \left\{ c_1 J_{1/3} \left( \frac{2}{3} x^{3/2} \right) + c_2 N_{1/3} \left( \frac{2}{3} x^{3/2} \right) \right\}$$

Linear comb. that vanishes at  $-\infty$  has asymptotic expressions

$$(13) \quad \omega(x) \rightarrow \frac{1}{x^{1/4}} \sin \left( \frac{2}{3} x^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right) \quad x \rightarrow \infty$$

$$\rightarrow \frac{1}{2(-x)^{1/4}} e^{-\frac{2}{3}(-x)^{3/2}} \quad x \rightarrow -\infty$$

Compare with WKB solution.

Conclusion: at <sup>each</sup> end points of interval where  $g > 0$  add phase  $\pi/4$

Очевидно, решением (приближенным) будет также вещественная линейная комбинация функций (5.8) и (5.8a):

$$u(x) \approx \frac{1}{(g(x))^{1/4}} \left\{ \sin \left[ \int \sqrt{g(x)} dx + \text{const} \right] \right\}. \quad (5.9)$$

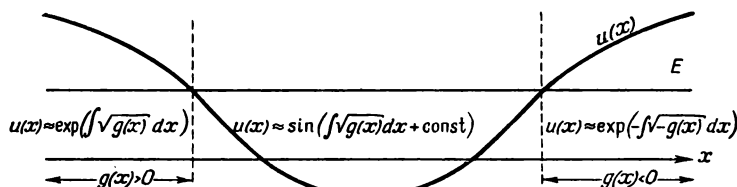
Это и есть искомое решение Вентцеля — Крамерса — Бриллюэна (ВКБ-решение).

**З а м е ч а н и е.** Величина  $|u|^2 \sim 1/\sqrt{g(x)} \sim 1/V$  пропорциональна времени, проводимому системой (в классическом смысле) в точке  $x$ .

**Второй случай,  $g(x) < 0$ .** Как и в случае  $g(x) > 0$ , найдем здесь решение уравнения (5.2) в виде

$$u(x) \sim \frac{1}{(-g(x))^{1/4}} e^{\pm \int \sqrt{-g(x)} dx} \quad \text{для } g(x) < 0. \quad (5.10)$$

Фиг. 4 иллюстрирует случаи  $g(x) > 0$  и  $g(x) < 0$ : соответствующие решения  $u$ , а также поведение  $U(x)$



Ф и г. 4.

**Сопряжение решений.** Остается „сшить“ полученные решения в точках, где функция  $g(x)$  меняет знак. Мы воспользуемся для этой цели следующей аналогией: уравнение

$$w''(x) + xw(x) = 0 \quad (5.11)$$

по виду напоминает уравнение (5.2) и имеет решение

$$w(x) = \sqrt{x} \left[ C_1 J_{1/3} \left( \frac{2}{3} x^{3/2} \right) + C_2 N_{1/3} \left( \frac{2}{3} x^{3/2} \right) \right], \quad (5.12)$$

где  $J(x)$  — функция Бесселя, а  $N(x)$  — функция Неймана. Выбрав константы линейной комбинации (5.12) так, чтобы при  $x \rightarrow -\infty$  решение стремилось к нулю, получим следующую асимптотику:

$$\left. \begin{aligned} & \rightarrow \frac{1}{2(-x)^{1/4}} e^{-2/3(-x)^{3/2}} \quad \text{при } x \rightarrow -\infty, \\ w(x) & \rightarrow \frac{1}{x^{1/4}} \sin \left( \frac{2}{3} x^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right) \quad \text{при } x \rightarrow +\infty. \end{aligned} \right\} \quad (5.13)$$

**Вывод.** Сравнивая этот результат с ВКБ-решением (5.9) и (5.10), можно заметить, что эти решения аналогичны друг другу, если на концах интервала, в котором  $g(x) > 0$ , добавить фазу  $\pi/4$ . Этот прием позволяет приближенно проследить поведение функции  $u(x)$ .



Let  $g > 0$  between A, B and  $g < 0$  outside  $\overline{AB}$   
 Phase difference B to A ~~is~~

$$(n + \frac{1}{2})\pi$$

$n$  = number of nodes between A & B.

Condition for matching from A to B

$$(n + \frac{1}{2})\pi = \int_A^B \sqrt{g} dx = \int_A^B \frac{mV}{\hbar} dx =$$

$$p = mV = \text{classical momentum} = \frac{1}{2\hbar} \oint p dx$$

Conclusion, Bohr-Sommerfeld quantization condition

$$(14) \quad \oint p dx = 2\pi\hbar(n + \frac{1}{2})$$

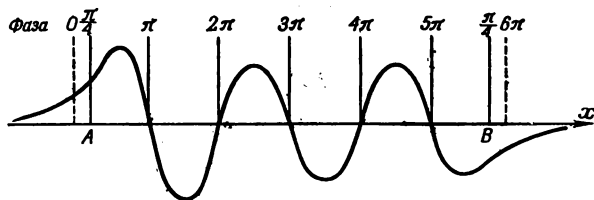
Note, Slightly different conditions on completely accessible closed path

$$(15) \quad \oint p dx = 2\pi\hbar n$$

Or on completely accessible segment bounded by infinitely high potential walls at A and B

$$(16) \quad \int p dx = 2\pi\hbar(n+1) \quad n = \text{no of nodes inside segment}$$

**Обсуждение.** Пусть  $g(x) > 0$  между  $A$  и  $B$  и  $g(x) < 0$  вне  $AB$  (фиг. 5).



Ф и г. 5.

К выводу условия квантования Бора — Зоммерфельда.

Разность фаз между  $B$  и  $A$  равна

$$\left(n + \frac{1}{2}\right) \pi,$$

где  $n$  — число нулей волновой функции в интервале  $AB$ . Так как переменная часть фазы, согласно (5.9), равна  $\int_V \sqrt{g(x)} dx$ , условие сшивания решений на интервале  $AB$  (изменение фазы) имеет вид

$$\left(n + \frac{1}{2}\right) \pi = \int_A^B \sqrt{V g(x)} dx = \int_A^B \frac{mV}{\hbar} dx = \frac{1}{2\hbar} \oint p dx,$$

где  $p = mV$  — классический импульс.

**Вывод.** Мы пришли к условию квантования Бора — Зоммерфельда,

$$\oint p dx = 2\pi\hbar \left(n + \frac{1}{2}\right). \quad (5.14)$$

**Замечание.** При движении вдоль замкнутого контура имеет место несколько иное условие квантования, а именно

$$\oint p dx = 2\pi\hbar n. \quad (5.15)$$

Для движения на полном сегменте, ограниченном в точках  $A$  и  $B$  бесконечно высокими потенциальными стенками, получим:

$$\oint p dx = 2\pi\hbar (n + 1), \quad (5.16)$$

где  $n$  равно числу нулей волновой функции *внутри* сегмента<sup>1)</sup>.

<sup>1)</sup> См. также Д. И. Блохинцев, Основы квантовой механики, М., 1961, стр. 121; Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, М., 1963, стр. 195 и далее.

## 6- Spherical harmonics

Legendre polynomials

$$(1) \quad P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2-1)^l$$

$$(2) \quad (1-x^2)P_l'' - 2xP_l' + l(l+1)P_l = 0$$

$$(3) \quad \int_{-1}^1 P_l^2(x) dx = \frac{2}{2l+1}$$

$$(4) \quad \int_{-1}^1 P_l(x) P_{l'}(x) dx = 0 \text{ for } l \neq l'$$

$$(5) \quad P_l = \frac{2l-1}{l} x P_{l-1} - \frac{l-1}{2} P_{l-2}$$

$$(6) \quad \begin{cases} P_0 = 1 & P_1 = x & P_2 = \frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2} \\ P_3 = \frac{5}{2}x^3 - \frac{3}{2}x & P_4 = \frac{35}{8}x^4 - \frac{15}{4}x^2 + \frac{3}{8} \\ P_5 = \frac{63}{8}x^5 - \frac{35}{4}x^3 + \frac{15}{8}x & ; P_l(1) = 1 \end{cases}$$

Alternate definition

$$(7) \quad \frac{1}{\sqrt{1-2xz+z^2}} = \sum_0^{\infty} P_l(x) z^l$$

Spherical harmonics:

$$(8) \quad \begin{cases} Y_{lm}(\theta, \varphi) = \frac{1}{N_{lm}} e^{im\varphi} \sin^{|m|} \theta \frac{d^{|m|}}{d(\cos \theta)} P_l(\cos \theta) \\ \frac{1}{N_{lm}} = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} & \text{for } m \leq 0 \text{ + sign} \\ (-1)^m \text{ sign} & \text{for } m > 0 \end{cases} \end{cases}$$

Сферические функции в квантовой механике используются, как правило, при решении уравнения Шредингера в случае центральных сил (см. лекцию 7).

**Полиномы Лежандра.** Эти полиномы, определяемые дифференциальной формулой

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l, \quad (6.1)$$

на отрезке  $-1 \leq x \leq +1$  вводятся как решения уравнения Лежандра, к которому приводит ряд физических задач:

$$(1 - x^2) P_l'' - 2x P_l' + l(l+1) P_l = 0. \quad (6.2)$$

Нормировка полиномов Лежандра определяется интегралом

$$\int_{-1}^{+1} P_l^2(x) dx = \frac{2}{2l+1}. \quad (6.3)$$

Два свойства полиномов Лежандра.

1. Они образуют полную систему ортогональных функций:

$$\int_{-1}^{+1} P_l(x) P_{l'}(x) dx = 0 \quad \text{при } l \neq l'. \quad (6.4)$$

2. Полином  $l$ -го порядка выражается через полиномы низших порядков рекуррентной формулой

$$P_l = \frac{2l-1}{l} x P_{l-1} - \frac{l-1}{2} P_{l-2}. \quad (6.5)$$

С помощью (6.1) вычислим некоторые полиномы:

$$\begin{aligned} P_0 &= 1, & P_1 &= x, & P_2 &= \frac{3}{2} x^2 - \frac{1}{2}, \\ P_3 &= \frac{5}{2} x^3 - \frac{3}{2} x, & P_4 &= \frac{35}{8} x^4 - \frac{15}{4} x^2 + \frac{3}{8}, \\ P_5 &= \frac{63}{8} x^5 - \frac{35}{4} x^3 + \frac{15}{8} x, & P_l(1) &= 1. \end{aligned} \quad (6.6)$$

Альтернативное определение.

$$\frac{1}{\sqrt{1-2rx+r^2}} = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(x) r^l. \quad (6.7)$$

Здесь слева стоит производящая функция, а справа — ее разложение по степеням переменной  $r$  ( $0 < r < 1$ ), причем роль коэффициентов разложения играют полиномы Лежандра.

**Сферические (шаровые) функции.** С помощью полиномов Лежандра строятся сферические, или шаровые, функции (сферические гармоники), определяемые как

$$\begin{aligned} Y_{lm}(\theta, \varphi) &= \frac{1}{N_{lm}} e^{im\varphi} \sin^{|m|} \theta \frac{d^{|m|} P_l(\cos \theta)}{d(\cos \theta)^{|m|}}, \\ \frac{1}{N_{lm}} &= \pm \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}; \end{aligned} \quad (6.8)$$

для  $m \leq 0$  берется знак „+“, для  $m > 0$  берется знак  $(-1)^m$ .



Normalization

$$(9) \int_{4\pi} Y_{lm}^* Y_{l'm'} d\omega = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

Diff. equation

$$(10) \Lambda Y_{lm} + l(l+1) Y_{lm} = 0$$

$$(11) \Lambda = \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

$$(12) \begin{cases} \nabla^2 (r^l Y_l) = 0 \\ \nabla^2 (r^{-l-1} Y_l) = 0 \quad (\text{except origin}) \end{cases}$$

$$(13) \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \Lambda$$

$$Y_{00} = 1/\sqrt{4\pi} \quad Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta$$

$$Y_{1,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta e^{\pm i\varphi}$$

$$Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \left( \frac{3}{2} \cos^2 \vartheta - \frac{1}{2} \right) \quad Y_{2,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \vartheta \cos \vartheta e^{\pm i\varphi}$$

$$Y_{2,\pm 2} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2 \vartheta e^{\pm 2i\varphi}$$

$$Y_{30} = \sqrt{\frac{7}{4\pi}} \left( \frac{5}{2} \cos^3 \vartheta - \frac{3}{2} \cos \vartheta \right)$$

$$Y_{3,\pm 1} = \mp \frac{1}{4} \sqrt{\frac{21}{4\pi}} \sin \vartheta (5 \cos^2 \vartheta - 1) e^{\pm i\varphi}$$

$$Y_{3,\pm 2} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{105}{2\pi}} \sin^2 \vartheta \cos \vartheta e^{\pm 2i\varphi}$$

$$Y_{3,\pm 3} = \mp \frac{1}{4} \sqrt{\frac{35}{8\pi}} \sin^3 \vartheta e^{\pm 3i\varphi}$$

Development in sph. harmon.  
 $f(\vartheta, \varphi) = \sum_{lm} c_{lm} Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$   
 $c_{lm} = \int f Y_{lm}^* d\omega$   
 (14)

[Это правило можно записать короче так: нормирующая постоянная в (6.8) имеет знак  $(-1)^{(m+|m|)/2}$ .]

*Нормировка и ортогональность* сферических функций определяются равенством

$$\int_{4\pi} Y_{lm}^* Y_{l'm'} d\omega = \delta_{ll'} \delta_{mm'}. \quad (6.9)$$

*Дифференциальное уравнение* для сферических функций получается из уравнения Лапласа при применении метода разделения переменных; оно имеет следующий вид:

$$\Delta Y_{lm} + l(l+1)Y_{lm} = 0, \quad (6.10)$$

где  $\Delta$  — угловая часть оператора Лапласа,

$$\Delta = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \quad (6.11)$$

*Некоторые свойства* сферических функций:

$$\left. \begin{aligned} \nabla^2 (r^l Y_{lm}) &= 0; \\ \nabla^2 (r^{-l-1} Y_{lm}) &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (6.12)$$

везде, кроме начала координат ( $r=0$ ).

Полный лапласиан в сферических координатах ( $r, \theta, \varphi$ ) имеет вид

$$\Delta \equiv \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \Delta. \quad (6.13)$$

*Разложение произвольной функции* по шаровым функциям (сферическим гармоникам):

$$f(\theta, \varphi) = \sum C_{lm} Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad C_{lm} = \int_{4\pi} f(\theta, \varphi) Y_{lm}^* d\omega. \quad (6.14)$$

Возможность такого разложения вытекает из свойств полноты и ортогональности системы сферических функций.

*Явный вид* некоторых сферических функций:

$$Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_{1,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta \cdot e^{\pm i\varphi},$$

$$Y_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \left( \frac{3}{2} \cos^2 \theta - \frac{1}{2} \right),$$

$$Y_{2,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cdot \cos \theta \cdot e^{\pm i\varphi}, \quad Y_{2,\pm 2} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2 \theta \cdot e^{\pm 2i\varphi},$$

$$Y_{3,0} = \sqrt{\frac{7}{4\pi}} \left( \frac{5}{2} \cos^3 \theta - \frac{3}{2} \cos \theta \right),$$

$$Y_{3,\pm 1} = \mp \frac{1}{4} \sqrt{\frac{21}{4\pi}} \sin \theta (5 \cos^2 \theta - 1) e^{\pm i\varphi},$$

$$Y_{3,\pm 2} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{105}{2\pi}} \sin^2 \theta \cos \theta \cdot e^{\pm 2i\varphi}, \quad Y_{3,\pm 3} = \mp \frac{1}{4} \sqrt{\frac{35}{4\pi}} \sin^3 \theta \cdot e^{\pm 3i\varphi}.$$

7 - Central forces

$$(1) \nabla^2 u + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(r)) u = 0$$

Polar coordinates

$$(2) \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \Delta u + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(r)) u = 0$$

Develop  $u(r, \theta, \varphi)$  in sph. harmon.

$$(3) u = \sum R_{lm}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

Use (6-10)

$$(4) \sum Y_{lm} \left\{ R_{lm}'' + \frac{2}{r} R_{lm}' - \frac{l(l+1)}{r^2} R_{lm} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) R_{lm} \right\} = 0$$

Multiply by  $Y_{lm}^* d\omega$  and integrate. Find

$$(5) R_l'' + \frac{2}{r} R_l' + \frac{2m}{\hbar^2} \left\{ E - U(r) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} R_l = 0$$

Note: indep. of  $m$ .

Each solution of (5) yields  $2l+1$  solutions of (4)

Useful transformation

$$(6) R_l(r) = r v_l(r)$$

$$(7) v_l''(r) + \frac{2m}{\hbar^2} \left\{ E - U(r) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} v_l(r) = 0$$

$$\begin{array}{ccccccc} l=0 & l=1 & l=2 & l=3 & l=4 & l=5 & l=6 \\ s & p & d & f & g & h & i \end{array}$$

Will prove later  $\hbar l \approx \text{ang momentum} = M$

Важную роль в теории атома играют центральные силы; потенциальная энергия в случае центральных сил зависит лишь от радиальной координаты (если источник поля совпадает с началом сферической системы координат). Волновое уравнение при этом имеет вид

$$\nabla^2 u(r) + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(r)] u(r) = 0. \quad (7.1)$$

Перепишем его в полярных (сферических) координатах:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \Delta u + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(r)] u = 0. \quad (7.2)$$

Здесь  $\Delta$  — оператор, определяемый формулой (6.11).

Разложим  $u(r, \theta, \varphi)$  по сферическим функциям:

$$u(r, \theta, \varphi) = \sum R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (7.3)$$

Суммирование охватывает все значения индексов  $n, l, m$ , но в конкретных случаях оно может сниматься, говоря формально, благодаря специальному выбору коэффициентов разложения, входящих в  $R_{nl}(r)$ . Подстановка этого разложения в уравнение (7.2) дает:

$$\sum Y_{lm} \frac{\partial^2 R_{nl}}{\partial r^2} + \sum \left\{ \frac{2}{r} Y_{lm} \frac{\partial R_{nl}}{\partial r} + \frac{R_{nl}}{r^2} \Delta Y_{lm} \right\} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) u = 0.$$

Используя (6.10), приходим к уравнению

$$\sum Y_{lm}(\theta, \varphi) \left\{ R_{nl}''(r) + \frac{2}{r} R_{nl}'(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} R_{nl}(r) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) R_{nl}(r) \right\} = 0. \quad (7.4)$$

Умножая его на  $Y_{lm}^* d\omega$  и интегрируя, получаем с учетом свойства (6.9):

$$R_{nl}'' + \frac{2}{r} R_{nl}' + \frac{2m}{\hbar^2} \left\{ E - U(r) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} R_{nl} = 0. \quad (7.5)$$

**Замечание.** В этом уравнении уже не фигурирует число  $m$ .

В дальнейшем оно будет отождествлено с магнитным квантовым числом. Не следует смешивать его с массой, обозначаемой той же буквой, но появляющейся всегда в характерных комбинациях (см., например, уравнение (7.5)).

Важно, что каждому решению уравнения (7.5) соответствует  $2l+1$  решений уравнения (7.1). Сделаем полезное преобразование

$$R_{nl}(r) = r v_{nl}(r); \quad (7.6)$$

уравнение (7.5) примет вид

$$v_{nl}''(r) + \frac{2m}{\hbar^2} \left\{ E - U(r) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} v_{nl}(r) = 0 \quad (7.7)$$

Каждому состоянию (т. е. определенному значению  $l$ ) принято сопоставлять буквенное обозначение, именно

Two mass points, central forces

$$(8) \quad \cancel{\nabla^2} u + \frac{1}{m_1} \nabla_1^2 u + \frac{1}{m_2} \nabla_2^2 u + \frac{2}{\hbar^2} (E - U(r)) u = 0$$

Change coordinates

$$(9) \quad \begin{cases} x = x_2 - x_1 & (\text{relative coordinates}) \\ X = \frac{m_1 x_1 + m_2 x_2}{m_1 + m_2} & (\text{c.o.f. mass coordinates}) \end{cases}$$

also

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \dots \quad \nabla_g^2 = \frac{\partial^2}{\partial X^2} + \dots$$

$$(10) \quad \begin{cases} \frac{1}{m_1} \nabla_1^2 + \frac{1}{m_2} \nabla_2^2 = \frac{1}{m_1 + m_2} \nabla_g^2 + \frac{1}{m} \nabla^2 \\ m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} = \text{red. mass} \end{cases}$$

(8) becomes:

$$(11) \quad \frac{1}{m_1 + m_2} \nabla_g^2 u + \frac{1}{m} \nabla^2 u + \frac{2}{\hbar^2} (E - U(r)) u = 0$$

$$(12) \quad \cancel{u(x, X)} \quad u(x, X) = \sum_{\vec{k}} w_{\vec{k}}(x, y, z) e^{i \vec{k} \cdot \vec{X}}$$

Substitute and invert Fourier

$$(13) \quad \cancel{\nabla^2} w_{\vec{k}} + \frac{2m}{\hbar^2} (E_{\text{rel}} - U(r)) w_{\vec{k}} = 0$$

$$(14) \quad E_{\text{rel}} = E - \underbrace{\frac{(\hbar k)^2}{2(m_1 + m_2)}}_{\text{energy of c.o.f. mass motion}}$$

Conclusion: Separation of relative and c.o.f. motion like in class. mech.!

$$\begin{array}{ccccccc}
 l=0 & l=1 & l=2 & l=3 & l=4 & l=5 & l=6 \\
 s & p & d & f & g & h & i
 \end{array}$$

Позднее будет показано, что величина  $\hbar l$  равна моменту импульса  $M^{1)}$ .

Уравнение для двух материальных точек в поле центральных сил. Это уравнение имеет вид

$$\frac{1}{m_1} \nabla_1^2 u + \frac{1}{m_2} \nabla_2^2 u + \frac{2}{\hbar^2} (E - U(r)) u = 0, \quad (7.8)$$

где  $u \equiv u(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ , а  $r = |\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1|$ . Сделаем замену координат

$$\begin{array}{l}
 \mathbf{x} = \mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1 \text{ — относительные координаты двух точек,} \\
 X = \frac{m_1 \mathbf{x}_1 + m_2 \mathbf{x}_2}{m_1 + m_2} \text{ — координаты центра масс.}
 \end{array} \quad (7.9)$$

В новых координатах лапласиан распадается на два оператора,

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}, \quad \nabla_g^2 = \frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2}{\partial Z^2},$$

причем

$$\frac{1}{m_1} \nabla_1^2 + \frac{1}{m_2} \nabla_2^2 = \frac{1}{m_1 + m_2} \nabla_g^2 + \frac{1}{m} \nabla^2, \quad (7.10)$$

где

$$m = m_1 m_2 / (m_1 + m_2) \text{ — приведенная масса.}$$

Уравнение (7.8) приобретает вид

$$\frac{1}{m_1 + m_2} \nabla_g^2 u + \frac{1}{m} \nabla^2 u + \frac{2}{\hbar^2} [E - U(r)] u = 0. \quad (7.11)$$

Будем искать его решение в форме <sup>2)</sup>

$$u(\mathbf{x}, X) = \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) e^{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{X}}. \quad (7.12)$$

Подставляя этот вид решения в (7.11) и производя обратное преобразование Фурье, получаем:

$$\nabla^2 \omega_{\mathbf{k}} + \frac{2m}{\hbar^2} [E_{red} - U(r)] \omega_{\mathbf{k}} = 0, \quad (7.13)$$

где

$$E_{red} = E - \frac{(\hbar k)^2}{2(m_1 + m_2)} \quad (7.14)$$

— приведенная энергия. Член  $(\hbar k)^2 / 2(m_1 + m_2)$  представляет собой кинетическую энергию центра масс.

**Вывод.** Разделение координат на относительные и координаты центра масс носит здесь такой же характер и приводит к такому же разложению движения на движение центра масс и относительное движение пары частиц около друг друга, как и в классической механике!

<sup>1)</sup> Точнее, максимальному значению проекции момента на выделенную ось. — Прим. ред.

<sup>2)</sup> Это оправдано, так как координаты центра масс являются циклическими [не входят явно в уравнение (7.11)]. — Прим. ред.

8-

hydrogen Atom

$$(1) \quad V = -\frac{Ze^2}{r}$$

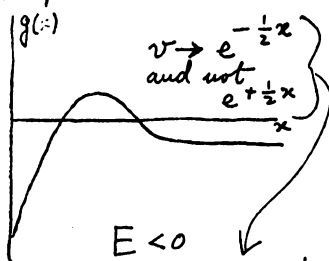
Radial equation (7-7) Neglect nuclear motion  
m will be reduced mass

$$(2) \quad v''(r) + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E + \frac{Ze^2}{r} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right) v(r) = 0$$

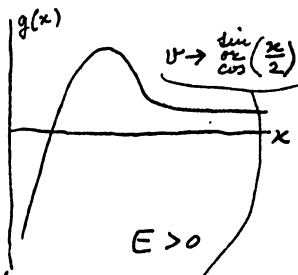
Put

$$(3) \quad \begin{cases} x = 2r/r_0 & r_0 = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m|E|}} \\ A = \frac{Ze^2}{2r_0|E|} = \sqrt{\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2|E|}} \end{cases}$$

$$(4) \quad \frac{d^2v}{dx^2} + \left( \pm \frac{1}{4} + \frac{A}{x} - \frac{l(l+1)}{x^2} \right) v = 0 \quad \begin{cases} + \text{ for } E > 0 \\ - \text{ for } E < 0 \end{cases}$$

Graphical discussion  $g(x)$ 

therefore, adjustment  
required. Only  
discrete values of  $E$   
allowable



no conditions  
needed at  $x \rightarrow \infty$   
All  $E > 0$  allowable

Assume  $E < 0$  — Case of discrete e. values,

$$(5) \quad \frac{d^2v}{dx^2} + \left( -\frac{1}{4} + \frac{A}{x} - \frac{l(l+1)}{x^2} \right) v = 0$$

$$(6) \quad v(x) = e^{-x/2} y(x)$$

В задаче об атоме водорода естественно пренебречь движением ядра; тогда вместо приведенной массы можно взять массу электрона  $m$ .

**Волновое уравнение.** Кулоновская потенциальная энергия электрона в поле ядра имеет вид

$$U = -\frac{Ze^2}{r}, \quad (8.1)$$

где  $Z=1$  для атома водорода\*. Запишем в этом случае уравнение (7.7) для радиальной волновой функции:

$$v''(r) + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E + \frac{Ze^2}{r} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right) v(r) = 0. \quad (8.2)$$

Введем новые переменные

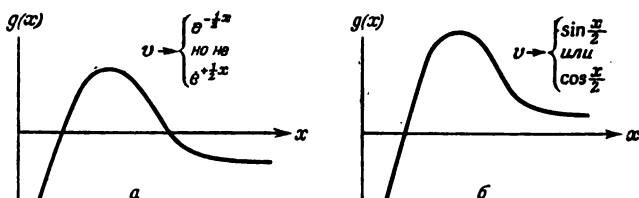
$$x = \frac{2r}{r_0}, \quad r_0 = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m|E|}}, \quad A = \frac{Ze^2}{2r_0|E|} = \sqrt{\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2|E|}}. \quad (8.3)$$

Уравнение (8.2) тогда приводится к виду

$$\frac{d^2v}{dx^2} + \left( \pm \frac{1}{4} + \frac{A}{x} - \frac{l(l+1)}{x^2} \right) v = 0, \quad (8.4)$$

где для  $E > 0$  берется знак „+“, а для  $E < 0$  — знак „—“. Выражение в скобках удобно обозначить как  $g(x)$ .

**Графический анализ.** Поведение  $g(x)$  изображено на фиг. 6. В случае  $E < 0$  решение  $v(x)$  имеет при  $x \rightarrow \infty$  асимптотику



Фиг. 6.  
График функции  $g(x)$ .

вида  $v(x) \rightarrow e^{\pm x/2}$ . Ввиду требования конечности волновой функции при  $x \rightarrow \infty$  мы должны отбросить решение  $e^{+x/2}$ ; из этого дополнительного требования вытекает, что возможны только дискретные значения  $E$ .

В случае  $E > 0$  решение  $v(x) \rightarrow \left[ \frac{\sin}{\cos} \right] (x/2)$  при  $x \rightarrow \infty$ , поэтому дополнительных условий не требуется и, следовательно, возможны любые значения  $E > 0$ .



$$(7) \quad y'' - y' + \left( \frac{A}{x} - \frac{l(l+1)}{x^2} \right) y = 0$$

$$y(x \rightarrow 0) = \begin{cases} x^{l+1} \\ x^{-l} \end{cases} \text{ or}$$

$y \rightarrow x^{-l}$  corresp. to  $u \sim x^{-l-1}$ . Normalization divergent at origin for  $l \geq 1$ . Therefore reject. For  $l=0$  also reject because  $u \sim 1/x$  and  $\nabla^2 \frac{1}{x} = -4\pi\delta(\vec{r})$  But no such singularity in potential!

Therefore acceptable solution

$$(8) \quad y(x) = x^{l+1} \sum_0^{\infty} a_s x^s$$

Substitute in (7). Find

$$(9) \quad a_{s+1} = \frac{s+l+1-A}{(s+1)(s+2l+2)} a_s$$

In general infinite series — This too ~~too~~ <sup>large</sup> at infinite ( $y(x \rightarrow \infty) \sim e^x$ ;  $u \rightarrow e^{x/2}$ )

Only acceptable solutions when  $A = \text{int. number}$ , <sup>non-normalizable</sup>

$$(10) \quad A = n = n' + l + 1$$

Then series  $\rightarrow$  polynomial

(10) & (3) give

$$(11) \quad E_n = -\frac{m Z^2 e^4}{2 \hbar^2 n^2}$$

$$R_{\infty} = \frac{m e^4}{2 \hbar^2} = 21.795 \times 10^{-12} \text{ erg} \\ = 13.605 \text{ eV} \\ = 109737.309(2) \text{ cm}^{-1}$$

$$n = l+1, l+2, \dots$$

Solution expressible in Laguerre Polynomials

$$(12) \quad L_k(x) = e^x \frac{d^k}{dx^k} (x^k e^{-x})$$

$$(13) \quad \begin{cases} L_0 = 1 & L_1 = 1 - x & L_2 = 2 - 4x + x^2 \\ L_3 = 6 - 18x + 9x^2 - x^3 \end{cases}$$

Случай  $E < 0$  (дискретные значения энергии). Уравнение (8.4) в этом случае имеет вид

$$\frac{d^2 v}{dx^2} + \left( -\frac{1}{4} + \frac{A}{x} - \frac{l(l+1)}{x^2} \right) v = 0. \quad (8.5)$$

Будем искать его решение в форме

$$v(x) = e^{-x/2} y(x), \quad (8.6)$$

где  $y(x)$  — неизвестная пока функция, которую надлежит определить. Подставим (8.6) в уравнение (8.5); имеем:

$$y'' - y' + \left( \frac{A}{x} - \frac{l(l+1)}{x^2} \right) y = 0. \quad (8.7)$$

Это уравнение имеет два решения, причем их асимптотика следующая:

$$y(x \rightarrow 0) = \begin{cases} x^{l+1} \\ \text{или} \\ x^{-l} \end{cases}$$

Второму [ $y(x) \rightarrow x^{-l}$  при  $x \rightarrow 0$ ] соответствует  $u(x) \sim r^{-l-1}$ . В этом случае нормировка расходится в начале координат при  $l \geq 1$  и такое решение неприемлемо. Решения этого типа при  $l=0$  также должны быть отброшены, ибо в этом случае  $u(x) \sim 1/r$ , т. е. содержит в начале координат сингулярность типа

$$\nabla^2 \frac{1}{r} = -4\pi\delta(r).$$

(Потенциальная энергия *не имеет* такой сингулярности!)

Итак, берем  $y(x \rightarrow 0) = x^{l+1}$ . Решение уравнения (8.7) имеет вид

$$y(x) = x^{l+1} \sum_0^{\infty} a_s x^s. \quad (8.8)$$

После подстановки его в уравнение (8.7) получим рекуррентную формулу для коэффициентов разложения (8.8),

$$a_{s+1} = \frac{s+l+1-A}{(s+1)(s+2l+2)} a_s. \quad (8.9)$$

В общем случае (8.8) представляет собой бесконечный ряд, слишком быстро расходящийся на бесконечности:  $y(x) \rightarrow e^x$ , т. е.  $u(x) \rightarrow e^{x/2}$  при  $x \rightarrow \infty$ . При этом функция  $u(x)$  ненормируема ни при каких значениях  $A$ , кроме

$$A = n = n' + l + 1, \quad (8.10)$$

где  $n$  — целое число<sup>1)</sup>. В этом случае бесконечный ряд вырождается в полином. Из (8.10) и (8.3) находим:

$$E_n = -\frac{mZ^2 e^4}{2\hbar^2 n^2}, \quad n = l+1, l+2, \dots, \quad (8.11)$$

<sup>1)</sup> Величина  $n$ , обычно называемая *главным квантовым числом*, играет важную роль в классификации энергетических уровней атомов. — Прим. ред.

Part

$$f(x) = x^k e^{-x}$$

$$L_k = e^x f^{(k)}(x)$$

$$x f' = (k-x) f$$

Diff.  $(k+1)$  times

$$x f^{(k+2)} + (k+1) f^{(k+1)} + (k+1) f^{(k)} = 0$$

$$f^{(k)} = e^{-x} L_k \quad \text{yields}$$

$$(14) \quad x L_k'' + (1-x) L_k' + k L_k = 0$$

This is Laguerre diff. equation

$$(15) \quad L_k^{(j)}(x) = \frac{d^j}{dx^j} \left\{ e^x \frac{d^k}{dx^k} (x^k e^{-x}) \right\}$$

$$(16) \quad \frac{d^j}{dx^j} (14) \quad x L_k^{(j)''} + (j+1-x) L_k^{(j)'} + (k-j) L_k^{(j)} = 0$$

~~Orthogonality~~ Normalization property

$$(17) \quad \int_0^\infty L_k^{(j)} L_{k'}^{(j)} x^j e^{-x} dx = \frac{(k!)^3}{(k-j)!} \delta_{kk'}$$

Normalized e.f.'s

$$(18) \quad \begin{cases} u_{nlm} = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \\ R_{nl} = \sqrt{\frac{4(n-l-1)!}{a^3 n^4 [(n+l)!]^3}} e^{-\frac{r}{na}} \left(\frac{2r}{na}\right)^l L_{n+l}^{(2l+1)}\left(\frac{2r}{na}\right) \end{cases}$$

$$(19) \quad a = \frac{\hbar^2}{m e^2} \frac{1}{Z} \quad \frac{\hbar^2}{m e^2} = \text{Bohr radius (nucleus of infinite mass)} \\ = 0.529171(6) \times 10^{-8} \text{ cm.}$$

или в случае собственно водородного атома ( $Z=1$ )

$$E_n = -R_\infty \left( \frac{1}{n^2} \right),$$

где

$$R_\infty = E_1 = 21,795 \cdot 10^{-12} \text{ эрг} = 13,605 \text{ эв} = 109\,737,309 \text{ (12) см}^{-1}.$$

Решение волнового уравнения выражается через полиномы Лагерра.

**Полиномы Лагерра.** Полином  $k$ -го порядка задается общей дифференциальной формулой

$$L_k(x) = e^x \frac{d^k}{dx^k} (x^k e^{-x}). \quad (8.12)$$

Например,  $L_0(x) = 1$ ,  $L_1(x) = 1 - x$ ,

$$L_2(x) = 2 - 4x + x^2, \quad L_3(x) = 6 - 18x + 9x^2 - x^3, \quad \dots \quad (8.13)$$

*Дифференциальное уравнение Лагерра.* Обозначим  $f(x) = x^k e^{-x}$ ; тогда (8.12) запишется как

$$L_k(x) = e^x f^{(k)}(x). \quad (8.12a)$$

Очевидно соотношение  $x f'(x) = (k - x) f(x)$ ; дифференцируя его  $k + 1$  раз, получаем уравнение

$$x f^{(k+2)}(x) + (x + 1) f^{(k+1)}(x) + (k + 1) f^{(k)}(x) = 0.$$

Но, согласно определению (8.12a),  $f^{(k)}(x) = e^{-x} L_k(x)$ ; подстановка в наше уравнение дает:

$$x L_k''(x) + (1 - x) L_k'(x) + k L_k(x) = 0. \quad (8.14)$$

Это и есть *дифференциальное уравнение Лагерра*.

*Нормировка.* Производная  $j$ -го порядка от формы (8.12) равна

$$L_k^{(j)}(x) = \frac{d^j}{dx^j} \left\{ e^x \frac{d^k}{dx^k} x^k e^{-x} \right\}. \quad (8.15)$$

Дифференцируя  $j$  раз уравнение (8.14), получаем уравнение второго порядка для функции (8.15):

$$\begin{aligned} \frac{d^j}{dx^j} [x L_k''(x) + (1 - x) L_k'(x) + k L_k(x)] = \\ = x L_k^{(j+2)}(x) + (j + 1 - x) L_k^{(j+1)}(x) + (k - j) L_k^{(j)}(x) = 0. \end{aligned} \quad (8.16)$$

Отсюда следует правило нормировки таких функций:

$$\int_0^\infty L_k^{(j)}(x) L_k^{(j)}(x) x^j e^{-x} dx = \frac{(k!)^2}{(k - j)!} \delta_{kk}. \quad (8.17)$$

Итак, решение радиального уравнения (7.7) найдено. Вернемся теперь к задаче об атоме водорода.

$$(20) \begin{cases} u(1s) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a} \\ u(2s) = \frac{(2 - r/a) e^{-r/2a}}{4 \sqrt{2\pi a^3}} \\ u(2p) = \frac{\frac{r}{a} e^{-r/2a}}{8 \sqrt{\pi a^3}} \begin{cases} -\sin \vartheta e^{i\varphi} \\ \sqrt{2} \cos \vartheta \\ \sin \vartheta e^{-i\varphi} \end{cases} \end{cases}$$

Note: s-wave functions are the only ones for which  $u(r=0) \neq 0$ . For them

$$(21) \quad u_{n,0}(r=0) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3 n^3}}$$



cont. spectrum

$-R/4$  3s, 3p  
 $-R/4$  2s, 2p

$-R$  1s

Qual. discussion

of hydrogen + hydrogen-like

spectrum

Degeneracy

Modified Coulomb potential

$$(22) \quad U = -\frac{Ze^2}{r} \left(1 + \frac{\beta}{r}\right)$$

$$(5) \text{ becomes } v'' + \left[-\frac{1}{4} + \frac{A}{r} + \frac{2A\beta}{r_0} \frac{1}{r^2} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] v = 0$$

Put

$$l'(l'+1) = l(l+1) - \frac{2A\beta}{r_0} = l(l+1) - \frac{2\beta}{a}$$

Eq. for  $v$  becomes like (5) with  $l' \rightarrow l$  ( $l$  integer,  $l'$  not integer)

Eigenvalues  $A = n' + l' + 1$  ( $n'$  integer)

$$= n' + 1 + l - (l - l')$$

$$= n - (l - l') = n - \alpha_l$$

This gives

$$(23) \quad E_{nl} = -\frac{me^4 Z^2}{2\hbar^2 (n - \alpha_l)^2} \quad (\text{removes } \frac{1}{2} \text{ degeneracy in part})$$

**Нормированные собственные функции.** Полученное решение выражается через шаровые функции и полиномы Лагерра. Частное решение имеет вид

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

$$R_{nl}(r) = \sqrt{\frac{4(n-l-1)!}{a^3 n^4 [(n+l)!]^3}} e^{-r/na} \left(\frac{2r}{na}\right)^l L_{n+l}^{(2l+1)}\left(\frac{2r}{na}\right), \quad (8.18)$$

где 
$$a = \frac{\hbar^2}{me^2} \frac{1}{Z}, \quad (8.19)$$

$\frac{\hbar^2}{me^2}$  = Боровский радиус =  $0,529171(6) \cdot 10^{-8}$  см

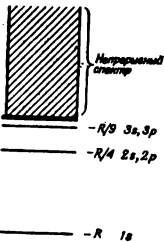
(массу ядра при этом считают бесконечно большой). Выпишем в явном виде несколько собственных функций:

$$u(1s) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}, \quad u(2s) = \frac{2 - \frac{r}{a}}{4 \sqrt{2\pi a^3}} e^{-r/2a},$$

$$u(2p) = \frac{\frac{r}{a} e^{-r/2a}}{8 \sqrt{\pi a^3}} \times \begin{cases} -\sin \theta \cdot e^{i\varphi}, \\ \sqrt{2} \cos \theta, \\ \sin \theta \cdot e^{-i\varphi}. \end{cases} \quad (8.20)$$

**З а м е ч а н и е.** Функции  $s$ -волны (состояния с  $l=1$ ) — единственные, для которых  $u(r=0) \neq 0$ . Для них

$$u_{ns}(r=0) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3 n^3}}. \quad (8.21)$$



Фиг. 7.

Дискретный и непрерывный спектры атома водорода.

Полезно обсудить качественно спектр водорода и водородоподобных ядер (фиг. 7) и характер вырождения энергетических уровней.

Каждое состояние атома, характеризующееся определенными значениями энергии и момента, помечают индексами  $n, l$ . В общем случае каждому уровню с фиксированным главным квантовым числом  $n$  соответствует  $n$  состояний, различающихся квантовыми числами  $l=0, 1, 2, \dots, (n-1)$ . Такое вырождение характерно лишь для случая кулоновского поля.

Каждое состояние с определенным  $l$  вырождено  $(2l+1)$  раз, так как ему соответствуют различные значения магнитного квантового числа  $m=0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$ . Таким образом, общая кратность вырождения стационарного состояния с данным квантовым числом  $n$  равна

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

**Модифицированный кулоновский потенциал.** Рассмотрим случай „модифицированного“ кулоновского потенциала, имеющего вид

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{r} \left(1 + \frac{\beta}{r}\right). \quad (8.22)$$

Уравнение для радиальной волновой функции  $[g(x) < 0]$ , соответствующее уравнению (8.5), при потенциале (8.22) имеет вид

Positive energy e.f.'s      Radial eqn

$$(24) \quad R'' + \frac{2}{z} R' + \left\{ \frac{2m}{\hbar^2} \left( E + \frac{Ze^2}{z} \right) - \frac{l(l+1)}{z^2} \right\} R = 0$$

$$(25) \quad \begin{cases} R = z^l e^{i k z} F(z) & k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \\ z = -2i k z \end{cases}$$

Find for  $F$

$$(26) \quad z^2 \frac{d^2 F}{dz^2} + (2l+2-z) \frac{dF}{dz} - (l+1-i\alpha) F = 0$$

$$(27) \quad \alpha = m e^2 Z / \hbar^2 k$$

Solution is hypergeometric function

$$(28) \quad F = F(l+1-i\alpha, 2l+2, -2ikz)$$

(definition & properties on next page)

Asymptotic expressions of  $R$

$$(29) \quad \begin{cases} R_l(z \rightarrow 0) \rightarrow z^l \\ R_l(z \rightarrow \infty) \rightarrow \frac{e^{-\frac{\pi}{2}\alpha}}{(2k)^l} \frac{(2l+1)!}{|\Gamma(l+1+i\alpha)|} \times \\ \times \frac{1}{kz} \sin \left\{ kz + \alpha \ln(2kz) - \frac{l\pi}{2} - \arg \Gamma \right\} \end{cases}$$

For  $l=0$

$$(30) \quad \begin{cases} R_0(z \rightarrow 0) \rightarrow 1 \\ R_0(z \rightarrow \infty) \rightarrow \frac{e^{-\pi\alpha/2}}{|\Gamma(1+i\alpha)|} \frac{1}{kz} \sin \left\{ kz + \alpha \ln(2kz) - \arg \Gamma \right\} \end{cases}$$

$$(31) \quad \begin{cases} \Gamma(n) = (n-1)! & \Gamma(1+z)\Gamma(1-z) = \frac{\pi z}{\sin \pi z} \\ |\Gamma(1+i\alpha)|^2 = \frac{2\pi\alpha}{e^{\pi\alpha} - e^{-\pi\alpha}} \end{cases}$$

$$v'' + \left[ -\frac{1}{4} + \frac{A}{x} + \frac{2AB}{r_0} \frac{1}{x^2} - \frac{l(l+1)}{x^2} \right] v = 0.$$

Если ввести обозначение

$$l'(l'+1) = l(l+1) - \frac{2A\beta}{r_0} = l(l+1) - \frac{2\beta}{a},$$

то это уравнение перейдет прямо в (8.5) (но вместо целого числа  $l$  здесь фигурирует, вообще говоря, не целое число  $l'$ ). Соответствующие собственные значения определяются величиной

$A = n' + l' + 1 = n' + 1 + l - (l - l') = n - (l - l') = n - \alpha_l$  ( $n'$  — целое). Формула (8.11) записывается при этом следующим образом:

$$E_{nl} = -\frac{me^4 Z^2}{2\hbar^2 (n - \alpha_l)^2}. \quad (8.23)$$

Отсюда ясно, что отклонения формы поля от кулоновской, вообще говоря, снимают вырождение (в рассмотренном случае лишь частично, так как наряду с зависимостью от  $n$  появляется зависимость энергии от  $l$ , но не от  $m$ ).

**Область положительных энергий.** Рассмотрим собственные функции водородного атома в области  $E > 0$ . Радиальное уравнение в этом случае имеет вид

$$R''(r) + \frac{2}{r} R'(r) \left\{ \frac{2m}{\hbar^2} \left( E + \frac{Ze^2}{r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} R(r) = 0, \quad (8.24)$$

и имеет решения

$$R(r) = r' e^{ikr} F(z), \quad \text{где} \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad z = -2ikr. \quad (8.25)$$

Подстановка (8.25) в уравнение (8.24) дает уравнение для  $F(z)$ :

$$z \frac{d^2 F(z)}{dz^2} + (2l + 2 - z) \frac{dF(z)}{dz} - (l + 1 - i\alpha) F(z) = 0, \quad (8.26)$$

где использовано обозначение

$$\alpha = \frac{me^2 Z}{\hbar^2 k}. \quad (8.27)$$

Решения уравнения (8.26) суть гипергеометрические функции

$$F(r) = F(l + 1 - i\alpha, 2l + 2, -2ikr). \quad (8.28)$$

Определение и свойства их приведены на следующей странице.

*Асимптотические выражения для  $R_l$ :*

$$R_l(r \rightarrow 0) = r^l,$$

$$R_l(r \rightarrow \infty) = \frac{e^{-\frac{\pi}{2}\alpha} (2l+1)!}{(2k)^l |\Gamma(l+1+i\alpha)|} \times \left. \begin{aligned} &\times \frac{1}{kr} \sin \left\{ kr + \alpha \ln(2kr) - \frac{l\pi}{2} - \arg \Gamma \right\}. \end{aligned} \right| \quad (8.29)$$



Def. & prop. of hypergeometric fun.

$$(32) \quad F(a, b, z) = 1 + \frac{a}{b \times 1!} z + \frac{a(a+1)}{b(b+1) \times 2!} z^2 + \dots$$

$$(33) \quad z F''(z) + (b-z) F'(z) - a F = 0$$

Assume  $b = \text{integer}$  & pure imaginary

Then ~~the~~ asymptotic formula

$$(34) \quad F(z \rightarrow i\infty) = \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(b-a)} (-z)^{-a} + \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)} z^{a-b} e^z$$

Для  $l=0$ , например,

$$R_0(r \rightarrow 0) = 1,$$

$$R_0(r \rightarrow \infty) = \frac{e^{-\frac{\pi}{2}\alpha}}{\Gamma(1+i\alpha)} \frac{1}{kr} \sin \{kr + \alpha \ln(2kr) - \arg \Gamma\}, \quad (8.30)$$

где

$$\Gamma(n) = (n-1)!,$$

$$|\Gamma(1+i\alpha)|^2 = \frac{2\pi\alpha}{e^{\pi\alpha} - e^{-\pi\alpha}}, \quad (8.31)$$

$$\Gamma(1+z) \cdot \Gamma(1-z) = \frac{\pi z}{\sin \pi z}.$$

**Гипергеометрические функции.** Первые члены разложения гипергеометрической функции в степенной ряд имеют вид

$$F(a, b, z) = 1 + \frac{a}{b \cdot 1!} z + \frac{a(a+1)}{b(b+1) \cdot 2!} z^2 + \dots \quad (8.32)$$

**Определение.** В общем случае гипергеометрические функции по определению удовлетворяют уравнению вида

$$zF''(z) + (b-z)F'(z) - aF(z) = 0. \quad (8.33)$$

**Асимптотика.** Если  $b$  — целое число, а  $z$  — чисто мнимая величина, то асимптотика  $F(z)$  записывается следующим образом:

$$F(z \rightarrow i\infty) = \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(b-a)} (-z)^{-a} + \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)} z^{a-b} \cdot e^z. \quad (8.34)$$

9- Orthogonality of wave functions.

a) One dim. case

$$(1) \quad \left\{ \begin{array}{l} u'_l + \frac{2m}{\hbar^2} (E_l - U(x)) u_l = 0 \\ u''_k + \frac{2m}{\hbar^2} (E_k - U(x)) u_k = 0 \end{array} \right. \quad \left. \begin{array}{l} u_k \\ -u_l \end{array} \right.$$

$$\begin{aligned} u_k u''_l - u_l u''_k &= \frac{d}{dx} (u_k u'_l - u_l u'_k) = \\ &= + \frac{2m}{\hbar^2} (E_k - E_l) u_k u_l \end{aligned}$$

$$(2) \quad \left| u_k u'_l - u_l u'_k \right|_a^b = \frac{2m}{\hbar^2} (E_k - E_l) \int_a^b u_k u_l dx$$

Usually  $u_k, u_l \rightarrow 0$  for  $x \rightarrow \pm \infty$ .

Let then  $a \rightarrow -\infty$ ,  $b \rightarrow +\infty$

$$(3) \quad 0 = (E_k - E_l) \int_{-\infty}^{\infty} u_k u_l dx$$

Comments: Other types of boundary conditions  
e.g. Periodic

$$(4) \quad 0 = (E_k - E_l) \oint u_k u_l dx$$

Bounded segment (Inf. potential at a and b)

$$(5) \quad 0 = (E_k - E_l) \int_a^b u_k u_l dx$$

In general one finds

$$(6) \quad 0 = (E_k - E_l) \int_{\text{domain}} u_k u_l dx$$

Проблема ортогональности волновых функций—решений волнового уравнения—в трехмерном и одномерном случаях имеет ряд особенностей; поэтому их целесообразно рассмотреть отдельно.

**А. Одномерный случай.** Волновые функции (без зависимости от времени) имеют вид  $u_i = u_i(x)$ . Произведем следующие очевидные операции:

$$\left. \begin{aligned} u_l'' + \frac{2m}{\hbar^2} [E_l - U(x)] u_l &= 0 & u_k \\ u_k'' + \frac{2m}{\hbar^2} [E_k - U(x)] u_k &= 0 & -u_l \\ \hline u_k u_l'' - u_l u_k'' &= \frac{d}{dx} (u_k u_l' - u_l u_k') = \frac{2m}{\hbar^2} (E_k - E_l) u_k u_l \end{aligned} \right| \quad (9.1)$$

Проинтегрируем обе части этого равенства на отрезке  $ab$ :

$$u_k u_l' \Big|_a^b - u_l u_k' \Big|_a^b = \frac{2m}{\hbar^2} (E_k - E_l) \int_a^b u_k u_l dx. \quad (9.2)$$

Обычно  $u_k, u_l \rightarrow 0$  при  $x \rightarrow \pm \infty$ . Устремляя пределы  $a$  и  $b$  в (9.2) к бесконечности,  $a \rightarrow -\infty$ ,  $b \rightarrow +\infty$ , получаем:

$$0 = \frac{2m}{\hbar^2} (E_k - E_l) \int_{-\infty}^{+\infty} u_k u_l dx. \quad (9.3)$$

Обсудим другие типы граничных условий.

*Периодическое движение* [граничное условие вида  $u(x) = u(x + \tau)$ ]:

$$0 = (E_k - E_l) \oint u_k u_l dx. \quad (9.4)$$

*Движение в сегменте* (бесконечно большой потенциал в точках  $a$  и  $b$ ):

$$0 = (E_k - E_l) \int_a^b u_k u_l dx. \quad (9.5)$$

*Общий случай.* Очевидно, в общем случае можно записать

$$0 = (E_k - E_l) \int u_l u_k dx, \quad (9.6)$$

где интегрирование проводится по *всей* области определения решения. При  $E_k \neq E_l$  из (9.6) следует, что

$$\int u_k u_l dx = 0. \quad (9.7)$$

Это означает, что два независимых решения волнового уравнения ( $k \neq l$ ) *ортогональны* друг другу, так как их скалярное произведение (9.7) обращается в нуль.

В одномерных задачах, как правило, каждому собственному значению энергии  $E_k$  соответствует одно решение

For

$$(7) \rightarrow \begin{cases} E_k \neq E_l \\ \int u_k u_l dx = 0 \end{cases}$$

Orthogonality

In one dim. problems usually ~~one~~ solve only (except for constant factor) for each eigenvalue. For normalized e.f.'s

$$(8) \quad \int u_l u_k dx = \delta_{lk}$$

Developments in eigenfunctions

$$(9) \quad \begin{cases} f(x) = \sum c_k u_k(x) \\ c_k = \int_{\text{domain}} f(x) u_k(x) dx \end{cases}$$

b) Tridimensional case

$$(10) \quad \begin{cases} \nabla^2 u_l + \frac{2m}{\hbar^2} (E_l - V) u_l = 0 \\ \nabla^2 u_k + \frac{2m}{\hbar^2} (E_k - V) u_k = 0 \end{cases} \quad \begin{matrix} u_k \\ -u_l \end{matrix}$$

$$(11) \quad \nabla \cdot (u_k \nabla u_l - u_l \nabla u_k) = \frac{2m}{\hbar^2} (E_k - E_l) u_k u_l$$

$$(12) \quad \frac{\hbar^2}{2m} \int_{\sigma} \left( u_k \frac{\partial u_l}{\partial n} - u_l \frac{\partial u_k}{\partial n} \right) d\sigma = (E_k - E_l) \int_{\tau} u_k u_l d\tau$$

Usually on contour of field  $u_k = u_l \rightarrow 0$

$$(13) \quad \text{Then } (E_k - E_l) \int u_k u_l d\tau = 0$$

$$(14) \quad \int u_k u_l d\tau = 0 \quad \text{for } E_k \neq E_l$$

(с точностью до постоянного множителя). Если собственные функции *нормированы*, то

$$\int u_k u_l dx = \delta_{kl}, \quad \delta_{kl} \equiv \begin{cases} 1 & \text{при } k=l, \\ 0 & \text{при } k \neq l. \end{cases} \quad (9.8)$$

В этом заключается свойство *ортонормированности* волновых функций.

*Разложение произвольной функции.* Всякую непрерывную функцию  $f(x)$  можно разложить в ряд по собственным функциям системы. Разложение имеет вид

$$f(x) = \sum c_k u_k(x), \quad c_k = \int f(x) u_k(x) dx. \quad (9.9)$$

(Интегрирование проводится по всей области определения независимой переменной  $x$ .)

**Б. Трехмерный случай.** Собственные функции  $u_l$  в этом случае зависят, вообще говоря, от всех трех пространственных переменных. Аналогично предыдущему имеем:

$$\begin{array}{l} \nabla^2 u_l + \frac{2m}{\hbar^2} (E_l - U) u_l = 0 \\ \nabla^2 u_k + \frac{2m}{\hbar^2} (E_k - U) u_k = 0 \end{array} \quad \left| \begin{array}{l} u_k \\ -u_l \end{array} \right. \quad (9.10)$$

$$\nabla (u_k \nabla u_l - u_l \nabla u_k) = \frac{2m}{\hbar^2} (E_k - E_l) u_k u_l \quad (9.11)$$

Проинтегрируем (9.11) по трехмерной области определения  $\tau$ , ограниченной замкнутой поверхностью  $\sigma$  ( $n$ —внешняя нормаль к ней), применяя теорему Гаусса—Остроградского:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \oint \left( u_k \frac{\partial}{\partial n} u_l - u_l \frac{\partial}{\partial n} u_k \right) d\sigma = (E_k - E_l) \int_{\tau} u_k u_l d\tau. \quad (9.12)$$

Обычно решение выбирается таким, что на границе области интегрирования, т. е. на поверхности  $\sigma$ , функции  $u_k, u_l \rightarrow 0$ ; при этом (9.12) принимает вид

$$0 = (E_k - E_l) \int_{\tau} u_k u_l d\tau; \quad (9.13)$$

в случае  $E_k \neq E_l$

$$\int_{\tau} u_k u_l d\tau = 0. \quad (9.14)$$

Когда каждому собственному значению энергии соответствует одна и только одна собственная функция, т. е. если ни одно состояние системы не вырождено, нормировка на единицу дает:

$$\int_{\tau} u_k u_l d\tau = \delta_{kl}. \quad (9.15)$$

If there is one e.f. per e.v. — Normalize to 1, and then

$$(15) \quad \int u_k u_l d\tau = \delta_{kl} \quad (\text{orthogonality})$$

Case of degeneracy. Possible to choose base such that (15) holds.

For example

$$E_1 = E_2$$

$u_1$  essentially  $\neq u_2$

Normalize  $u_1$  to unity

Take

$$u_1^{\text{new}} = u_1$$

Instead of  $u_2$  take first

$$u_2 - u_1, \quad \int u_1 (u_2 - u_1) d\tau = u_2^{\text{interior}}$$

$u_2^{\text{interior}}$  is orthog. to  $u_1$

$$\int u_1 u_2^{\text{interior}} d\tau = \int u_1 u_2 d\tau - \underbrace{\left( \int u_1^2 d\tau \right)}_{=1} \times \int u_1 u_2 d\tau = 0$$

Use then

$$u_1^{\text{new}} = u_1$$

$$u_2^{\text{new}} = \text{normalized } u_2^{\text{interior}}$$

Conclusion: even when there is degeneracy

Possible & convenient to choose base such that (15) holds.

Analogy of (9)

$$(16) \quad \begin{cases} f(x, y, z) = \sum c_k u_k(x, y, z) \\ c_k = \int u_k f d\tau \end{cases}$$

Remarks: Completeness of a set of e.f.'s —

Role of complex solutions — Solution of time dependent equation

$$(17) \quad \Psi = \sum c_k e^{-\frac{i}{\hbar} E_k t} u_k \quad (\text{meaning of } |c_k|^2)$$

Этим соотношением определяется *ортогональность* полной системы (нормированных) собственных функций невырожденной системы.

**Случай вырождения.** И в этом случае возможно выбрать *базис* в гильбертовом пространстве (систему независимых функций) таким образом, чтобы соотношение (9.15) сохраняло силу.

Волновые уравнения вида (9.10) представляют собой *линейные* дифференциальные уравнения. Если данному значению  $E$  соответствуют несколько собственных функций  $u_i$ , то можно составить линейную комбинацию этих функций; полученная функция также будет решением исходного уравнения, соответствующим тому же собственному значению  $E$ .

Пусть, например,  $E_1 = E_2$ , а  $u_1$  существенно не равна  $u_2$ . Нормируем  $u_1$  на единицу и выберем ее в качестве новой собственной функции:  $u_1^{new} = u_1$ . Вместо  $u_2$  возьмем сначала „промежуточную“ функцию вида

$$u_2^{int} = u_2 - u_1 \int u_1 u_2 d\tau.$$

„Промежуточная“  $u_2^{int}$  ортогональна к функции  $u_1$ ; действительно, благодаря единичной нормировке  $u_1$

$$\int u_1 u_2^{int} d\tau = \int u_1 u_2 d\tau - \left( \int u_1^2 d\tau \right) \cdot \int u_1 u_2 d\tau = 0.$$

Используя теперь введенные функции

$$\begin{aligned} u_1^{new} &= \text{Нормированная } u_1, \\ u_2^{new} &= \text{Нормированная } u_2^{int}, \end{aligned}$$

получаем две функции, удовлетворяющие равенству (9.15) — свойству ортогональности.

**Вывод.** Даже в тех случаях, когда имеет место *вырождение*, возможно и удобно выбрать *такой функциональный базис*, в котором удовлетворяется требование ортогональности (9.15).

Укажем трехмерный аналог разложения (9.9):

$$f(x, y, z) = \sum c_k u_k(x, y, z), \quad c_k = \int u_k f d\tau. \quad | \quad (9.16)$$

**Важные моменты.\***

*а. Полнота системы собственных функций.*

*б. Роль комплексных решений.*

*в. Решение зависящего от времени уравнения Шредингера.*

Решение волнового уравнения, не зависящего от времени (стационарные состояния), вообще говоря, следует умножить на экспоненту, являющуюся решением уравнения  $\partial\psi/\partial t = -(i/\hbar) E\psi$ . В общем случае состояние с неопределенной энергией (смесь состояний) описывается, как обычно, линейной комбинацией вида

$$\psi = \sum_k c_k e^{-(i/\hbar) E_k t} u_k(x, y, z). \quad (9.17)$$

*г. Смысл  $|c_k|^2$ .*



## 10 - Linear Operators

- a) Functions in a field. Examples of fields  
 ( $x; x, y, z$ ; points on s.p.b. surface; finite set of points; ...)
- b) Functions as vectors with infinite or finite number of dimensions

### c) Operators

(1)  $g = \mathcal{O}f$

examples  $g = f^2, g = 3f^3, g = \frac{df}{dx}, g = \frac{d^2f}{dx^2}$

$g = (7x^2 + 1) \times f$  etc...

Important: unit operator (indicated by  $1$  or  $I$ )

(2)  $\left\{ \begin{array}{l} \text{means } g = 1f \\ g = f \end{array} \right.$

unit operator leave function unchanged

d) In Q. H. important linear operators  
 Defining property  $a, b$  constants

(3)  $\mathcal{O}(af + bg) = a\mathcal{O}f + b\mathcal{O}g$

Examples: identity, or

$\mathcal{O} = 3$  (i.e. multiply times 3)

$\mathcal{O} = 7x^2 + 1$  (i.e. multiply by  $7x^2 + 1$ )

$\mathcal{O} = \frac{d}{dx}$

$\mathcal{O} = \frac{d^2}{dx^2}$

Instead

$\mathcal{O} =$  take cube of

is not linear

Hence forth only lin. operators will be discussed

1. *Функции задаются на многообразии.* Примерами многообразий могут служить числовая ось  $x$  (одномерное пространство), трехмерное пространство чисел  $x, y, z$ , точки на поверхности сферы, конечный набор точек и т. д.

2. *Функции можно интерпретировать как векторы в пространстве.* При этом пространство может иметь конечное или бесконечное число измерений (гильбертово пространство).

### 3. Оператор.

В общем случае оператор  $\hat{O}$  определяет правило получения функции  $g$  из функции  $f$ :

$$g = \hat{O}f. \quad (10.1)$$

Операциям возведения в степень, возведения в степень с последующим умножением на число, однократного и многократного дифференцирования, умножения на некоторую функцию и т. д. можно сопоставить соответствующие операторы. Тогда действие оператора  $\hat{O}$  на функцию  $f$  будет давать функции  $g$ .

Например:  $g = f^2$ ,  $g = 3f^2$ ,  $g = df/dx$ ,  $g = d^2f/dx^2$ ,  $g = (7x^2 + 1)f$  и т. д.

Важно, что существует *единичный*, или *тождественный*, оператор, обозначаемый как  $1$  или  $\hat{1}$ , действие которого на функцию дает функцию, тождественно равную исходной:

$$g = 1f \equiv f, \quad (10.2)$$

т. е. единичный оператор оставляет функцию неизменной.

4. В квантовой механике важную роль играют *линейные операторы*, определяемые свойством

$$\hat{O}(af + bg) = a\hat{O}f + b\hat{O}g, \quad (10.3)$$

где  $a$  и  $b$  — постоянные коэффициенты.

Примерами линейных операторов могут служить

*единичный оператор:*  $\hat{O} = 1$ ;

*оператор умножения на число 3:*  $\hat{O} = 3$ ;

*оператор умножения на функцию  $7x^2 + 1$ :*  $\hat{O} = 7x^2 + 1$ ;

*операторы дифференцирования:*  $\hat{O} = d/dx$  и  $\hat{O} = d^2/dx^2$ .

Напротив, оператор, сопоставляющий некоторой функции ее куб, не является линейным оператором. Начиная с этого момента, в дальнейшем будут рассматриваться только линейные операторы.

5. *Сумма (разность) линейных операторов* определяется как оператор  $C = A \pm B$ , действие которого на  $f$  эквивалентно сумме (разности) результатов действия на  $f$  операторов  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$ :

$$\hat{C}f = (\hat{A} \pm \hat{B})f = \hat{A}f \pm \hat{B}f. \quad (10.4)$$

e) Sum and difference of operators, defined by

$$(4) \quad (A \pm B)f = Af \pm Bf$$

Commutative property  $A+B=B+A$

Assoc. property  $A+(B+C)=(A+B)+C$  and similar are evident.

f) Product by a number

$$(5) \quad (aA)f = a(Af)$$

g) Product of two operators  $A, B$

$$(6) \quad (AB)f = A(Bf)$$

Assoc. property

$$(7) \quad A(B+C) = AB+AC \quad (\text{evident})$$

In general however

$$AB \neq BA \quad (A \text{ and } B \text{ do not commute})$$

Example  $A=x$  (i. e. multiply by  $x$ )

$$B = \frac{d}{dx}$$

Then

$$(AB)f = \left(x \frac{d}{dx}\right)f = x \frac{df}{dx} = x f'$$

But

$$(BA)f = \frac{d}{dx}(xf) = x f' + f$$

h) Commutator of  $A$  and  $B$  is

$$(8) \quad AB - BA = [A, B]$$

Property

$$(9) \quad [A, B] = -[B, A] \quad (\text{evident})$$

Example

$$(10) \quad \left[\frac{d}{dx}, x\right] = 1$$

(check)

Свойства коммутативности (перестановочности) в сложении

$$\hat{A} + \hat{B} = \hat{B} + \hat{A},$$

ассоциативности

$$A + (\hat{B} + C) = (\hat{A} + \hat{B}) + C$$

и т. д., очевидно, присущи линейным операторам.

6. Умножение оператора на число эквивалентно умножению на это число результата действия оператора:

$$(a\hat{A})f = a(\hat{A}f). \quad (10.5)$$

7. Произведение двух линейных операторов  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$ , очевидно, обладает сочетательным (ассоциативным) свойством

$$(\hat{A}\hat{B})f = \hat{A}(\hat{B}f) \quad (10.6)$$

и свойством дистрибутивности

$$\hat{A}(\hat{B} + \hat{C}) = \hat{A}\hat{B} + \hat{A}\hat{C}. \quad (10.7)$$

Перестановочное свойство умножения в общем случае не имеет места:

$$\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A},$$

т. е. два линейных оператора  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  в общем случае *не коммутируют*. Например, оператор умножения на  $x$ , т. е.  $\hat{A} = x$ , и оператор однократного дифференцирования  $\hat{B} = d/dx$  не коммутируют. В самом деле,

$$(\hat{A}\hat{B})f = \left(x \frac{d}{dx}\right)f = x \frac{df}{dx},$$

$$(\hat{B}\hat{A})f = \frac{d}{dx}(xf) = x \frac{df}{dx} + f.$$

8. Коммутатор, или перестановочное соотношение, для операторов  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  обозначается как

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}. \quad (10.8)$$

Коммутатору, очевидно, присуще следующее свойство:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}]. \quad (10.9)$$

В качестве примера можно взять играющее важную роль в квантовой механике перестановочное соотношение

$$\left[\frac{d}{dx}, x\right] = 1, \quad (10.10)$$

в справедливости которого нетрудно убедиться непосредственно.

i) Powers of operator. Def. by

$$(11) \quad A^n f = A(A \dots A(Af))$$

Example  $A = \frac{d}{dx}$  then  $A^2 = \frac{d^2}{dx^2}$   $A^n = \frac{d^n}{dx^n}$

Property

$$(12) \quad A^{n+m} = A^n A^m \quad (\text{evident})$$

$$(13) \quad [A^n, A^m] = 0 \quad (\text{ " })$$

Two powers of same operator commute

j) Inverse operator

$A^{-1}$   
can be defined only when

$$(14) \quad \begin{cases} Af = g \\ \text{can be solved for } f. \text{ Then, by definition} \\ f = A^{-1}g \end{cases}$$

Properties

$$(A^{-1}A)f = A^{-1}(Af) = A^{-1}g = f \quad \text{that is}$$

$$(15) \quad A^{-1}A = I \quad (= \text{identity operator})$$

also

$$(AA^{-1})g = A(A^{-1}g) = Af = g \quad \text{that is}$$

$$(16) \quad AA^{-1} = I$$

And from (15) (16)

$$(17) \quad [A, A^{-1}] = 0$$

\* Functions of an operator - Formal definition. Given a function  $F(x)$  defined

9. *Степени операторов* определяются как операторы, действие которых эквивалентно последовательному действию оператором-основанием на данную функцию столько раз, сколько указано в показателе степени:

$$\hat{A}^n f = \underbrace{\hat{A} [\hat{A} \dots \hat{A} (\hat{A} f)]}_n; \quad (10.11)$$

например, для  $\hat{A} = d/dx$

$$\hat{A}^2 = \frac{d^2}{dx^2}, \dots, \hat{A}^n = \frac{d^n}{dx^n}.$$

Очевидны следующие свойства степеней операторов:

$$\hat{A}^{n+m} = \hat{A}^n \cdot \hat{A}^m, \quad (10.12)$$

$$[\hat{A}^n, \hat{A}^m] = 0. \quad (10.13)$$

[Формула (10.13) означает, что любые две степени одного и того же оператора коммутируют между собой.]

10. *Оператор, обратный  $\hat{A}$* , обозначим как  $\hat{A}^{-1}$ .

$$\left. \begin{array}{l} \hat{A}^{-1} \text{ оказывается определенным только тогда, когда} \\ \text{уравнение } \hat{A}f = g \text{ разрешимо относительно } f. \text{ Тогда,} \\ \text{по определению, } f = \hat{A}^{-1}g. \end{array} \right\} \quad (10.14)$$

Укажем свойства обратного оператора:

$$(\hat{A}^{-1} \cdot \hat{A})f = \hat{A}^{-1}(\hat{A}f) = \hat{A}^{-1}g = f,$$

иначе говоря,

$$\hat{A}^{-1} \cdot \hat{A} \equiv 1, \quad (10.15)$$

где  $1$  — оператор тождественного преобразования (т. е. единичный оператор).

В то же время  $(\hat{A}\hat{A}^{-1})g = \hat{A}(\hat{A}^{-1}g) = \hat{A}f = g$ , т. е.

$$\hat{A} \cdot \hat{A}^{-1} \equiv 1. \quad (10.16)$$

Из (10.15) и (10.16) вытекает, что

$$[\hat{A}, \hat{A}^{-1}] = 0. \quad (10.17)$$

11. *Функции операторов.* Формальное определение: пусть имеются некоторая аналитически заданная функция  $F(x)$  [например,  $F(x) = \sin x$ ,  $F(x) = e^{ax}$ ,  $F(x) = x^2/(1-x)$  и т. д.] и оператор  $\hat{A}$ . По аналогии с разложением в ряд Тейлора этой функции определим  $F(\hat{A})$  как

$$F(\hat{A}) = \sum_0^{\infty} \frac{F^{(n)}(0)}{n!} \hat{A}^n, \quad (10.18)$$

пользуясь тем обстоятельством, что понятия суммы и степени операторов уже были введены. Заметим, что это определение не всегда имеет смысл.

by analytical form (e.g.  $F(x) = \sin x$ ,  $F(x) = e^{\alpha x}$ ,  $f(x) = \frac{x^2}{1-x}$ , etc...) and operator  $A$ . Define

$$(18) \quad F(A) = \sum_0^{\infty} \frac{F^{(n)}(0)}{n!} A^n$$

Observe: definition not always meaningful

Example:  $A = \frac{d}{dx}$ ,

$$\begin{aligned} e^{\alpha A} &= 1 + \alpha A + \frac{\alpha^2}{2!} A^2 + \dots + \frac{\alpha^n}{n!} A^n \dots \\ &= 1 + \alpha \frac{d}{dx} + \dots + \frac{\alpha^n}{n!} \frac{d^n}{dx^n} = \sum_0^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} \frac{d^n}{dx^n} \end{aligned}$$

$$(19) \quad e^{\alpha \frac{d}{dx}} f = \sum \frac{\alpha^n}{n!} \frac{d^n f}{dx^n} = f(x + \alpha)$$

Example:  $A = x$  (i.e. multiply times  $x$ )

(20) Then  $F(A) = F(x)$  (i.e. multiply by  $F(x)$ )

b) Function of two (or more) operators. Attempt to generalize (18)

$$(21) \quad \left\{ \begin{aligned} F(A, B) &= \sum_{n, m=0}^{\infty} \frac{F^{(n, m)}(0, 0)}{n! m!} A^n B^m \\ \text{where } F^{(n, m)}(x, y) &= \frac{\partial^{n+m} F(x, y)}{\partial x^n \partial y^m} \end{aligned} \right.$$

however ambiguous except when  $A, B$  commute because otherwise e.g.  $A^2 B \neq ABA \neq BA^2$

$$(22) \quad AB \rightarrow \frac{AB+BA}{2} \quad A^2 B \rightarrow \frac{A^2 B + ABA + BA^2}{3}$$

and similar

Пример 1. Для оператора  $\hat{A} = d/dx$  разложение экспоненты имеет вид

$$\begin{aligned} e^{\alpha \hat{A}} &= 1 + \alpha \hat{A} + \frac{\alpha^2}{2!} \hat{A}^2 + \dots + \frac{\alpha^n}{n!} \hat{A}^n + \dots = \\ &= 1 + \alpha \frac{d}{dx} + \frac{\alpha^2}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \dots = \sum_0^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} \frac{d^n}{dx^n}; \end{aligned}$$

отсюда

$$e^{\alpha \frac{d}{dx}} f(x) = \sum_0^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} \frac{d^n f(x)}{dx^n} = f(x + \alpha). \quad (10.19)$$

Таким образом, получается оператор сдвига аргумента функции.

Пример 2. Для оператора  $\hat{A} = x$  (оператора умножения на  $x$ )

$$F(\hat{A}) = F(x), \quad (10.20)$$

т. е. получается оператор умножения на  $F(x)$ .

12. Функция двух (или более) операторов. Попытаемся обобщить равенство (10.18) следующим образом:

$$F(\hat{A}, \hat{B}) = \sum_{n, m=0}^{\infty} \frac{F^{(n, m)}(0, 0)}{n! m!} \hat{A}^n \hat{B}^m, \quad (10.21)$$

где

$$F^{(n, m)}(x, y) = \frac{\partial^{n+m} F(x, y)}{\partial x^n \partial y^m}.$$

Это определение, однако, неоднозначно, если только операторы  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  не коммутируют между собой: действительно, для некоммутирующих операторов

$$\hat{A}^2 \hat{B} \neq \hat{A} \hat{B} \hat{A} \neq \hat{B} \hat{A}^2.$$

Иногда в случаях, подобных данному, можно произвести симметризацию произведений операторов, положив, например,

$$\begin{aligned} \hat{A} \hat{B} &\rightarrow \frac{\hat{A} \hat{B} + \hat{B} \hat{A}}{2}, \\ \hat{A}^2 \hat{B} &\rightarrow \frac{\hat{A}^2 \hat{B} + \hat{A} \hat{B} \hat{A} + \hat{B} \hat{A}^2}{3} \end{aligned} \quad (10.22)$$

и т. д.



# 11 - Eigenvalues and eigenfunctions

Eigenvalue problem

(1)

$$A\psi = a\psi$$

$A$  = operator (linear)

$a$  = number

$\psi$  = function

$\psi$  usually restricted to regular <sup>univalent</sup> functions - Typ cal restrictions  $\psi(x)$  finite everywhere including infinite distance - For fields with a boundary (e.g. box) usual condition  $\psi$  vanishes on boundary

~~all the other values of  $a$  are not solutions~~

In gen. solutions only for special values of  $a$  called eigenvalues -

(2)

$$A\psi_n = a_n\psi_n$$

$a_n$  = eigenvalue

$\psi_n$  = e. f.

~~all the other values of  $a$  are not solutions~~

Example: time indep. Schrodinger eq

$$(3) \quad \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V\right)\psi = E\psi$$

$E$  = eigenvalue of operator  $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V$

$\psi$  = corresp. e. f.

Non degenerate e.v. when only one  $\psi_n$  except for const. factor

degenerate otherwise (double, triple, etc.)  
degeneracy

$a_1, a_2, \dots, a_n \dots$  be all e.v.'s of (2)

(each repeated times degeneracy)

$\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n \dots$  be e.f.'s

In Sect 9 for (3)  $\psi_n$  forms orthog. system

**Задача на собственные значения.** Вообще говоря, эта задача заключается в том, чтобы исследовать и решить уравнение вида

$$\hat{A}\psi = a\psi, \quad (11.1)$$

где  $\hat{A}$  — линейный оператор,  $a$  — число,  $\psi$  — функция, т. е. найти класс таких функций, действие данного оператора на которые сводится к умножению их на число. Эти функции называют *собственными функциями* данного оператора.

Обычно функция  $\psi$  считается регулярной и однозначной. Типичное ограничение, накладываемое на такую функцию  $\psi$ , — это требование конечности  $\psi$  повсюду, в том числе и на бесконечности. В случае ограниченных полей — замкнутых систем (например, на сегменте) — граничное условие есть обращение функции  $\psi$  в нуль на границе. Вообще говоря, решения уравнения (11.1) существуют *только* для специальных значений  $a$ , называемых *собственными значениями* оператора  $\hat{A}$ :

$$\hat{A}\psi_n = a_n\psi_n, \quad (11.2)$$

где  $a_n$  — собственные значения, а  $\psi_n$  — соответствующие им собственные функции.

**Пример.** Не зависящее от времени уравнение Шредингера

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U\right)\psi = E\psi \quad (11.3)$$

приводит к задаче на собственные значения  $E_n$  для оператора полной энергии  $\hat{E} = (\hbar^2/2m)\nabla^2 + U$ , которым соответствуют собственные функции  $\psi_n$ .

**Вырождение.** Собственные значения называются *невырожденными*, когда каждому из них соответствует (с точностью до постоянного множителя) лишь одна собственная функция  $\psi_n$ . В противном случае собственные значения называются *вырожденными* (двухкратно, трехкратно и т. д.).

**Ортогональность собственных функций.** Пусть  $a_1, a_2, \dots, a_n, \dots$  — все собственные значения оператора  $\hat{A}$  в (11.2) (количество совпадающих друг с другом собственных значений характеризует кратность вырождения). Далее, пусть  $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n, \dots$  — соответствующие собственные функции. Согласно лекции 9, функции  $\psi_n$  образуют *ортонормированную систему функций* для уравнения (11.3), если в качестве  $\hat{A}$  взять оператор полной энергии (гамильтониан) системы.

Definition - Scalar product of  $f, g$  (functions)

$$(4) \quad (g|f) = \int g^* f$$

$\int = \int dx$  or  $\int dx dy dz$  or  $\int_{\text{all points}}$

Observe  $(g|f) = (f|g)^*$

Definition  $g, f$  orthogonal when

$$(5) \quad (g|f) = 0 \quad \text{or} \quad \int g^* f = 0$$

Question - When will e.f.'s of  $\hat{V}(z)$  be orthogonal? corresponding to different pairs

Answer - When  $A$  is

Definition - Hermitian operator  $A$  defined  
key property

$$(6) \quad \left. \begin{aligned} (g|Af) &= (Ag|f) \quad \text{or} \\ \int g^*(Af) &= \int (Ag)^* f \end{aligned} \right\}$$

Example of hermitian operators

$$x, \quad \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, \quad \nabla^2, \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x, y, z)$$

needed appropriate boundary conditions

$$(7) \quad \left\{ \begin{aligned} &\text{Lemma} - A \text{ hermitian} \\ &(f|Af) = \text{real number} \end{aligned} \right.$$

$$\text{Proof} \quad (f|Af) = (Af|f) = (f|Af)^*$$

$$(8) \quad \left\{ \begin{aligned} &\text{Theorem} - A \text{ hermitian} - \text{e.o. real} \\ &\text{Proof} \end{aligned} \right.$$

$$A\psi_m = a_m \psi_m \quad (\psi_m | A \psi_m) = a_m (\psi_m | \psi_m) \quad a_m = \frac{(\psi_m | A \psi_m)}{(\psi_m | \psi_m)} = \frac{\text{real}}{\text{real}} = \text{real}$$

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ 1.** Скалярным произведением функций  $f$  и  $g$  называется выражение

$$(g|f) = \int g^* f. \quad (11.4)$$

[Отметим, что  $(g|f) \equiv (f|g)^*$ .] Здесь знак интеграла в зависимости от характера функций  $f$  и  $g$  означает либо просто интеграл по  $dx$ , либо тройной интеграл по  $d\tau = dx dy dz$ , либо вообще сумму по всем точкам, в которых определены обе функции.

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ 2.** Функции  $f$  и  $g$  ортогональны, если

$$(g|f) = 0, \quad \text{т. е.} \quad \int g^* f \equiv 0. \quad (11.5)$$

Вопрос. При каких условиях собственные функции уравнения (11.2) соответствующие различным собственным значениям, будут ортогональны между собой?

Ответ. Для этого необходимо и достаточно, чтобы оператор  $\hat{A}$  был эрмитов, именно:

**Эрмитовы операторы.**

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ 3.** Оператор  $\hat{A}$  называется *эрмитовым*, если выполняется равенство

$$(g|\hat{A}f) = (\hat{A}g|f) \quad \text{или} \quad \int g^* \hat{A}f = \int (\hat{A}g)^* f. \quad (11.6)$$

Примеры эрмитовых операторов:

$$\hat{x}; \quad \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}; \quad \nabla^2; \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \hat{U}(x, y, z)$$

(для реализации эрмитовости этих операторов, вообще говоря, *необходимы* соответствующие граничные условия).

**ЛЕММА.** Если оператор  $\hat{A}$  эрмитов, то форма  $(f|\hat{A}f)$  вещественна. (11.7)

**Доказательство.** На основании свойства  $(g|f) \equiv (f|g)^*$  и определения (11.6) имеем

$$(f|\hat{A}f) = (\hat{A}f|f) = (f|\hat{A}f)^*, \quad (11.7')$$

что и требовалось доказать.

**ТЕОРЕМА 1.** Если оператор  $\hat{A}$  эрмитов, то все его собственные значения действительны. (11.8)

**Доказательство.** Исходим из уравнения (11.2)  $\hat{A}\psi_n = a_n \psi_n$ , обе части которого умножаем слева скалярно на  $\psi_n$ :

$$(\psi_n|\hat{A}\psi_n) = a_n (\psi_n|\psi_n);$$

(9) { Theorem A hermitian  $a_n \neq a_m$  then  $\psi_n$  orthog to  $\psi_m$

Proof

$$A \psi_n = a_n \psi_n \quad \left| \int \psi_m^*$$

$$A \psi_m = a_m \psi_m$$

$$(A \psi_m)^* = a_m^* \psi_m^* \quad \left| \int \psi_n$$

because  $a_m$  is real

$$\underbrace{\int \psi_m^* A \psi_n - \int (A \psi_m)^* \psi_n}_{=0 \text{ because } A \text{ is herm.}} = (a_n - a_m) \underbrace{\int \psi_m^* \psi_n}_{= (\psi_m | \psi_n)}$$

Therefore

$$(a_n - a_m) (\psi_m | \psi_n) = 0$$

"when  $a_n \neq a_m$  QED

### Quasi theorems

(10) { If  $(f | Af)$  is real for all  $f$ 's  $A$  is herm (inverse of (7))

(11) { If all  $(\psi_n | \psi_m) = 0$  for all  $a_n \neq a_m$   $A$  is hermitian. (Inverse of (9))

These quasi theorems will be made plausible later

Normalized orthogonal e.f.s

(12) { A hermitian  $\psi_1$  orthog to  $\psi_2$   
 $a_1, a_2, \dots, a_n, \dots$  when  $a_n \neq a_s$ . If  
 $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n, \dots$  there is degeneracy proceed like page 9-3

пользуясь теперь свойством (11.6), получаем:

$$a_n = \frac{(\psi_n | \hat{A} \psi_n)}{(\psi_n | \psi_n)} = \frac{\text{Действительное}}{\text{Действительное}} = \text{Действительное},$$

что и требовалось доказать.

■ **ТЕОРЕМА 2.** Если оператор  $\hat{A}$  эрмитов и собственные значения  $a_n$  и  $a_m$  различны, то соответствующие собственные функции взаимно ортогональны. (11.9)

**Доказательство.** Следующие операции очевидны:

$$\begin{array}{l} \int \psi_m^* \left| \begin{array}{l} \hat{A} \psi_n = a_n \psi_n \\ \hat{A} \psi_m = a_m \psi_m \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} (\text{вспомним, что собственные значения} \\ \text{эрмитовых операторов вещественны:} \\ a_m^* = a_m) \end{array} \\ - \int \psi_n \left| \begin{array}{l} (\hat{A} \psi_m)^* = a_m^* \psi_m^* \end{array} \right. \end{array}$$


---


$$\int \psi_m^* (\hat{A} \psi_n) - \int (\hat{A} \psi_m)^* \psi_n = (a_n - a_m) \int \psi_m^* \psi_n \equiv (a_n - a_m) (\psi_m | \psi_n).$$

Левая часть полученного равенства равна нулю ввиду эрмитовости оператора  $\hat{A}$  ( $m \neq n$ ); следовательно,

$$(a_n - a_m) (\psi_m | \psi_n) = 0,$$

так что при  $a_n \neq a_m$

$$(\psi_m | \psi_n) \equiv \int \psi_m^* \psi_n = 0, \quad (11.9')$$

что и требовалось доказать.

#### ■ НВАЗИТЕОРЕМЫ

Если произведение  $(f | \hat{A} f)$  вещественно для всех функций  $f$ , то оператор  $\hat{A}$  эрмитов [теорема, обратная лемме (11.7)]; (11.10)

Если все произведения  $(\psi_n | \psi_m)$  равны нулю для всех  $a_n \neq a_m$ , то оператор  $\hat{A}$  эрмитов [теорема, обратная теореме (11.9)]. (11.11)

Эти теоремы будут разъяснены позднее.

#### Нормированные ортогональные собственные функции.

Если  $\hat{A}$  — эрмитов оператор, причем

$a_1, a_2, \dots, a_n, \dots$  — собственные значения  $\hat{A}$ ,

$\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n, \dots$  — собственные функции  $\hat{A}$ ,  
то любая  $\psi_r$  ортогональна любой  $\psi_s$  при  $a_r \neq a_s$ . (11.12)

Если же имеет место вырождение ( $a_r = a_s$ ), то следует применить процедуру, описанную в лекции 9 на стр. 67.

Normalization, Divide each  $\psi_n$  by  $\sqrt{(\psi_n | \psi_n)}$ . After all this for new  $\psi_n$

$$(13) \quad (\psi_n | \psi_s) = \delta_{ns}$$

Quasi theorem - Development of "arbitrary"  $f$

$$(14) \quad f = \sum c_n \psi_n \quad c_n = (\psi_n | f)$$

or identity

$$(15) \quad f = \sum (\psi_n | f) \psi_n$$

(Plausible later) for all  $f$ 's

When (15) is correct (12) is called complete normalized orthogonal set.

Definition: mean value  $\bar{A}$  of operator  $A$  relative to function  $\psi$

$$(16) \quad \bar{A} = \frac{(\psi | A \psi)}{(\psi | \psi)}$$

Example: if  $A = x$  and  $\psi$  norm to 1

$$(17) \quad \bar{x} = \int \psi^* x \psi = \int x |\psi|^2 dx$$

Therefore <sup>weight</sup> ~~not~~ used in averaging  $x$  is  $|\psi|^2$

Theorem The ~~is~~ mean value of a hermitian operator is real (follows from (7) + (16))

Quasi Theorem - If the mean value of

Our operator relative to any all functions is real, the operator is hermitian (plausible later; can be proved easily from (15))

*Нормировка.* Общий метод нормировки функций состоит в следующем. Каждая функция  $\psi_n$  делится на  $\sqrt{(\psi_n | \psi_n)}$ . После того как все  $\psi_n$  поделены, для новых  $\psi_n$  справедливо равенство

$$(\psi_r | \psi_s) = \delta_{rs}. \quad (11.13)$$

■ **КВАЗИТЕОРЕМА.** Разложение „произвольной“ функции  $f$  по собственным функциям  $\psi_n$  содержит в качестве коэффициентов произведения вида  $(\psi_n | f)$ ,

$$f = \sum_n c_n \psi_n, \quad c_n = (\psi_n | f), \quad (11.14)$$

иначе говоря, имеет место тождество

$$f = \sum_n (\psi_n | f) \psi_n. \quad (11.15)$$

Справедливость этого утверждения будет показана позднее. Если тождество (11.15) верно для всех функций  $f$ , то систему функций (11.12) называют *полной системой ортогональных нормированных функций* (полной ортонормированной системой).

*Полная система ортонормированных функций.*

В конце лекции 9 уже говорилось о понятии полноты системы функций; к этому здесь следует добавить лишь соображения ортогональности и нормировки.

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ.** Среднее значение  $\bar{A}$  оператора  $\hat{A}$  относительно функции  $\psi$  равно

$$\bar{A} = \frac{(\psi | \hat{A} \psi)}{(\psi | \psi)}. \quad (11.16)$$

**Пример.** Если  $\hat{A} = x$ , а функция  $\psi$  нормирована на 1, то

$$\bar{x} = \int \psi^* x \psi d\tau = \int x |\psi|^2 d\tau. \quad (11.17)$$

Следовательно, статистический вес, использованный при усреднении координаты  $x$ , равен  $|\psi|^2$ .

■ **ТЕОРЕМА.** Среднее значение эрмитова оператора представляет собой действительное число.

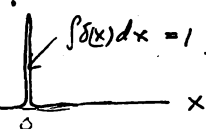
Доказательство следует из соотношений (11.7) и (11.16).

■ **КВАЗИТЕОРЕМА.** Если среднее значение оператора относительно всех функций вещественно, то этот оператор эрмитов.

Справедливость этой теоремы будет показана позднее; она просто следует из свойства (11.15).



Dirac  $\delta(x)$  function

(18)   $\int \delta(x) dx = 1$  when interval includes  $x=0$

(19)  $\delta(x) = \lim_{\alpha \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} e^{-\alpha x^2}$

(20)  $\delta(x) = \lim_{\alpha \rightarrow \infty} \frac{\sin \alpha x}{\pi x}$

or other forms -

Properties

(21)  $\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x-a) dx = f(a)$

Take derivative respect  $a$

(21)  $-\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta'(x-a) dx = f'(a)$

Use with caution !!

Fourier development

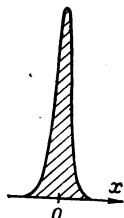
(22)  $\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} dk$

Also dev. in e.f.'s (like (15))

$\delta(x-x') = \sum_n (\underbrace{\psi_n^*(x')}_{\text{from (21)}}) \psi_n(x)$

(23)  $\delta(x-x') = \sum_n \psi_n^*(x') \psi_n(x)$

**Дополнение:  $\delta$ -функция Дирака.** По определению,  $\delta$ -функция Дирака обладает следующими свойствами\*:



Фиг. 8.

Наглядное представление  $\delta$ -функции Дирака. Площадь, ограниченная кривой, равна единице; высота пика бесконечна.

$$\int \delta(x) dx = 1, \quad (11.18)$$

когда интервал интегрирования включает точку  $x=0$ ; в противном случае  $\int \delta(x) dx = 0$  (фиг. 8). Можно определить  $\delta$ -функцию Дирака и с помощью предельных переходов

$$\delta(x) = \lim_{\alpha \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} e^{-\alpha x^2}, \quad (11.19)$$

или

$$\delta(x) = \lim_{\alpha \rightarrow \infty} \frac{\sin \alpha x}{\pi x} \quad (11.20)$$

и др.

Эти определения отражают также свойство четности  $\delta$ -функции.

Перечислим некоторые основные свойства  $\delta$ -функции. Прежде всего

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \delta(x-a) dx = f(a). \quad (11.21a)$$

Взяв теперь производную от обеих частей равенства (11.21) по  $a$ , получим другое свойство:

$$-\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \delta'(x-a) dx = f'(a). \quad (11.21b)$$

*Пользоваться осторожно!*

Запишем теперь фурье-разложение  $\delta$ -функции:

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} dk. \quad (11.22)$$

Нетрудно видеть, что фурье-образ этой функции равен 1. По правилу (11.15) разложим  $\delta$ -функцию в ряд по собственным функциям некоторой задачи:

$$\delta(x-x') = \sum_n (\psi_n(x) | \delta(x-x')) \psi_n(x);$$

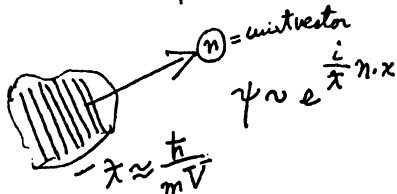
учитывая (11.21), получаем:

$$\delta(x-x') = \sum_n \psi_n^*(x') \psi_n(x). \quad (11.23)$$

## 12 - Operators for mass point.

Six operators on  $\psi(x, y, z)$ 

$$(1) \quad x, y, z, \quad \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} = p_x, \quad \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} = p_y, \quad \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} = p_z$$

(a) assume  $\psi$  describes small wave packets

Derive from (11-16) (fairly obvious)

$$(2) \quad \begin{cases} \bar{x}, \bar{y}, \bar{z} = \text{approximate coordinates of wave packet} \\ \bar{p}_x, \bar{p}_y, \bar{p}_z = \text{approximate components of mom. vector } mV\vec{n} \end{cases}$$

$$\left( \text{This last: } \bar{p}_x = \frac{(\psi | \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x})}{(\psi | \psi)} \approx \frac{\hbar}{x} n_x = mV n_x \right)$$

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x} \approx \frac{\hbar}{i} \frac{i}{x} n_x \psi$$

(b) (2) suggests that operators (1) have something to do with coordinates & mom. components!  
Further confirmation.  
 Write energy (Kin + Potential of point)

$$(3) \quad E = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + V(x, y, z) = H(x, \dots, p_x, \dots)$$

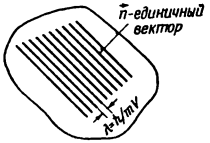
Interpret above as function of operators (1). This operator function of operators is defined as in (10-21) but in this case definition is quite unambiguous

Простейшей физической системой является материальная точка. Ниже рассматриваются некоторые операторы для этого случая.

Запишем шесть операторов, действующих на функцию  $\psi(x, y, z)$ :

$$\hat{x}; \hat{y}; \hat{z}; \quad \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} = \hat{p}_x; \quad \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} = \hat{p}_y; \quad \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} = \hat{p}_z; \quad (12.1)$$

все шесть операторов эрмитовы. Выясним, как они действуют на волновую функцию системы.



Фиг. 9.  
Волновой пакет.

**А. Средние значения.** Предположим, что  $\psi$  описывает „малый“ волновой пакет (фиг. 9)

$$\psi \sim e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{n} \cdot \mathbf{r}}, \quad \mathbf{r} = (x, y, z).$$

Усреднив значения операторов по правилу (11.16), имеем:

$$\begin{aligned} \bar{x}, \bar{y}, \bar{z} &\text{— средние координаты волнового пакета;} \\ \bar{p}_x, \bar{p}_y, \bar{p}_z &\text{— средние значения компонент вектора} \end{aligned} \quad (12.2)$$

импульса  $mV\mathbf{n}$ .

Замечание. Для координат этот результат вполне очевиден. Для компонент импульса, например для  $\bar{p}_x$ ,

$$\bar{p}_x = \frac{(\psi | \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi)}{(\psi | \psi)} \approx \frac{\hbar}{\lambda} n_x = mV n_x,$$

поскольку для рассматриваемой функции

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x} \approx \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} e^{\frac{i}{\hbar} n_x x} = \frac{\hbar}{\lambda} n_x \psi.$$

Из определения средних величин (12.2) ясно, что операторы (12.1) должны быть как-то связаны с координатами и компонентами импульса в их привычном классическом понимании. Убедимся в этом.

**Б. Дальнейшее подтверждение.** Запишем сумму потенциальной и кинетической энергий материальной точки:

$$E = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + U(x, y, z) = H(x, \dots, p_x, \dots). \quad (12.3)$$

$$(4) \begin{cases} U(x, y, z) \rightarrow \text{Operator that multiplies times } U(x, y, z) \\ p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 \rightarrow \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} + \dots \right\} \\ = -\hbar^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \dots \right) = -\hbar^2 \nabla^2 \end{cases}$$

Therefore operator (hermitian)

$$(5) H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U$$

Applied to function  $\psi$  yields

$$(6) H\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U\psi$$

This means merely ordinary product  $U$  times  $\psi$

$H$  is called energy operator or hamiltonian operator

From previous examples, especially linear oscillator & hydrogen atom appears that

The e.o.'s of  $H$  are the energy levels of system.

(C) Suggested generalization. Postulate.

Consider classical function of state of system (e.g.;  $y$  coordinate;  $z$ -component of momentum; kin. energy;  $x$  component of ang. momentum & similar). All these expressible classically as functions of  $(x, y, z, p_x, p_y, p_z)$

Истолкуем записанное таким образом выражение для полной энергии материальной точки как функцию операторов (12.1). Эта операторная функция определяется также по правилу (10.21), но в данном случае определение вполне однозначно. Итак,

$$\begin{aligned} U(x, y, z) &\rightarrow \hat{U}(x, y, z) \left[ \begin{array}{l} \text{оператор умножения} \\ \text{на функцию } U(x, y, z) \end{array} \right], \\ p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 &\rightarrow \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2 = \\ &= \left( \frac{\hbar}{i} \right)^2 \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} + \dots \right\} = -\hbar^2 \left\{ \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \dots \right\} = -\hbar^2 \nabla^2. \end{aligned} \quad (12.4)$$

Следовательно, оператор, соответствующий энергии  $E$  (очевидно, эрмитов), может быть записан в виде

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \hat{U}. \quad (12.5)$$

Применяя этот оператор к функции  $\psi$ , получаем:

$$\hat{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + \hat{U}\psi. \quad (12.6)$$

Член  $\hat{U}\psi$  имеет смысл обычного умножения функции координат  $U(x, y, z)$  на волновую функцию  $\psi$ . Оператор  $\hat{H}$  называют *оператором полной энергии* или *оператором Гамильтона* (гамильтонианом). Из предыдущих примеров (особенно из рассмотрения линейного осциллятора и атома водорода) следует, что

Собственные значения оператора  $\hat{H}$  представляют собой энергетические уровни системы.

**В. Напрашивающиеся обобщения. Постулаты.** Рассмотрим классические функции состояния системы (например,  $y$ -координату,  $z$ -компоненту импульса, кинетическую энергию  $T$ ,  $x$ -компоненту момента и т. п.). Все эти функции выражаются в классической физике как функции переменных  $x, y, z, p_x,$

Form corresponding operator functions

$$\left[ x; p_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}; -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2; M_x = y p_z - z p_y = \frac{\hbar}{i} \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \text{ and similar} \right] \text{ Note:}$$

all these operators must be chosen hermitian

a function  $F(x, y, z, p_x, p_y, p_z)$

Postulate 1 - The only possible results of a measurement of ~~of~~ coordinate and momenta are the eigenvalues of the corresponding hermitian operator.

Discussion of meaning of state in classical + wave mechanics

Postulate 2 - Wave mechanical state is determined by function  $\psi$ . Its <sup>variation</sup> in time according to the time dep. Sch. eq.

However two  $\psi$ 's proportional to each other represent the same state.

Question. How does one determine the initial  $\psi$ ? Answer: measure a quantity  $F(\vec{x}, \vec{p})$ . Result of measurement will be one of the e.v.'s of  $F$ , say  $F_n$ . If  $F_n$  is non degenerate  $\psi$  immediately after the measurement is the e.f. of  $F$  corresponding to given e.v. If there is degeneracy more measurements are needed, as will be seen later.

$p_y, p_z$ . Образует соответствующие операторные функции:

$$\hat{x}; \quad \hat{p}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}; \quad \hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2;$$

$$\hat{M}_x = \hat{y} \hat{p}_z - \hat{z} \hat{p}_y = \frac{\hbar}{i} \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \text{ и т. п.}$$

З а м е ч а н и е. Все эти операторы должны быть выбраны эрмитовыми, так как иначе их средние и собственные значения не будут вещественными.

**постулат 1.** Единственно возможными результатами измерения функции, зависящей от координат и импульса,

$$F = F(x, y, z, p_x, p_y, p_z),$$

являются собственные значения соответствующего этой функции эрмитова оператора.

**постулат 2.** Квантовомеханическое состояние системы определяется волновой функцией  $\psi$ . Функция  $\psi$  изменяется во времени таким образом, как того требует зависящее от времени уравнение Шредингера.

В о п р о с. Как следует выбирать начальные значения функции  $\psi$ ?

О т в е т. Измеряется некоторая величина  $F(\mathbf{x}, \mathbf{p})$ . Результат этого измерения должен совпадать с одним из собственных значений оператора  $\hat{F}$ , например с  $F_n$ . Если  $F_n$  является невырожденным собственным значением, то функция  $\psi$  непосредственно после измерения и будет собственной функцией оператора  $\hat{F}$ , соответствующей данному собственному значению. Если же имеет место вырождение, то необходимо большее число измерений, как выяснится позднее.



Q.v. problem

$$(7) \quad G g_n(\vec{x}) = G_n g_n(\vec{x})$$

$G$  = Herm. operator fct of  $\vec{x}, \vec{p}$

$G_n$  = eigenvalue ( $G_n$  is a number)

$g_n(x)$  = eigenfunction.

Develop  $\psi$  ~~as a sum of~~  $g_n(\vec{x})$

$$(8) \quad \psi = \sum_n b_n g_n(\vec{x})$$

$b_n$  is a number

this is state fct at time  $t$

$$b_n = (g_n | \psi) = \int g_n^* \psi d\tau$$

(9) Postulate 3 - If  $G(x, p)$  is measured probability of finding as result  $G = G_n$  is proportional to  $|b_n|^2$

Observe: if  $\psi$  normalized  $\sum |b_n|^2 = 1$

Proof

$$1 = (\psi | \psi) = \left( \sum_n b_n g_n \mid \sum_s b_s g_s \right) =$$

$$= \sum_{n,s} b_n^* b_s (g_n | g_s) = \sum_{n,s} b_n^* b_s \delta_{ns} = \sum_n b_n^* b_n = \sum |b_n|^2$$

Therefore: when  $\psi$  is normal. to 1

$$(10) \quad |b_n|^2 = \text{prob. of finding } G = G_n \text{ by measurement}$$

Then: Mean value of possible results of measuring  $G$  ( $\psi$  is normalized to 1)

$$\bar{G} = \sum_n |b_n|^2 G_n = \sum_n b_n^* G_n b_n = \sum_{n,s} b_s^* G_n b_n \delta_{sn} =$$

### Задача на собственные значения:

$$\hat{G}g_n(\mathbf{x}) = G_n g_n(\mathbf{x}), \quad (12.7)$$

где  $\hat{G}$  — эрмитов оператор, зависящий от  $\mathbf{x}$  и  $\mathbf{p}$ ;  $G_n$  — его собственное значение (*число*);  $g_n(\mathbf{x})$  — собственная функция. Разложим  $\psi$  по собственным функциям  $g_n(\mathbf{x})$ :

$$\begin{aligned} \psi &= \sum_n b_n g_n(\mathbf{x}), \\ b_n &= (g_n | \psi) = \int g_n^* \psi d\tau; \end{aligned} \quad (12.8)$$

здесь  $b_n$  — коэффициенты разложения (числа), а  $\psi$  определяет состояние системы в момент времени  $t$ .

$$\left| \begin{array}{l} \text{постулат 3. При измерении величины } G(\mathbf{x}, \mathbf{p}) \text{ вероятность} \\ \text{получить значение, равное } G_n, \text{ пропорциональна } |b_n|^2. \end{array} \right| \quad (12.9)$$

Отсюда следует

**УТВЕРЖДЕНИЕ.** Если  $\psi$  — нормированная функция, то

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

**Доказательство.**

$$\begin{aligned} 1 = (\psi | \psi) &= \left( \sum_n b_n g_n \left| \sum_s b_s g_s \right. \right) = \sum_{n,s} b_n^* b_s (g_n | g_s) = \sum_{n,s} b_n^* b_s \delta_{ns} = \\ &= \sum_n b_n^* b_n = \sum_n |b_n|^2. \end{aligned}$$

Таким образом,

$$\left| \begin{array}{l} \text{Если функция } \psi \text{ нормирована на единицу, то} \\ |b_n|^2 = \text{Вероятность получить при} \\ \text{измерении число } G = G_n. \end{array} \right| \quad (12.10)$$

Поэтому среднее значение возможных результатов измерения величины  $G$  (волновая функция  $\psi$  нормирована на единицу) равно

$$\begin{aligned} \bar{G} &= \sum_n |b_n|^2 G_n = \sum_n b_n^* b_n G_n = \\ &= \sum_{n,s} b_s^* G_n b_n \delta_{ns} = \sum_{s,n} b_s^* G_n b_n (g_s | g_n) = \\ &= \left( \sum_s b_s g_s \left| \sum_n b_n G_n g_n \right. \right) = (\psi | \sum_n b_n G_n g_n) = \\ &= (\psi | G \sum_n b_n g_n) = (\psi | G \psi) = \frac{(\psi | G \psi)}{(\psi | \psi)}; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \sum_n b_n^* G_n b_n (g_n | g_n) = \left( \sum_n b_n^* g_n \middle| \sum_n b_n G_n g_n \right) = \\
 &= \cancel{\langle \psi |} (\psi | \sum_n b_n G_n g_n) = (\psi | G \sum_n b_n g_n) = \\
 &= (\psi | G \psi) = \frac{(\psi | G \psi)}{(\psi | \psi)} \quad \text{This denominator is } = 1
 \end{aligned}$$

Therefore:

Theorem. The average of op.  $G$  in the sense of (11-16) is the weighted average of ~~all~~ of possible results that can be obtained by measuring quantity  $G(\vec{r}, \vec{p})$ .

Complications when e.v.'s of  $G$  are continuous  
Example: op.  $x$

$$x f(x) = x' f(x) \quad (x' = \text{number})$$

Solution  $f(x) = \delta(x - x')$  = corresp. e.f.  
 $\delta(x - x')$  is not normalizable.

However: in sum's like (8), write  $\int$  instead of  $\sum$  as follows

$$\begin{aligned}
 &\cancel{\sum_n \int \delta(x - x') dx} \\
 &\quad \begin{aligned}
 &\quad \quad \quad n \rightarrow x' \\
 &\quad \quad \quad g_n(x) \rightarrow \delta(x - x') \\
 &\quad \quad \quad b_n = (g_n^* | \psi) \rightarrow (\delta(x - x') | \psi) dx' \\
 &\quad \quad \quad \sum_n \rightarrow \int
 \end{aligned}
 \end{aligned}$$

then the inadequate normalization is compensated for by infinitesimal factor  $dx'$ . And all formulas become correct.

знаменатель  $(\psi|\psi)$  в силу нормировки равен 1 [ср. с (11.16)]. Отсюда следует

■ **ТЕОРЕМА.** Среднее значение оператора  $\hat{G}$  в смысле определения (11.16) равно взятому с весовыми множителями среднему значению всех возможных результатов измерения соответствующей физической величины  $G(\mathbf{x}, \mathbf{p})$ .

Усложнения. Случай непрерывного множества собственных значений оператора  $\hat{g}$ .

Пример 1. Рассмотрим операторное уравнение для оператора координаты  $\hat{x}$

$$\hat{x}f(x) = x'f(x),$$

где  $x'$  — число. Решение этого уравнения имеет вид

$$f(x) = \delta(x - x')$$

[ $\delta(x - x')$  — соответствующая  $x'$  собственная функция]. Функция  $\delta(x - x')$  не нормируема.

Однако если суммирование типа (12.8) заменить интегралом:

$$\begin{aligned} n &\rightarrow x', \\ g_n(x) &\rightarrow \delta(x - x'), \\ b_n &= (g_n^* | \psi) \rightarrow (\delta(x - x') | \psi) dx', \\ \sum_n &\rightarrow \int, \end{aligned}$$

то отсутствие обычной нормировки компенсируется бесконечно малым множителем  $dx'$ , и все формулы становятся корректными. Таким образом,

$$(11) \left\{ \begin{array}{l} \text{Dens. of prob. of point being at } x=x' \quad (8)(9) \\ |\delta(x-x') \psi(x)|^2 = \left| \int \delta(x-x') \psi(x) dx \right|^2 = \\ = |\psi(x')|^2 \quad \text{(familiar result!)} \end{array} \right.$$

Mean value of  $x$

$$(12) \quad \bar{x} = (\psi | x \psi) = \int x |\psi|^2 dx \quad \left( \psi \text{ normalized to one} \right)$$

Second example operator

$$(13) \quad p = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$$

e.v. equation

$$(14) \left\{ \begin{array}{l} p f(x) = p' f(x) \\ \frac{\hbar}{i} f'(x) = p' f(x) \end{array} \right. \quad \left( \begin{array}{l} p = \text{operator} \\ p' = \text{number} \end{array} \right)$$

general solution  $\frac{i}{\hbar} p' x$

$$(15) \quad f(x) = e^{\frac{i}{\hbar} p' x}$$

This is e.f. for eigenvalue  $p'$   
all  $-\infty < p' < +\infty$   
are allowable

Again small trouble with normalization (15) not strictly normalizable — In this case same like (8) changed as follows

$$(16) \left\{ \begin{array}{l} n \rightarrow p' \quad g_n(x) \rightarrow e^{\frac{i}{\hbar} p' x} \quad b_n = (g^* | \psi) \rightarrow (e^{\frac{i}{\hbar} p' x} | \psi) \\ \sum_n \rightarrow \int \frac{dp'}{2\pi\hbar} \quad \text{(notice factor } \frac{1}{2\pi\hbar} \text{)} \quad \text{this factor is needed for completeness [see (11-23) and (11-22)]} \\ \delta(x-x') = \sum_n g_n^*(x') g_n(x) \rightarrow \int \frac{dp'}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} p'(x-x')} = \delta(x-x') \end{array} \right.$$

$$\left. \begin{aligned} &\text{Плотность вероятности того, что значение координаты} \\ &\text{материальной точки есть } x=x', \text{ равна} \\ &|\langle \delta(x-x') | \psi(x) \rangle|^2 = \left| \int \delta(x-x') \psi(x) dx \right|^2 = |\psi(x')|^2. \end{aligned} \right| \quad (12.11)$$

Знакомый результат! Среднее значение координаты  $x$  определяется как

$$\bar{x} = \langle \psi | x \psi \rangle = \int x |\psi|^2 dx \quad (12.12)$$

(функция  $\psi$  нормирована на единицу).

Пример 2. Рассмотрим импульс материальной точки; ему соответствует оператор

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}. \quad (12.13)$$

Уравнение для собственных значений имеет вид ( $\hat{p}$  — оператор,  $p'$  — число)

$$\left. \begin{aligned} \hat{p} f(x) &= p' f(x), \\ \text{или} \\ \frac{\hbar}{i} f'(x) &= p' f(x). \end{aligned} \right| \quad (12.14)$$

Запишем общее решение уравнения (12.14):

$$f(x) = e^{\frac{i}{\hbar} p' x}. \quad (12.15)$$

Это собственная функция, соответствующая собственному значению  $p'$ , которое может быть любым:

$$-\infty < p' < +\infty.$$

В этом случае снова возникает некоторое затруднение при нормировке, так как функция (12.15) непосредственно *не нормируема*. В таких случаях суммы типа (12.8) нужно преобразовать следующим образом:

$$\left. \begin{aligned} n &\rightarrow p', & g_n^*(x) &\rightarrow e^{\frac{i}{\hbar} p' x}, \\ b_n = (g_n^* | \psi) &\rightarrow (e^{\frac{i}{\hbar} p' x} | \psi), & \sum_n &\rightarrow \int \frac{dp'}{2\pi\hbar}; \end{aligned} \right| \quad (12.16)$$

теперь

$$\delta(x-x') = \sum_n g_n^* g_n(x) \rightarrow \int \frac{dp'}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} p' (x-x')} = \delta(x-x')$$

[отметим множитель  $1/2\pi\hbar$ : он вводится ради полноты, см. (11.23) и (11.22)].

~~Def~~ Prob of finding  $p', p' + dp'$

$$(18) \begin{cases} \frac{dp'}{2\pi\hbar} \left| \left( e^{\frac{i}{\hbar} p' x} \mid \psi(x) \right) \right|^2 & \psi \text{ normalized} \\ = \frac{dp'}{2\pi\hbar} \left| \int e^{-\frac{i}{\hbar} p' x} \psi(x) dx \right|^2 \end{cases}$$

Notice prob. proport. to sq. modulus of Fourier coefficient

Check that total prob. = 1 (from (17) and normalization)

Mean value of momentum

Two expressions — From (18)

$$(19) \quad \bar{p} = \frac{1}{2\pi\hbar} \int p' dp' \left| \int e^{-\frac{i}{\hbar} p' x} \psi(x) dx \right|^2$$

or from p. 12-5 and normalization

$$(20) \quad \bar{p} = (\psi | p \psi) = \int \frac{\hbar}{i} (\psi | \psi') = \frac{\hbar}{i} \int \psi^* \psi' dx$$

part integration  $\rightarrow = -\frac{\hbar}{i} \int \psi'^* \psi dx = \frac{\hbar}{2i} \int (\psi^* \psi' - \psi'^* \psi) dx$

Prove: (19) & (20) are equivalent

[write (19) as double integral and use (17)]

Вероятность того, что импульс системы имеет величину в интервале  $(p', p' + dp')$ , равна  $(\psi$  нормирована)

$$\frac{dp'}{2\pi\hbar} \left| \left( e^{\frac{i}{\hbar} p' x} \mid \psi(x) \right) \right|^2 \quad (12.17)$$

или

$$\frac{dp'}{2\pi\hbar} \left| \int e^{-\frac{i}{\hbar} p' x} \psi(x) dx \right|^2. \quad (12.18)$$

**З а м е ч а н и е.** Отсюда непосредственно следует вывод, что искомая вероятность пропорциональна квадрату модуля коэффициента фурье-разложения. Полезно убедиться, что полная вероятность равна единице, как следует из (12.17) и (12.18) и нормировки  $\psi(x)$ .

**Среднее значение импульса.** Для среднего значения импульса можно указать два выражения:

1) вытекающее из (12.18)

$$\bar{p} = \frac{1}{2\pi\hbar} \int p' dp' \left| \int e^{-\frac{i}{\hbar} p' x} \psi(x) dx \right|^2; \quad (12.19)$$

2) вытекающее из определения среднего (см. стр. 93—95) при учете нормировки

$$\begin{aligned} \bar{p} = (\psi \mid p \psi) &= \frac{\hbar}{i} (\psi \mid \psi') = \frac{\hbar}{i} \int \psi^* \psi' dx = -\frac{\hbar}{i} \int \psi'^* \psi dx = \\ &= \frac{\hbar}{2i} \int (\psi^* \psi' - \psi'^* \psi) dx \end{aligned}$$

(интеграл  $\int \psi^* \psi' dx$  вычислялся по частям). Рекомендуется самостоятельно доказать, что равенства (12.19) и (12.20) эквивалентны.

[**Указание:** записать правую часть (12.19) в виде двойного интеграла по координатам  $x$  и  $x'$  и использовать (12.17) и (12.18).]



### 13- Uncertainty principle

Definite  $x$   $x=x'$  means  $\psi(x) = \delta(x-x')$

Fourier has all comp with eq. amplitude

Hence no momentum limitation

(1)  $\boxed{\delta x = 0 \rightarrow \delta p = \infty}$

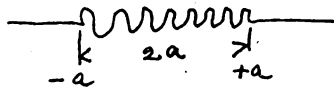
Definite  $p = p' \rightarrow \psi = e^{\frac{i}{\hbar} p' x} \quad |\psi|^2 = 1$   
hence

(2)  $\boxed{\delta p = 0 \rightarrow \delta x = \infty}$

Interms. case

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} & |x| < a \\ 0 & |x| > a \end{cases}$$

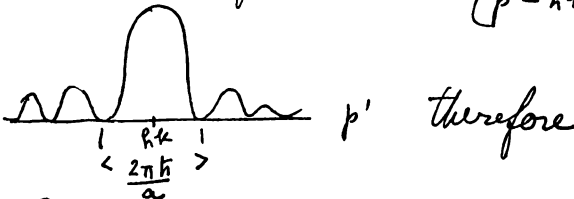
(3)  $\boxed{\delta x = a}$



From (12-18)

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar} p' x} e^{ikx} dx &= \int_{-a}^a e^{i(k - \frac{p'}{\hbar})x} dx = \\ &= \frac{\sin((p' - \hbar k) \frac{a}{\hbar})}{p' - \hbar k} \times 2\hbar \end{aligned}$$

Prob distrib of  $p'$  is  $\sim \frac{\sin^2(p' - \hbar k) \frac{a}{\hbar}}{(p' - \hbar k)^2}$



(4)  $\delta p' = \frac{\pi\hbar}{a}$

Пусть частица имеет *точно определенное значение координаты*  $x$ , а именно  $x = x'$ . Очевидно, соответствующая волновая функция должна иметь вид  $\psi(x) = \delta(x - x')$ . Все коэффициенты ее фурье-разложения равны между собой; следовательно, частица в таком состоянии с равной вероятностью может иметь *любое* значение импульса:

$$\delta x = 0 \rightarrow \delta p = \infty. \quad (13.1)$$

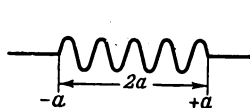
С другой стороны, при *определенном значении импульса*  $p = p'$

$$\psi(x) = e^{\frac{i}{\hbar} p' x}, \quad |\psi|^2 = 1. \quad (13.2)$$

Следовательно, в этом случае никак не фиксировано положение точки в пространстве:

$$\delta p = 0 \rightarrow \delta x = \infty.$$

Можно рассмотреть также промежуточный случай (фиг. 10)



Фиг. 10.

Одномерный волновой пакет шириной  $2a$ .

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx}, & |x| < a, \\ 0, & |x| > a, \end{cases}$$

т. е. случай

$$\delta x = a.$$

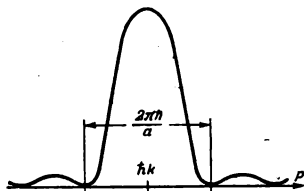
(13.3)

Из формулы (12.18) следует, что

$$\int_{-a}^{+a} e^{-\frac{i}{\hbar} p' x} e^{ikx} dx = \int_{-a}^{+a} e^{i \left( k - \frac{p'}{\hbar} \right) x} dx = \frac{\sin \left[ \left( p' - \hbar k \right) \frac{a}{\hbar} \right]}{p' - \hbar k} \cdot 2\hbar.$$

Плотность вероятности того, что значение импульса частицы равно  $p'$ , при этом будет пропорциональна величине

$$\sin^2 \left[ \left( p' - \hbar k \right) \frac{a}{\hbar} \right] / (p' - \hbar k)^2.$$



Фиг. 11.

График плотности вероятности распределения импульса в случае  $\delta x = a$ .

Распределение этой вероятности показано на чертеже (фиг. 11); нетрудно видеть, что разброс значений импульса укладывается в интервал

$$\delta p' = \frac{\pi \hbar}{a}. \quad (13.4)$$

(3) + (4)  $\rightarrow$   
 (5)  $\delta x \delta p \approx \hbar$   
 (Uncertainty principle)

Quantitatively one proves that for any  $\psi$

(6)  $\delta x \delta p \geq \frac{\hbar}{2}$  (See Perico - Quantum Mech. p. 110 ff, p. 118)

For discussion of examples Schiff pp. 7 to 15  
 $x$  +  $p$  are complementary according to (5)

Complementarity of time ( $t$ ) and energy ( $E$ )

(7)  $\delta t \delta E \approx \hbar$

has various meanings.

1) Freq. of short duration phenomenon  
 (lasting  $\delta t$ ) has broad band ( $\delta \omega$ ). Find  
 as (3) + (4)

(8)  $\delta t \delta \omega \approx 1$

In wave mech.  $E = \hbar \omega$ , hence (7).

States of a system of short life cannot have  
 energy more sharply defined than corresponds  
 to (7).

2) Discussion of measurement procedures  
 has shown that in order to measure energy  
 accurately ( $\delta E$ ) a time of at least  $\delta t \approx \hbar / \delta E$   
 is needed.

All this will be discussed more sharply  
 later

Сравнивая формулы (13.3) и (13.4), получаем:

$$\delta x \delta p \approx a \frac{\pi \hbar}{a} \approx \pi \hbar, \text{ или } \delta x \delta p \approx \hbar. \quad (13.5)$$

Этот результат известен как *гейзенберговское соотношение неопределенностей*. Строгий формальный расчет показывает, что для любой волновой функции  $\psi$  выполняется неравенство

$$\delta x \delta p \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (13.6)$$

Доказательство для одномерной области можно найти в учебнике Э. Персико<sup>1)</sup>. Полезные для изучения примеры рассматриваются в „Квантовой механике“ Л. Шиффа, где отчетливо видна *взаимная дополнительность* координаты  $x$  и импульса  $p$  в согласии с соотношением (13.5)<sup>2)</sup>.

Дополнительность временной координаты  $t$  и энергии системы  $E$

$$\delta t \delta E \approx \hbar \quad (13.7)$$

имеет ряд важных аспектов:

1. Частота, характерная для кратковременных явлений  $\delta t$ , имеет широкий разброс (полосу  $\delta \omega$ ). Подобно соотношениям (13.3) и (13.4) находим:

$$\delta t \delta \omega \approx 1. \quad (13.8)$$

В квантовой механике  $E = \hbar \omega$ , откуда непосредственно следует соотношение (13.7).

Энергетические состояния систем с коротким временем жизни не могут быть определены более точно, чем допускает формула (13.7).

2. Анализ процесса измерений свидетельствует о том, что для точного определения энергии (для достижения достаточно малого значения  $\delta E$ ) требуется по крайней мере промежуток времени

$$\delta t \approx \hbar / \delta E.$$

Все это будет более детально обсуждаться позднее.

<sup>1)</sup> Э. Ферми рекомендует курс Enrico Persico, Fundamentals of Quantum Mechanics, ed. G. M. Temmer, N. Y., 1950, p. 110—119. Соответствующие разделы этого курса приведены в комментарии (\*) к настоящей странице в конце "Конспектов". Целесообразно протудировать эти выдержки прежде, чем продолжать изучение "Конспектов". — *Прим. ред.*

<sup>2)</sup> См. Л. Шифф, Квантовая механика, ИЛ, 1959, стр. 17—27; кроме того, ввиду важности вопроса полезно ознакомиться с его изложением у различных авторов: см., например, П. А. М. Дирак, Принципы квантовой механики, М., 1960, стр. 143; А. А. Соколов и др., Квантовая механика, Учпедгиз, 1962, стр. 146; Д. И. Блохинцев, Основы квантовой механики, Высшая школа, 1961, стр. 55. — *Прим. ред.*

### 14 - Matrices

Functions in finite field (name points of field  $1, 2, \dots, n$ )  $f$  is ensemble of  $n$  (complex) numbers  $(f_1, f_2, \dots, f_n)$ .

Discuss: functions in continuous fields as limit of functions in ~~also~~ a finite number of points, (e.g. describe an  $f(x)$  by a table).

Consider now field of  $n$  points.

- (1)  $f \equiv (f_1, f_2, \dots, f_n)$  considered as vector with complex components ( $n$ -dimensional). Limit to  $n \rightarrow \infty$  (even continuous infinity) yield identification of ~~all~~ functions with vectors in Hilbert space — Will establish theorems for finite  $n$  and in many cases results can be generalized.

Scalar product of  $f \equiv (f_1, f_2, \dots, f_n)$  &  $g \equiv (g_1, g_2, \dots, g_n)$

(2)  $(g|f) = \sum_1^n g_s^* f_s$  (analog of (11-4))

Observe  $(g|f) = (f|g)^*$

(3)  $(g|f) = (f|g)^*$

(4) Magnitude of "vector"  $f = (f|f) = \sum_1^n |f_s|^2$

(5) Unit "vector" = "vector" of magnitude one

(6) Orthogonal vectors ~~to each other~~  $f + g$ , when  $(f|g) = 0$  or equivalent  $(g|f) = 0$

**Функции на многообразии.** На многообразии, включающем конечное число точек (назовем их  $1, 2, \dots, n$ ), некоторую функцию  $f$  можно понимать как совокупность  $n$  (комплексных) чисел  $f_1, f_2, \dots, f_n$ . Переход к непрерывному многообразию (например, к пространству одного или более измерений) можно рассматривать как предельный переход  $n \rightarrow \infty$ ; при этом функцию в дискретных пространствах (до предельного перехода) можно изображать с помощью таблиц.

Перейдем теперь к рассмотрению многообразия, включающего лишь  $n$  точек.

**Функция на многообразии как вектор.** Итак, функция

$$f \equiv (f_1, f_2, \dots, f_n) \quad (14.1)$$

рассматривается как вектор с комплексными компонентами ( $n$ -мерный комплексный вектор). Переход к пределу  $n \rightarrow \infty$  (причем возможен случай даже бесконечного непрерывного множества) ведет к отождествлению понятий функции и вектора в гильбертовом пространстве. Ниже будут доказаны теоремы для ограниченного числа точек  $n$ ; в ряде случаев эти теоремы могут быть обобщены. Введем понятие скалярного произведения функций

$$f \equiv (f_1, f_2, \dots, f_n) \text{ и } g \equiv (g_1, g_2, \dots, g_n):$$

$$(g|f) = \sum_{s=1}^n g_s^* f_s \quad (14.2)$$

[это аналог формулы (11.4)]. Заметим, что

$$(g|f) = (f|g)^*. \quad (14.3)$$

Модуль „вектора“  $f$  определяется соотношением

$$|f|^2 = (f|f) = \sum_{s=1}^n |f_s|^2. \quad (14.4)$$

Единичный „вектор“ представляет собой такой „вектор“, модуль которого равен единице:  $(e|e) = 1$ . (14.5)

Векторы  $f$  и  $g$  ортогональны, если  $(f|g) = 0$ , или, что то же,  $(g|f) = 0$ . (14.6)

Base of  $n$  lin. independent "vectors"

$$(7) \quad e^{(1)}, e^{(2)}, \dots, e^{(n)}$$

Condition: no linear comb. of the  $e$ 's vanishes unless all coeff are zero. Expressed by:

$$(8) \quad \det \| e^{(i)}_k \| = 0$$

Then: any  $f = \text{lin comb of } e\text{'s}$

$$(9) \quad f = \sum a_i e^{(i)}$$

Determine coefficients  $a_i$  by solving  $n$  lin. eq. with  $\det \neq 0$

Orthonormal base

where

$$(10) \quad (e^i | e^k) = \delta_{ik}$$

If (10) then

$$(11) \quad a_i = (e^i | f)$$

and identity

$$(12) \quad f = \sum_i (e^i | f) e^i$$

evident

Operators: Op.  $\sigma$  is rule to convert a "vector"  $f$  into another  $g$  (in same field)

$$(13) \quad g = \sigma f \quad (g \text{ equals } \sigma \text{ applied to } f)$$

Means: components of  $g$  are functions of components of  $f$

$$(14) \quad g_k = \sigma_k(f_1, f_2, \dots, f_n)$$

$\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n$  are  $n$  functions of  $n$  variables each defining op.  $\sigma$

Linear operators defined

as on p. 10-1 by property

$$(15) \quad \sigma(a f + b g) = a \sigma f + b \sigma g$$

$a, b$  constants  
 $f, g$  "vectors"

**Базис.** Введем базис из  $n$  линейно независимых векторов:

$$e^{(1)}, e^{(2)}, \dots, e^{(n)}. \quad (14.7)$$

Необходимым и достаточным условием линейной независимости  $n$  векторов является отсутствие какой-либо линейной комбинации их, равной нулю, когда хотя бы один коэффициент в ней отличен от нуля. Это условие можно выразить в форме

$$\det \|e_k^i\| \neq 0. \quad (14.8)$$

Любую функцию  $f$  можно представить в виде линейной комбинации базисных векторов  $e^{(i)}$ :

$$f = \sum_i a_i e^i. \quad (14.9)$$

Чтобы определить коэффициенты  $a_i$  в таком разложении, необходимо решить систему  $n$  линейных уравнений, причем детерминант, составленный из коэффициентов при неизвестных, должен быть отличен от нуля.

**Ортонормированный базис.** Базис называют ортогональным и нормированным, если

$$(e^i | e^k) = \delta_{ik}. \quad (14.10)$$

В этом случае коэффициенты разложения определяются особенно просто. Действительно, умножая левую и правую части равенства (14.9) скалярно на  $e^k$  и используя условие ортогональности (14.10), очевидно получаем:

$$(f | e^i) = a_i. \quad (14.11)$$

Таким образом, можно записать тождество

$$f = \sum_i a_i e^i = \sum_i (e^i | f) e^i. \quad (14.12)$$

**Операторы.** Оператор  $\hat{G}$  есть операция, при которой „вектор“  $f$  переходит в „вектор“  $g$ , определенный на том же многообразии:

$$g = \hat{G}f. \quad (14.13)$$

Равенство (14.13) означает, что „вектор  $g$  равен результату действия оператора  $\hat{G}$  на вектор  $f$ “. Таким образом, компоненты вектора  $g$  являются функциями от компонент вектора  $f$ :

$$g_k = \hat{G}_k(f_1, \dots, f_n). \quad (14.14)$$

Иначе говоря,  $n$  функций  $\hat{G}_1, \hat{G}_2, \dots, \hat{G}_n$ , каждая из которых зависит от  $n$  переменных, в совокупности определяют оператор  $\hat{G}$ .

**Линейные операторы.** Линейные операторы определяются (аналогично случаю, рассмотренному в лекции 10, стр. 69) свойством

$$\hat{G}(af + bg) = a\hat{G}f + b\hat{G}g, \quad (14.15)$$

где  $a$  и  $b$  — постоянные, а  $f$  и  $g$  — произвольные „векторы“.



Theorem For finite field: most general linear operator is a linear and homog. substitution

$$(16) \quad \begin{cases} g = \sigma f \\ g = a_{11}f_1 + \dots + a_{1n}f_n \quad \text{or} \\ g = a_{m1}f_1 + \dots + a_{mn}f_n \\ g = \sum_{l=1}^m a_{kl} f_l \end{cases} \quad \text{a's constants}$$

Proof: ~~What~~ evident that (16) is a linear operator. Prove (16) only <sup>type of</sup> linear operator. Assume  <sup>$\sigma$  defined by (16) is</sup> linear. Apply (19) with

$$(17) \quad \sigma(p + \varepsilon f) = \sigma p + \varepsilon \sigma f$$

$$(\sigma p)_k = \sigma_k(p_1, \dots, p_n)$$

$$(\sigma f)_k = \sigma_k(f_1, \dots, f_n)$$

$$(\sigma(p + \varepsilon f))_k = \sigma_k(p_1 + \varepsilon f_1, \dots) =$$

$$= \sigma_k(p_1, \dots) + \varepsilon \left\{ \frac{\partial \sigma_k(p)}{\partial p_1} f_1 + \frac{\partial \sigma_k(p)}{\partial p_2} f_2 + \dots \right\}$$

Find from (17)

$$(\sigma f)_k = \sum \frac{\partial \sigma_k(p)}{\partial p_i} f_i$$

Coefficients indep. of  $f$ 's, hence constants Q.E.D.

~~What if  $\sigma$  is not linear?~~

Hence forth consider only linear operators like (16)



Operator (linear) (16) represented by  $n \times n$  square matrix of coefficients

$$(18) \quad O = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} \end{vmatrix}$$

do not confuse with a determinant which is one number

Also rectangular matrices ( $n$  rows  $\times$   $m$  columns)  
(e.g.) "vector"  $f$  represented by "vert. slot" matrix

$$(19) \quad f = \begin{vmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_n \end{vmatrix} \quad (1 \times n)$$

Algebra of matrices - Def. of operations

(20) Multiply times a number  $a$  = multiply all elements by  $a$

(21) Add & subtract (possible only for ~~two~~ matrices that have all the same number of rows and all the same number of columns) = Matrix <sup>(or difference)</sup> sum is a matrix in which each element is the sum (or the difference) of the corresp. elements of the original matrices:

Example

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} a_{11}+b_{11} & a_{12}+b_{12} & a_{13}+b_{13} \\ a_{21}+b_{21} & a_{22}+b_{22} & a_{23}+b_{23} \end{vmatrix}$$

Theorems: elementary properties hold for above operations

Product of two matrices,  $A$  and  $B$

$$(22) \quad AB = C$$

**Матричное представление операторов.** Линейный оператор (14.16), записанный в виде квадратной  $n \times n$ -матрицы, составленной из коэффициентов  $a_{ik}$ , имеет вид

$$\hat{O} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \dots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \dots & a_{3n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} \quad (14.18)$$

(оператор-матрицу не следует смешивать с детерминантом той же матрицы; детерминант представляет собой *одно число*).

Можно ввести также прямоугольные матрицы ( $n$  строк  $\times$   $m$  столбцов). Например, „вектор“  $f$  можно записать в виде вертикального столбца (матрицы  $n \times 1$ )

$$f = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_n \end{pmatrix}. \quad (14.19)$$

**Алгебра матриц.** Определим основные операции над матрицами:

Умножить матрицу на число  $a$  значит умножить все ее элементы на число  $a$ :

$$a \| a_{ik} \| = \| aa_{ik} \|. \quad (14.20)$$

Сложение и вычитание (допустимое только для матриц, имеющих одинаковое число строк и одно и то же число столбцов, причем число строк и число столбцов не обязательно должны совпадать) приводит к матрице-сумме (разности), все элементы которой являются суммами (или разностями) соответствующих элементов первоначальных матриц<sup>1)</sup>:

$$\left\| \begin{matrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \end{matrix} \right\| + \left\| \begin{matrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} \end{matrix} \right\| = \left\| \begin{matrix} a_{11} + b_{11} & a_{12} + b_{12} & a_{13} + b_{13} \\ a_{21} + b_{21} & a_{22} + b_{22} & a_{23} + b_{23} \end{matrix} \right\|. \quad (14.21)$$

■ **ТЕОРЕМЫ.** Элементарные свойства операторов (14.15) совпадают со свойствами матриц.

Это означает, что алгебра матриц, определяемая операциями (14.20) и (14.21), *полностью эквивалентна* алгебре линейных операторов, определенных свойством (14.15).

<sup>1)</sup> Существует ряд теорем, касающихся свойств введенных здесь операций над матрицами (см.: Ф. Р. Гантмахер, Теория матриц, М., 1953; А. Г. Курош, Курс высшей алгебры, М., 1955; Б. Л. Вандер-Варден, Современная алгебра, М.—Л., 1947, ч. I).—Прим. ред.

defined only when A has as many columns as B has rows. Definition

$$(23) \left\{ \begin{array}{l} A = \| a_{ik} \| \quad \left. \begin{array}{l} i = 1, 2, \dots, n \\ k = 1, 2, \dots, m \end{array} \right\} \begin{array}{l} n = \text{number of rows} \\ m = \text{number of cols.} \end{array} \\ B = \| b_{jl} \| \quad \left. \begin{array}{l} j = 1, 2, \dots, m \\ l = 1, 2, \dots, p \end{array} \right\} \begin{array}{l} m = \text{no. of rows} \\ p = \text{no. of cols} \end{array} \\ \text{Product } C = AB \\ C = \| c_{rs} \| \quad \left. \begin{array}{l} r = 1, 2, \dots, n \\ s = 1, 2, \dots, p \end{array} \right\} \end{array} \right. \quad \left( \begin{array}{l} \text{Product has as} \\ \text{many rows as A} \\ \text{and as many cols} \\ \text{as B} \end{array} \right)$$

$$(24) \left\{ \begin{array}{c} \begin{array}{ccc} \xleftarrow{m} & & \xleftarrow{p} \\ \uparrow n & \boxed{A} & \times \boxed{B} \xrightarrow{p} \boxed{C} \xrightarrow{n} \\ \downarrow n & & \downarrow n \end{array} \end{array} \right.$$

Elements of product matrix obtained from rule

$$(25) \quad c_{rs} = \sum_{k=1}^m a_{rk} b_{ks}$$

(Rule of product rows  $\times$  columns).

Most important special case. Product of square matrices (of equal side  $n$ ) (like (18))  
 Their (a) product  $AB$  also is a sq. matrix of order  $n$

(b) Product in inverted order.  
 $BA$   
 can be defined and it too is sq. matrix but

Произведение двух матриц  $A$  и  $B$

$$AB = C \quad (14.22)$$

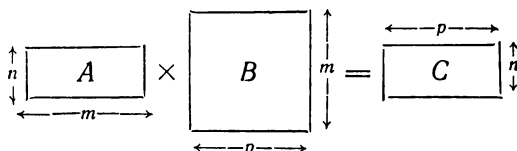
определено *только* в том случае, если матрица  $A$  имеет столько же столбцов, сколько матрица  $B$  строк. Операция умножения двух матриц определяется следующими свойствами:

$$\begin{aligned} A &= \|a_{ik}\|; \quad i=1, 2, \dots, n, \quad \text{где } n \text{ — число строк,} \\ &\quad k=1, 2, \dots, m, \quad m \text{ — число столбцов;} \\ B &= \|b_{jl}\|; \quad j=1, 2, \dots, m, \quad \text{где } m \text{ — число строк,} \\ &\quad l=1, 2, \dots, p, \quad p \text{ — число столбцов.} \end{aligned} \quad (14.23)$$

Произведение  $C = AB$  есть матрица

$$C = \|C_{rs}\|; \quad r=1, 2, \dots, n, \quad \text{где } n \text{ — число строк,} \\ s=1, 2, \dots, p, \quad p \text{ — число столбцов.}$$

Перемножение матриц  $A$  и  $B$  дает матрицу  $C$ , у которой столько строк, сколько их у матрицы  $A$ , и столько столбцов, сколько у матрицы  $B$ :



$$\begin{array}{c} \uparrow n \\ \boxed{A} \\ \leftarrow m \end{array} \times \begin{array}{c} \boxed{B} \\ \downarrow m \\ \leftarrow p \end{array} = \begin{array}{c} \leftarrow p \\ \boxed{C} \\ \downarrow n \end{array} \quad (14.24)$$

Элементы матрицы, получаемой в результате операции умножения, находят по правилу

$$C_{rs} = \sum_{k=1}^m a_{rk} b_{ks}. \quad (14.25)$$

Правило перемножения: *Строка*  $\times$  *Столбец*.

**Чрезвычайно важный частный случай.** Произведение квадратных матриц ( $n \times n$ ), подобных матрице (14.18), имеет следующие свойства:

а. Произведение  $AB$  также является квадратной матрицей порядка  $n$ .

б. Произведение матриц, взятых в обратном порядке, есть также квадратная матрица порядка  $n$ , но в общем случае произведение  $BA$  отличается от  $AB$ :

$$\begin{aligned} (AB)_{rs} &= \sum_k a_{rk} b_{ks}, \\ (BA)_{rs} &= \sum_k b_{rk} a_{ks}. \end{aligned} \quad (14.26)$$

in general different from  $AB$

$$(26) \begin{cases} (AB)_{rs} = \sum_k a_{rk} b_{ks} \\ (BA)_{rs} = \sum_k b_{rk} a_{ks} \end{cases}$$

Theorem:  
 $\det(AB) = \det(A) \times \det(B)$   
 Evident because product  
 of sq. matrices has same rule  
 as rows  $\times$  cols. prod. of determi.

(27) Definition of commutator (for sq. matrices)

$$(28) [A, B] = AB - BA$$

Unit matrix (definition)

$$(29) I = \begin{vmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{vmatrix}$$

square  
 diagonal matrix  
 with all elements  
 on main diagonal  
 $= I$

Property

$$(30) \begin{cases} IA = AI = A \\ [I, A] = 0 \end{cases}$$

direct from (25)  
 or (26)

Inverse of a matrix  $B = A^{-1}$

Defined by

$$(31) A^{-1}A = AA^{-1} = I$$

Question when does inverse matrix exist?

Answer: when  $\det(A) \neq 0$  because then  
 verify rule

$$(32) (A^{-1})_{rs} = \frac{\text{algebraic minor index } (s, r) \text{ in } A}{\text{determinant of } A}$$

Property

$$(33) \det(A^{-1}) = \frac{1}{\det(A)}$$

Property

$$(34) [A^{-1}, A] = 0$$

all this for square matrices

Вплоть до формулы (14.34) речь будет идти исключительно о квадратных матрицах.

■ **ТЕОРЕМА.** Детерминант произведения двух квадратных матриц равен произведению детерминантов этих матриц: (14.27)

$$\det(AB) = \det A \cdot \det B.$$

Доказательство этой теоремы очевидно: умножение квадратных матриц производится точно по такому же правилу, как и перемножение детерминантов (Строка  $\times$  Столбец)\*.

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ.** Коммутатор или перестановочное соотношение (допустимое лишь в случае квадратных матриц) есть форма вида

$$[A, B] = AB - BA. \quad (14.28)$$

Очевидное свойство коммутатора:

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

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ.** Единичная матрица есть матрица вида

$$1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}, \quad (14.29)$$

т. е. квадратная матрица, элементы главной диагонали в которой суть единицы, а остальные элементы — нули\*\*.

*Свойства единичной матрицы:*

$$\begin{aligned} 1A &= A1 = A, \\ [1A] &= [A1] = 0. \end{aligned} \quad (14.30)$$

Эти свойства непосредственно следуют из (14.26).

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ.** Матрица  $B$ , обратная матрице  $A$ ,

$$B = A^{-1}, \quad (14.31)$$

определяется соотношением

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

Вопрос. Когда существует обратная матрица?

Ответ. Обратная матрица существует, когда  $\det A \neq 0$ , так как лишь в этом случае реализуемо правило

$$(A^{-1})_{rs} = \frac{\text{adj}(A)_{rs}}{\det(A)_{\sigma\sigma}}. \quad (14.32)$$

Рекомендуется проверить это правило непосредственно.

*Два свойства обратных матриц:*

$$\det(A^{-1}) = \frac{1}{\det A}, \quad (14.33)$$

$$[A^{-1}, A] = 0. \quad (14.34)$$



Property: For operator matrices like (16) all definitions of algebraic operations above ~~are~~ ~~are~~ are derivable ~~and~~ from and consistent with the definitions of operator algebra given in Sect. 10. (Check one by one).

In particular define for square matrices, a matrix that is a function of another matrix by same procedure of p. 10-4

Product of a square matrix by a vertical slot matrix (like (18) + (19))

$$(35) \quad O f = g \quad \square \times \parallel = \parallel$$

$g$  is a vert. slot are given by (16) according to the matrix product rule (25) by equations (16).

(36)  $\left\{ \begin{array}{l} \underline{\text{Therefore}}: (35) \text{ can be read with identical} \\ \underline{\text{results either}}: \text{Square matrix } O \times (\text{vert slot } f) = \\ \quad \quad \quad = \text{vert slot } g \\ \underline{\text{or.}} \text{ Operator } O \text{ applied to function } f = \text{function } g \end{array} \right.$

**ВАЖНОЕ СВОЙСТВО.** Для матриц, представляющих операторы например, (14.16)], все данные выше определения алгебраических операций могут быть выведены также из алгебры операторов, изложенной в лекции 10, и согласуются с ней (рекомендуется провести проверку этого утверждения шаг за шагом для всех операций). В частности, для квадратных матриц можно установить функциональную зависимость одной матрицы от другой точно так же, как это было сделано в лекции 10 [см. равенства (10.18) и (10.21)].

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ.** Произведение квадратной матрицы на вертикальную матрицу-столбец [соответственно матриц типа (14.18) и (14.19)] определяется как

$$\hat{G}f = g; \quad \boxed{\phantom{0000}} \times \boxed{\phantom{000}} = \boxed{\phantom{000}}, \quad (14.35)$$

где  $g$ —вертикальный столбец, полученный согласно правилу умножения матриц (14.25) в соответствии с выражениями (14.16).

Следовательно, равенство (14.35) можно понимать с равным правом

|  |         |
|--|---------|
| <i>либо как правило</i>  | (14.36) |
| Квадратная матрица $\hat{G} \times$ Вертикальный столбец $f =$<br>= Вертикальный столбец $g$ , |         |
| <i>либо как правило</i>  |         |
| Оператор $\hat{G}$ , действуя на функцию $f$ , дает функцию $g$ .                              |         |

### Transposed matrix of A - definition

$$(37) \begin{cases} A^{\text{trans}} = \text{matrix } A \text{ in which rows and columns have been interchanged} \\ \text{or (equivalent)} \\ (A^{\text{trans}})_{ik} = A_{ki} \end{cases}$$

Particular cases:

$A = \text{sq. matrix (e.g. operator matrix)}$

$A^{\text{trans}}$  is obtained by changing each element with the one symmetric with respect to main diagonal

$f = \text{vert. slot (function or "vector")}$

$f^{\text{trans}} = \text{horizontal slot} = \|f_1, f_2, \dots, f_n\|$

### Conjugate matrix of A - definition

$$(38) \begin{cases} A^* = \text{matrix } A \text{ in which each element is changed into its compl. conjugate} \\ (A^*)_{ik} = A_{ik}^* \end{cases}$$

Adjoint matrix of A - ~~definition~~ (very important)

Notation for this matrix will be  $\tilde{A}$

### Definition

$$(39) \begin{cases} \tilde{A} \text{ obtained from } A \text{ by transposition and conjugation} \\ (\tilde{A})_{ik} = A_{ki}^* \end{cases}$$

Example

$$A = \begin{vmatrix} 1 & 2+i & 3 \\ 2 & 1+i & 1-i \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} \quad \tilde{A} = \begin{vmatrix} 1 & 2 & 0 \\ 2-i & 1-i & 0 \\ 3 & 1+i & 1 \end{vmatrix}$$

### Транспонированная матрица.

Транспонированная матрица, соответствующая матрице  $A$ , будет обозначаться как  $\tilde{A}$ .

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ.**  $\tilde{A}$  — Матрица  $A$ , в которой строки и столбцы поменялись ролями, или (эквивалентно)

$$(\tilde{A})_{ik} = A_{ki}.$$

(14.37)

**Частные случаи.** Пусть  $A$  — квадратная матрица (например, матрица-оператор); тогда  $\tilde{A}$  получается путем замены каждого элемента матрицы  $A$  на элемент, расположенный *симметрично* данному относительно главной диагонали.

Пусть  $f$  — вертикальный столбец (функция или „вектор“); тогда  $\tilde{f}$  есть горизонтальная строка  $\|f_1, f_2, \dots, f_n\|$ .

**Матрица, комплексно сопряженная данной.** Такая матрица будет обозначаться как  $A^*$ .

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ.** Матрица  $A^*$  есть комплексно сопряженная матрице  $A$ , если каждый ее элемент — комплексно сопряженное соответствующего элемента матрицы  $A$ :

$$(A^*)_{ik} = A_{ik}^*.$$

(14.38)

**Матрица, эрмитово сопряженная данной.** Операция эрмитова сопряжения играет чрезвычайно важную роль в квантовой механике. Матрицу, эрмитово сопряженную матрице  $A$ , мы будем обозначать как  $A^+$ .

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ.** Матрица  $A^+$  получается из  $A$  путем последовательного применения к матрице  $A$  операций транспонирования и комплексного сопряжения:

$$(A^+)_{ik} = A_{ki}^*.$$

(14.39)

Пример 1:

$$A = \begin{vmatrix} 1 & 2+i & 3 \\ 2 & 1+i & 1-i \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}, \quad A^+ = \begin{vmatrix} 1 & 2 & 0 \\ 2-i & 1-i & 0 \\ 3 & 1+i & 1 \end{vmatrix}.$$

Пример 2:

$$f = \begin{vmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \end{vmatrix}, \quad f^+ = \|f_1^*, f_2^*, f_3^*\|.$$

(14.40)

Other example

$$(40) \quad f = \begin{vmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \end{vmatrix} \quad \tilde{f} = |f_1^* \ f_2^* \ f_3^*|$$

$f$  &  $g$  are "vertical slots" i.e. functions.

$\tilde{g}f$  is then a matrix of one row and one column (See (23) & (24)) that is a number

Find

$$(41) \quad \tilde{g}f = \sum_1^n g_s^* f_s = (g|f)$$

$A, B, C, \dots, K, L$  are matrices with such numbers of rows and columns that product matrix

$$(42) \quad \begin{cases} P = ABC \dots KL \text{ can be defined} \\ \text{Needed: No. of rows of each matrix} = \text{no. of columns of successive matrix} \\ \text{Then } \tilde{P} = \tilde{L} \tilde{K} \dots \tilde{C} \tilde{B} \tilde{A} \end{cases}$$

That is, The adjoint of a matrix product is the product of the adjoint matrices taken in opposite order. Proof evident from definitions.

For matrix  $\tilde{g}f$  of one row and one col. of (41).

adjoint is = for this case to complex conjugate

$$(43) \quad \widetilde{\tilde{g}f} = (\tilde{g}f)^* = \tilde{f}g = (f|g)$$

**Свойства эрмитово сопряженных матриц.** Пусть  $f$  и  $g$  — „вертикальные столбцы“, т. е. функции. Тогда [см. определение (14.23) — (14.25)]

Произведение  $g^+f$  есть матрица с одной строкой и одним столбцом, т. е. просто число:

$$g^+f = \sum_1^n g_s^* f_s = (g | f). \quad (14.41)$$

Пусть  $A, B, C, \dots, K, L$  — матрицы с таким (вообще говоря, неодинаковым для разных матриц) числом строк и столбцов, что может быть определено их произведение, т. е. матрица

$$P = A \cdot B \cdot C \dots K \cdot L.$$

Чтобы такое произведение существовало, необходимо, чтобы число строк у матрицы, получаемой при каждом шаге перемножения, равнялось числу столбцов следующей матрицы.

*Важное свойство* произведения (14.42a) состоит в том, что

$$P^+ = L^+ \cdot K^+ \dots C^+ \cdot B^+ \cdot A^+, \quad (14.42)$$

т. е. эрмитово сопряженное произведение матриц есть произведение в обратном порядке эрмитово сопряженных матриц. Справедливость этого утверждения очевидным образом вытекает из приведенных определений операций.

В случае матрицы  $g^+f$ , состоящей из одной строки и одного столбца (14.41), эрмитово сопряжение *совпадает* с обычным комплексным сопряжением:

$$(g^+f)^+ = (g^+f)^* = f^+g = (f | g). \quad (14.43)$$

## 15- Hermitian matrices - Eigenvalue problems.

- (1) A square  $(n \times n)$  matrix is Hermitian when each of its elements is compl. conjugate of the one symmetric to it with respect to main diagonal. If  $A$  is hermitian
- $$a_{ik} = a_{ki}^*$$

- (2) Therefore a hermitian matrix is equal to its adjoint and vice versa (self adjoint)
- $$\tilde{A} = A \quad \text{if } A \text{ is hermitian}$$

All matrices

$$\begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix} \quad \begin{vmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{vmatrix} \quad \begin{vmatrix} 0 & -i & e^{i\alpha} \\ i & 0 & e^{-i\beta} \\ e^{-i\alpha} & e^{i\beta} & 3 \end{vmatrix} \quad \begin{vmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{vmatrix}$$

are hermitian.

- (3) Observe: the diagonal elements of a hermitian matrix are real numbers

- (4) Theorem (evident from definitions). If  $A, B, C, \dots$  are hermitian matrices and  $a, b, c, \dots$  are real numbers, then
- $$aA + bB + cC + \dots \text{ is hermitian}$$

- (5) Theorem - If  $A$  is hermitian all its powers are hermitian. That is
- $$A^3 = \tilde{A}^3$$

Proof:  $\tilde{A^3} = \widetilde{A A A} = \tilde{A} \tilde{A} \tilde{A} = (\tilde{A})^3 = A^3$

- (6) Theorem - If  $A$  is hermitian its determinant is real.
- $$\det(A) = \text{real number}$$

Proof:  $\det(A) = \det(\tilde{A}^{\text{trans}}) = [\det(\tilde{A})]^* = [\det(A)]^*$

## ЭРМИТОВЫ МАТРИЦЫ. ЗАДАЧА НА СОБСТВЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ

15

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ.** Квадратную  $(n \times n)$ -матрицу называют *эрмитовой* (или *самосопряженной*), если каждый из ее элементов комплексно сопряжен элементу, симметричному данному относительно главной диагонали; иначе говоря матрица  $A$  эрмитова, если

$$a_{ik} = a_{ki}^*.$$

Отсюда: эрмитова матрица тождественно равна своей эрмитово сопряженной, и наоборот (самосопряженность):

$$A \text{ (эрмитова)} = A^+. \quad (15.2)$$

Например, все следующие матрицы:

$$\begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix}, \quad \begin{vmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{vmatrix}, \quad \begin{vmatrix} 0 & -i e^{i\alpha} \\ i & 0 e^{-i\beta} \\ e^{-i\alpha} & e^{i\beta} & 3 \end{vmatrix}, \quad \begin{vmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{vmatrix}$$

— эрмитовы (самосопряженные). Следует заметить, что

*Диагональные элементы эрмитовых матриц есть либо действительные числа, либо нули:*

$$a_{ii} = \text{Действительное число (или нуль).} \quad (15.3)$$

Из предыдущих определений очевидным образом вытекает:

■ **ТЕОРЕМА.** Если  $A, B, C, \dots$  — эрмитовы матрицы и если  $a, b, c, \dots$  — действительные числа, то комбинация

$$aA + bB + cC + \dots \quad (15.4)$$

также есть эрмитова матрица.

■ **ТЕОРЕМА.** Если матрица  $A$  эрмитова, то возведение ее в любую степень дает эрмитову матрицу:

$$A^s = (A^s)^+. \quad (15.5)$$

**Доказательство.**

$$(A^s)^+ = (A A \dots A)^+ = A^+ \dots A^+ A^+ = (A^+)^s = A^s.$$

■ **ТЕОРЕМА.** Если матрица  $A$  эрмитова, то

$$\det A = \text{Действительное число.} \quad (15.6)$$

**Доказательство.**

$$\det A = \det (A^+) = [\det (A^+)]^* = [\det (A)]^*.$$



- (7) Theorem - If  $A$  is hermitian, so is  $A^{-1}$
- Proof:  $1 = AA^{-1} = \widetilde{A^{-1}} \widetilde{A} = \widetilde{A^{-1}} A$  therefore
- $\nearrow$  because 1 is hermitian  $\quad \nwarrow$  because  $A$  is hermitian
- $\rightarrow A^{-1} = \widetilde{A^{-1}}$  ~~also~~
- because its product ~~with~~ with  $A$  is  $= 1$

From these theorems follows an important theorem.

- (8) Important theorem. If  $F(x)$  is a real function of the real variable  $x$  such that for it one can define a matrix  $F(A)$  which is a function of a matrix  $A$  according to p. 14-7 and p. 10-4. Then if  $A$  is hermitian  $F(A)$  is hermitian because the series expansion of  $F(x)$  has real coefficients and (5) (4).

- (9) If  $A, B$  are hermitian in general their product  $AB$  is not hermitian but symmetrized product  $\frac{1}{2}(AB+BA)$  is hermitian

Proof  $\frac{1}{2}(AB+BA) = \frac{1}{2}(\widetilde{B} \widetilde{A} + \widetilde{A} \widetilde{B}) = \frac{1}{2}(BA+AB) = \frac{1}{2}(AB+BA)$

- (10) This permits in many cases to define a matrix that is a function  $F(A, B)$  of two (or more) matrices in such a way that, If  $F$  is the symbol of a real function of its variables and  $A, B$  are hermitian,  $F(A, B)$  is hermitian.

■ **ТЕОРЕМА.** Если матрица  $A$  эрмитова, то обратная ей матрица  $A^{-1}$  также эрмитова: (15.7)

$$A^{-1} = (A^{-1})^+.$$

**Доказательство.**  $1 = AA^{-1} = (A^+)^{-1} A^+ = (A)^{-1} A$ , так как  $A$  и  $1$  — эрмитовы матрицы,  $(A^{-1})^+$  должна быть также эрмитовой.

Из этих теорем вытекает следующая

■ **ВАЖНАЯ ТЕОРЕМА.** Пусть  $F(x)$  — вещественная функция вещественной переменной  $x$ , такая, что ей можно сопоставить матрицу  $F(A)$ , т. е. определенную функцию от матрицы  $A$  в соответствии с (10.18). Тогда если матрица  $A$  эрмитова, то и  $F(A)$  эрмитова: (15.8)

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

**Доказательство.** В самом деле, разложение функции  $F(x)$  в ряд содержит лишь действительные коэффициенты и справедливы теоремы (15.5) и (15.4):  $F(A)^+ = F(A)$ .

Существенны следующие

*Два свойства эрмитовых матриц:*

Если матрицы  $A$  и  $B$  эрмитовы, то их произведение  $AB$  в общем случае не является эрмитовым, но симметризованное произведение эрмитово: (15.9)

$$C = \frac{1}{2} (AB + BA) = C^+.$$

**Доказательство.**

$$C^+ = \frac{1}{2} (B^+ A^+ + A^+ B^+) = \frac{1}{2} (BA + AB) = C.$$

Свойство (15.9) позволяет во многих случаях определить матрицу  $F(A, B)$ , являющуюся функцией двух (или более) матриц, таким образом, что:

Если символ  $F$  означает действительную функцию своих переменных и если матрицы  $A$  и  $B$  эрмитовы, то (15.10)

$$F(A, B) \text{ — эрмитова матрица.}$$

Такую матричную функцию  $F(A, B)$  особенно легко определить, если эрмитовы матрицы  $A$  и  $B$  коммутируют: основанием для этого служит следующая

No difficulty when  $A, B$  commute because

- (11) { Theorem (E)  $A, B$  are hermi; (E)  $AB=BA$   
 (C)  $P=ABABBB$  or similar products of  ~~$A, B$~~   
 factors  $A$  or  $B$  is hermitian.  
 (Proof: Take adjoint of  $P$ , then reorder factors  
 using assumptions to prove  $\tilde{P}=P$ )

- (12) { Property - Def. of hermitian operators (11-(a)) is  
 consistent with def (1) of herm. matrix.  
 Because (E)  $A=\tilde{A}$  (C)  
 $(g|Af) = \tilde{g} Af = \tilde{g} \tilde{A} f = \tilde{A} g f = (Ag|f)$

Eigenvalue problems for hermitian matrix operators

- (13) { (E)  $A=\tilde{A}$  Problem  $A\psi = a\psi$  }  $a = \text{eigenvalue}$   
 $\Rightarrow$   
 $a_{11}\psi_1 + a_{12}\psi_2 + \dots + a_{1n}\psi_n = a\psi_1$   
 $a_{21}\psi_1 + a_{22}\psi_2 + \dots + a_{2n}\psi_n = a\psi_2$   
 $\vdots$   
 $a_{n1}\psi_1 + a_{n2}\psi_2 + \dots + a_{nn}\psi_n = a\psi_n$

Solvable when

(14) 
$$\begin{vmatrix} a_{11}-a & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22}-a & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn}-a \end{vmatrix} = 0$$

this is determinant  
(not matrix)

This is algebraic equation of  $n^{\text{th}}$  degree  
 (Secular equation). It has  $n$  roots, some  
 of them, however may coincide in case of degeneracy



eigenvalues  
 $a_1, a_2, \dots, a_n$   
 corresponding  
 $\psi^{(1)}, \psi^{(2)}, \dots, \psi^{(n)}$

- (15) All roots are real (Prove like (11-8))  
 Therefore, A hermitian matrix operator has  $n$  real eigenvalues; some of them may coincide
- (16) Theorem. Eigenf. corresponding to different e.v.'s are orthogonal (Proof like (11-9)).
- (17) Theorem. If the  $n$  roots of sec. eq. are all single then for each eigenvalue  $a_i$  there is only one  $\psi_i$  except for constant factor.  
 (Proof given in algebra of determinants)
- (18) Rule for constructing  $\psi_i$ . Substitute  $a_i$  for  $a$  in secular determinant (14). Then the  $n$  algebraic minors of any one row of determinant are proportional to the components of vector  $\psi^{(i)}$

Problem: construct the eigenvectors of

$$A = \begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} \text{ and normalize them to 1}$$

Look for  $\begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix} \quad \begin{vmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{vmatrix} \quad \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix}$

- (19) Case of degeneracy. An e.v. that is a solution of sec. eq. multiple of order  $q$  has  $q$  linearly independent e.f.'s - (This follows from algebra of determinants) - They can be chosen orthogonal and normalized to one.

Discuss geometrical analogy to ellipsoid

Следовательно, эрмитова матрица-оператор имеет  $n$  действительных собственных значений, причем некоторые из них могут совпадать между собой. Собственным значениям  $a_1, a_2, \dots, a_n$  соответствуют собственные функции  $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n$ . (15.15)

■ **ТЕОРЕМА.** Собственные функции, соответствующие различным собственным значениям, ортогональны:  
Если  $a_i \neq a_k$ , то  $(\psi^{(i)} | \psi^{(k)}) = 0$ . (15.16)

Доказательство аналогично доказательству теоремы (11.9).

■ **ТЕОРЕМА.** Если все  $n$  корней секулярного уравнения обладают кратностью 1, то каждому собственному значению  $a_s$  соответствует единственная собственная функция  $\psi_s$  (с точностью до постоянного множителя). (15.17)

Доказательство этой теоремы дается в алгебре детерминантов.

**ПРАВИЛО** построения  $\psi_s$ . Подставим в секулярный детерминант (15.14)  $a_s$  вместо  $a$ . Тогда  $n$  алгебраических дополнений любой строки детерминанта будут пропорциональны компонентам вектора  $\psi^{(s)}$ . (15.18)

*Задачи.*

1. Построить собственные векторы матрицы-оператора

$$A = \begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{vmatrix}$$

и нормировать их на единицу.

2. Проделать то же самое для матриц

$$\begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}, \quad \begin{vmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{vmatrix}, \quad \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix}.$$

**Случай вырождения.** Рассмотрим вопрос о вырождении в случае эрмитовых матриц-операторов.

Собственное значение, являющееся решением секулярного уравнения и обладающее кратностью  $q$ , соответствует  $q$  линейно независимым собственным функциям. Этот вывод следует из алгебры детерминантов. Такие собственные функции могут быть выбраны ортогональными и нормированными на единицу. (15.19)

*Полезно обсудить* геометрическую аналогию (с эллипсоидом).

(20) Choose orthonormal set  $\psi^{(1)} \psi^{(2)} \dots \psi^{(n)}$ ;  $\widetilde{\psi^{(i)}} \psi^{(j)} = \delta_{ij}$   
as basis for vector space.

(21) Development  
$$f = \sum_j (\psi^{(j)} | f) \psi^{(j)}$$

This "proves" quasitheorem (11-p.4) also prove easily all other quasi theorems of sect 11, reducing them to simple algebraic properties.

Analogy of formula (11B-23). Put in (21)

$f_p = \delta_{p\sigma}$  ( $\sigma = \text{fixed index}$ ,  $p = \text{variable index}$ ). Then  $f = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$   
 $(\psi^{(s)} | f_p) = \psi_{\sigma}^{(s)*}$ . Therefore

$$(22) \quad \delta_{p\sigma} = \sum_s \psi_{\sigma}^{(s)*} \psi_p^{(s)}$$

Alternate writing of above

$$(23) \quad \sum_s \psi^{(s)} \widetilde{\psi^{(s)}} = 1 \text{ (identity } n \times n \text{ matrix)}$$

Observe: as matrix operator is defined by giving its eigenvectors and the corresponding eigenvalues. (Because, then)

$$(24) \quad Af = \sum_s a_s (\psi^{(s)} | f) \psi^{(s)} \text{ is completely defined}$$

Выберем ортонормированную систему собственных функций

$$\psi^{(1)}, \psi^{(2)}, \dots, \psi^{(n)}; \psi^{+(r)} \psi^{(s)} = \delta_{rs} \quad (15.20)$$

в качестве *базиса* векторного пространства. Разложим произвольную функцию  $f$  в ряд по этим собственным функциям:

$$f = \sum_s (\psi^{(s)} | f) \psi^{(s)}. \quad (15.21)$$

В результате мы получили уже известное выражение (11.14) или (11.15), „доказав“ тем самым соответствующую квазитеорему лекции 11; все остальные квазитеоремы этой лекции могут быть также просто доказаны путем сведения их к простым алгебраическим свойствам матриц.

Построим теперь аналог формулы (11.23) для случая дискретных собственных значений. Положим в (15.21)

$$f \rightarrow f_q = \delta_{q\sigma},$$

где  $\sigma$  — фиксированный, а  $q$  — переменный индексы:

$$f_q = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ \cdot \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad \text{так что } (\psi^{(s)} | f) = \psi_{\sigma}^{*(s)}.$$

$\leftarrow \sigma$

Следовательно,

$$\delta_{q\sigma} = \sum_s \psi_{\sigma}^{*(s)} \psi_q^{(s)}. \quad (15.22)$$

Иначе можно записать:

$$\sum_s \psi^{(s)} \psi^{+(s)} = 1, \quad (15.23)$$

где  $1$  — единичная  $n \times n$ -матрица (матрица тождественного преобразования).

Вывод. Матрица-оператор полностью определяется заданием своих собственных векторов и соответствующих собственных значений. Действительно, при этом правая сторона уравнения

$$Af = \sum_s a_s (\psi^{(s)} | f) \psi^{(s)} \quad (15.24)$$

определяется однозначно, что и соответствует определению оператора.



### 16- Unitary matrices - Transformations

(E) A hermitian, B hermitian

(1)  $\begin{pmatrix} \psi^{(1)} & \dots & \psi^{(n)} \\ a_1 & \dots & a_n \end{pmatrix}$  are e.f.'s and e.v.'s of A  
orthonormal set

(2)  $\begin{pmatrix} \varphi^{(1)} & \dots & \varphi^{(n)} \\ b_1 & \dots & b_n \end{pmatrix}$  for B  
also orthonormal

Problem: find matrix T (transformation) that converts  $\varphi^{(1)}$  into  $\psi^{(1)}$

(3)  $T \varphi^{(1)} = \psi^{(1)}$

Solution  $T \varphi^{(1)} \widehat{\varphi}^{(1)} = \psi^{(1)} \widehat{\varphi}^{(1)}$

Sum over 1 and use (14-23)

(4)  $T = \sum_{j=1}^n \psi^{(j)} \widehat{\varphi}^{(j)}$

Analogy with transformation of coordinates

Definition. Unitary matrix  $\tilde{Q}$  has defining property

(5)  $\tilde{Q} Q = 1 \quad \text{or} \quad (\tilde{Q} = Q^{-1})$

(6)  $\left\{ \begin{array}{l} \text{Theorem. } T \text{ is unitary: Proof:} \\ \tilde{T} = \sum \psi^{(j)} \widehat{\varphi}^{(j)} = \sum \varphi^{(j)} \widehat{\psi}^{(j)} \quad \text{then using (15-20) and (15-23)} \\ \tilde{T} T = \sum_{j\sigma} \varphi^{(j)} \widehat{\psi}^{(j)} \varphi^{(\sigma)} \widehat{\varphi}^{(\sigma)} = \sum_{j\sigma} \varphi^{(j)} \delta_{j\sigma} \widehat{\varphi}^{(j)} = \sum_j \varphi^{(j)} \widehat{\varphi}^{(j)} = 1 \end{array} \right.$

Пусть  $A$  и  $B$  — эрмитовы операторы, а

$$\left. \begin{array}{l} \psi^{(1)}, \psi^{(2)}, \dots, \psi^{(n)} \\ a_1, a_2, \dots, a_n \end{array} \right\} \begin{array}{l} \text{ортонормированная система соб-} \\ \text{ственных функций и собственные} \\ \text{значения оператора } A \end{array} \quad (16.1)$$

и

$$\left. \begin{array}{l} \varphi^{(1)}, \varphi^{(2)}, \dots, \varphi^{(n)} \\ b_1, b_2, \dots, b_n \end{array} \right\} \begin{array}{l} \text{ортонормированная система соб-} \\ \text{ственных функций и собственные} \\ \text{значения оператора } B. \end{array} \quad (16.2)$$

**задача.** Требуется найти матрицу преобразования  $T$ , которая переводила бы  $\varphi^{(s)}$  в  $\psi^{(s)}$ :

$$T\varphi^{(s)} = \psi^{(s)}. \quad (16.3)$$

**Решение.** Умножим это равенство справа на  $\varphi^{+(s)}$ :

$$T\varphi^{(s)}\varphi^{+(s)} = \psi^{(s)}\varphi^{+(s)}.$$

Суммируя по  $s$  и используя свойство (15.23), получаем:

$$T = \sum_s \psi^{(s)}\varphi^{+(s)}. \quad (16.4)$$

Здесь обнаруживается аналогия с преобразованиями координат.

Преобразованию векторов при переходе от одной системы координат к другой можно придать матричную форму. Как станет ясно в дальнейшем, при таких преобразованиях особенно важную роль играют преобразования, описываемые унитарными матрицами.

**определение.** Матрицу  $Q$  называют унитарной, если она имеет следующее определяющее свойство:

$$Q^+Q = 1, \text{ или } Q^+ = Q^{-1}. \quad (16.5)$$

■ **ТЕОРЕМА.** Матрица  $T$  унитарна:

$$T^+T = 1. \quad (16.6)$$

**Доказательство.** Производя эрмитово сопряжение, получаем:

$$T^+ = (\sum \psi^{(s)}\varphi^{+(s)})^+ = \sum \varphi^{(s)}\psi^{+(s)},$$

а на основании (15.20) и (15.23) находим окончательно:

$$T^+T = \sum_{s, \sigma} \varphi^{(s)}\psi^{+(s)}\psi^{(\sigma)}\varphi^{+(\sigma)} = \sum_{s, \sigma} \varphi^{(s)}\delta_{s\sigma}\varphi^{+(\sigma)} = \sum_s \varphi^{(s)}\varphi^{+(s)} = 1.$$

(7) { Theorem (E)  $T$  unitary

(7) { (2)  $(Tf|Tg) = (f|g)$

Proof:  $(Tf|Tg) = \widetilde{Tf} Tg = \widetilde{f} \widetilde{T} Tg = \widetilde{f}g = (f|g)$

(8) { Theorem (E)  $T$  unitary (E)  $\psi^{(s)}$  an orthonormal set of  $n$  vectors

(8) { (2)  $T\psi^{(s)} = \varphi^{(s)}$  also form an orthonormal set (evident from (7))

Therefore: The unitary transformations transform an orthonormal base into another

(Orthornormal set  $e^{(1)} = \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{vmatrix}$   $e^{(2)} = \begin{vmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{vmatrix}$   $e^{(n)} = \begin{vmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{vmatrix}$ )

(9) {  $T e^{(s)} = \psi^{(s)}$  ~~by~~ by unitary matrix

$T = \sum_s \psi^{(s)} \widetilde{e^{(s)}} = \begin{vmatrix} \psi_1^{(1)} & \psi_1^{(2)} & \dots & \psi_1^{(n)} \\ \psi_2^{(1)} & \psi_2^{(2)} & \dots & \psi_2^{(n)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_n^{(1)} & \psi_n^{(2)} & \dots & \psi_n^{(n)} \end{vmatrix}$  or  $T_{ik} = \psi_i^{(k)}$

Transformations of coordinates of "vector"  $f$

(10) {  $f \text{ in } \mathcal{E} = \begin{vmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{vmatrix} = \sum x_i e^{(i)}$  to new "axes"  $\psi^{(k)}$

$f \text{ in } \mathcal{E} = \sum x'_k \psi^{(k)}$

$x_i$  "old" coord. of  $x$   
 $x'_k$  "new" " "  $x$

■ ТЕОРЕМА. Если матрица  $T$  унитарна, то (16.7)

$$(Tf | Tg) = (f | g).$$

Доказательство.

$$(Tf | Tg) = (Tf)^+ Tg = f^+ T^+ Tg = f^+ g = (f | g).$$

■ ТЕОРЕМА. Если матрица  $T$  унитарна, а  $\psi^{(s)}$  — ортонормированная система  $n$  векторов, то результат преобразования  $T\psi^{(s)} = \varphi^{(s)}$  также дает ортонормированную систему векторов. (16.8)

Доказательство очевидным образом следует из теоремы (16.7).

Вывод. Унитарные преобразования переводят один ортонормированный базис в другой.

Пример 1. Преобразование ортонормированной системы функций-„векторов“  $e^{(s)}$

$$e^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad e^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \dots, \quad e^{(n)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} \quad (16.9)$$

с помощью унитарной матрицы  $T$  дает другую систему ортонормированных „векторов“  $\psi^{(s)}$ :

$$Te^{(s)} = \psi^{(s)},$$

$$T = \sum_s \psi^{(s)} e^{+ (s)} = \begin{pmatrix} \psi_1^{(1)} & \psi_1^{(2)} & \psi_1^{(3)} & \dots & \psi_1^{(n)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_n^{(1)} & \psi_n^{(2)} & \psi_n^{(3)} & \dots & \psi_n^{(n)} \end{pmatrix} \quad \text{или} \quad T_{ik} = \psi_i^{(k)}$$

Пример 2. Преобразование координат „вектора“  $f$

$$f = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \sum_i x_i e^{(i)} \quad (16.10)$$

к новым „осям“  $\psi^{(k)}$

$$f = \sum_k x'_k \psi^{(k)},$$

где  $x_i$  — „старые“, а  $x'_k$  — „новые“ координаты „вектора“  $f$ , производится с помощью матрицы  $T$ .

Relationship between new and old coord.

~~Let  $\psi^{(k)}$  be the new basis vectors~~ use (?)

$$(11) \left\{ \begin{aligned} x'_k &= \tilde{\psi}^k f = \sum_j \psi_j^{(k)*} x_j = (\tilde{T})_{ks} x_s \\ \text{or in matrix notation for vertical slots} \\ x &= \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \end{bmatrix} \quad x' = \begin{bmatrix} x'_1 \\ x'_2 \\ \vdots \end{bmatrix} \quad \begin{aligned} x' &= \tilde{T} x = T^{-1} x \\ x &= T x' \end{aligned} \end{aligned} \right.$$

Observe: Transformation of the coordinates is the inverse of the transformation of the base & vectors

Transformation of a matrix operator  $A$   
Question. The matrix operator  $A$  defines a linear substit. on the coord.  $x$  of a vector. What is the corresponding linear substit. on the coordinates  $x'$  of same vector?

Answer: from (11)  $x = T x'$ ; from definition of question above

$$\begin{aligned} A x &= T A x' \\ \parallel \\ A T x' &\rightarrow T^{-1} A T x' = A' x' \\ &\text{for an arbitrary } x'. \\ &\text{Therefore} \end{aligned}$$

$$(12) \left\{ \begin{aligned} &\boxed{A' = T^{-1} A T = \tilde{T} A T} \\ \text{or inverse} & \\ A &= T A' T^{-1} = T A' \tilde{T} \end{aligned} \right.$$

Зная, таким образом, связь между базисами, найдем теперь связь между „старыми“ и „новыми“ координатами:

$$x'_k = \psi_k^+ f = \sum_s \psi_s^{*(k)} x_s = (T^+)_{ks} x_s \quad (16.11a)$$

[где в последнем шаге использована формула (16.9)]. В матричной записи для вертикальных столбцов,

$$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad x' = \begin{pmatrix} x'_1 \\ x'_2 \\ \vdots \end{pmatrix},$$

это соотношение принимает вид

$$x' = T^+ x = T^{-1} x, \quad x = T x'. \quad (16.11b)$$

**Вывод.** Преобразование координат описывается той же матрицей, что и *обратное* преобразование базисных векторов.

#### Преобразование, индуцируемое матрицей-оператором $\hat{A}$ .

**Вопрос.** Если матричный оператор  $\hat{A}$  определяет некоторое линейное преобразование координат  $x$  некоторого вектора, то какое соответствующее линейное преобразование  $\hat{A}'$  действует на координаты  $x'$  этого же вектора в другой координатной системе?

**Ответ.** Пользуясь преобразованием (16.11b), заметим, что

$$x = T x', \quad \hat{A} x = \hat{A} T x' = T \hat{A}' x'.$$

Отсюда:

$$T^{-1} \hat{A} T x' = \hat{A}' x'$$

для произвольных значений  $x'$ . Следовательно,

$$\hat{A}' = T^{-1} \hat{A} T = T^+ \hat{A} T$$

и наоборот,

$$\hat{A} = T \hat{A}' T^{-1} = T \hat{A}' T^+.$$

(16.12)

Таким образом, матрица  $T$  преобразует оператор  $\hat{A}$  в оператор  $\hat{A}'$ .

~~Matrix~~  $A$  is transformed into  $A'$  by  $T$

Properties

(E)

$$A' = T^{-1}AT$$

$$B' = T^{-1}BT$$

Then

$$A' \pm B' = T^{-1}(A \pm B)T$$

$$A'B' = T^{-1}(AB)T$$

$$A'^n = T^{-1}A^nT$$

$$F(A') = T^{-1}F(A)T \quad \text{also } I = T^{-1}IT$$

and similar properties. Verify directly

The algebra of  $A', B', \dots$  is identical to the algebra of  $A, B, \dots$

(14) { Also:  $A'$  has the same e.v.'s of  $A$ . And its e.f.'s are

$$\psi^{(s)} = T^{-1}\tilde{\psi}^{(s)} = \tilde{T}\psi^{(s)}$$

(check)

$$\text{or } T\psi^{(s)} = \tilde{\psi}^{(s)}$$

(15) { Trace or Spur of a matrix  $A$  (sq. matrix)  

$$Sp(A) = \sum_i^n A_{ii} \quad \left( \begin{array}{l} \text{sum of elements of} \\ \text{main diagonal} \end{array} \right)$$

(16) { Theorem  $A$  &  $A'$  have same spur  

$$Sp A' = Sp \tilde{T}AT = \sum_{ik} (\tilde{T})_{ik} A_{kz} T_{zi} =$$

$$= \sum_{kz} A_{kz} (T\tilde{T})_{zk} = \sum A_{kz} \delta_{kz} = \sum A_{kk} = Sp A$$

**Свойства преобразований.** Рассмотрим ряд свойств матриц-операторов широко используемых в квантовомеханических расчетах.

$$1. \text{ Если } \hat{A}' = T^{-1} \hat{A} T, \quad \hat{B}' = T^{-1} \hat{B} T,$$

то

$$\begin{aligned} \hat{A}' \pm \hat{B}' &= T^{-1} (\hat{A} \pm \hat{B}) T, \quad \hat{A}' \hat{B}' = T^{-1} (\hat{A} \hat{B}) T, \\ \hat{A}'^n &= T^{-1} \hat{A}^n T, \quad F(\hat{A}') = T^{-1} F(\hat{A}) T, \\ 1 &= T^{-1} 1 T \end{aligned} \quad (16.13)$$

и т. д.

Доказательство этих свойств производится путем непосредственной проверки.

2. Алгебра операторов  $\hat{A}'$ ,  $\hat{B}'$ , ... совпадает с алгеброй операторов  $\hat{A}$ ,  $\hat{B}$ , ...

3. Оператору  $\hat{A}'$  соответствуют те же самые собственные значения, что и оператору  $\hat{A}$ , а их собственные функции связаны между собой следующим образом:

$$\psi'^{(s)} = T^{-1} \psi^{(s)} = T^+ \psi^{(s)}, \quad (16.14)$$

или

$$T \psi'^{(s)} = \psi^{(s)}.$$

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ.** След, или шпур, квадратной матрицы  $A$  есть

$$\text{Sp}(A) = \sum_{s=1}^n A_{ss}, \quad (16.15)$$

т. е. равен сумме элементов, стоящих на главной диагонали.

Существенно, что шпур имеет смысл только для квадратных матриц.

Полезно знать следующее свойство шпура: циклическая перестановка матриц в произведении под знаком Sp оставляет значение шпура этого произведения неизменным:

$$\text{Sp}(AB \dots YZ) = \text{Sp}(ZAB \dots Y).$$

■ **ТЕОРЕМА.** Шпуры матриц  $A$  и  $A'$  совпадают:

$$\begin{aligned} \text{Sp}(A') &= \text{Sp}(T^+ A T) = \sum_{ikr} (T_{ik}^+ A_{kr} T_{ri}) = \sum_{kr} A_{kr} (T T^+)_{rk} = \\ &= \sum_{kr} A_{kr} \delta_{kr} = \sum A_{kk} = \text{Sp}(A). \end{aligned} \quad (16.16)$$



A hermitian, T unitary  $A' = \tilde{T}AT$

Auswer

$$T = \sum_j \psi^{(j)} e^{\tilde{\gamma}^{(j)}} \quad (\text{see (9)})$$

Because

$$(17) \quad A' = \tilde{T} A T = \sum_{\sigma} e^{\sigma} \underbrace{\tilde{\psi}^{\sigma} A \psi^{\sigma}}_{a_{\sigma} \psi^{\sigma}} e^{\sigma} = \sum_{\sigma} a_{\sigma} e^{\sigma} \underbrace{\tilde{\psi}^{\sigma} \psi^{\sigma}}_{\delta_{\sigma}} e^{\sigma}$$

This means: A is made diagonal by taking its e.f.'s as the ~~basis~~<sup>bases</sup>. I base of new co ordinates

$$\rightarrow = \sum_j a_j e^j \tilde{e}^j = \sum_j a_j \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix} \tilde{e}^j = \begin{vmatrix} a_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a_m \end{vmatrix}$$

$A$  is transformed in a diagonal matrix  $A'$  with the  $e.v$ 's of on main diagonal.

$T$  transforms the original base  $e^{(3)}$  into  $\eta^{(3)}$

### Theorem

(18) } Theorem  $\text{Spur}(A) = \sum a_j$

evident from previous and (16)

New definition of a matrix  $F(A)$ . Two steps:

(ii) one ~~the~~ Convert  $A$  to diagonal  $A'$  as in (17)

(19) two  $F(A') = \begin{vmatrix} F(a_1) & 0 & 0 & - \\ 0 & F(a_2) & 0 & - \\ 0 & 0 & 0 & - \\ 0 & 0 & 0 & - \end{vmatrix}$   $A' = TAT$   
 $A = TA'T \approx$

(19) two  $F(A') = \begin{vmatrix} F(a_1) & 0 & 0 & - \\ 0 & F(a_2) & 0 & - \\ 0 & 0 & 0 & - \\ 0 & 0 & 0 & - \end{vmatrix}$   $A' = TAT$   
 $A = TA'T \approx$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} F(a_3) \dots$$

three  $F(A) = T F(A') \tilde{T}$

**задача.** Определить унитарную матрицу  $T$ , приводящую заданную эрмитову матрицу  $A$  к диагональному виду  $A'$ :

$$A' = T^+ A T.$$

**Решение** [см. (16.9)]:  $T = \sum_s \psi^{(s)} e^{+(s)}.$

$$\begin{aligned} \text{В самом деле, } A' = T^+ A T &= \sum_{s, \sigma} e^{(s)} \psi^{+(s)} A \psi^{(\sigma)} e^{+(\sigma)} = \\ &= \sum_{s, \sigma} a_{\sigma} e^{(s)} \psi^{+(s)} \psi^{(\sigma)} e^{+(\sigma)} = \end{aligned}$$

$$= \sum_s a_s e^{(s)} e^{+(s)} = \sum_s a_s \times \left\| \begin{array}{cccccc} 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \end{array} \right\| \stackrel{\uparrow}{\leftarrow s} = \left\| \begin{array}{cccc} a_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_2 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & a_s & \dots 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & a_n \end{array} \right\|.$$

(Здесь использованы равенства  $A \psi^{(\sigma)} = a_{\sigma} \psi^{(\sigma)}$  и  $\psi^{+(s)} \psi^{(\sigma)} = \delta_{s\sigma}$ .) Таким образом, матрица  $A$  преобразована в диагональную матрицу  $A'$ , на главной диагонали которой стоят собственные значения матрицы  $A$ . Матрица  $T$  преобразует первоначальный базис  $e^{(s)}$  в базис  $\psi^{(s)}$ . Это означает, что  $A$  приводится к диагональному виду с помощью перехода к новому координатному базису, а именно к базису, в котором роль базисных векторов играют ее собственные функции. Отсюда вытекает

■ **ТЕОРЕМА.** Шпур оператора  $\hat{A}$  равен сумме его собственных значений:  $\text{Sp}(\hat{A}) = \sum_1^n a_s.$  (16.18)

**Доказательство.** Очевидно следует из (16.17) и (16.16).

Теперь можно дать *новое определение* матрицы  $F(A)$ . Сделаем это в три шага.

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ.** Первый шаг: приведем матрицу  $A$  к диагональному виду  $A'$  методом (16.17):

$$A' = T^+ A T, \quad A = T A' T^+.$$

Второй шаг: возьмем в качестве  $F(A')$  матрицу

$$F(A') = \left\| \begin{array}{cccc} F(a_1) & 0 & 0 & \dots \\ 0 & F(a_2) & 0 & \dots \\ 0 & 0 & F(a_s) & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{array} \right\|.$$

Третий шаг: вернемся к прежнему базису

$$F(A) = T F(A') T^+.$$

Proove easily (using (13)) - Definition (19) is equivalent to gen. definition of p. 10-4 ~~200~~ whenever that definition is meaningful.  
But Definition (19) does not restrict  $F$ .

(20)  $\left\{ \begin{array}{l} \text{Theorem} \\ [A, F(A)] = 0 \\ \text{even when def. (19) is used. Proof:} \\ [A', F(A')] = 0 \text{ because both diagonal, then} \\ \text{use (13)} \end{array} \right.$

(21)  $\left\{ \begin{array}{l} \text{Theorem (Inverse of (20))} \\ \text{If } A, B \text{ commute and } A \text{ is non} \\ \text{degenerate} \\ B = F(A) \end{array} \right.$

Proof: Transform  $A$  into diag. matrix  $A'$  as in (17)  $A' = \tilde{T} A T = \begin{vmatrix} a_1 & 0 & 0 \\ 0 & a_2 & 0 \\ 0 & 0 & \dots \end{vmatrix}$

$$B' = \tilde{T} B T$$

From  $[A, B] = 0$  follows  $[A' B'] = 0$

$$[A', B']_{ik} = (a_i - a_k) b'_{ik} = 0 \quad \text{From this}$$

and  $a_i \neq a_k$  for  $i \neq k$  follows  $b'_{ik} = 0$  for  $i \neq k$

$$\text{Therefore } B' \text{ also diagonal} = \begin{vmatrix} b_1 & 0 & 0 \\ 0 & b_2 & 0 \\ 0 & 0 & b_3 \dots \end{vmatrix} = B'$$

Therefore  $B' = F(A')$  provided  $F$  is one of the infinite  $f$ 's for which  $F(a_1) = b_1, F(a_2) = b_2, \dots, F(a_n) = b_n$

С помощью равенства (16.13) легко доказать справедливость этого определения. Определение (16.19) эквивалентно общему определению, данному в лекции 10 (см. стр. 73), во всех случаях, когда последнее имеет смысл. Однако определение (16.19) не накладывает ограничений на функции  $F$ .

■ **ТЕОРЕМА.** Перестановочное соотношение  $[A, F(A)] = 0$  выполняется и тогда, когда функции от матрицы определены правилом (16.19). (16.20)

**Доказательство.** Коммутатор  $[A', F(A')]$ , очевидно, равен нулю, так как обе матрицы диагональны. Воспользовавшись теперь преобразованием  $T$  в соответствии с (16.13), легко получить равенство (16.20), что и требовалось.

■ **ОБРАТНАЯ ТЕОРЕМА.** Если матрицы  $A$  и  $B$  коммутируют, причем  $A$  — невырожденная матрица, то имеет место соотношение  $B = F(A)$ . (16.21)

**Доказательство.** Приведем  $A$  к диагональному виду, следуя методу (16.17):

$$A' = T^+ A T = \begin{vmatrix} a_1 & 0 & \dots \\ 0 & a_2 & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{vmatrix}.$$

Сделаем то же с матрицей  $B$ :

$$B' = T^+ B T$$

(при этом заведомо не известно, диагональна ли матрица  $B'$ ). Из  $[A, B] = 0$  следует, что  $[A', B'] = 0$ , так что в компонентах

$$[A', B']_{ik} = (a_i - a_k) b'_{ik} = 0.$$

Но поскольку  $a_i \neq a_k$  при  $i \neq k$ , то отсюда следует, что  $b'_{ik} = 0$  при  $i \neq k$ . Следовательно, матрица  $B'$  также диагональна и равна

$$B' = \begin{vmatrix} b_1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & b_2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & b_3 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix}.$$

Тогда можно записать равенство  $B' = F(A')$ , если в качестве функции  $F$  взять одну из того бесконечного множества функций, для которых

$$F(a_1) = b_1, \quad F(a_2) = b_2, \quad \dots, \quad F(a_n) = b_n.$$

Transform back + use (19) to prove (21).

Incidentally we have proved:

(22) { Theorem: A diagonal, non degenerate B, commutes with A. Then: also B must be diagonal

(23) { If A in (22) is degenerate then B does not have to be diagonal. But B has the structure shown in the following example easily generalized

$$A = \begin{pmatrix} a_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & a_2 \end{pmatrix} \quad B = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & & & \\ b_{21} & b_{22} & & & \\ & & b_{33} & b_{34} & b_{35} \\ 0 & & b_{43} & b_{44} & b_{45} \\ & & b_{53} & b_{54} & b_{55} \end{pmatrix}$$

This has important application.

Assume: A, B hermitian and  $[A, B] = 0$

Solve the e.v. problem of A as on p. 15-3.

Then transform A into a diagonal matrix

(24) {  $A' = \tilde{T} A T$  as in (17). Also  $B' = \tilde{T} B T$ . A' and B' commute. Then: ~~to~~

If A is non degenerate, by (22) B' is diagonal and the e.v. problem of B is solved

If A is degenerate, then B' is of form like in example (23) and its secular equation splits into simpler equations each having order = to the degree of degeneracy of the e.v.'s of A.

Остается лишь произвести обратное преобразование и использовать определение (16.19). Теорема доказана.

Заметим, что по ходу дела фактически была доказана следующая

■ **ТЕОРЕМА.** Если невырожденная матрица  $B$  коммутирует с диагональной матрицей  $A$ , то матрица  $B$  должна быть также диагональна. (16.22)

Если в теореме (16.22) диагональная матрица  $A$  является вырожденной, то  $B$  не обязательно должна быть диагональна, но имеет характерный вид, который можно усмотреть из следующего примера, с легкостью поддающегося обобщению:

$$\begin{aligned} \text{если } A = \begin{vmatrix} a_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & a_2 \end{vmatrix}; & \quad (16.23) \\ \text{то } B = \begin{vmatrix} b_{11} & b_{12} & 0 & 0 & 0 \\ b_{21} & b_{22} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b_{33} & b_{34} & b_{35} \\ 0 & 0 & b_{43} & b_{44} & b_{45} \\ 0 & 0 & b_{53} & b_{54} & b_{55} \end{vmatrix}. \end{aligned}$$

**Важное приложение.** Устанавливаемые теоремой (16.22) и обобщением (16.23) факты находят в квантовой механике важное приложение:

Пусть  $A$  и  $B$  — эрмитовы матрицы, и пусть  $[A, B] = 0$ .

Разрешим задачу на собственные значения оператора  $\hat{A}$ , как указано в лекции 15 [см. (15.13) и (15.14)], затем приведем к диагональному виду по (16.17) матрицы  $A$  и  $B$ :

$$A' = T^+ A T; \quad B' = T^+ B T. \quad (16.24)$$

Матрицы  $A'$  и  $B'$  коммутируют; значит, если матрица  $A$  невырожденная, то, по (16.22), матрица  $B'$  диагональна: тем самым решена задача на собственные значения оператора  $\hat{B}$ .

Если же  $A$  вырожденная, то  $B'$  имеет вид, подобный (16.23); тогда ее секулярное уравнение распадается на более простые уравнения, порядок которых равен кратности вырождения собственных значений матрицы  $A$ .

## 17- Observables

Observable = function of state of system.

- 1- In q.m. one constructs for each observable  $Q$  a linear operator (also  $Q$ ). If the observable is essentially real,  $Q$  is a hermitian operator

- 2- A measurement of  $Q$  may yield as value of  $Q$  only one of the e.v.'s of op.  $Q$

$$(1) \quad Q f_{q'} = q' f_{q'} \quad \left( \begin{array}{l} q' \text{ is e.v.} \\ f_{q'} \text{ is e.f.} \end{array} \right)$$

- 3- State of system represented by  $\psi$  (usually normalized to 1)  
~~factor immaterial~~

- 4- How to determine  $\psi$ ?

Measure  $Q$ , find  $Q = q'$

Then if  $q'$  non degenerate,

$$(2) \quad \psi = f_{q'}$$

If  $q'$  is degenerate then.

$\psi =$  linear comb. of all e.f.'s corresponding to  $q'$

~~Factor immaterial~~ (Vector  $\psi$  belongs to subspace  $q'$ )

$$(3) \quad Q\psi = q'\psi \text{ defines the subspace } q'$$

Наблюдаемая есть функция состояния системы<sup>1)</sup>.

1. В квантовой механике каждой наблюдаемой  $Q$  ставится в соответствие линейный оператор (также обозначаемый через  $Q$ ).

Если значения наблюдаемой представляют собой существенно действительные числа, то соответствующий ей оператор  $\hat{Q}$  — эрмитов.

2. Измерение наблюдаемой величины  $Q$  может дать только одно из собственных значений оператора  $\hat{Q}$ :

$$\hat{Q}f_{q'} = q'f_{q'}, \quad (17.1)$$

где  $q'$  — собственное значение оператора  $\hat{Q}$ , а  $f_{q'}$  — соответствующая собственная функция оператора  $\hat{Q}$ .

3. Состояние системы описывается функцией  $\psi$  (обычно нормируемой на единицу — нормирующий множитель не играет принципиальной роли).

4. Как определить  $\psi$ ?

При измерении  $Q$  находят  $Q = q'$ . Отсюда, если собственное значение  $q'$  невырожденное, заключают, что

$$\psi = f_{q'}. \quad (17.2)$$

Если  $q'$  — вырожденное собственное значение, то волновая функция  $\psi$  равна линейной комбинации всех собственных функций, соответствующих этому значению  $q'$  (вектор  $\psi$  принадлежит подпространству  $q'$ ). При этом уравнение

$$\hat{Q}\psi = q'\psi \quad (17.3)$$

определяет подпространство  $q'$ .

<sup>1)</sup> О понятии наблюдаемой более подробно см. в книге П. А. М. Дирака, Принципы квантовой механики, М., 1960, гл. II.— Прим. ред.



In order to determine  $\psi$  within subspace  $q'$  choose observable  $P$  that commutes with  $Q$

$$(4) \quad [P, Q] = 0$$

$$(5) \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{Theorem: } \textcircled{E} [P, Q] = 0; \textcircled{E} Q\psi = q'\psi, \text{ i.e.} \\ \psi \text{ belongs to subspace } q'; \textcircled{D} P\psi \text{ also belongs} \\ \text{to subspace } q', \text{ i.e. } Q(P\psi) = q'(P\psi). \\ \text{Proof: } Q(P\psi) = QP\psi = PQ\psi = Pq'\psi = q'(P\psi) \end{array} \right.$$

Consider  $P$  as operator within subspace  $q'$ . ~~Then~~  
I will have e.v.'s & e.f.'s in number equal to the dimension of subspace  $q'$  obtained as simultaneous solutions of:

$$(6) \quad \left\{ \begin{array}{l} Q\psi = q'\psi \\ P\psi = p'\psi \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} p' = \text{e.v. of } P \text{ within} \\ \text{subspace } Q = q' \end{array}$$

(6) Defines a sub-sub-space ( $Q = q', P = p'$ ). If this is one-dimensional (6) defines  $\psi$  except for factor. Otherwise  $\psi$  is limited to sub-sub-space. Then measure also <sup>another</sup> observable  $R$  such that

$$(7) \quad [R, Q] = 0 \quad [R, P] = 0$$

$R$  operates in sub-sub-space

$$(8) \quad Q\psi = q'\psi \quad P\psi = p'\psi \quad R\psi = r'\psi$$

Define sub-sub-sub-space. If it has one dimension  $\psi$  is determined. If not, go on.

5- If  $\psi$  is known and  $A$  is measured:  
Prob of finding  $A = a'$  is  $|\langle f_{a'} | \psi \rangle|^2$

Чтобы определить  $\psi$  внутри подпространства, выберем новую наблюдаемую  $p$ , такую, чтобы она коммутировала с  $\hat{Q}$ :

$$[\hat{P}, \hat{Q}] = 0. \quad (17.4)$$

■ ТЕОРЕМА. Если  $[\hat{P}, \hat{Q}] = 0$  и  $\hat{Q}\psi = q'\psi$ , т. е. если  $\psi$  принадлежит подпространству  $q'$ , то  $\hat{P}\psi$  также принадлежит подпространству  $q'$ , т. е.

$$Q(\hat{P}\psi) = q'(\hat{P}\psi).$$

Доказательство.

$$Q(\hat{P}\psi) = \hat{Q}\hat{P}\psi = \hat{P}\hat{Q}\psi = \hat{P}q'\psi = q'(\hat{P}\psi).$$

Рассмотрим  $P$  как оператор в подпространстве  $q'$ . Число соответствующих собственным значениям и собственным функциям равно числу измерений подпространства  $q'$ , задаваемого совместными решениями уравнений

$$\begin{aligned} \hat{Q}\psi &= q'\psi, \\ \hat{P}\psi &= p'\psi, \end{aligned} \quad (17.6)$$

где  $p'$  — собственное значение оператора  $\hat{P}$  в подпространстве  $Q = q'$ . Система уравнений (17.6) определяет под-подпространство ( $Q = q'$ ,  $P = p'$ ). Если это под-подпространство имеет только одно измерение, то система (17.6) определяет  $\psi$  (с точностью до множителя). В противном случае  $\psi$  сводится к под-подпространству. В таком случае вводят в рассмотрение третью наблюдаемую  $R$ , такую, что

$$[\hat{R}, \hat{Q}] = 0, \quad [\hat{R}, \hat{P}] = 0. \quad (17.7)$$

Оператор  $\hat{R}$  действует в под-под-подпространстве, определяемом системой уравнений

$$\hat{Q}\psi = q'\psi, \quad \hat{P}\psi = p'\psi, \quad \hat{R}\psi = r'\psi. \quad (17.8)$$

Если это под-под-подпространство обладает лишь одним измерением, то функция  $\psi$  определена. Если же нет, то следует продолжать процедуру до тех пор, пока не будет получено одномерное подпространство.

5. Если волновая функция  $\psi$  известна, то при измерении наблюдаемой  $A$  вероятность получить  $A = a'$  равна

$$|\langle a' | \psi \rangle|^2.$$

6 - Time variation of "state vector"  $\psi$

$H$  = hamiltonian operator (Hermitian). Then time dependent Schrödinger eq

$$(9) \quad i\hbar \dot{\psi} = H\psi$$

Observe

$$(10) \quad -i\hbar \dot{\tilde{\psi}} = \tilde{\psi} \tilde{H} = \tilde{\psi} H$$

$$(11) \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{Theorem: } \tilde{\psi}\psi \text{ (i.e the normalization} \\ \text{constant) is a time constant. Therefore;} \\ \text{if } \psi(0) \text{ is normalized, so is } \psi(t). \\ \text{Proof:} \\ \frac{d}{dt} \tilde{\psi}\psi = \tilde{\psi} \dot{\psi} + \dot{\tilde{\psi}} \psi \stackrel{(9) \& (10)}{=} \frac{1}{i\hbar} \tilde{\psi} H\psi - \frac{1}{i\hbar} \tilde{\psi} H\psi = 0 \end{array} \right.$$

$$(12) \quad \left\{ \begin{array}{l} 7 - \text{If classically} \\ H = H(q_1, q_2, \dots, p_1, p_2, \dots) \\ \text{Operator substituting } p_i = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_i}, \dots \\ \text{but not always unambiguous} \end{array} \right.$$

These operators on functions  $f(q_1, q_2, \dots, q_n)$

Very infinite "index"  $q_1', q_2', \dots, q_n'$

8 - Transformation to matrix.

Frequently convenient to transform to orthonormal base using the e.f.'s of some pertinent operator like hamiltonian or

6. Изменение „вектора состояния“  $\psi$  во времени. Пусть оператор  $\hat{H}$  — гамильтониан (разумеется, эрмитов, поскольку энергия — действительная величина). Тогда уравнение Шредингера с временной частью записывается в виде

$$i\hbar\dot{\psi} = \hat{H}\psi; \quad (17.9)$$

таким образом,

$$-i\hbar\dot{\psi}^+ = \psi^+ \hat{H}^+ = \psi^+ \hat{H}. \quad (17.10)$$

■ ТЕОРЕМА. Величина  $\psi^+\psi$  (т. е. норма волновой функции) есть константа, не зависящая от времени. Тем самым, если волновая функция  $\psi(0)$  нормирована в начальный момент времени, то она,  $\psi(t)$ , также нормирована и в любой другой момент времени. (17.11)

Доказательство.

$$(\partial/\partial t)\psi^+\psi = \dot{\psi}^+\psi + \psi^+\dot{\psi};$$

отсюда, учитывая (17.9) и (17.10), имеем:

$$\dot{\psi}^+\psi + \psi^+\dot{\psi} = (1/i\hbar)\psi^+ \hat{H}\psi - (1/i\hbar)\psi^+ \hat{H}\psi = 0,$$

что и требовалось доказать.

7. Имеет место следующее соответствие между классическим гамильтонианом  $H$  и квантовомеханическим оператором  $\hat{H}$ :

Если классически  $H = H(q_1, q_2, \dots, p_1, p_2, \dots)$ , то для получения квантовомеханического оператора полной энергии  $\hat{H}$  следует заменить

$$p_j \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_j} \equiv \hat{p}_j. \quad (17.12)$$

Однако эта операция не всегда дает однозначный результат.

Введенные операторы действуют на функции вида

$$f = f(q_1, \dots, q_s).$$

Каждый из индексов  $1, 2, \dots, s$  у величины  $q'$  представляет собой сокращенную запись даже сколь угодно большого набора индексов ( $s$  — сокращенная запись всех индексов).

8. Переход к матричной записи. Часто удобно преобразовать операторы к матричному виду в ортонормированном базисе, выбрав в качестве базисных векторов собственные функции какого-либо часто используемого оператора, например гамильтониана или невозмущенного гамильтониана. Будем для

impert. hamiltonian, assume one  $q$  only  
 Orthonormal base functions ( $q=x$ )

- (13)  $\psi^{(1)}(x), \psi^{(2)}(x), \dots, \psi^{(n)}(x), \dots$   
 • Transf. unitary matrix (See p. 16-2)

(14) 
$$T = \begin{pmatrix} \psi^{(1)}(x') & \psi^{(2)}(x') & \dots & \psi^{(n)}(x') & \dots \\ \psi^{(1)}(x'') & \psi^{(2)}(x'') & \dots & \psi^{(n)}(x'') & \dots \\ \psi^{(1)}(x''') & \psi^{(2)}(x''') & \dots & \psi^{(n)}(x''') & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

Doubly infinite matrix!!

horizontal index  $1, 2, \dots, n, \dots$  (may or may not be discrete)

vert. index  $x', x'', x'''$  (all values of  $x$ , usually continuous infinity)

(Handle with caution!)

a "vector or function"  $f(x) = \sum \varphi_n^* \psi^{(n)}$

~~$\varphi_n$~~   $\varphi_n = (\psi^{(n)} | f) = \int \psi^{(n)*} f dx = \tilde{\psi}^n f$

- (15)  $\begin{cases} f(x') & f(x'') & f(x''') & \text{old coordinates of } f \\ \varphi_1 & \varphi_2 & \varphi_n & \text{new " " } f \end{cases}$

(16)  $\left\{ \begin{array}{l} \text{Operator } A \text{ transforms to } \tilde{T} A T \\ A = \begin{vmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{1n} \dots \\ A_{21} & A_{22} & A_{2n} \dots \\ A_{31} & A_{32} & A_{3n} \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots \end{vmatrix} \quad A_{nm} = (\psi^{(n)} | A \psi^{(m)}) = \\ \quad \quad \quad = \int \psi^{(n)*}(x) A \psi^{(m)}(x) dx \\ \text{If } A \text{ is hermitian } A_{nm} = A_{mn}^* \end{array} \right.$

простоты рассматривать систему, имеющую только *одну* обобщенную координату  $q$ , и положим  $q=x$ .

Систему ортонормированных базисных функций запишем как

$$\psi^{(1)}(x), \psi^{(2)}(x), \dots, \psi^{(n)}(x), \dots \quad (17.13)$$

Унитарная матрица преобразования [см. (16.9)] имеет вид

$$T = \left\| \begin{array}{cccc} \psi^{(1)}(x') & \psi^{(2)}(x') & \dots & \psi^{(n)}(x') & \dots \\ \psi^{(1)}(x'') & \psi^{(2)}(x'') & \dots & \psi^{(n)}(x'') & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \psi^{(1)}(x^{(n)}) & \psi^{(2)}(x^{(n)}) & \dots & \psi^{(n)}(x^{(n)}) & \dots \end{array} \right\|. \quad (17.14)$$

Матрица вдвойне бесконечна! Действительно, число строк и столбцов бесконечно, причем номера столбцов  $1, 2, \dots, n, \dots$  могут быть дискретными, а могут быть и непрерывными; все значения „номеров“ строк  $x', x'', \dots, x^{(n)}, \dots$  обычно образуют бесконечное непрерывное множество. Работая с матрицей (17.14), необходимо быть осторожным в выкладках!

„Вектор-функция“  $f(x) = \sum \varphi_n \psi^{(n)}$  обладает коэффициентами разложения

$$\varphi_n = (\psi^{(n)} | f) = \int \psi^{*(n)} f dx = \int \psi^{+(n)} f dx,$$

где

$$\left. \begin{array}{l} f(x'), f(x''), f(x'''), \dots \text{— старые компоненты } f, \\ \varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \dots \text{— новые компоненты } f. \end{array} \right\} \quad (17.15)$$

Оператор  $\hat{A}$  переходит в  $T^+ \hat{A} T = A'$ , причем

$$\hat{A} = \left\| \begin{array}{cccc} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1n} & \dots \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2n} & \dots \\ A_{31} & A_{32} & \dots & A_{3n} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{array} \right\|; \quad (17.16)$$

$$A_{nm} = (\psi^{(n)} | A \psi^{(m)}) = \int \psi^{*(n)}(x) A \psi^{(m)}(x) dx.$$

Если  $\hat{A}$  — эрмитов оператор, то  $A_{nm} = A_{mn}^*$ .

$A_{nm}$  — матричный элемент оператора  $A$  между состояниями  $n$  и  $m$ .

$$(17) \left\{ \begin{array}{l} A_{nm} = \text{matrix element of } n \text{ between} \\ \text{states } n \text{ \& } m. \text{ Also} \\ A_{nm} = \langle \psi^{(n)} | A | \psi^{(m)} \rangle = \langle n | A | m \rangle \\ \psi^{(m)} = |m\rangle = \text{ket } \widetilde{\psi}^n = \langle n | = \text{bra} \end{array} \right.$$

Example - Take

$$(18) \left\{ \begin{array}{l} \psi^{(n)}(x) = u_n(x) = \text{e.f.'s of oscillator (4-17)} \\ \text{They are e.f.'s of operator} \\ H = \frac{1}{2m} p^2 + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \end{array} \right.$$

After unitary transf. (14)  $H$  transforms to  
diag. matrix

$$(19) \left\{ \begin{array}{l} H = \begin{vmatrix} \frac{\hbar\omega}{2} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \frac{3}{2}\hbar\omega & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \frac{5}{2}\hbar\omega & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \frac{7}{2}\hbar\omega & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix} \end{array} \right.$$

$$\left( \text{~~also~~} \right) H_{nm} = H_{nm} \delta_{nm} = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) \delta_{nm}$$

Determine matrix  $x$  and matrix  $p$ .

$$(20) \left\{ \begin{array}{l} \text{From (18) \& } \text{~~also~~} px - xp = \hbar/i \\ \frac{\hbar}{im} p = Hx - xH \text{ or } \frac{\hbar}{im} p_{rs} = (Hx - xH)_{rs} = (H_{rs} - H_{sr})x_{rs} = \hbar\omega \left(n - \frac{1}{2}\right) x_{rs} \end{array} \right.$$

В другой записи

$$\begin{aligned} A_{nm} &= \langle \psi^{(n)} | \hat{A} | \psi^{(m)} \rangle \equiv \langle n | \hat{A} | m \rangle, \\ \psi^{(m)} &\equiv | m \rangle = ket \text{ (кет)}, \\ \psi^{+(n)} &\equiv \langle n | = bras \text{ (бра)}^{1)}. \end{aligned} \quad (17.17)$$

Пример.

Волновые функции гармонического осциллятора (4.17)

$$\psi^{(n)}(x) = u_n(x)$$

являются собственными функциями оператора

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + \frac{m\omega^2}{2} \hat{x}^2.$$

После унитарного преобразования (17.14) матрица гамильтониана  $H$  приводится к диагональному виду

$$\begin{aligned} H &= \begin{vmatrix} \frac{1}{2} \hbar \omega & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \frac{3}{2} \hbar \omega & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \frac{5}{2} \hbar \omega & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \frac{7}{2} \hbar \omega & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix}, \\ H_{nm} &= H_{nn} \delta_{nm} = \hbar \omega \left( n + \frac{1}{2} \right) \delta_{nm}. \end{aligned} \quad (17.19)$$

Определим матрицу  $x$  и матрицу  $p$ . Из (17.18) и перестановочного соотношения  $\hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p} = \hbar/i$  получим:

$$\frac{\hbar}{im} \hat{p} = \hat{H}\hat{x} - \hat{x}\hat{H},$$

или

$$\frac{\hbar}{im} p_{rs} = (\hat{H}\hat{x} - \hat{x}\hat{H})_{rs} = (H_{rr} - H_{ss}) x_{rs} = \hbar \omega (r - s) x_{rs}. \quad (17.20)$$

<sup>1)</sup> Это так называемые дираковские обозначения, широко используемые в современной квантовой теории. — Прим. ред.



$$(21) \begin{cases} \text{From } H p - p H = -\frac{\hbar}{i} m \omega^2 x \\ \dots \frac{\hbar}{i} m \omega^2 x_{r,s} = \hbar \omega (r-s) p_{r,s} \end{cases}$$

Combine to find

$$x_{r,s} = (r-s)^2 x_{r,s}$$

Therefore  $x_{r,s} \neq 0$  only for  $r = s \pm 1$

$$(22) \begin{cases} \text{Also } p_{r,s} \neq 0 & \text{if } r = s \pm 1 \\ \text{Also } p_{r,r+1} = -i m \omega x_{r,r+1} \end{cases}$$

Determine  $|x_{r,r+1}|^2 + |x_{r-1,r}|^2 = \frac{\hbar \omega}{m \omega^2} (r + \frac{1}{2})$   
from (18) (19) (22). Find

$$|x_{r,r+1}|^2 = \frac{\hbar}{2 m \omega} (r+1)$$

Discuss arbitrariness of argument

$$(23) \begin{cases} x_{r,r+1} = x_{r+1,r} = \sqrt{\frac{\hbar}{2 m \omega}} \sqrt{r+1} \\ p_{r,r+1} = -p_{r+1,r} = -i \sqrt{\frac{\hbar m \omega}{2}} \sqrt{r+1} \end{cases}$$

$$(24) \begin{cases} x = \sqrt{\frac{\hbar}{2 m \omega}} \begin{vmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix}; \quad p = \sqrt{\frac{\hbar m \omega}{2}} \begin{vmatrix} 0 & -i\sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ i\sqrt{1} & 0 & -i\sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & i\sqrt{2} & 0 & -i\sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & i\sqrt{3} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix} \end{cases}$$

Check  $\boxed{p x - x p = \frac{\hbar}{i}}$

Аналогичным образом из перестановочного соотношения

$$\hat{H}\hat{p} - p\hat{H} = -\frac{\hbar}{i} m\omega^2 x \quad (17.21)$$

следует, что

$$-\frac{\hbar}{i} m\omega^2 x_{rs} = \hbar\omega (r-s) p_{rs}.$$

Отсюда после очевидных преобразований имеем:

$$x_{rs} = (r-s)^2 x_{rs}.$$

$$\left. \begin{array}{l} x_{rs} \neq 0, \\ p_{rs} \neq 0 \end{array} \right\} \text{ только при } r = s \pm 1, \quad (17.22)$$

$$p_{r, r+1} = -im\omega x_{r, r+1}.$$

Найдем величину  $x_{r, r+1}$ . Прежде всего из (17.18), (17.19) и (17.22) имеем:

$$|x_{r, r+1}|^2 + |x_{r-1, r}|^2 = \frac{\hbar\omega}{m\omega^2} \left(r + \frac{1}{2}\right).$$

Отсюда

$$|x_{r, r+1}|^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} (r+1).$$

Учитывая произвольность выбора фазы в рассматриваемых комплексных выражениях, возьмем

$$x_{r, r+1} = x_{r+1, r} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sqrt{r+1}, \quad (17.23)$$

$$p_{r, r+1} = -p_{r+1, r} = -i \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} \sqrt{r+1}.$$

Эти результаты удобно изобразить в виде матриц как

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \begin{vmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix}, \quad (17.24)$$

$$p = \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} \begin{vmatrix} 0 & -i\sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ i\sqrt{1} & 0 & -i\sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & i\sqrt{2} & 0 & -i\sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & i\sqrt{3} & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix}.$$

Читателю предлагается, исходя из представления (17.24), вновь проверить равенство  $\hat{p}\hat{x} - x\hat{p} = \hbar/i$ .

Important linear combinations

$$(25) \quad \left\{ \begin{array}{l} \tilde{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x - \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega}} p = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix} \\ a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x + \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega}} p = \begin{vmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{4} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix} \end{array} \right.$$

$a, \tilde{a}$  are non hermitian operators  
(destruction & creation operators of field theory).

Check commutation relation

$$(26) \quad a \tilde{a} - \tilde{a} a = 1$$

Важные линейные комбинации:

$$\begin{aligned} a^+ &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} - \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \hat{p} = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix}, \\ a &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \hat{p} = \begin{vmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix}; \end{aligned} \quad (17.25)$$

здесь  $a$  и  $a^+$  — неэрмитовы операторы (операторы уничтожения и порождения частиц в квантовой теории поля).

Предлагаем читателю проверить перестановочные соотношения для операторов  $a$  и  $a^+$ :

$$aa^+ - a^+a = 1. \quad (17.26)$$

### 18 - The angular momentum

$$(1) \quad \vec{M} = \vec{r} \times \vec{p}$$

$$(2) \quad \begin{cases} M_x = y p_z - z p_y = X \\ M_y = z p_x - x p_z = Y \\ M_z = x p_y - y p_x = Z \end{cases}$$

$$(3) \quad M^2 = M_x^2 + M_y^2 + M_z^2$$

Prove easily commutation rules

$$(4) \quad \begin{cases} [M_x, M_y] = i\hbar M_z; [M_y, M_z] = i\hbar M_x \\ [M_z, M_x] = i\hbar M_y \end{cases}$$

$$(5) \quad \text{or} \quad \vec{M} \times \vec{M} = i\hbar \vec{M}$$

$$(6) \quad [M_x, M^2] = [M_y, M^2] = [M_z, M^2] = 0$$

$$(7) \quad [r^2, M_x] = [r^2, M_y] = [r^2, M_z] = 0$$

$$(8) \quad [r^2, M^2] = 0$$

Use units  $\hbar = 1$

$$(9) \quad [X, Y] = +iZ \quad [Y, Z] = +iX \quad [Z, X] = +iY$$

Take representation with  
 $M^2$  diagonal matrix

Момент импульса, или момент количества движения, в квантовой механике, как и в классической физике, определяется выражением (в квантовой механике — операторным \*)

$$\hat{\mathbf{M}} = \hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{p}}. \quad (18.1)$$

В компонентах

$$\begin{aligned} \hat{M}_x &= \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y = X, \\ \hat{M}_y &= \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z = Y, \\ \hat{M}_z &= \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x = Z. \end{aligned} \quad (18.2)$$

Оператор квадрата момента импульса строится, как обычно:

$$\hat{M}^2 = \hat{M}_x^2 + \hat{M}_y^2 + \hat{M}_z^2. \quad (18.3)$$

Нетрудно доказать следующие перестановочные соотношения:

$$\begin{aligned} [\hat{M}_x, \hat{M}_y] &= i\hbar \hat{M}_z, \quad [\hat{M}_y, \hat{M}_z] = i\hbar \hat{M}_x, \\ [\hat{M}_z, \hat{M}_x] &= i\hbar \hat{M}_y, \end{aligned} \quad (18.4)$$

или

$$[\hat{\mathbf{M}} \times \hat{\mathbf{M}}] = i\hbar \hat{\mathbf{M}}, \quad (18.5)$$

$$[\hat{M}_x, \hat{M}^2] = 0, \quad [\hat{M}_y, \hat{M}^2] = [\hat{M}_z, \hat{M}^2] = 0. \quad (18.6)$$

$$[\hat{r}^2, \hat{M}_x] = [\hat{r}^2, \hat{M}_y] = [\hat{r}^2, \hat{M}_z] = 0, \quad (18.7)$$

$$[\hat{r}^2, \hat{M}^2] = 0. \quad (18.8)$$

При использовании системы единиц, в которой  $\hbar = 1$ , перестановочные соотношения (18.4) принимают в обозначениях (18.2) вид

$$[X, Y] = iZ, \quad [Y, Z] = iX, \quad [Z, X] = iY. \quad (18.9)$$

Теперь нужно перейти к представлению, в котором матрица  $\hat{M}^2$  диагональна.

Найдем собственные значения оператора  $\hat{M}^2$ . Операторы (18.2) и (18.3) в полярных координатах запишутся как

$$M_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad \hat{M}^2 = -\hbar^2 \Delta, \quad (18.10)$$

где  $\Delta$  — угловая часть лапласиана (6.11).

Из выражений (18.2) видно, что любые две компоненты  $\mathbf{M}$  не коммутируют друг с другом и, следовательно, в любом представлении может быть диагональной только одна из трех компонент  $\hat{M}_x$ ,  $\hat{M}_y$ ,  $\hat{M}_z$ . Однако все три компоненты  $\hat{\mathbf{M}}$  одновременно коммутируют с оператором  $\hat{M}^2$  [см. (18.6)]. Поэтому одновременно с матрицей-оператором  $\hat{M}^2$  можно диагонализировать одну из компонент  $\hat{\mathbf{M}}$  (например,  $\hat{M}_z$ ). Таким образом, в квантовой механике наблюдаемыми могут одновременно быть  $M^2$  и одна из компонент  $\mathbf{M}$ .

Find e.v. of  $M^2$ . From (2) & (3) expressed in polar coordinates

$$(10) \quad \begin{cases} M_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ M^2 = -\hbar^2 \Lambda \end{cases}$$

Therefore.

$$(11) \quad \begin{cases} M^2 \text{ has e.v.'s } \hbar^2 l(l+1) & l=0, 1, 2, \dots \\ M_z \text{ " " } \hbar m & m=\dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots \end{cases}$$

$$(12) \quad \begin{cases} \text{e.f.'s of } M^2 & (\hbar=1) \\ M^2 = l(l+1) & \psi = f(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \\ 2l+1 \text{ - fold degeneracy, in addition to } r\text{-degeneracy} \end{cases}$$

$$(13) \quad \begin{cases} \text{For each } M^2 = l(l+1) \text{ find} \\ M_z = m = (l, l-1, l-2, \dots, -l) \end{cases}$$

- ~~These~~ Partial matrices  $M_x, M_y, M_z$

$$(14) \quad \begin{cases} M_z = \hbar \begin{vmatrix} l & 0 & 0 & \dots \\ 0 & l-1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & l-2 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & -l \end{vmatrix} ; \quad M_x = \frac{\hbar}{2} \begin{vmatrix} 0 & b_l & 0 & 0 & \dots & 0 \\ b_l & 0 & b_{l-1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & b_{l-1} & 0 & b_{l-2} & \dots & 0 \\ 0 & 0 & b_{l-2} & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & b_{-l+1} & 0 \end{vmatrix} \\ M_y = \frac{\hbar}{2} \begin{vmatrix} 0 & -ib_l & 0 & 0 & \dots & 0 \\ ib_l & 0 & -ib_{l-1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & ib_{l-1} & 0 & -ib_{l-2} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -ib_{-l+1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & ib_{-l+1} & 0 \end{vmatrix} \end{cases}$$

$b_s = \sqrt{(l+s)(l+1-s)}$   
(See Schiff: p. 144)

Вывод.

$$\begin{aligned} \hat{M}^2 &\text{ имеет собственные значения } \hbar^2 l(l+1); l=0, 1, 2, \dots; \\ M_z &\text{ имеет собственные значения } \hbar m; m=\dots-2, -1, 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (18.11)$$

Здесь  $m$ —магнитное, а  $l$ —орбитальное квантовые числа.

Собственные функции оператора  $\hat{M}^2$  (в единицах  $\hbar=1$ ):

$$M^2 = l(l+1), \quad \psi = f(r) Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (18.12)$$

Итак, собственные функции  $(2l+1)$ -кратно вырождены по магнитному квантовому числу  $m$  (это вырождение накладывается еще на вырождение радиальных собственных функций).

$$\text{На каждое значение } M^2 = l(l+1) \text{ приходится } (2l+1) \text{ значений } M_z: \quad (18.13)$$

$$M_z = m = (l, l-1, l-2, \dots, -l).$$

Укажем в использованном представлении конкретный вид матриц  $\hat{M}_x$ ,  $\hat{M}_y$  и  $\hat{M}_z$ :

$$\begin{aligned} \hat{M}_z &= \hbar \begin{vmatrix} l & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & l-1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & l-2 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -l \end{vmatrix}, \\ \hat{M}_y &= \frac{\hbar}{2} \begin{vmatrix} 0 & -ib_l & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ ib_l & 0 & -ib_{l-1} & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & ib_{l-1} & 0 & -ib_{l-2} & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & -ib_{-l+1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & ib_{-l+1} & 0 \end{vmatrix}, \\ \hat{M}_x &= \frac{\hbar}{2} \begin{vmatrix} 0 & b_l & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ b_l & 0 & b_{l-1} & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & b_{l-1} & 0 & b_{l-2} & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b_{l-2} & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & b_{-l+1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & b_{-l+1} & 0 \end{vmatrix}, \end{aligned} \quad (18.14)$$

где  $b_s = \sqrt{(l+s)(l+1-s)}$  (см. у Шиффа, стр. 170).



Prove directly, either from properties of spherical harmonics — Or from commutation rules.

Further more general discussion of ang. momentum later.

$$(15) \left\{ \begin{array}{l} l=0 \quad M^2=0 \quad M_z = M_x = M_y = \|0\| \end{array} \right.$$

$$(16) \left\{ \begin{array}{l} l=1 \quad M^2=2 \quad M_z = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix} \quad M_x = \begin{vmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{vmatrix} \\ M_x + i M_y = \begin{vmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{vmatrix} \quad M_y = \begin{vmatrix} 0 & -i/\sqrt{2} & 0 \\ i/\sqrt{2} & 0 & -i/\sqrt{2} \\ 0 & i/\sqrt{2} & 0 \end{vmatrix} \\ M_x - i M_y = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{vmatrix} \end{array} \right.$$

Now hermitian linear combinations

$$(17) \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\hbar} \langle m+1 | M_x + i M_y | m \rangle = \sqrt{(l+m+1)(l-m)} \\ \frac{1}{\hbar} \langle m-1 | M_x - i M_y | m \rangle = \sqrt{(l+m)(l+1-m)} \end{array} \right.$$

all other matrix elements vanish!

Observe: operator  $M_x + i M_y$  changes

$$(18) \left\{ \begin{array}{l} \text{state } |m\rangle \rightarrow \sqrt{(l+m+1)(l-m)} |m+1\rangle \\ (M_x - i M_y) |m\rangle \rightarrow \sqrt{(l+m)(l+1-m)} |m-1\rangle \end{array} \right.$$

$M_x + i M_y$  increases,  $M_x - i M_y$  decreases the  $m$  value by one unit.

Справедливость этих формул можно доказать, исходя либо из свойств сферических гармоник, либо из перестановочных соотношений. В дальнейшем мы проведем более общее рассмотрение свойств оператора момента импульса.

В заключение выпишем вид матриц момента при  $l=0$  и  $l=1$ :

$$l=0, \quad M^2 = \|0\|, \quad \hat{M}_x = \hat{M}_y = \hat{M}_z = \|0\|; \quad (18.15)$$

$$l=1, \quad M^2 = 2 \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}, \quad \hat{M}_z = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix},$$

$$\hat{M}_x = \begin{vmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{vmatrix}, \quad \hat{M}_y = \begin{vmatrix} 0 & -\frac{i}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{i}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{i}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{i}{\sqrt{2}} & 0 \end{vmatrix}, \quad (18.16)$$

$$\hat{M}_x + i\hat{M}_y = \begin{vmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}, \quad \hat{M}_x - i\hat{M}_y = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{vmatrix}.$$

Отличные от нуля матричные элементы последних двух неэрмитовых операторов равны соответственно

$$\frac{1}{\hbar} \langle m+1 | \hat{M}_x + i\hat{M}_y | m \rangle = \sqrt{(l+m+1)(l-m)};$$

$$\frac{1}{\hbar} \langle m-1 | \hat{M}_x - i\hat{M}_y | m \rangle = \sqrt{(l+m)(l+1-m)}. \quad (18.17)$$

З а м е ч а н и е. Оператор  $\hat{M}_x + i\hat{M}_y$  переводит состояние  $|m\rangle$  в состояние  $|m+1\rangle$ , а оператор  $\hat{M}_x - i\hat{M}_y$  переводит то же состояние  $|m\rangle$  в состояние  $|m-1\rangle$ , так что оператор  $\hat{M}_x + i\hat{M}_y$  увеличивает, а оператор  $\hat{M}_x - i\hat{M}_y$  уменьшает значение  $m$  на единицу. (18.18)

## 19- Time dependence of observables- Heisenberg representation.

Time dependent equation

$$(1) \quad i\hbar \dot{\psi} = H \psi$$

May be used to define following unitary transformation (function of time)

$$(2) \quad S(t)$$

$S(t)$  transforms a vector  $\varphi(0)$ , referred to  $t=0$  into a vector  $\varphi(t)$ , referred to time  $t$ .  $\varphi(t)$  is obtained by integrating

$$(3) \quad i\hbar \dot{\varphi} = H \varphi$$

between 0 and  $t$  taking  $\varphi(0)$  as initial value of  $\varphi$ .

Already proved (17-p.3) that  $S(t)$  is unitary.

$$(4) \quad \begin{cases} \varphi(t) = S(t) \varphi(0) \\ \varphi(0) = S(t)^{-1} \varphi(t) = \tilde{S}(t) \varphi(t) \end{cases}$$

In particular for wave function

$$(5) \quad \begin{cases} \psi(t) = S(t) \psi(0) \\ \psi(0) = \tilde{S}(t) \psi(t) \end{cases}$$

When  $H$  is time independent, explicit expression of  $S(t)$

Унитарное преобразование  $\hat{S}(t)$ . Зависящее от времени уравнение Шредингера

$$i\hbar\dot{\psi} = \hat{H}\psi \quad (19.1)$$

может быть использовано для определения следующего унитарного преобразования, зависящего от времени:

Преобразование  $\hat{S}(t)$  переводит вектор  $\psi(0)$ , соответствующий моменту  $t=0$ , в вектор  $\psi(t)$ , соответствующий моменту  $t$ <sup>1)</sup>. (19.2)

Заметим, что в теории дифференциальных уравнений  $\psi$  получают, интегрируя уравнение

$$i\hbar\dot{\psi} = \hat{H}\psi \quad (19.3)$$

на интервале от 0 до  $t$ , причем в качестве начального значения  $\psi$  берется величина  $\psi(0)$ .

Из теоремы (17.11) непосредственно следует, что оператор  $\hat{S}(t)$  должен быть унитарным: если

$$\begin{aligned} \psi(t) &= \hat{S}(t)\psi(0), \\ \psi(0) &= \hat{S}^{-1}(t)\psi(t) = \hat{S}^+(t)\psi(t). \end{aligned} \quad (19.4)$$

В частности, для волновой функции

$$\begin{aligned} \psi(t) &= \hat{S}(t)\psi(0), \\ \psi(0) &= \hat{S}^+(t)\psi(t). \end{aligned} \quad (19.5)$$

Если гамильтониан  $\hat{H}$  не зависит от времени, явное выражение для  $\hat{S}(t)$  имеет вид

$$\hat{S}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}, \quad (19.6)$$

<sup>1)</sup> Напомним, что в классической механике переход от момента времени  $t=0$  к другому моменту  $t$  можно рассматривать как каноническое преобразование. — Прим. ред.

(4)

$$\begin{aligned} \dot{\tilde{S}}(t) &= -\frac{i}{\hbar} H \tilde{S}(t) \\ \tilde{S}(t) &= e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \end{aligned}$$

In general

$$(6) \quad S(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} H t}$$

Proof by substitution in (4) + (3)

$$(7) \quad \tilde{S}(t) = e^{\frac{i}{\hbar} H t} \quad (\text{because } H \text{ is hermitian})$$

Schrodinger representation, use time dependent state vector

$\psi(t)$   
described by time dependent coordinates in the base  $B(0)$   
time independent  $e^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, e^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \dots$

(8)

Any observable  $A$ , like  $x$ , or  $p_y$ , or any function of coordinates & momenta, not containing the time explicitly is described by a matrix in the base  $B(0)$ . The elements of this matrix are time independent. However the probabilities to obtain by measurement at time  $t$  certain results are time dependent because the state vector  $\psi(t)$  is time dependent.

~~the time dependent state vector~~  
Heisenberg representation. The time dependent state vector  $\psi(t)$

$$(9) \quad \psi(t) = S(t) \psi(0)$$

is represented in terms of a time dependent

что легко проверить, непосредственно подставив (19.6) в равенство (19.5), а затем в уравнение (19.1):

$$\hat{S}^+(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t}, \quad (19.7a)$$

так как гамильтониан  $\hat{H}$  — эрмитов оператор. В общем случае  $\hat{S}$ -матрица определяется уравнением

$$\hat{S}(t) = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \hat{S}(t), \text{ или } \hat{S}^+(t) = \frac{i}{\hbar} \hat{H} \hat{S}^+(t). \quad (19.7b)$$

**Шредингеровское представление.** В этом представлении система описывается „вектором“ состояния  $\psi(t)$ , зависящим от времени.

Переменные во времени „векторные“ компоненты амплитуды  $\psi(t)$  задаются в гильбертовом пространстве с не зависящим от времени базисом  $B(0)$ :

$$e^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad e^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \dots \quad (19.8)$$

Любая не содержащая временной зависимости наблюдаемая  $A$ , будь то  $x$ , или  $p_y$ , или любая другая функция координат и импульса, описывается матрицей в базисе  $B(0)$ . Элементы этой матрицы не зависят от времени. Однако вероятность получить при измерении, проводимом в момент  $t$ , определенные результаты зависит от времени, так как вектор состояния  $\psi(t)$  в шредингеровском представлении является функцией времени.

**Гейзенберговское представление.** В этом представлении зависящая от времени прежняя амплитуда („вектор“) состояния  $\psi(t)$ , связанная со своим начальным значением через  $\hat{S}$ -матрицу соотношением

$$\psi(t) = \hat{S}(t) \psi(0), \quad (19.9)$$

(10) { set of base vectors  
 $e^{(3)}(t) = S(t) e^{(3)}$   
 (Base  $B(t)$ )

(11) { The coordinates of  $\psi(t)$  in  $B(t)$  are time independent and equal to the coordinates of  $\psi(0)$  in  $B(0)$ . Because!  

$$\widetilde{e}^{(3)}(t) \psi(t) = \widetilde{S}(t) e^{(3)} S(t) \psi(0) = \widetilde{e}^{(3)} \widetilde{S} S \psi(0) = \widetilde{e}^{(3)} \psi(0)$$

This is sometimes abbreviated in the ~~original~~ statement that the state vector is time independent. Rather the state vector is referred to a set of coordinates that follows it in its motion and it appears constant when referred to such coordinates.

The matrix elements of observable  $A$  function of coordinates & momenta but not containing  $t$  explicitly are time constants in the base  $B(0)$  but not in the Heisenberg time dependent base  $B(t)$ .

The matrix representing  $A$  becomes

(12)  $A(t) = \widetilde{S}(t) A S(t)$ ;  $A = S A(t) \widetilde{S}$

where  $A$  is the time independent matrix representing the observable in the Schrödinger base  $B(0)$  &

Find  

$$\frac{d}{dt} A(t) = \widetilde{S}(t) A \dot{S}(t) + \dot{\widetilde{S}}(t) A S(t) \stackrel{\text{use (7)}}{=} \frac{i}{\hbar} (\widetilde{S} H A S - \widetilde{S} A H S)$$

задается в *зависящем от времени базисе*  $B(t)$  векторов:

$$e^{(s)}(t) = \hat{S}(t) e^{(s)}(0). \quad (19.10)$$

Компоненты „вектора“  $\psi(t)$  в базисе  $B(t)$  не зависят от времени и равны компонентам „вектора“  $\psi(0)$  в базисе  $B(0)$ , так как выполняются соотношения

$$\begin{aligned} e^{+(s)}(t) \psi(t) &= [\hat{S}(t) e^{(s)}(0)]^+ \hat{S}(t) \psi(0) = \\ &= e^{+(s)}(0) \hat{S}^+ \hat{S} \psi(0) = e^{+(s)}(0) \psi(0). \end{aligned} \quad (19.11)$$

Содержание этих соотношений иногда кратко выражают в форме утверждения, что вектор состояния не зависит от времени. Однако лучше говорить, что вектор состояния оказывается отнесенным к сопутствующей ему системе координат и представляется постоянным лишь в этой системе.

Матричные элементы наблюдаемой  $A$ —функции координат и импульса, не содержащей явной зависимости от времени, постоянны во времени лишь при рассмотрении их в базисе  $B(0)$ , но не в гейзенберговском базисе  $B(t)$ , зависящем от времени.

**Гейзенберговское уравнение движения.** Соответствующая оператору  $\hat{A}$  матрица при переходе от  $t=0$  к моменту времени  $t$  принимает вид

$$\begin{aligned} \hat{A}(t) &= \hat{S}^+(t) \hat{A} \hat{S}(t), \\ \hat{A} &= \hat{S} \hat{A}(t) \hat{S}^+, \end{aligned} \quad (19.12)$$

где  $\hat{A}$ —не зависящая от времени матрица, описывающая наблюдаемую в шредингеровском базисе  $B(0)$ . Найдем производную по времени от  $\hat{A}(t)$ , используя уравнения (19.76):

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \hat{A}(t) &= \\ &= \hat{S}^+(t) \hat{A} \hat{S}(t) + \hat{S}^+(t) \hat{A} \hat{S}(t) = \\ &= \frac{i}{\hbar} [\hat{S}^+ \hat{H} \hat{A} \hat{S} - \hat{S}^+ \hat{A} \hat{H} \hat{S}]. \end{aligned}$$



Put like (12)

$$(13) \quad H(t) = \tilde{S} H S$$

Find then

$$(14) \quad \frac{dA(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [H(t), A(t)]$$

This is the Heisenberg equation of motion for operators that do not explicitly depend on time.

→ If  $H$  does not contain  $t$  explicitly, from

(14) find

$$\frac{dH(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [H(t), H(t)] = 0 \quad \text{i.e.}$$

$$(15) \quad H(t) = \text{constant} = H(0) = H$$

This however is correct only provided the hamiltonian does not contain the time explicitly.

Relationship between (14) & the Hamilton eq's  
Assume

$$(16) \quad \left\{ \begin{array}{l} H = H(q, p, \dots) \quad (\text{time independent}) \\ [p_s, q_s] = \frac{\hbar}{i} \quad \text{leads to } [H, q_s] = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial H}{\partial p_s} \\ [H, p_s] = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial H}{\partial q_s} \quad \text{Then from (14)} \\ \frac{dq_s}{dt} = \frac{i}{\hbar} [H, q_s] = \frac{\partial H}{\partial p_s}; \quad \frac{dp_s}{dt} = \frac{i}{\hbar} [H, p_s] = -\frac{\partial H}{\partial q_s} \\ \quad \text{= Hamilton equations} \end{array} \right.$$

Meaning of  $A(t)$ : measuring operator  $A(t)$  on state  $\psi(t)$  at  $t=0$  is equivalent to measure  $A$  on future state  $\psi(t)$

Приняв, как и в (19.12),

$$\hat{H}(t) = \hat{S}^+ \hat{H} \hat{S}, \quad (19.13)$$

получим:

$$\frac{d\hat{A}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}(t), \hat{A}(t)]. \quad (19.14)$$

Это *гейзенберговское уравнение движения* для операторов, не зависящих явно от времени. Смысл  $\hat{A}(t)$  можно понять, заметив, что среднее значение  $\hat{A}(t)$ , взятое по состоянию  $\psi(0)$  в момент времени  $t=0$ , равно среднему значению  $\hat{A}$  по состоянию  $\psi(t)$  в момент времени  $t$ .

Уравнение (19.14) обнаруживает явное сходство с соответствующим уравнением классической механики, в котором фигурируют скобки Пуассона. Поэтому коммутатор в правой части (19.14) обычно называют *квантовыми скобками Пуассона* от  $\hat{H}$  и  $\hat{A}$  (см. также последние уравнения этой лекции).

Если гамильтониан  $H$  не содержит явной зависимости от  $t$ , то из (19.14) следует, что

$$\frac{d\hat{H}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}(t), \hat{H}(t)] \equiv 0, \quad (19.14')$$

т. е. что

$$H(t) = \text{const} = H(0) = H. \quad (19.15)$$

Это, однако, верно лишь *при условии*, что гамильтониан *не зависит явно* от времени.

#### Связь между (19.14) и уравнением Гамильтона.

Положим, что гамильтониан  $H = H(q_1, q_2, q_3, \dots, p_1, p_2, p_3, \dots)$  явно не зависит от времени. Перестановочные соотношения  $[p_s, q_s] = \hbar/i$  в простых случаях приводят к уравнениям

$$[\hat{H}, \hat{q}_s] = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial H}{\partial p_s}, \quad [\hat{H}, \hat{p}_s] = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial H}{\partial q_s}. \quad (19.16)$$

Отсюда с учетом (19.14) получим уравнения

$$\begin{aligned} \frac{dq_s}{dt} &= \frac{i}{\hbar} [H, q_s] = \frac{\partial H}{\partial p_s}, \\ \frac{dp_s}{dt} &= \frac{i}{\hbar} [H, p_s] = -\frac{\partial H}{\partial q_s}, \end{aligned}$$

которые являются уравнениями Гамильтона, имеющими ту же характерную форму, что и соответствующие уравнения классической механики.

## 20 - Conservation theorems.

- (1)  $\left\{ \begin{array}{l} \text{Assume in this section} \\ H \text{ does not contain } t \text{ explicitly} \end{array} \right.$
- (2)  $\left\{ \begin{array}{l} \text{Same assumption for other operators} \\ A, B, C \dots \end{array} \right.$
- Then: According to (19-(15))
- (3)  $\left\{ \begin{array}{l} H \text{ is constant} \\ \text{(conservation of energy)} \end{array} \right.$
- (4)  $\left\{ \begin{array}{l} \text{Similarly from (19-(14))}, A \text{ is conserved} \\ \text{when} \end{array} \right. [H, A] = 0$

Meaning: measuring  $A$  now or at a future time gives same result.

Classical conservation theorems of momentum and ang. momentum are related to symmetry properties of physical space. i. e.

Conserv. of momentum  $\leftrightarrow$  Translation symmetry  
 " " angular momentum  $\leftrightarrow$  Rotation symmetry

Assume symmetry <sup>of position</sup> of system.

Examples: Translation (case of internal forces only)

Rotation (case of internal forces only or of central forces for rotation around <sup>source</sup> centers of central forces)

В этой лекции будет предполагаться, что гамильтониан  $\hat{H}$  не зависит явным образом от времени  $t$ . (20.1)

То же предположение примем относительно других операторов  $\hat{A}$ ,  $\hat{B}$ ,  $\hat{C}$ , ... . (20.2)  
Согласно (19.15), в рассматриваемом случае

$$H = \text{const.} \quad (20.3)$$

Это закон сохранения энергии.

Аналогичным образом из (19.14) следует, что физическая величина  $A$  сохраняется, если (20.4)

$$[\hat{H}, \hat{A}] = 0.$$

Это равенство означает, что измерение  $A$  в данный или любой последующий момент времени дает *один и тот же результат*.

**Преобразования симметрии.** Классические законы сохранения импульса и момента связаны со свойствами симметрии физического пространства, именно:

Сохранение импульса — с симметрией относительно трансляций (сдвигов) системы координат\*.

Сохранение момента импульса — с симметрией относительно поворотов системы координат.

Обратно, из наличия законов сохранения можно сделать заключение о свойствах симметрии системы. В связи со сказанным полезно ввести *преобразования симметрии* для физических систем.

*Примеры преобразований симметрии:*

1. Преобразование трансляции (сдвиг) координат (симметрия имеет место лишь в случае чисто внутренних сил).

2. Преобразование ротации (поворот) координат (симметрия имеет место лишь в случае чисто внутренних сил или в случае центральных внешних сил, если поворот совершается вокруг источника сил).

Rotation around  $z$ -axis (whenever it applies)

Reflection on a plane of symmetry.

For each such case introduce operator

$$(5) \quad \begin{cases} \text{Defined } T \\ Tf(\text{positions}) = f(\text{positions changed by symmetry operation}) \end{cases}$$

Example: operation = reflection about  $xy$  plane

$$Tf(x, y, z, x_2, y_2, z_2, \dots) = f(x, y, -z, x_2, y_2, -z_2, \dots)$$

$$(6) \quad \begin{cases} \text{Theorem: } T \text{ is unitary: evident because} \\ T \text{ obviously conserves the normalization of } f \\ \tilde{T}T = 1 \end{cases}$$

$$(7) \quad \begin{cases} \text{Theorem: } T \text{ commutes with } H \\ [H, T] = 0 \end{cases}$$

Because consider one e.v.  $E_n$  of  $H$  defining a vector subspace of the (~~one or more~~) e.f.'s of  $H$  belonging to  $E_n$  —  $T$  operates within the subspace — This means: the matrix elements  $T_{rs}$  of  $T$  in the  $H$  representation vanish for  $E_r \neq E_s$  which is equivalent to (7)

$$(8) \quad \begin{cases} \text{Theorem} \\ [H, \tilde{T}] = 0 \\ \text{Because } \tilde{T} = T^{-1} \text{ is also a symmetry operation} \\ \text{(inverse of } T) \end{cases}$$

3. Поворот вокруг выделенной оси  $z$  (аксиальная симметрия также требует определенных условий).

4. Отражение относительно плоскости симметрии

В каждом из этих случаев можно ввести оператор  $\hat{T}$ , определяемый равенством

$$\hat{T}f(\text{в исходном положении}) = f(\text{в положении, измененном действием преобразования симметрии}). \quad (20.5)$$

**Пример.** Отражение относительно плоскости  $xy$  для функции двух частиц:

$$\hat{T}f(x_1, y_1, z_1; x_2, y_2, z_2) = f(x_1, y_1, -z_1; x_2, y_2, -z_2).$$

■ **ТЕОРЕМА.** Оператор преобразования симметрии  $\hat{T}$  является унитарным: (20.6)

$$\hat{T}^+ \hat{T} = 1.$$

Доказательство самоочевидно, так как  $\hat{T}$  явно сохраняет нормировку волновой функции  $f$ .

□ **ТЕОРЕМА.** Оператор преобразования симметрии  $\hat{T}$  коммутирует с гамильтонианом  $\hat{H}$ : (20.7)

$$[\hat{H}, \hat{T}] = 0.$$

**Доказательство.** При рассмотрении одного собственного значения  $E_r$  оператора  $\hat{H}$ , определяющего вектор подпространства (одной или более) собственных функций гамильтониана  $\hat{H}$ , соответствующих этому значению  $E_r$ , заметим, что оператор действует *внутри* этого подпространства. Это означает, что матричные элементы  $T_{rs}$  оператора  $\hat{T}$  в представлении Гейзенберга равны нулю при  $E_r \neq E_s$ , что эквивалентно утверждению теоремы.

■ **ТЕОРЕМА.** Эрмитово сопряженный оператор преобразования симметрии  $T^+$  коммутирует с гамильтонианом  $\hat{H}$ : (20.8)

$$[\hat{H}, \hat{T}^+] = 0.$$

Доказательство сводится к тому соображению, что  $\hat{T}^+ = \hat{T}^{-1}$  представляет собой также преобразование симметрии (обратное преобразованию  $\hat{T}$ ).

Theorem. A unitary matrix  $T$  has e.f.'s that are orthogonal (like those of a hermitian matrix), and e.v.'s of modulus 1.

Proof:

$$T = \underbrace{\frac{T + \tilde{T}}{2}} + i \underbrace{\frac{T - \tilde{T}}{2i}}$$

these are  
hermitian  
and commute

therefore they have a common set of e.f.'s that are orthogonal. They are also the e.f.'s of  $T$ . (First part of theorem). Take these eigenvectors as base and reduce  $T$  to diagonal form. Then from  $T\tilde{T}=1$  follows that diagonal elements have modulus 1 (Second part of theorem).

$$(9) \left\{ \begin{array}{ll} \text{Therefore: e.v.'s of } T & e^{i\alpha_s} \\ \text{e.v.'s of } \tilde{T} & e^{-i\alpha_s} \\ \text{e.v.'s of } \frac{T + \tilde{T}}{2} & \cos \alpha_s \\ \text{e.v.'s of } \frac{T - \tilde{T}}{2i} & \sin \alpha_s \end{array} \right\} \begin{array}{l} \text{all belong to} \\ \text{same wave fct } \psi^{(s)} \end{array}$$

$\alpha_s$  is real

(10) { All above 4 matrices commute with each other and with  $H$ . Therefore they are true constants and their wave functions  $\psi^{(s)}$  may be chosen to coincide with the eigenfunctions of the energy

■ **ТЕОРЕМА.** Собственные функции унитарной матрицы преобразования симметрии  $\hat{T}$  ортогональны (подобно собственным функциям эрмитовой матрицы), а модули их собственных значений равны единице.

**Доказательство.**

$$\hat{T} = \frac{\hat{T} + \hat{T}^+}{2} + i \frac{\hat{T} - \hat{T}^+}{2i} = \hat{A} + i\hat{B}.$$

Матрицы  $A$  и  $B$  эрмитовы и коммутируют друг с другом; следовательно, они имеют общую систему собственных функций, причем эти функции ортогональны. Очевидно, эти же функции являются собственными функциями оператора  $\hat{T}$  (первая часть теоремы доказана). Возьмем теперь собственные векторы этих функций в качестве базиса и приведем матрицу  $\hat{T}$  к диагональному виду. Тогда из равенства  $\hat{T}\hat{T}^+ = 1$  следует, что диагональные элементы исследуемой матрицы по модулю равны единице (тем самым доказана и вторая часть теоремы). Таким образом,

$$\begin{aligned} \text{Собственные значения оператора } \hat{T} &\text{ равны } e^{i\alpha_s}, \\ \text{Собственные значения оператора } \hat{T}^+ &\text{ равны } e^{-i\alpha_s}, \\ \text{Собственные значения оператора } \hat{A} &\text{ равны } \cos \alpha_s, \\ \text{Собственные значения оператора } \hat{B} &\text{ равны } \sin \alpha_s, \end{aligned} \quad (20.9)$$

где числа  $\alpha_s$  — действительные.

Все четыре собственных значения соответствуют одной и той же волновой функции  $\psi^{(s)}$ .

Все четыре матрицы (20.9) коммутируют друг с другом и с гамильтонианом  $\hat{H}$ . Следовательно, они не меняются во времени, а их собственные функции  $\psi^{(s)}$  могут быть выбраны так, что совпадут с собственными функциями оператора энергии (гамильтониана). (20.10)



Symmetry Group. is the ensemble of all the transformations corresponding to a certain symmetry property: e.g. all the rotations of the  $x, y, z$ -axes form the rotations group

Comments on group theory of Q. M.

- (11) { Representation of a group = ensemble of unitary matrices corresponding to all operations of group and having same algebra.

- (12) { Irreducible representation = representation that cannot be transformed to  $\begin{pmatrix} \text{diag} & 0 \\ 0 & \text{diag} \end{pmatrix}$  for all its matrices at same time.

- (13) { Property: Irred. repres. are determined <sup>uniquely</sup> by the abstract structure of the group

- (14) { Usually useful to. Choose a set of base vectors  $\varphi^{(1)}, \varphi^{(2)}, \dots, \varphi^{(n)}$  that split into ~~some~~ sub-sets each one of which <sup>(get!)</sup> is ~~transformed~~ transformed into itself by all operations of the symmetry group according to <sup>one of</sup> its irreducible <sup>representations</sup>.

Wigner theorem. If a quantity A commutes with

- (15) { all operations of a group (e.g. the Hamiltonian), the matrix elements of A <sup>(for the above choice of base vectors)</sup> vanish when the two vectors  $\varphi^{(i)}, \varphi^{(k)}$  correspond to different irred. repres. Otherwise

$$\langle \varphi^{(i)} | A | \varphi^{(k)} \rangle = a_{i,k} \delta_{i,k} \quad \text{with } a_{i,k} \text{ a number provided } R_i = R_k$$

**Определения.** Группой \* симметрии называется совокупность всех преобразований, соответствующих определенному свойству симметрии. Например, все повороты вокруг осей  $x, y, z$  образуют группу вращений.

Представлением группы называется совокупность унитарных матриц, соответствующих всем преобразованиям группы и обладающих общей алгеброй. (20.11)

Неприводимым представлением называется такое представление, все матрицы которого не могут быть одновременно приведены к виду (20.12)

$$\begin{array}{|c|c|} \hline \text{штриховка} & 0 \\ \hline 0 & \text{штриховка} \\ \hline \end{array}$$

свойство. Неприводимые представления однозначно определяются абстрактной структурой группы. (20.13)

Полезный прием состоит в том, чтобы выбрать такую систему базисных векторов

$$\varphi^{(1)}, \varphi^{(2)}, \dots,$$

что она распадается на подсистемы

$$\varphi^{(l_1)}, \varphi^{(l_2)}, \varphi^{(l_3)}, \dots, \varphi^{(l_p)}, \quad (20.14)$$

каждая из которых (система  $l$ ) под действием всех преобразований группы симметрии переходит сама в себя. Такое разделение на подсистемы, не зацепляющиеся друг за друга при преобразованиях, соответствует явному нахождению неприводимых представлений рассматриваемой группы  $R_l$ .

■ ТЕОРЕМА ВИГНЕРА. Если величина  $A$  (например, гамильтониан  $\hat{H}$ ) коммутирует со всеми преобразованиями группы, то матричные элементы  $\varphi^{+(i)} A \varphi^{(k)}$  при выборе базисных векторов (20.14) равны нулю, коль скоро векторы  $\varphi^{(i)}$  и  $\varphi^{(k)}$  соответствуют различным неприводимым представлениям. Иначе говоря, (20.15)

$$\langle \varphi^{(i)} | \hat{A} | \varphi^{(k)} \rangle = a_i \lambda \delta_{ik},$$

где  $a_i, \lambda$  — число, причем  $R_l = R_\lambda$ .

(18)

Application 1 - Translation symmetry and the conservation of momentum. For systems with internal forces only - (Means homogeneity of physical space)

(16)  $T(\vec{a}) = T(a, b, c) = \text{translation by } [a, b, c] \equiv \vec{a}$   
Observe: all these  $T$ 's corresponding to  $\vec{a}$  &  $\vec{a}'$  commute among themselves and of course with  $H$ . (Abelian group). Therefore: choose representation in which  $H$  & all  $T$ 's are orthogonal. For a wave function  $\psi$  then

$$T(\vec{a}) \psi = e^{i\alpha(\vec{a})} \psi \quad \alpha(\vec{a}) \text{ is a function of the vector } \vec{a}$$

From  $T(\vec{a}) T(\vec{a}') = T(\vec{a} + \vec{a}')$  conclude

$$\alpha(\vec{a}) + \alpha(\vec{a}') = \alpha(\vec{a} + \vec{a}') \quad \text{i.e.}$$

$$\alpha = \vec{k} \cdot \vec{a} = k_x a + k_y b + k_z c$$

$\vec{k}$  is a constant vector for the given wave function  $\psi$ . It would be different for another wave function.

(19) Find:  $\hbar \vec{k} = \text{momentum of system}$ . Proof:

Take an infinitesimal translation by  $\epsilon$  along  $x$   
( $a = \epsilon, b = 0, c = 0$ )  $T = e^{i k_x \epsilon} = 1 + i k_x \epsilon$

$$T \psi(x, y, z, x_2, y_2, z_2, \dots) = (1 + i k_x \epsilon) \psi = \psi + i k_x \epsilon \psi$$

$$\hookrightarrow \psi(x_1 + \epsilon, y_1, z_1, x_2 + \epsilon, y_2, z_2, \dots) = \psi + \epsilon \left( \frac{\partial \psi}{\partial x_1} + \frac{\partial \psi}{\partial x_2} + \dots \right)$$

$$(20) \left\{ \begin{aligned} k_x \psi &= \frac{1}{i} \left( \frac{\partial \psi}{\partial x_1} + \frac{\partial \psi}{\partial x_2} + \dots \right) = \frac{1}{\hbar} (\hat{p}_x^{(1)} \psi + \hat{p}_x^{(2)} \psi + \dots) \\ \hbar k_x &= \sum \hat{p}_x^{(s)} \quad \text{summed to all mass points} \end{aligned} \right.$$

**приложение 1. Трансляционная симметрия и закон сохранения импульса.** Для замкнутой системы (действуют лишь внутренние силы, что означает однородность физического пространства) имеет место симметрия относительно сдвига (трансляции), описываемого преобразованием

$$\hat{T}(\mathbf{a}) = \hat{T}(\mathbf{a}, b, c) = \text{Сдвиг всех координат на } \mathbf{a} \quad \left| \quad (20.16) \right.$$

$$[\mathbf{a} \equiv (a, b, c)].$$

**Замечание.** Все операторы  $\hat{T}$ , соответствующие различным векторам (сдвигам)  $\mathbf{a}$ ,  $\mathbf{a}'$  и т. д., коммутируют между собой, а также, конечно, и с гамильтонианом  $\hat{H}$  (образуя тем самым так называемую *абелеву группу*). Именно поэтому целесообразно выбрать такое представление, в котором  $\hat{H}$  и все  $\hat{T}$  описываются диагональными матрицами. Тогда, обозначая волновую функцию через  $\psi$ , можно записать

$$\hat{T}(\mathbf{a})\psi = e^{i\alpha(\mathbf{a})}\psi \quad [\alpha = \alpha(\mathbf{a}) - \text{функция вектора } \mathbf{a}].$$

$$\left. \begin{aligned} \text{На основании } \hat{T}(\mathbf{a})\hat{T}(\mathbf{a}') = \hat{T}(\mathbf{a} + \mathbf{a}') \text{ заключаем, что} \\ \alpha(\mathbf{a}) + \alpha(\mathbf{a}') = \alpha(\mathbf{a} + \mathbf{a}'), \text{ т. е.} \\ \alpha = \mathbf{k} \cdot \mathbf{a} = k_x a + k_y b + k_z c, \end{aligned} \right| \quad (20.17)$$

где  $\mathbf{k}$  — постоянный для данной волновой функции  $\psi$  вектор. Для другой волновой функции вектор  $\mathbf{k}$  — другой. Отсюда

$$\hat{T}(\mathbf{a}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}} - \text{неприводимое представление} \quad \left| \quad (20.18) \right.$$

$$\text{группы трансляций.}$$

$$\text{вывод. Величина } \hbar \mathbf{k} \text{ есть импульс системы.} \quad (20.19).$$

**Доказательство.** Возьмем бесконечно малый сдвиг вдоль оси  $x$  ( $a = \varepsilon$ ,  $b = c = 0$ ); тогда

$$\hat{T} = e^{ik_x \varepsilon} \approx 1 + ik_x \varepsilon$$

и

$$\hat{T}\psi(x_1, y_1, z_1; x_2, y_2, z_2; \dots) \approx (1 + ik_x \varepsilon)\psi = \psi + ik_x \varepsilon \psi;$$

с другой стороны,

$$\begin{aligned} \hat{T}\psi(x_1, y_1, z_1; x_2, y_2, z_2; \dots) = \\ = \psi(x_1 + \varepsilon, y_1, z_1; x_2 + \varepsilon, y_2, z_2; \dots) \approx \psi + \varepsilon \left( \frac{\partial \psi}{\partial x_1} + \frac{\partial \psi}{\partial x_2} + \dots \right). \end{aligned}$$

Сравнивая эти выражения, находим:

$$k_x \psi = \frac{1}{i} \left( \frac{\partial \psi}{\partial x_1} + \frac{\partial \psi}{\partial x_2} + \dots \right) = \frac{1}{\hbar} (p_x^{(1)}\psi + p_x^{(2)}\psi + \dots),$$

$$\text{откуда } \hbar k_x = \sum_s p_x^{(s)} \text{ или } \hbar \mathbf{k} = \sum_s \mathbf{p}^{(s)}. \quad \left| \quad (20.20) \right.$$

Здесь суммирование проводится по всем материальным точкам.

Wave functions of  $\vec{p}$

$$\psi = e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}_1} \varphi(\vec{x}_2 - \vec{x}_1, \vec{x}_3 - \vec{x}_1, \dots)$$

(21)

$\vec{p}$  here is a vector with components that are numbers, not operators.

They are the e.v.'s of the operators

$$p_x, p_y, p_z.$$

Frequently one makes a transformation to a moving system of reference (Galileian or Lorentz as case may be) in order to reduce system to c.o.m. frame (barsy).

Application 2 - Rotation symmetry & the conserv.  
of angular momentum

For systems with internal forces only or <sup>also</sup> with external  $\oint$  central forces. Center of rotation in this case is the origin of the central forces.

Take

$$T = \text{rot. by infinitesimal } \omega_z \text{ around } z \text{ axis}$$

$$x \rightarrow x - \omega_z y \quad y \rightarrow y + \omega_z x, \quad z \rightarrow z$$

$$T \psi(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, \dots) = \psi(x_1 - \omega_z y_1, y_1 + \omega_z x_1, z_1, \dots)$$

(13)

Use Hermitian operator

$$M_z = \frac{\hbar}{\omega_z} \frac{T - T^{-1}}{2i}$$

Also similarly  $M_x$  and  $M_y$  and

(24)

$$M^2 = M_x^2 + M_y^2 + M_z^2$$

In it  $\vec{p} = 0$  and  $\psi$  is a function of the relative coordinates only.  
Comments on quantum generalization

Волновые функции, зависящие от  $\mathbf{p}$ , имеют вид

$$\psi = e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}_1} \varphi(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_3 - \mathbf{x}_1, \dots); \quad (20.21)$$

$\mathbf{p}$  — вектор, компоненты которого есть числа, а не операторы; эти компоненты — собственные значения операторов  $\hat{p}_x$ ,  $\hat{p}_y$  и  $\hat{p}_z$ .

Часто используются преобразования к движущейся системе отсчета (преобразование Галилея или преобразование Лоренца); например, чтобы перейти к системе центра масс (центра инерции).. В такой системе отсчета

$$\mathbf{p} = 0 \text{ и волновая функция } \psi \text{ зависит только от относительных координат материальных точек}^{1)}. \quad (20.22)$$

Системы центра масс важны и с более общей точки зрения\*.

**приложение 2. Симметрия относительно поворотов и закон сохранения момента импульса.** Рассматриваемый случай реализуется, когда на систему действуют только внутренние силы (замкнутая система) или когда внешние силы обладают центральной симметрией. В последнем случае центр вращения должен совпадать с источником внешних (центральных) сил. Пусть

$\hat{T}$  — оператор поворота на бесконечно малый угол  $\omega_z$  вокруг оси  $z$ ; этот оператор дает преобразование

$$\begin{aligned} x &\rightarrow x - \omega_z y, \\ y &\rightarrow y + \omega_z x, \\ z &\rightarrow z, \end{aligned}$$

так что

$$\hat{T} \psi(x_1, y_1, z_1, \dots) = \psi(x_1 - \omega_z y_1, y_1 + \omega_z x_1, z_1, \dots).$$

Образует эрмитов оператор

$$\hat{M}_z = \frac{\hbar}{\omega_z} \frac{\hat{T} - \hat{T}^+}{2i}.$$

Аналогичным образом можно построить эрмитовы операторы  $\hat{M}_x$ ,  $\hat{M}_y$  и оператор

$$\hat{M}^2 = \hat{M}_x^2 + \hat{M}_y^2 + \hat{M}_z^2. \quad (20.24)$$

<sup>1)</sup> Конечно, если систему можно считать изолированной. — Прим. ред.

Follows:

- (25)  $\left\{ \begin{array}{l} H_x, H_y, H_z, H^2 \\ \text{are constants of motion. (Conservation of ang. mom.)} \\ \text{also from their definition follow the commutation} \\ \text{relations} \end{array} \right.$

(26)  $\left\{ \begin{array}{l} [H_x, H_y] = \frac{\hbar}{i} H_z \quad \& \text{similar or} \\ \vec{H} \times \vec{H} = \frac{\hbar}{i} \vec{H} \\ [H_x, H^2] = 0 \quad \& \text{similar} \end{array} \right.$

like for the ang. mom of a single point  
(p 18-1)

One proves that the matrix structure of (15) found in (18)-(12)(13)(14)(17)(18) follows from commutation rules only and obtains therefore for (15) with the following exception: In sect. 18  $l$  was an integral number. In general, however, also half odd values of  $l$  are allowable. This is important for the quantum theory of spin.

Application 3  $\Rightarrow$  Reflection symmetry + conservation of parity. For systems with internal + central forces only one postulates reflection symmetry

$T$  corresponds to  $x \rightarrow -x \quad y \rightarrow -y \quad z \rightarrow -z$   
reflection about the origin. This implies that right + left are physically equivalent.

(27) The transformation  $T$  (2) corresponding to a rotation by  $\alpha$  around  $\hat{z}$  as  $\hat{z} \rightarrow \hat{z}$  in the representation in which  $H$  and  $H^2$  are diagonal  
 $T(\alpha) \psi = e^{i\alpha M_z} \psi$   
 $\psi = \text{eigenstate of } M_z$

Следовательно,

Физические величины (наблюдаемые)  
 $M_x, M_y, M_z, M^2$  являются константами движения. (20.25)

Это закон сохранения момента импульса.

Из определения операторов (20.25) следуют также перестановочные соотношения:

$$[\hat{M}_x, \hat{M}_y] = \frac{\hbar}{i} \hat{M}_z, \quad [\hat{M}_y, \hat{M}_z] = \frac{\hbar}{i} \hat{M}_x, \quad [\hat{M}_z, \hat{M}_x] = \frac{\hbar}{i} \hat{M}_y,$$

т. е.

$$[\mathbf{M} \times \mathbf{M}] = \frac{\hbar}{i} \mathbf{M},$$

$$[\hat{M}_x, \hat{M}^2] = [M_y, \hat{M}^2] = [\hat{M}_z, \hat{M}^2] = 0. \quad (20.26)$$

Полученные для системы частиц перестановочные соотношения имеют в точности тот же вид, что и соотношения для оди-  
 ночной материальной точки (18.1)—(18.3).

Можно показать, что матричная структура (20.15), отра-  
 женная в серии равенств (18.12)—(18.14), (18.17) и (18.18),  
 следует только из перестановочных соотношений, и тем самым  
 доказать в общем случае теорему (20.15), но со следующим  
*важным отличием*: в лекции 18 было показано, что орбиталь-  
 ное квантовое число  $l$  принимает целые значения; в общем  
 случае, однако, оказываются допустимыми также *полуцелые*  
 $[(2n+1)/2]$  значения  $l$ . Последнее обстоятельство особенно  
 важно в квантовой теории спина.

Например, преобразование  $\hat{T}(\alpha)$ , соответствующее повороту  
 на угол  $\alpha$  вокруг некоторой оси  $z$ , при действии на свою  
 собственную функцию дает

$$\hat{T}(\alpha) \psi = e^{i m \alpha} \psi; \quad (20.27)$$

если использовать представление, в котором матрицы  $M_z$  и  $M^2$   
 диагональны, то  $m$  будет целым или полуцелым числом.

**приложение 3. Симметрия относительно отражения (инверсии) и  
 закон сохранения четности.** Если в физической системе действуют  
 лишь внутренние и центральные внешние силы, то можно по-  
 стулировать существование симметрии относительно отра-  
 жения (инверсии) координат. В этом случае преобразова-  
 ние  $\hat{T}$  соответствует замене

$$x \rightarrow -x, \quad y \rightarrow -y, \quad z \rightarrow -z$$

и представляет собой отражение относительно начала коорди-  
 нат. (Источник центральных сил, как обычно, помещается в  
 начале координат.)

Условие симметрии относительно отражения физически  
 означает эквивалентность правой и левой систем координат.



$$(28) \quad T\psi(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, \dots) = \psi(-x_1, -y_1, -z_1, -x_2, -y_2, -z_2, \dots)$$

Observe

$$(29) \quad T^2 = 1$$

Also  $T$  commutes with the operators (25) and of course with  $H$ .

(30) Normally choose eigenfunctions of  $M^2$ ,  $M_z$ , and  $T$  (they all intercommute). Because of (29) the e.v.'s of  $T$ , which in general are given by (9) become:

$$(31) \quad \text{e.v.'s of } T \text{ are } \pm 1$$

This permits classification of states

$$(32) \quad \left\{ \begin{array}{ll} \text{even} & \text{for } T = +1 \\ \text{odd} & \text{for } T = -1 \end{array} \right\} (\text{parity})$$

The parity is a property that does not change as long as only central & internal forces act on system.

Из данного определения  $\hat{T}$  следует, что

$$\hat{T}\psi(x_1, y_1, z_1; x_2, y_2, z_2; \dots) = \psi(-x_1, -y_1, -z_1; -x_2, -y_2, -z_2; \dots). \quad (20.28)$$

*Свойства преобразования инверсии.* Нетрудно видеть (применив преобразование  $\hat{T}$  дважды), что

$$\hat{T}^2 = 1. \quad (20.29)$$

Кроме того, оператор инверсии координат  $\hat{T}$  коммутирует с операторами (20.25) и, конечно, с гамильтонианом  $\hat{H}$ .

$$\left. \begin{array}{l} \text{За основу обычно берут собственные функции} \\ \text{операторов } \hat{M}^2, \hat{M}_z \text{ и } \hat{T} \end{array} \right| \quad (20.30)$$

(все они коммутируют между собой). Из равенства (20.29) следует, что собственные значения оператора инверсии  $\hat{T}$  [в общем случае даваемые формулой (20.9)] равны

$$\text{Собственные значения } \hat{T} = \pm 1. \quad (20.31)$$

Это обстоятельство позволяет ввести следующую классификацию состояний физических систем:

$$\left. \begin{array}{l} \text{Состояние} \\ \text{четное} — \text{при } T = +1 \text{ (положительная четность);} \\ \text{нечетное} — \text{при } T = -1 \text{ (отрицательная четность).} \end{array} \right| \quad (20.32)$$

*Четность есть свойство системы, сохраняющееся пока и поскольку на систему действуют только центральные внешние силы и произвольные внутренние силы<sup>1)</sup>.*

<sup>1)</sup> С того времени, как Э. Ферми читал эти лекции, было открыто несохранение четности при слабых взаимодействиях. См. основные работы в сборнике «Новые свойства элементарных частиц», ИЛ, 1957.—Прим. ред.

# 21- Time independent perturbation theory,

$$(1) \quad H = \underbrace{H_0}_{\text{unpert.}} + \underbrace{\mathcal{H}_0}_{\text{perturbation}}$$

$$(2) \quad H_0 u_0^{(n)} = E_0^{(n)} u_0^{(n)}$$

$$(3) \quad H = H_0 + \lambda \mathcal{H}_0 \quad \lambda \rightarrow 1 \text{ at end}$$

$$(4) \quad u^{(n)} = u_0^{(n)} + \lambda u_1^{(n)} + \lambda^2 u_2^{(n)} + \dots$$

$$(5) \quad E^{(n)} = E_0^{(n)} + \lambda E_1^{(n)} + \lambda^2 E_2^{(n)} + \dots$$

$$(6) \quad (H_0 + \lambda \mathcal{H}_0) u^{(n)} = E^{(n)} u^{(n)}$$

$$(7) \quad \left\{ \begin{array}{l} H_0 u_0^{(n)} = E_0^{(n)} u_0^{(n)} \leftarrow \text{this is (2)} \\ H_0 u_1^{(n)} - E_0^{(n)} u_1^{(n)} = E_1^{(n)} u_0^{(n)} = -\mathcal{H}_0 u_0^{(n)} \\ H_0 u_2^{(n)} - E_0^{(n)} u_2^{(n)} - E_2^{(n)} u_0^{(n)} = -\mathcal{H}_0 u_1^{(n)} + E_1^{(n)} u_1^{(n)} \end{array} \right.$$

$$(8) \quad H_0 u_1^{(n)} - E_0^{(n)} u_1^{(n)} = E_1^{(n)} u_0^{(n)} = -\mathcal{H}_0 u_0^{(n)}$$

$$(9) \quad H_0 u_2^{(n)} - E_0^{(n)} u_2^{(n)} - E_2^{(n)} u_0^{(n)} = -\mathcal{H}_0 u_1^{(n)} + E_1^{(n)} u_1^{(n)}$$

Put  $u_1^{(n)} = \sum' c_{nm}^{(1)} u_0^{(m)}$   
 $u_2^{(n)} = \sum' c_{nm}^{(2)} u_0^{(m)}$

Substitute in (8), (9) using (e) or (7)

$$(11) \quad \sum' c_{nm}^{(1)} (E_0^{(n)} - E_0^{(m)}) u_0^{(m)} = -\mathcal{H}_0 u_0^{(n)}$$

$$(12) \quad \sum' c_{nm}^{(2)} (E_0^{(n)} - E_0^{(m)}) u_0^{(m)} = -\mathcal{H}_0 u_1^{(n)} + E_1^{(n)} u_1^{(n)}$$

Первый шаг теории возмущений — представление оператора Гамильтона системы в форме

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{\mathcal{H}}, \quad (21.1)$$

где  $\hat{\mathcal{H}}$  — малая, не зависящая явно от времени добавка (*возмущение*) к невозмущенному оператору  $\hat{H}_0$ . Собственные значения и собственные функции невозмущенного гамильтониана  $H_0$  определяются из уравнения

$$\hat{H}_0 u_0^{(n)} = E_0^{(n)} u_0^{(n)}, \quad (21.2)$$

где  $u_0^{(n)}$  — собственные функции гамильтониана  $\hat{H}_0$  (ортонормированные). Из соображений удобства будем писать в дальнейшем

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{\mathcal{H}}, \quad (21.3)$$

где постоянная  $\lambda$  считается малой; этот прием позволит более наглядно разделить уравнения различных приближений, причем в конечном результате  $\lambda \rightarrow 1$ . Разложим собственные функции и собственные значения полного гамильтониана  $\hat{H}$  в ряд по степеням  $\lambda$ :

$$u^{(n)} = u_0^{(n)} + \lambda u_1^{(n)} + \lambda^2 u_2^{(n)} + \dots; \quad (21.4)$$

$$E^{(n)} = E_0^{(n)} + \lambda E_1^{(n)} + \lambda^2 E_2^{(n)} + \dots; \quad (21.5)$$

тогда уравнение для собственных функций  $u^{(n)}$  и собственных значений  $E^{(n)}$  полного гамильтониана

$$(\hat{H}_0 + \lambda \hat{\mathcal{H}}) u^{(n)} = E^{(n)} u^{(n)} \quad (21.6)$$

примет вид

$$\begin{aligned} & (\hat{H}_0 + \lambda \hat{\mathcal{H}})(u_0^{(n)} + \lambda u_1^{(n)} + \dots) = \\ & = (E_0^{(n)} + \lambda E_1^{(n)} + \dots)(u_0^{(n)} + \lambda u_1^{(n)} + \dots) \end{aligned}$$

или

$$\begin{aligned} & \hat{H}_0 u_0^{(n)} + \lambda (\hat{H}_0 u_1^{(n)} + \hat{\mathcal{H}} u_0^{(n)}) + \lambda^2 (\hat{H}_0 u_2^{(n)} + \hat{\mathcal{H}} u_1^{(n)}) + \dots = \\ & = E_0^{(n)} u_0^{(n)} + \lambda (E_0^{(n)} u_1^{(n)} + \mathcal{H} u_0^{(n)}) + \lambda^2 (E_0^{(n)} u_2^{(n)} + E_1^{(n)} u_1^{(n)} + E_2^{(n)} u_0^{(n)}) + \dots \end{aligned}$$

Приравнявая коэффициенты при  $\lambda$  в соответствующих степенях, получаем систему уравнений

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{H}_0 u_0^{(n)} = E_0^{(n)} u_0^{(n)}, \end{array} \right. \quad (21.7)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{H}_0 u_1^{(n)} - E_0^{(n)} u_1^{(n)} - E_1^{(n)} u_0^{(n)} = -\hat{\mathcal{H}} u_0^{(n)}, \end{array} \right. \quad (21.8)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{H}_0 u_2^{(n)} - E_0^{(n)} u_2^{(n)} - E_1^{(n)} u_1^{(n)} - E_2^{(n)} u_0^{(n)} = -\hat{\mathcal{H}} u_1^{(n)} + E_1^{(n)} u_1^{(n)}, \\ \dots \dots \dots \end{array} \right. \quad (21.9)$$

Matrix element

$$(13) \quad \begin{aligned} \mathcal{H}_{mn} &= (\psi_0^{(m)} | \mathcal{H} | \psi_0^{(n)}) = \langle m | \mathcal{H} | n \rangle = \\ &= \int \psi_0^{m*} \mathcal{H} \psi_0^n dx = \widetilde{\psi}_0^{(m)} \mathcal{H} \psi_0^{(n)} \end{aligned}$$

(a) Determine  $E_1^{(n)}$ . Multiply (11) by  $\widetilde{\psi}_0^{(n)}$  to left, use orthogonality

$$(14) \quad \widetilde{\psi}_0^n \psi_0^m = \delta_{nm}$$

$$(15) \quad E_1^{(n)} = \widetilde{\psi}_0^{(n)} \mathcal{H} \psi_0^{(n)} = \mathcal{H}_{nn}$$

~~For~~ First order perturbation of energy is mean value of  $\mathcal{H}$  over unperturbed state.

Next  $\widetilde{\psi}_0^{(n)} \times (11)$  yields

$$(16) \quad c_{nm}^{(1)} = \frac{\mathcal{H}_{mn}}{E_0^{(n)} - E_0^{(m)}}$$

or e.f.'s to first order

$$(17) \quad \psi_0^{(n)} + \sum_m' \frac{\mathcal{H}_{mn}}{E_0^{(n)} - E_0^{(m)}} \psi_0^{(m)}$$

Same treatment on (12) yields

$$(18) \quad E_2^{(n)} = \sum_m' \frac{\mathcal{H}_{mn} \mathcal{H}_{mm}}{E_0^{(n)} - E_0^{(m)}} = \sum_m' \frac{|\mathcal{H}_{mn}|^2}{E_0^{(n)} - E_0^{(m)}}$$

$$(19) \quad c_{nm}^{(2)} = \sum_s' \frac{\mathcal{H}_{ms} \mathcal{H}_{sn}}{(E_0^{(n)} - E_0^{(s)})(E_0^{(s)} - E_0^{(m)})} - \frac{\mathcal{H}_{mn} \mathcal{H}_{nn}}{(E_0^{(n)} - E_0^{(m)})^2}$$

[Уравнение (21.7) совпадает с уравнением (21.2) и тем самым подтверждает его.]

Разложим функции  $u_i^{(n)}$  в ряд по собственным функциям  $u_0^{(n)}$ :

$$\left. \begin{aligned} u_1^{(n)} &= \sum_m' C_{nm}^{(1)} u_0^{(m)}, \\ u_2^{(n)} &= \sum_m' C_{nm}^{(2)} u_0^{(m)}, \\ &\dots \end{aligned} \right\} \quad (21.10)$$

Штрих в суммах означает, что суммирование ведется по всем значениям  $m$ , кроме значения  $m=n$ .

Подставив эти разложения в (20.8) и (20.9) и используя (21.2) или (21.7), получим:

$$\sum_m' C_{nm}^{(1)} (E_0^{(m)} - E_0^{(n)}) u_0^{(m)} - E_1^{(n)} u_0^{(n)} = -\hat{\mathcal{H}} u_0^{(n)}, \quad (21.11)$$

$$\sum_m' C_{nm}^{(2)} (E_0^{(m)} - E_0^{(n)}) u_0^{(m)} - E_2^{(n)} u_0^{(n)} = -\hat{\mathcal{H}} u_1^{(n)} + E_1^{(n)} u_1^{(n)}, \quad (21.12)$$

.....

Матричный элемент возмущающей добавки  $\hat{\mathcal{H}}_{mn}$  равен

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_{mn} &= (u_0^{(m)} | \hat{\mathcal{H}} u_0^{(n)}) \equiv \langle m | \hat{\mathcal{H}} | n \rangle = \\ &= \int u_0^{(m)*} \hat{\mathcal{H}} u_0^{(n)} dx = u_0^{+(m)} \hat{\mathcal{H}} u_0^{(n)}. \end{aligned} \quad (21.13)$$

Найдем добавку первого порядка к энергии  $E_1^{(n)}$ ; для этого умножим уравнение (21.11) слева на  $u_0^{+(n)}$  и, используя свойство ортогональности системы функций нулевого приближения

$$u_0^{+(n)} u_0^{(m)} = \delta_{nm}, \quad (21.14)$$

$$\text{получим} \quad E_1^{(n)} = u_0^{+(n)} \hat{\mathcal{H}} u_0^{(n)} = \mathcal{H}_{nn}. \quad (21.15)$$

Вывод. Член первого порядка теории возмущений для собственных значений энергии равняется *среднему значению оператора  $\hat{\mathcal{H}}$  по функциям невозмущенного состояния*.

Далее, умножая (21.11) слева на  $u_0^{+(m)}$ , получим выражения для коэффициентов разложения

$$C_{nm}^{(1)} = \frac{\mathcal{H}_{mn}}{E_0^{(n)} - E_0^{(m)}}; \quad (21.16)$$

отсюда *собственные функции первого приближения* равны

$$u_0^{(n)} + \sum_m' \frac{\mathcal{H}_{mn}}{E_0^{(n)} - E_0^{(m)}} u_0^{(m)}. \quad (21.17)$$

Аналогичным образом из уравнения (21.12) получим:

$$E_2^{(n)} = \sum_m' \frac{\mathcal{H}_{nm} \mathcal{H}_{mn}}{E_0^{(n)} - E_0^{(m)}} = \sum_m' \frac{|\mathcal{H}_{nm}|^2}{E_0^{(n)} - E_0^{(m)}}; \quad (21.18)$$

$$C_{nm}^{(2)} = \sum_s' \frac{\mathcal{H}_{ms} \mathcal{H}_{sn}}{(E_0^{(n)} - E_0^{(s)}) (E_0^{(n)} - E_0^{(m)})} - \frac{\mathcal{H}_{mn} \mathcal{H}_{nn}}{(E_0^{(n)} - E_0^{(m)})^2}. \quad (21.19)$$

Example - Lin. oscillator perturbed by const. force  $F$

$$(20) \quad \mathcal{H}'_0 = -Fx$$

$$(21) \quad \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{H}'_{nm} = -Fx_{nm} \quad \text{From (p. 17-6)} \\ x_{n,n+1} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sqrt{n+1} \\ x_{n,n-1} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sqrt{n} \end{array} \right. \quad E_0^{(n)} = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$$

$$x_{n,n-3} = x_{n,n-2} = x_{nn} = x_{n,n+2} = x_{n,n+3} = \dots = 0$$

Take part of energy. First order

$$(22) \quad E_1^{(n)} = \mathcal{H}'_{nn} = -Fx_{nn} = 0$$

Second order

$$(23) \quad \left\{ \begin{array}{l} E_2^{(n)} = \sum' \frac{|\mathcal{H}'_{nm}|^2}{E_0^n - E_0^m} = F^2 \left( \frac{|x_{n,n+1}|^2}{-\hbar\omega} + \frac{|x_{n,n-1}|^2}{\hbar\omega} \right) = \\ = \frac{F^2}{\hbar\omega} \left( -\frac{\hbar}{2m\omega} (n+1) + \frac{\hbar}{2m\omega} n \right) = -\frac{F^2}{2m\omega^2} \end{array} \right.$$

Energy of all states is decreased by  $F^2/(2m\omega^2)$

Direct proof

$$(24) \quad H = \frac{1}{2m} p^2 + \frac{m\omega^2}{2} x^2 - Fx = \frac{1}{2m} p^2 + \frac{m\omega^2}{2} \left(x - \frac{F}{m\omega^2}\right)^2 - \frac{F^2}{2m\omega^2}$$

correction of energy as above

shift of eq. position

**ПРИМЕР 1. Линейный осциллятор, возмущаемый постоянной силой  $F$ .**  
Возмущение гамильтониана имеет вид

$$\hat{\mathcal{H}} = -F\hat{x}. \quad (21.20)$$

Матричные элементы  $\hat{\mathcal{H}}$  равны

$$\mathcal{H}_{nm} = -Fx_{nm};$$

согласно соотношениям (17.23), записываем:

$$\begin{aligned} x_{n, n+1} &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sqrt{n+1}, \quad x_{n, n-1} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sqrt{n}, \\ E_0^{(n)} &= \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right), \\ \dots = x_{n, n-3} &= x_{n, n-2} = x_{nn} = x_{n, n+2} = x_{n, n+3} = \dots = 0. \end{aligned} \quad (21.21)$$

Итак, в первом порядке теории возмущений поправка для энергии равна нулю:

$$E_1^{(n)} = \mathcal{H}_{nn} = -Fx_{nn} = 0. \quad (21.22)$$

Во втором порядке

$$\begin{aligned} E_2^{(n)} &= \sum_m \frac{|\mathcal{H}_{nm}|^2}{E_0^{(n)} - E_0^{(m)}} = F^2 \left( \frac{|x_{n, n+1}|^2}{-\hbar\omega} + \frac{|x_{n, n-1}|^2}{\hbar\omega} \right) = \\ &= \frac{F^2}{\hbar\omega} \left( -\frac{\hbar}{2m\omega} (n+1) + \frac{\hbar}{2m\omega} n \right) = -\frac{F^2}{2m\omega^2}. \end{aligned} \quad (21.23)$$

Таким образом, энергии всех состояний уменьшаются по сравнению с невозмущенными значениями на величину  $F^2/2m\omega^2$ .

Проведем непосредственную проверку полученного результата. Для этого произведем тождественное преобразование полного гамильтониана:

$$H = \frac{1}{2m} p^2 + \frac{m\omega^2}{2} x^2 - Fx \equiv \frac{1}{2m} p^2 + \frac{m\omega^2}{2} \left( x - \frac{F}{m\omega} \right)^2 - \frac{F^2}{2m\omega^2}. \quad (21.24)$$

Этот гамильтониан отличается от невозмущенного лишь смещением положения равновесия (координаты  $x$ ) на величину  $F/m\omega^2$ , не изменяющим величины энергии, и добавочным постоянным слагаемым  $-F^2/2m\omega^2$ , представляющим собой уже полученную поправку.



Example - Zeeman effect (no spin) ( $\vec{p} \rightarrow \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}$ )

$$(25) \quad H = \frac{1}{2M} \left( \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + U(r) \quad A = \text{vect. pot}$$

$$= \frac{1}{2M} p^2 + U(r) - \frac{e}{Mc} \vec{p} \cdot \vec{A} + \text{quad. terms in } \vec{A} \quad H = \nabla \times \vec{A}$$

neglected

(comment:  $\vec{p} \cdot \vec{A} - \vec{A} \cdot \vec{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla \cdot \vec{A} = 0$  in static case)

Mag. field  $\parallel$  to  $z$ , intensity  $B$

$$(26) \quad A_x = -\frac{B}{2} y, \quad A_y = \frac{B}{2} x, \quad A_z = 0$$

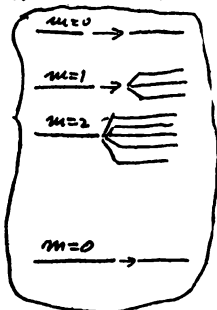
$$(27) \quad H = \frac{1}{2M} p^2 + U(r) - \frac{eB}{2Mc} (x p_y - y p_x)$$

Unpert. e.f.'s

$$(28) \quad u_{n,l,m}(r, \vartheta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

In this case pert. theory trivial because (28) are also e.f.'s of (27).

$$(29) \quad \begin{cases} H_0 u_{nlm} = E_{nl}^{(0)} u_{nlm} \\ \mathcal{H}_0 u_{nlm} = -\frac{eB}{2Mc} m u_{nlm} \\ E_{nlm} = E_{nl}^{(0)} - \frac{eB}{2Mc} m \end{cases}$$



Discussion (Selection rule  $m \rightarrow m \pm 1$ )

also corresp. principle)

Discuss role of constants of motion in limiting types of unpert. e.f.'s that enter into perturbation sums.

**ПРИМЕР 2. Эффект Зеемана для частиц со спином нуль.** В качестве невозмущенной системы рассматривается заряженная бесспиновая частица, движущаяся в кулоновском центральном поле (см. лекцию 8, где также не учитывался спин электрона). Чтобы учесть в волновом уравнении взаимодействие с внешним магнитным полем, используется обычная замена  $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}$ , где  $\mathbf{A}$  — электромагнитный вектор-потенциал (магнитная индукция  $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ ). При этом полный гамильтониан принимает вид

$$H = \frac{1}{2M} \left( \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + U(r) = \frac{1}{2M} p^2 - \frac{e}{2Mc} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}) + U(r) + \frac{e^2}{c^2} A^2. \quad (21.25)$$

(Членом, квадратичным по  $\mathbf{A}$ , в дальнейшем пренебрегаем\*.)

Коммутатор  $\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} - \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} = \frac{\hbar}{i} (\nabla \cdot \mathbf{A})$  в статическом случае равен нулю. Пусть вектор индукции магнитного поля  $\mathbf{B}$  будет параллелен оси  $z$ , так что

$$A_x = -\frac{B}{2} y, \quad A_y = \frac{B}{2} x, \quad A_z = 0. \quad (21.26)$$

Тогда

$$\hat{H} = \frac{1}{2M} \hat{p}^2 + U(r) - \frac{eB}{4Mc} (\hat{x} \hat{p}_y - \hat{y} \hat{p}_x), \quad (21.27)$$

где, очевидно,

$$\frac{1}{2M} \hat{p}^2 + U(r) = \hat{H}_0, \quad \frac{eB}{4Mc} (\hat{x} \hat{p}_y - \hat{y} \hat{p}_x) = \hat{\mathcal{H}}.$$

Собственные функции невозмущенного гамильтониана  $\hat{H}_0$ , как было установлено в лекции 8, имеют вид

$$u_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (21.28)$$

В этом случае расчет по теории возмущений осуществляется тривиально, так как собственные функции (21.28) одновременно являются и собственными функциями гамильтониана (21.27). Получим

$$\begin{array}{l} \underline{l=0; \quad m=0} \rightarrow \text{—} \\ \underline{l=1; \quad m=-1, 0, +1} \rightarrow \left\{ \begin{array}{c} \text{—} \\ \text{—} \\ \text{—} \end{array} \right\} \\ \underline{l=2; \quad -2 \leq m \leq +2} \rightarrow \left\{ \begin{array}{c} \text{—} \\ \text{—} \\ \text{—} \\ \text{—} \\ \text{—} \end{array} \right\} \end{array}$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 u_{nlm} &= E_{nl}^{(0)} u_{nlm}, \\ \hat{\mathcal{H}} u_{nlm} &= -\frac{eB}{4Mc} (\hat{x} \hat{p}_y - \hat{y} \hat{p}_x) u_{nlm} = \\ &= \frac{eB}{4Mc} M_z u_{nlm} = -\frac{eB}{4Mc} m u_{nlm}, \end{aligned}$$

$$(21.29)$$

**Фиг. 12.**

Эффект Зеемана без учета спина электрона при различных значениях орбитального квантового числа  $l$ .

так что

$$E_{nlm} = E_{nl}^{(0)} - \frac{eB}{4Mc} m.$$

Из (21.19) видно, что в результате наложения внешнего магнитного поля вырождение по  $m$  снимается и энергетические уровни атома водорода расщепляются (это расщепление показано на фиг. 12). Напомним, что спин электрона здесь не учитывался.

Bohr magneton.

Write ~~(20-11)~~ perturbation repr. int. of orbit and field in (27)

$$(30) \quad \begin{cases} \mathcal{H} = -\vec{B} \cdot \vec{\mu} & \vec{\mu} = \text{magn. mom. of orbit} \\ \vec{\mu} = \frac{e\hbar}{2mc} \left( \frac{1}{\hbar} \vec{M} \right) & \frac{\vec{M}}{\hbar} = \text{ang. mom. of orbit} \\ & \text{in } \hbar \text{ units.} \end{cases}$$

$$(31) \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{Interpret: to each unit } \hbar \text{ of ang. momentum of the} \\ \text{orbit there is associated a unit} \\ \mu_0 = \frac{e\hbar}{2mc} = 9.2732 \times 10^{-21} \text{ cm}^{5/2} \text{ g}^{1/2} \text{ sec}^{-1} \\ \text{of magnetic moment } (\mu_0 = \text{Bohr magneton}). \end{array} \right.$$

Topics for discussion.

Proof of (31) from classical orbit model

Proof of (31) from current density derived from continuity equation (2-(7)) and (2-(9))

$$(32) \quad \vec{J} = \frac{\hbar e}{2imc} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)$$

$$(33) \quad \begin{cases} \mu_z = \int \frac{1}{2} (\vec{r} \times \vec{J})_z d^3x \\ \psi = F(r, \theta) e^{im\varphi} & \psi^* = F(r, \theta) e^{-im\varphi} \\ \int |\psi|^2 d^3x = 1 \end{cases}$$

$$(34) \quad \rightarrow \mu_z = \frac{e\hbar}{2mc} m$$

Темы для обсуждения:

1. Правила отбора \*  $m \begin{matrix} \nearrow m \pm 1 \\ \searrow m \end{matrix}$  и принцип соответствия.

2. Роль констант движения в предельной форме невозможных собственных функций, входящих в суммы теории возмущений.

**Магнетон Бора.** Запишем возмущающий гамильтониан в форме энергии взаимодействия орбитального магнитного момента с внешним магнитным полем, т. е. подставим в выражение (21.27) в качестве  $\mathcal{H}$  величину

$$\mathcal{H} = -\mathbf{B}\boldsymbol{\mu},$$

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{e\hbar}{2mc} \left( \frac{1}{\hbar} \mathbf{M} \right), \quad (21.30)$$

где  $\boldsymbol{\mu}$  — орбитальный магнитный момент, а  $\mathbf{M}/\hbar$  — орбитальный механический момент, выраженный в единицах действия  $\hbar$ .

*Интерпретация.* Каждой единице  $\hbar$  орбитального момента соответствует единица магнитного момента

$$\mu_0 = \frac{e\hbar}{2mc} = 9,2732 \cdot 10^{-21} \text{ см}^5/2 \cdot \text{э}^{1/2} \cdot \text{сек}^{-1}. \quad (21.31)$$

„Квант“ магнитного момента  $\mu_0$  называют *магнетоном Бора*.

Темы для обсуждения:

1. Доказательство формулы (21.31), исходя из классических представлений о движении электрона по непрерывной орбите.

2. Доказательство формулы (21.31) с помощью представления о плотности тока. Плотность тока  $\mathbf{j}$ , как следует из уравнения непрерывности (2.7) и определения (2.9), есть

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar e}{2imc} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*). \quad (21.32)$$

Кроме того, учтем, что

$$\mu_z = \int \frac{1}{2} (\mathbf{x} \times \mathbf{j})_z d^3x,$$

$$\psi = F(r, \theta) e^{im\varphi}, \quad \psi^* = F(r, \theta) e^{-im\varphi},$$

$$\int |\psi|^2 d^3x = 1. \quad (21.33)$$

Отсюда без труда получим:

$$\mu_z = \frac{e\hbar}{2m_e c} m. \quad (21.34)$$

Ritz Method. From (22).  $\psi$  approximates exact  $\psi^{(n)}$  with error of first order. Then

$$(35) \left\{ \begin{aligned} \bar{H} &= (\psi | H \psi) = \bar{\psi} H \psi = \int \psi^* H \psi dx \\ &\text{approximates } E^{(n)} \text{ with error of } \underline{\text{second order}}. \end{aligned} \right.$$

$$(36) \left\{ \begin{aligned} &\text{Practical application: guess wave function} \\ &\text{Compute } \bar{\psi} H \psi. \text{ If guess of } \psi \text{ is fair} \\ &\text{guess of } E \text{ is good.} \end{aligned} \right.$$

~~At this point~~  
More precisely, Theorem: Minimum problem

$$(37) \quad \delta(\bar{\psi} H \psi) = 0 \text{ with condition } \bar{\psi} \psi = 1$$

Leads to Schrödinger equation

$$(38) \left\{ \begin{aligned} &\text{Proof } \bar{\delta} \bar{\psi} H \psi + \bar{\psi} H \delta \psi - \lambda \bar{\psi} \delta \psi - \lambda \delta \bar{\psi} \psi = 0 \\ &\bar{\delta} \bar{\psi} (H \psi - \lambda \psi) + (\bar{H} \psi - \lambda \bar{\psi}) \delta \psi = 0 \\ &\text{leads to equation} \\ &H \psi = \lambda \psi \quad (= \text{Schrod. eq. with } E = \lambda) \end{aligned} \right.$$

Therefore: Solve min. problem (37). The min. value is the lowest e.v., extremal values are other e.v's.

Practical application: Choose reasonable guess for  $\psi^{(0)} \propto f(x, \alpha, \beta, \gamma, \dots)$ .  $\alpha, \beta, \dots$  are adjustable parameters. Compute

$$(39) \left\{ \begin{aligned} E(\alpha, \beta, \gamma, \dots) &= \frac{\int f^*(x, \alpha, \dots) H f(x, \alpha, \dots) dx}{\int f^*(x, \alpha, \dots) f(x, \alpha, \dots) dx} \end{aligned} \right.$$

**Метод Ритца.** Волновая функция  $\psi$ , соответствующая уравнению (21.2), аппроксимирует точную функцию  $\psi^{(n)}$  с возможной ошибкой *n*-го порядка малости. В стационарной теории возмущений выражение

$$\bar{H} = (\psi | \hat{H} \psi) = \psi^+ \hat{H} \psi = \int \psi^* \hat{H} \psi dx \quad (21.35)$$

дает значения энергии  $E^{(n)}$  с точностью до величин *второго порядка*. Это обстоятельство служит основанием для приближенного вариационного метода Ритца.

*Эскиз практической процедуры:* берется пробная волновая функция  $\psi$ . Вычисляется значение  $\psi^+ \hat{H} \psi$ . (21.36)

Приближение по энергии  $E$  оказывается *более точным*, чем приближение по волновой функции  $\psi$ .

Изложим это более подробно.

■ **ТЕОРЕМА.** Вариационная задача на минимум  $\delta (\psi^+ \hat{H} \psi) = 0$  при условии  $\psi^+ \psi = 1$  приводит к уравнению Шредингера. (21.37)

**Доказательство.** Выполняя варьирование, получаем:

$$\delta \psi^+ \hat{H} \psi + \psi^+ \hat{H} \delta \psi - \lambda \psi^+ \delta \psi - \lambda \delta \psi^+ \psi = 0,$$

или

$$\delta \psi^+ (\hat{H} \psi - \lambda \psi) + (\hat{H} \psi - \lambda \psi)^+ \delta \psi = 0, \quad (21.38)$$

откуда следует уравнение

$$\hat{H} \psi - \lambda \psi = 0,$$

т. е. уравнение Шредингера с  $E = \lambda$ .

Коэффициент  $\lambda$  выполняет здесь роль лагранжева неопределенного множителя, обычного для задач на условный экстремум.

**вывод.** Решая задачу на экстремум (минимум) (21.37), получаем в качестве минимального значения функционала наименьшее собственное значение энергии; экстремальным же значениям вообще соответствуют все другие собственные значения энергии.

*Практическое приложение теоремы (метод Ритца):* выберем разумную пробную волновую функцию  $\psi^0 \approx f(x, \alpha, \beta, \dots)$ , где  $\alpha, \beta, \dots$  — подлежащие варьированию (подгоночные) параметры. Вычислив величину

$$E(\alpha, \beta, \dots) = \frac{\int f^*(x, \alpha, \beta, \dots) \hat{H} f(x, \alpha, \beta, \dots) dx}{\int f^*(x, \alpha, \beta, \dots) f(x, \alpha, \beta, \dots) dx}, \quad (21.39)$$

Find ~~some~~ values of  $\alpha, \beta, \dots$  that

(30)  $E(\alpha, \beta, \dots) = \min$

The min value of  $E$  is close to lowest energy level,  $f(\alpha, \alpha, \beta, \dots)$  is fair approx. to e.f.

Example. Oscillator problem

(31)  $H = \frac{1}{2} p^2 + \frac{1}{2} x^2$   $\hbar=1 \quad m=1 \quad \omega=1$

Trial  $f(x)$



Find  $E(\alpha) = \frac{\frac{1}{2} \int_{-\alpha}^{\alpha} x^2 f^2(x) dx + \frac{1}{2} \int_{-\alpha}^{\alpha} f(x) f''(x) dx}{\int_{-\alpha}^{\alpha} f^2(x) dx}$

(32) 
$$= \frac{\frac{\alpha^3}{30} + \frac{1}{\alpha}}{\frac{2}{3} \alpha} = \frac{1}{20} \alpha^2 + \frac{3}{2} \frac{1}{\alpha^2}$$

(33) 
$$\begin{cases} \text{Min at EQ } \alpha = \sqrt[4]{30} = 2.34 \\ E(2.34) = 0.548, \text{ within } 10\% \text{ of} \\ \text{correct lowest e.v. } 0.500000 \end{cases}$$

Prove,  $E(\alpha, \beta, \dots)$  given by (29) obeys

(34)  $E(\alpha, \beta, \dots) \geq E_0$

with  $E_0 =$  lowest ex. e.v. (For proof develop  $f$  in e.f.'s of  $H$ )

Discussion of practical use.

найдем такие значения параметров  $\alpha, \beta, \dots$ , при которых

$$E(\alpha, \beta, \dots) = \min. \quad (21.40)$$

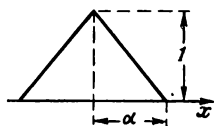
Это минимальное значение  $E$  будет близко к низшему энергетическому уровню, если пробная функция  $f(x, \alpha, \beta, \dots)$  является хорошим приближением к точной собственной функции, соответствующей этому уровню.

**Пример.** Рассмотрим задачу о гармоническом осцилляторе с точки зрения метода Ритца. Гамильтониан имеет вид

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \hat{p}^2 + \frac{1}{2} \hat{x}^2 \quad (21.41)$$

(здесь приняты единицы  $\hbar = 1, m = 1, \omega = 1$ ).

Обозначим пробную волновую функцию через  $f(x)$  и зададим ее в форме „треугольника“ с высотой 1 и основанием  $2\alpha$  (фиг. 13). Здесь всего один варьируемый параметр  $\alpha$ . Простые выкладки дают



Фиг. 13.

Вид пробной функции  $f(x)$ .

$$E(\alpha) = \frac{\frac{1}{2} \int_{-\alpha}^{+\alpha} x^2 f^2(x) dx - \frac{1}{2} \int_{-\alpha}^{+\alpha} f(x) f''(x) dx}{\int_{-\alpha}^{+\alpha} f^2(x) dx} = \frac{\alpha^3/30 + 1/\alpha}{2/3 \alpha} = \frac{1}{20} \alpha^2 + \frac{3}{2} \frac{1}{\alpha^2}. \quad (21.42)$$

Минимум „энергии“  $E(\alpha)$  соответствует значению

$$\alpha = \sqrt[4]{30} = 2,34, \quad (21.43)$$

откуда  $E(2,34) = 0,548$ ;

это с погрешностью не более  $10\%$  (достаточно хорошо для первого приближения!) совпадает с точным наименьшим собственным значением, равным 0,500 000.

*Темы для обсуждения:*

1. Доказать следующее утверждение. Величина  $E(\alpha, \beta, \dots)$ , даваемая формулой (21 29), удовлетворяет неравенству

$$E(\alpha, \beta, \dots) \geq E_0, \quad (21.44)$$

где  $E_0$  — низшее собственное значение энергии рассматриваемой системы.

**Указание:** функцию  $f$  следует разложить по собственным функциям гамильтониана  $\hat{H}$ .

2. Обсудить практическое применение доказанного утверждения.



## 2.2 - Case of degeneracy or quasi-degeneracy

Perturbation procedure of Sect 2.1 breaks down when  $E_0^{(u)} - E_0^{(m)} = 0$  or very small.  
(See 2.1 (18) and (21-16))

- (1)  $\left\{ \begin{array}{l} \text{unpert. e.f.'s} \\ u_0^{(1)} \quad u_0^{(2)} \dots u_0^{(g)} \quad u_0^{(g+1)} \quad u_0^{(g+2)} \dots \end{array} \right.$   
 These deg. or quasi degenerate for unp. problem      These have unpert. energies quite different from previous.  
 Search for solutions (of first order) of type approx

- (2)  $\left\{ \begin{array}{l} u = \sum_1^g c_s u_0^{(s)} + \sum_{g+1}^{\infty} c_\alpha u_0^{(\alpha)} = \\ \text{ } c_\alpha \text{ small of first order} \\ \text{ } c_s \text{ large} \\ H = H_0 + \mathcal{H} \\ H u = E u \quad E = E_0 + \epsilon \end{array} \right.$   
 In first approximation

- (3)  $\left\{ \begin{array}{l} \sum_1^g c_s (H - E) u_0^{(s)} + \sum_{g+1}^{\infty} c_\alpha (H_0 - E_0) u_0^{(\alpha)} = 0 \\ \text{Multiply by } u_0^{(l)} \text{ to left, } l=1, 2, \dots, g. \end{array} \right.$

- (4)  $\left\{ \begin{array}{l} \sum_1^g c_s (H_{ls} - E) = 0 \\ \begin{vmatrix} H_{11} - E & H_{12} & \dots & H_{1g} \\ H_{21} & H_{22} - E & \dots & H_{2g} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{g1} & H_{g2} & \dots & H_{gg} - E \end{vmatrix} = 0 \end{array} \right.$   
 This is secular problem of order  $g$  that determines the  $g$  energy levels corresp. to the degenerate or quasi deg. set of  $g$  levels of unpert. problem.

Процедура теории возмущений, изложенная в лекции 21, теряет смысл, когда разности

$$E_0^{(n)} - E_0^{(m)} = 0 \text{ (вырождение)}$$

или очень малы (квазивырождение) [см. (21.18) и (21.16)]. В таких случаях необходим другой подход.

Запишем собственные функции невозмущенной системы; пусть

|   |   |        |
|---|---|--------|
| Функции $u_0^{(1)}, u_0^{(2)}, \dots, u_0^{(g)}$ соответствуют вырожденным или квазивырожденным состояниям системы. | Функции $u_0^{(g+1)}, u_0^{(g+2)}, \dots$ соответствуют остальным (невырожденным) состояниям системы. | (22.1) |
|---|---|--------|

Будем искать приближенные решения задачи (в первом порядке) в форме

$$u = \sum_{s=1}^g C_s u_0^{(s)} + \sum_{\alpha=g+1}^{\infty} C_{\alpha} u_0^{(\alpha)}, \quad (22.2)$$

где  $C_{\alpha}$  — малые первого порядка,  
 $C_s$  — предположительно велики.

Искомая функция должна приближенно соответствовать гамильтониану  $\hat{H}$ , заданному, как и раньше, в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{\mathcal{H}},$$

так что уравнение Шредингера имеет вид  $\hat{H}u = Eu$ , причем

$$E = E_0 + \varepsilon$$

( $\varepsilon$  — добавка первого порядка к собственным значениям энергии системы). Подставляя в уравнение Шредингера функцию (22.2), получаем в первом приближении:

$$\sum_1^g C_s (\hat{H} - E) u_0^{(s)} + \sum_{g+1}^{\infty} C_{\alpha} (\hat{H}_0 - E_0) u_0^{(\alpha)} = 0. \quad (22.3a)$$

Но так как, по определению,  $u_0^{(\alpha)}$  — собственные функции оператора  $\hat{H}_0$ , уравнение (22.3a) переписывается в виде

$$\sum_1^g C_s (\hat{H} - E) u_0^{(s)} + \sum_{g+1}^{\infty} C_{\alpha} (E_0^{(\alpha)} - E_0) u_0^{(\alpha)} = 0. \quad (22.3b)$$

Умножим это уравнение слева на функцию  $u_0^{+(l)}$ , где  $l = 1, 2, \dots, g$ ; в силу ортонормированности функций нулевого приближения получим:

Determine then

$$(5) \quad c_{\alpha} = \frac{\sum_{\alpha} c_0 H_{\alpha 0}}{E_0 - E_0^{(\alpha)}} \quad \text{large denominator!}$$

gives first order correction to wave function.

Comments : role of conservation theorems in reducing secular problem (4)

Example Stark effect in H  $n=2$  levels

Perturbation

$$(6) \quad \mathcal{H} = +eFz \quad F = \text{electric field}$$

4 deg levels of unpert. problem

$$(7) \quad 2s, 2p_1, 2p_0, 2p_{-1} \quad (\text{see p. 8-4})$$

Observe:

$$(8) \quad [\mathcal{H}, M_z] = 0$$

Therefore perturbation mixes only states of equal  $m$ , like  $2s$  and  $2p_0$ .

$2p_1$  and  $2p_{-1}$  have their energies perturbed as in case of nondegeneracy

by in first approx. (21-(15)) by ant

$$(9) \quad \begin{cases} \langle 2p_1 | eFz | 2p_1 \rangle = \\ = eF \int z |\psi_{2p_1}|^2 d^3x = 0 \quad (\text{because } z \text{ odd}) \\ \quad \quad \quad |\psi_{2p_1}|^2 \text{ even} \end{cases}$$

Same for  $2p_{-1}$

Therefore  $2p_1$  &  $2p_{-1}$  unperturbed in first approximation.

$$\sum_{s=1}^g C_s (H_{1s} - E) = 0.$$

Это секулярная задача. Условие ее разрешимости —

$$\text{Равенство нулю} \quad \begin{vmatrix} H_{11} - E & H_{12} & \dots & H_{1g} \\ H_{21} & H_{22} - E & \dots & H_{2g} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ H_{g1} & H_{g2} & \dots & H_{gg} - E \end{vmatrix} = 0. \quad (22.4)$$

детерминанта

Условие разрешимости представляет собой алгебраическое уравнение степени  $g$  для определения энергий  $E$ , соответствующих первым  $g$  вырожденным или квазивырожденным состояниям невозмущенной системы.

$$\text{Затем находим:} \quad C_\alpha = \left( \sum_{s=1}^g C_s H_{\alpha s} \right) / (E_0^{(\alpha)} - E_0), \quad (22.5)$$

причем знаменатель  $E_0^{(\alpha)} - E_0$  велик!

Эти коэффициенты дают поправку к волновой функции в первом порядке теории возмущений.

Следует отметить роль законов сохранения при упрощении секулярного уравнения (22.4) в процессе его решения.

**ПРИМЕР. Эффект Штарка.** Рассмотрим сдвиг энергетических уровней атома водорода во внешнем электрическом поле напряженности  $F$  для уровней с  $n=2$  (эффект Штарка).

Будем считать, что электрическое поле направлено по оси  $z$ , так что возмущающий гамильтониан  $\mathcal{H}$  (энергия взаимодействия электрона с внешним полем) равен

$$\mathcal{H} = +eFz, \quad (22.6)$$

где  $F$  — напряженность электрического поля.

Возмущающий гамильтониан (22.6) является нечетной функцией  $z$ . Таким образом, вычисление диагональных элементов  $\mathcal{H}_{nn}$  по (21.13) с невозмущенными функциями даст нулевой результат. Отсюда следует, что в основном состоянии атома водорода эффект Штарка в первом порядке отсутствует, так как при  $n=1$  вырождения нет (используется формализм предыдущей лекции); именно поэтому следует рассмотреть следующую оболочку ( $n=2$ ).

Невозмущенное состояние с главным квантовым числом  $n=2$  четырехкратно вырождено, так что энергии уровней

$$2s_0, \quad 2p_1, \quad 2p_0, \quad 2p_{-1} \quad (22.7)$$

совпадают (см. фиг. 7, стр. 57).

Из того факта, что координата  $z$  коммутирует с  $M_z$ , следует:

$$[\hat{\mathcal{H}}, \hat{M}_z] = 0, \quad (22.8)$$

так что возмущение влияет только на состояния с одинаковым значением магнитного квантового числа  $m$ , т. е. на состояния  $2s_0$  и  $2p_0$  (смешивает их), в то время как два других уровня  $2p_1$  и  $2p_{-1}$ , как и в отсутствие вырождения, сохраняют невозмущенные значения энергии.

$$(10) \quad \psi_{2s} = \frac{1}{\sqrt{32\pi a^3}} \left(2 - \frac{r}{a}\right) e^{-\frac{r}{2a}}$$

$$(11) \quad \psi_{2p_0} = \frac{1}{\sqrt{32\pi a^3}} \frac{r}{a} e^{-\frac{r}{2a}} \cos \theta$$

$$\langle 2s | z | 2s \rangle = \langle 2p_0 | z | 2p_0 \rangle = 0$$

$$(12) \quad \begin{cases} \langle 2s | z | 2p_0 \rangle = \frac{1}{32\pi a^3} \int_0^\infty \int_0^\pi \left(2 - \frac{r}{a}\right) \frac{r}{a} e^{-\frac{r}{2a}} r \cos^2 \theta \sin \theta d\theta dr \\ = \underbrace{\frac{1}{16a^3} \int_0^\infty \left(2 - \frac{r}{a}\right) \frac{r}{a} r^2 dr}_{-72a^4} \underbrace{\int_0^\pi \cos^2 \theta \sin \theta d\theta}_{2/3} = -3a \end{cases}$$

Perturb matrix

$$(13) \quad \begin{vmatrix} eF & 0 & -3a \\ 0 & -3a & eF \\ -3a & eF & 0 \end{vmatrix} \text{ has e.v.'s } \pm 3eFa$$

Therefore in ~~first order~~

$$(14) \quad \begin{cases} \text{Energy level to first approx.} & \text{E.t. of zero approx.} \\ -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{4} & \psi_{2p_1} \\ -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{4} & \psi_{2p_{-1}} \\ -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{4} + 3eFa & \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{2s} + \psi_{2p_0}) \\ -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{4} - 3eFa & \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{2s} - \psi_{2p_0}) \end{cases}$$

В первом приближении добавочную энергию уровня  $2p_1$  можно записать [см. (21.15)] в виде

$$E_{2p_1} = \langle 2p_1 | eFz | 2p_1 \rangle = eF \int z |\psi_{2p_1}|^2 d^3x = 0 \quad (22.9)$$

(вследствие нечетности  $z$  и четности  $|\psi_{2p_1}|^2$ ). Аналогичный результат получается и для уровня  $2p_{-1}$ . Следовательно, уровни  $2p_1$  и  $2p_{-1}$  в первом приближении оказываются невозмущенными. Волновые функции уровней  $2s$  и  $2p_0$  имеют вид

$$\psi_{2s} = \frac{1}{\sqrt{32\pi a^3}} \left(2 - \frac{r}{a}\right) e^{-r/2a}, \quad (22.10)$$

$$\psi_{2p_0} = \frac{1}{\sqrt{32\pi a^3}} \frac{r}{a} e^{-r/2a} \cos \theta. \quad (22.11)$$

Матричные элементы  $\langle 2s | z | 2s \rangle$  и  $\langle 2p_0 | z | 2p_0 \rangle$ , как и матричный элемент (22.9), равны нулю<sup>1)</sup>.

Вычислим следующий матричный элемент:

$$\begin{aligned} \langle 2s | z | 2p_0 \rangle &= \frac{1}{32\pi a^3} \int_0^\infty \int_0^\pi \left(2 - \frac{r}{a}\right) e^{-r/2a} \frac{r}{a} r \cos^2 \theta \, 2\pi r^2 dr \sin \theta d\theta = \\ &= \frac{1}{16a^3} \int_0^\infty \left(2 - \frac{r}{a}\right) e^{-r/2a} \frac{r}{a} dr \int_0^\pi \cos^2 \theta \sin \theta d\theta = \\ &= \frac{1}{16a^3} [-72a^3] \left[\frac{2}{3}\right] = -3a, \end{aligned} \quad (22.12)$$

где  $a = \frac{\hbar^2}{me^2} \frac{1}{z}$  — боровский радиус (8.19).

Матрица, соответствующая возмущающему гамильтониану,

$$eF \begin{vmatrix} 0 & -3a \\ -3a & 0 \end{vmatrix} \quad \text{имеет собственные значения,} \quad (22.13)$$

равные  $\pm 3eFa$

Отсюда следуют энергетические уровни (в первом приближении) и соответствующие волновые функции (в нулевом приближении):

| Энергия уровней<br>(первое приближение)     | Собственные функции<br>(нулевое приближение)   |         |
|---|--|---------|
| $-\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{4}$        | $\psi_{2p_1}$                                  |         |
| $-\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{4}$        | $\psi_{2p_{-1}}$                               |         |
| $-\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{4} + 3eFa$ | $\frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{2s} + \psi_{2p_0})$ |         |
| $-\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{4} - 3eFa$ | $\frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{2s} - \psi_{2p_0})$ | (22.14) |

<sup>1)</sup> Ср. замечание после формулы (22.6). — Прим. ред.

### 23- Time dependent perturbation theory, Born approximation.

$$(1) \begin{cases} H = H_0 + \mathcal{H}_1 & H_0 \text{ time independent} \\ & \mathcal{H}_1 \text{ may be time dependent} \end{cases}$$

Unperturbed Schr. eq.

$$(2) \quad i\hbar \dot{\psi}_0 = H_0 \psi_0$$

has solution

$$(3) \quad \psi_0 = \sum a_n^{(0)} u_n^{(0)} e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^{(0)} t}$$

(4) constants.

$$H_0 u_n^{(0)} = E_n^{(0)} u_n^{(0)}$$

Solve Schr eq

$$(5) \quad i\hbar \dot{\psi} = (H_0 + \mathcal{H}_1) \psi \leftarrow$$

$$(6) \quad \text{by } \psi = \sum a_n(t) u_n^{(0)} e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^{(0)} t}$$

→ then multiply by  $\widetilde{u_s^{(0)}}$  to left & use orthonormality and (4).

$$(7) \quad \dot{a}_s = -\frac{i}{\hbar} \sum_n a_n \langle s | \mathcal{H}_1 | n \rangle e^{\frac{i}{\hbar} (E_s^{(0)} - E_n^{(0)}) t}$$

$$(8) \quad \langle s | \mathcal{H}_1 | n \rangle = \widetilde{u_s^{(0)}} \mathcal{H}_1 u_n^{(0)} = \int u_s^{(0)*} \mathcal{H}_1 u_n^{(0)} dx = \mathcal{H}_{sn}$$

(7) is exact. Use it approximately by substituting in right hand side  $a_n(0)$  for  $a_n(t)$ . Then

$$(9) \quad a_s(t) \approx a_s(0) - \frac{i}{\hbar} \sum_n a_n(0) \int_0^t \mathcal{H}_{sn}(t) e^{\frac{i}{\hbar} (E_s^{(0)} - E_n^{(0)}) t} dt$$

Пусть гамильтониан системы имеет вид

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{\mathcal{H}};$$

$\hat{H}_0$  — невозмущенный гамильтониан — не зависит от времени,  
 $\hat{\mathcal{H}}$  — гамильтониан возмущения — может содержать  
 временную зависимость. (23.1)

Стационарное (невозмущенное) уравнение Шредингера

$$i\hbar \dot{\psi}_0 = \hat{H}_0 \psi_0, \quad (23.2)$$

имеет решение  $\psi_0 = \sum_n a_n^{(0)} u_0^{(n)} e^{-\frac{i}{\hbar} E_0^{(n)} t},$  (23.3)

где  $a_n^{(0)}$  — постоянные коэффициенты, а  $u_0^{(n)}(\mathbf{r})$  — собственные функции уравнения

$$\hat{H}_0 u_0^{(n)} = E_0^{(n)} u_0^{(n)}. \quad (23.4)$$

Требуется найти решение уравнения Шредингера для системы с гамильтонианом  $\hat{H}$  (23.1), которое точно мы не можем решить. Для нахождения приближенного решения можно воспользоваться нестационарной теорией возмущений.

Представим решение возмущенного уравнения Шредингера

$$i\hbar \dot{\psi} = (\hat{H}_0 + \hat{\mathcal{H}}) \psi \quad (23.5)$$

в виде  $\psi = \sum a_n(t) u_0^{(n)} e^{-\frac{i}{\hbar} E_0^{(n)} t},$  (23.6)

где  $a_n(t)$  — коэффициенты разложения, подлежащие определению. Подставим (23.6) в уравнение (23.5); затем, умножив полученное равенство слева на  $u_0^{+(s)}$  и воспользовавшись свойством ортонормированности функций  $u_0^{(n)}$  и  $u_0^{+(s)}$  и уравнением (23.4), получим:

$$\dot{a}_s = -\frac{i}{\hbar} \sum_n a_n \langle s | \hat{\mathcal{H}} | n \rangle e^{\frac{i}{\hbar} (E_0^{(s)} - E_0^{(n)}) t}, \quad (23.7)$$

где  $\langle s | \hat{\mathcal{H}} | n \rangle = u_0^{+(s)} \hat{\mathcal{H}} u_0^{(n)} = \int u_0^{+(s)} \hat{\mathcal{H}} u_0^{(n)} dx = \mathcal{H}_{sn}.$  (23.8)

*Система уравнений для  $a_s$  (23.7) является точной, а не приближенной, так что фактически она эквивалентна точному уравнению Шредингера (23.5). Будем, однако, решать эти уравнения приближенно, методом итераций: подставим в правую часть (23.7) коэффициенты невозмущенного решения  $a_n(0)$  в качестве первого приближения к  $a_n(t)$ . Приближенное выра-*



Important special case. At  $t=0$  system in state  $n$ . Then  $a_n(0)=1$ , all other  $a_i$  are zero.

$$(10) \quad a_s(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t \mathcal{H}_{sn}(t) e^{\frac{i}{\hbar}(E_s^{(s)} - E_n^{(n)})t} dt$$

Matrix element  $\mathcal{H}_{sn}(t)$  causes transitions  $n \rightarrow s$ .

Transitions from  $n$  to a continuum of states

$$(11) \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{Assume } \mathcal{H}_{sn} \text{ indep. of time, then} \\ \text{Diagram: } n \rightarrow s \text{ with 5 horizontal lines} \\ a_s(t) = -\mathcal{H}_{sn} \frac{e^{\frac{i}{\hbar}(E_s^{(s)} - E_n^{(n)})t} - 1}{E_s^{(s)} - E_n^{(n)}} \\ |a_s(t)|^2 = 4|\mathcal{H}_{sn}|^2 \frac{\sin^2 \frac{\omega t}{2\hbar} (E_s^{(s)} - E_n^{(n)})}{(E_s^{(s)} - E_n^{(n)})^2} \end{array} \right.$$

Prob of transition to one state  $s$

$$(12) \quad \left\{ \begin{array}{l} P(t) = \sum_s |a_s(t)|^2 = 4|\mathcal{H}_{sn}|^2 \sum \frac{\sin^2 \frac{\omega t}{2\hbar} (E_s^{(s)} - E_n^{(n)})}{(E_s^{(s)} - E_n^{(n)})^2} = \\ = 4|\mathcal{H}_{sn}|^2 \rho(E_n) \int \frac{\sin^2 \frac{\omega t}{2\hbar} (E - E_n)}{(E - E_n)^2} d(E - E_n) \\ = t \frac{2\pi}{\hbar} |\mathcal{H}_{sn}|^2 \rho(E_n) \underbrace{\frac{\pi t}{2\hbar}}_{\int \frac{\sin^2 x}{x^2} dx = \pi} \end{array} \right.$$

$$(13) \quad \left\{ \begin{array}{l} \rho(E_n) = \text{no of states } s, \text{ close to } E_n \text{ per unit energy interval.} \\ \text{Rate of transition} = \frac{2\pi}{\hbar} |\mathcal{H}_{sn}|^2 \rho(E_n) \end{array} \right.$$

Discuss: distribution of final states as function of  $t$  & relation with uncertainty principle

жение для  $a_s(t)$  после интегрирования по времени запишется как

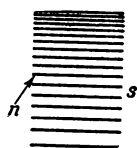
$$a_s(t) \approx a_s(0) - \frac{i}{\hbar} \sum_n a_n(0) \int_0^t \mathcal{H}_{sn}(t) e^{\frac{i}{\hbar} (E_0^{(s)} - E_0^{(n)}) t} dt. \quad (23.9)$$

**Важный частный случай.** Пусть при  $t=0$  система находится в состоянии  $n$ . Тогда  $a_n(0)=1$ , а все другие коэффициенты равны нулю. Отсюда

$$a_s(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t \mathcal{H}_{sn}(t) e^{\frac{i}{\hbar} (E_0^{(s)} - E_0^{(n)}) t} dt \quad \text{при } s \neq n. \quad (23.10)$$

Матричный элемент  $\mathcal{H}_{sn}(t)$  определяет переход из состояния  $n$  в состояние  $s$ .

*Переходы из состояния  $n$  во все прочие состояния вообще.* Положим  $\mathcal{H}_{sn}$  не зависящим от времени. Интеграл в (23.10) равен



Фиг. 14.

Переход с уровня  $n$  в континуум состояний

$$a_s(t) = -\mathcal{H}_{sn} \frac{e^{\frac{i}{\hbar} (E_0^{(s)} - E_0^{(n)}) t} - 1}{E_0^{(s)} - E_0^{(n)}}.$$

Вероятность перехода за  $t$  — время действия возмущения из состояния  $n$  в одно состояние  $s$  (фиг. 14) — равна

$$|a_s(t)|^2 = 4 |\mathcal{H}_{sn}|^2 \frac{\sin^2 \frac{t}{2\hbar} (E_0^{(s)} - E_0^{(n)})}{(E_0^{(s)} - E_0^{(n)})^2}.$$

(23.11)

Отсюда вероятность перехода во все состояния вообще

$$P(t) = \sum_s |a_s(t)|^2 = 4 |\mathcal{H}_{sn}|^2 \sum_s \frac{\sin^2 \frac{t}{2\hbar} (E_0^{(s)} - E_0^{(n)})}{(E_0^{(s)} - E_0^{(n)})^2} =$$

$$= 4 |\mathcal{H}_{sn}|^2 \varrho(E_n) \int \frac{\sin^2 \frac{t}{2\hbar} (E^{(s)} - E^{(n)}) d(E^{(s)} - E^{(n)})}{(E^{(s)} - E^{(n)})^2} = t \frac{2\pi}{\hbar} |\mathcal{H}_{sn}|^2 \varrho(E_n).$$

(23.12)

Здесь интегрирование дает  $\pi t/2\hbar$  (известный несобственный интеграл  $\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2 \alpha x}{x^2} dx$  равен  $\pi \alpha$ ).

$\varrho(E_n)$  — Число состояний  $s$  в единичном интервале энергий в окрестности  $E_n$ ;

$$\left[ \text{Вероятность перехода} \right]_{\text{в единицу времени}} = \frac{2\pi}{\hbar} |\mathcal{H}_{sn}|^2 \varrho(E_n).$$

(23.13)

Example : Born approximation.

(14) { Scattering by a potential  $U(\vec{x})$

initial  $\vec{p}$   $\rightarrow$   $U(\vec{x})$   $\rightarrow$  final  $\vec{p}'$   $\sigma$   ~~$\vec{p}' = \vec{p}$~~   $|\vec{p}'| = |\vec{p}|$

$U(x) = \%$  treated as perturbation

(15) { initial state  $\frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}}$  ( $\Omega = \text{vol. of box}$ )

final state  $\frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p}' \cdot \vec{x}}$

$\langle \vec{p}' | \% | \vec{p} \rangle = \frac{1}{\Omega} \int U(\vec{x}) e^{\frac{i}{\hbar} (\vec{p} - \vec{p}') \cdot \vec{x}} d^3x$

$= \frac{1}{\Omega} U_{\vec{p}-\vec{p}'}$  Fourier transform of  $U$

(16) { No of final states in solid angle  $d\omega$  per unit energy interval

$\rho_{d\omega} = \frac{\Omega d\omega}{(2\pi\hbar)^3} \frac{p^2 dp}{v dp} = \frac{\Omega p^2}{8\pi^3 \hbar^3 v} d\omega$

$v = \text{velocity}$   $v dp = dE$  (correct also relativistically)

Rate of transitions into  $d\omega$

$d\omega \frac{v}{\Omega} \frac{d\sigma}{d\omega} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \frac{1}{\Omega} U_{\vec{p}-\vec{p}'} \right|^2 \frac{\Omega p^2}{8\pi^3 \hbar^3 v} d\omega$

(17)  $\boxed{\frac{d\sigma}{d\omega} = \frac{1}{4\pi^2 \hbar^4} \frac{p^2}{v^2} |U_{\vec{p}-\vec{p}'}|^2}$

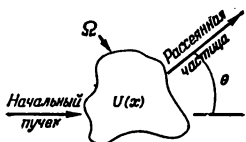
(18) { For ~~non~~ non relativistic mechanics  $m = \frac{p}{v}$

$\frac{d\sigma}{d\omega} = \frac{m^2}{4\pi^2 \hbar^4} |U_{\vec{p}-\vec{p}'}|^2$

**Тема для обсуждения:** Зависимость конечного распределения по состояниям от времени  $t$  и связь между характером этого распределения и принципом неопределенности \*.

**ПРИМЕР. Борновское приближение.**

Рассмотрим процесс рассеяния заряженной частицы на потенциале  $U(x)$ , понимая его как гамильтониан возмущения. Он не зависит от времени (сохранение энергии). Импульс падающей частицы обозначим через  $p$ , а импульс рассеянной — через  $p'$  (фиг. 15). Итак, условия задачи:



Фиг. 15.

Рассеяние на потенциале  $U(x)$ .  
Объем взаимодействия („ящик“)  $\Omega$ .  
Сохранение энергии  $|p| = |p'|$ .  
 $U(x) \equiv \mathcal{H}$  — возмущение.

(23.14)

Начальное и конечное состояния представим как падающую и рассеянную волны (функции нормируются на „ящик“  $\Omega$ ). Поскольку временные части волновых функций одинаковы (ввиду сохранения энергии), запишем их пространственные части и матричный элемент перехода  $p \rightarrow p'$  (из начального состояния в конечное):

$$\text{Начальное состояние (падающая волна)} \quad \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{\frac{i}{\hbar} p \cdot x},$$

$$\text{Конечное состояние (рассеянная волна)} \quad \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{\frac{i}{\hbar} p' \cdot x},$$

(Нормировка на  $\Omega$ .)

Матричный элемент перехода  $p \rightarrow p'$

(23.15)

$$\langle p | \mathcal{H} | p' \rangle = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} U(x) e^{\frac{i}{\hbar} (p - p') \cdot x} d^3x = \frac{1}{\Omega} U_{p-p'}.$$

Таким образом, матричный элемент равен фурье-образу потенциальной энергии  $U$ , взятому с аргументом  $p - p'$ .

Число конечных состояний в телесном угле  $d\omega$  на единичный интервал энергий равно

$$\rho d\omega = \frac{\Omega d\omega}{(2\pi\hbar)^3} \frac{p^2 dp}{v dp} = \frac{\Omega p^2}{8\pi^2 \hbar^3 v} d\omega, \quad (23.16)$$

$v$  — начальная скорость частицы,  $v dp = dE$  (что верно и в релятивистском случае).

Тогда скорость переходов в телесный угол  $d\omega$  (вероятность рассеяния в  $d\omega$  за единицу времени) равна

$$d\omega \frac{v}{\Omega} \frac{d\sigma}{d\omega} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \frac{1}{\Omega} U_{p-p'} \right|^2 \frac{\Omega p^2}{8\pi^2 \hbar^3 v} d\omega;$$

Limits of validity (discuss)

$$(19) \quad \frac{1}{\hbar} L (\sqrt{p^2 + 2mU} - p) \ll 1 \quad \left\langle \begin{array}{c} L \\ \hat{U} \end{array} \right\rangle$$

Scattering by Coulomb center

$$(20) \quad \left\{ \begin{array}{l} U = \frac{ZZe^2}{r} \\ U_{p \rightarrow p'} = ZZe^2 \int \frac{e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}-\vec{p}') \cdot \vec{x}}}{r} d^3x = \frac{4\pi ZZe^2}{\frac{1}{\hbar^2} |\vec{p}-\vec{p}'|^2} = \\ = \frac{4\pi \hbar^2 ZZe^2}{4p^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}} \end{array} \right. \quad \left( \overset{\text{use}}{V^2 \varphi} = -4\pi \frac{e^{i\alpha x}}{r} \right)$$

$$(21) \quad \left\{ \frac{d\sigma}{d\omega} = \frac{Z^2 Z^2 (me^2)^2}{4} \frac{1}{p^2 \sin^4 \frac{\theta}{2}} \right. \quad \left. \begin{array}{l} \text{Identical to classical} \\ \text{Rutherford formula} \end{array} \right\}$$

Suggested discussion topics.

Scattering by potential well - Nuclear forces

Limit of long wave length - isotropic scattering

" " short " " - forward

Role of the mass (neutrons)

Exponential decay of original state in case (11)

отсюда

$$\frac{d\sigma}{d\omega} = \frac{1}{4\pi^2\hbar^4} \frac{p^2}{v^2} |U_{p-p'}|^2. \quad (23.17)$$

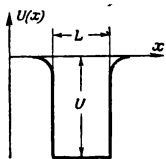
Формула (23.17) дает *эффективное дифференциальное сечение рассеяния*  $d\sigma$ .

В нерелятивистском случае  $m = \frac{p}{v} (= \text{const})$

$$\frac{d\sigma}{d\omega} = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4} |U_{p-p'}|^2. \quad (23.18)$$

*Пределы применимости полученных результатов.* Рекомендуется обсудить пределы применимости борновского приближения. В частности, в случае рассеяния на прямоугольной яме (фиг. 16) такое условие имеет вид

$$\frac{1}{\hbar} L (p - \sqrt{p^2 - 2mU}) \ll 1, \quad (23.19)$$



Фиг. 16.

где  $L$  — ширина потенциальной ямы, а  $U$  — ее глубина (модуль рассеивающего потенциала).

Это соответствует слабому возмущению (в скобках стоит разность импульсов частицы вне и внутри ямы).

#### Рассеяние на кулоновском центре

Потенциальная энергия заряда  $ze$  в поле рассеивающего заряда  $Ze$  равна

$$U = zZe^2/r;$$

отсюда фурье-образ матричного элемента  $U_{p-p'}$  [см. (23.15)] есть

$$U_{p-p'} = zZe^2 \int e^{\frac{i}{\hbar} (p-p') \cdot x} \frac{1}{r} d^3x = \frac{4\pi zZe^2}{\frac{1}{\hbar^2} |p-p'|^2} = \frac{4\pi\hbar^2 zZe^2}{4p^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}}; \quad |p| = |p'| = p. \quad (23.20)$$

При интегрировании здесь полезно учесть соотношение\*

$$\nabla^2 (1/r) = -4\pi\delta(x).$$

Для сечения рассеяния получим:

$$\frac{d\sigma}{d\omega} = \frac{z^2 Z^2}{4} \left( \frac{me^2}{p^2} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}, \quad (23.21)$$

т. е. известную классическую формулу Резерфорда.

*Темы для обсуждения:*

1. Рассеяние на потенциальной яме и ядерные силы.
2. Предел больших длин волн — изотропное рассеяние.
3. Предел малых длин волн — рассеяние вперед.
4. Роль массы покоя (случай нейтрино).
5. Экспоненциальный закон распада некоторой первоначально связанной системы [случай (23.11)].

# 24 - Emission and absorption of radiation.

(1)  $\mathcal{H}_0 = e B z \cos \omega t$

$B =$  amplitude,

At  $t=0$  atom in state  $n$ . From (23-(10))

(2)  $a_m(t) = -\frac{i}{\hbar} e B z_{mn} \int_0^t \cos \omega t e^{i\omega_{mn}t} dt$

$$\omega_{mn} = \frac{E^{(m)} - E^{(n)}}{\hbar} > 0 \quad \cos \omega t = \frac{e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}}{2}$$

$\rightarrow \omega \approx \omega_{mn}$  then   
 this term only important when

$$a_m(t) \approx -\frac{i e B}{2\hbar} z_{mn} \int_0^t e^{i(\omega_{mn} - \omega)t} dt =$$

$$= +\frac{e B}{2\hbar} z_{mn} \frac{e^{i(\omega - \omega_{mn})t} - 1}{\omega - \omega_{mn}}$$

(3)  $|a_m(t)|^2 = \frac{e^2 B^2}{\hbar^2} |z_{mn}|^2 \frac{\sin^2 \frac{t}{2} (\omega - \omega_{mn})}{(\omega - \omega_{mn})^2}$

Light intensity  $= \frac{c B^2}{8\pi}$

Absorption from continuum overlapping  $\omega_{mn}$

(4)  $\frac{c B^2}{8\pi} = \frac{dI}{d\omega} d\omega$  Substitute in (3), then  $\int d\omega$

use  $\int \frac{\sin^2 \alpha x}{x^2} dx = \pi \alpha$

$$|a_m|^2 = t \times \frac{4\pi^2 e^2}{c \hbar^2} |z_{mn}|^2 \frac{dI}{d\omega}$$

$\omega =$  avg. frequency   
 not solid angle!

(5) Rate of absorption  $= \frac{4\pi^2 e^2}{c \hbar^2} |z_{mn}|^2 \frac{dI}{d\omega}$

For isotropic radiation of volume energy density  $u(\omega) d\omega$

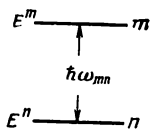
(6) Rate of absorption  $= \frac{4\pi^2 e^2}{3 \hbar^2} |\vec{z}_{mn}|^2 u(\omega_{mn})$

factor 1/3 from averaging over direction of polarization

Здесь будет рассмотрено дипольное излучение, появляющееся уже в первом порядке теории возмущений, когда  $S$ -матрицу можно считать пропорциональной гамильтониану (см. лекцию 19). Будем предполагать, что на атом действует возмущение в форме электромагнитной волны, описываемое гамильтонианом

$$\mathcal{H} = e\mathbf{z}B \cdot \cos \omega t, \quad (24.1)$$

где  $B$  — амплитуда напряженности возмущающего поля.



Фиг. 17.

Пусть в момент  $t=0$  атом находится в состоянии  $E^{(n)}$  и под действием возмущения может перейти на более высокий уровень  $E^{(m)}$  (фиг. 17). Согласно (23.10),

$$a_m(t) = -\frac{i}{\hbar} eBZ_{mn} \int_0^t \cos \omega t e^{i\omega_{mn}t} dt, \quad (24.2)$$

где величина  $\omega_{mn}$ , называемая *боровской частотой перехода* между энергетическими уровнями  $m$  и  $n$ , положительна:

$$\omega_{mn} = \frac{E^{(m)} - E^{(n)}}{\hbar} > 0.$$

Заметим, что  $\cos \omega t = \frac{1}{2} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})$ .

Когда частота возмущающей волны приближается к частоте перехода  $\omega \approx \omega_{mn}$ , в этом выражении существенно только второе слагаемое. В таком случае (24.2) принимает вид

$$a_m(t) \approx -\frac{ieB}{2\hbar} z_{mn} \int_0^t e^{i(\omega_{mn} - \omega)t} dt = \frac{eB}{2\hbar} z_{mn} \frac{e^{-i(\omega - \omega_{mn})t} - 1}{\omega - \omega_{mn}}.$$

Вероятность того, что в момент времени  $t$  атом окажется на энергетическом уровне  $E^{(m)}$ , равна

$$|a_m(t)|^2 = \frac{e^2 B^2}{\hbar^2} |z_{mn}|^2 \frac{\sin^2 \frac{t}{2} (\omega - \omega_{mn})}{(\omega - \omega_{mn})^2}. \quad (24.3)$$

Здесь обнаруживается интересное обстоятельство: при  $\omega \rightarrow \omega_{mn}$  вероятность перехода достигает максимума; тогда говорят о *резонансном вынужденном переходе*.

Энергия электромагнитной световой волны равна  $cB^2/8\pi$ ; рассматривая поглощение в случае, когда падающая волна имеет непрерывный спектр в окрестности резонансной частоты  $\omega_{mn}$ , следует принять

$$\frac{cB^2}{8\pi} = \frac{dI}{d\omega}. \quad (24.4)$$

Подставив это выражение в (24.3) и интегрируя по  $\omega$  с учетом

тождества  $\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2 \alpha x}{x^2} dx = \pi\alpha$ , получим:  $|a_m|^2 = t \frac{4\pi^2 e^2}{c\hbar^2} |z_{mn}|^2 \frac{dI}{d\omega}$

( $\omega$  — циклическая частота, а не телесный угол!). Итак,

$$\left[ \begin{array}{c} \text{Скорость поглощения падающей} \\ \text{(вынуждающей) волны} \end{array} \right] = \frac{4\pi^2 e^2}{c\hbar^2} |z_{mn}|^2 \frac{dI}{d\omega}. \quad (24.5)$$

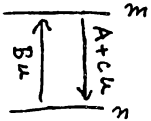


Relationship between emission & absorption could be derived from quantum electrodynamics - However simpler to use Einstein's A & B method

Rate of  $n \rightarrow m$

From (6)

$$(7) \quad B = \frac{4\pi^2 e^2}{3\hbar^2} |\vec{x}_{mn}|^2$$



this B is a coefficient. Has nothing to do with B of page 1

Rate of  $m \rightarrow n$   $[A + C u(\omega)] N(m)$

For thermal equilibrium

$$(8) \quad \frac{N(m)}{N(n)} = e^{-\frac{E(m) - E(n)}{kT}} = e^{-\frac{\hbar \omega_{mn}}{kT}}$$

Spontaneous transitions

Boltzmann distribution

At equilibrium: Rate  $n \rightarrow m$  = Rate  $m \rightarrow n$

$$(9) \quad \frac{A}{B u(\omega)} + \frac{C}{B} = \frac{N_m}{N_n} = e^{-\frac{\hbar \omega}{kT}}$$

Planck's law

$$(10) \quad u = \frac{\hbar \omega^3 / \pi^2 c^3}{e^{\frac{\hbar \omega}{kT}} - 1}$$

$$\frac{\pi^2 c^3}{\hbar \omega^3} \frac{B A}{B} \left( e^{\frac{\hbar \omega}{kT}} - 1 \right) + \frac{C}{B} = e^{\frac{\hbar \omega}{kT}}$$

Must hold at all T's  
Therefore:

$$\frac{\pi^2 c^3}{\hbar \omega^3} \frac{B A}{B} = 1 \quad \frac{C}{B} = 1$$

Einstein's relations

$$(11) \quad A = \frac{\hbar \omega^3}{\pi^2 c^3} B ; C = B \quad \text{then from (7)}$$

$$(12) \quad \frac{1}{\tau} = A = \frac{4}{3} \frac{e^2 \omega^3}{\hbar c^3} |\vec{x}_{mn}|^2 \quad \text{for spontaneous transitions}$$

В случае изотропного излучения следует ввести объемную плотность энергии  $U(\omega)d\omega$ ; тогда (24.5) приобретает вид

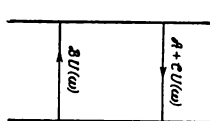
$$\text{Скорость поглощения} = \frac{4\pi^2 e^2}{3\hbar^2} |\mathbf{x}_{mn}|^2 U(\omega_{mn}) \quad (24.6)$$

(множитель  $1/3$  возникает при усреднении по всем возможным направлениям поляризации).

Связь между излучением и поглощением можно было бы вывести методами квантовой электродинамики, однако проще воспользоваться методом коэффициентов Эйнштейна  $\mathcal{A}$ ,  $\mathcal{B}$  и  $\mathcal{C}$ . Скорость вынужденного перехода из состояния  $n$  в состояние  $m$ :

$$\text{Скорость перехода } n \rightarrow m = \mathcal{B}U(\omega) \mathcal{N}(n).$$

Здесь  $\mathcal{N}(n)$  — число атомов в состоянии  $n$  (или  $m$ ). Естественно предположить, что скорость обратного перехода из состояния  $m$  в состояние  $n$  равна



Фиг. 18.

На более высокий уровень возможны лишь вынужденные переходы, а на более низкий — как вынужденные, так и спонтанные.

где  $\mathcal{A}$  — коэффициент спонтанного (самопроизвольного) перехода, а  $\mathcal{C}$  — коэффициент вынужденного перехода  $m \rightarrow n$ .

Установим связь между коэффициентами  $\mathcal{A}$ ,  $\mathcal{B}$  и  $\mathcal{C}$ . Числа атомов соответственно в состояниях  $n$  и  $m$  равны  $\mathcal{N}(n)$  и  $\mathcal{N}(m)$ . Из (24.6) следует, что

$$\mathcal{B} = \frac{4\pi^2 e^2}{3\hbar^2} |\mathbf{x}_{mn}|^2. \quad (24.7)$$

При термодинамическом равновесии система атомов подчиняется распределению Больцмана, так что

$$\frac{\mathcal{N}(m)}{\mathcal{N}(n)} = e^{-\frac{E(m) - E(n)}{\kappa T}} = e^{-\frac{\hbar\omega_{mn}}{\kappa T}} \quad (24.8)$$

( $\kappa$  — постоянная Больцмана).

По самому смыслу равновесия скорость перехода  $n \rightarrow m$  должна быть равна скорости обратного перехода  $m \rightarrow n$ ; следовательно,

$$\frac{\mathcal{A}}{\mathcal{B}U(\omega)} + \frac{\mathcal{C}}{\mathcal{B}} = \frac{\mathcal{N}(n)}{\mathcal{N}(m)} = e^{\frac{\hbar\omega_{mn}}{\kappa T}}. \quad (24.9)$$

По формуле Планка,

$$U(\omega) = \frac{\hbar\omega^3/\pi^2 c^3}{e^{\hbar\omega/\kappa T} - 1}; \quad (24.10)$$

подставляя (24.10) в (24.9), получаем:

$$\frac{\pi^2 c^3}{\hbar\omega^3} \frac{\mathcal{A}}{\mathcal{B}} (e^{\hbar\omega/\kappa T} - 1) + \frac{\mathcal{C}}{\mathcal{B}} = e^{\hbar\omega/\kappa T}.$$

Это равенство должно выполняться при любой температуре  $T$ , так что

$$\frac{\pi^2 c^3}{\hbar\omega^3} \frac{\mathcal{A}}{\mathcal{B}} = 1, \quad \frac{\mathcal{C}}{\mathcal{B}} = 1.$$

- (12) generalized to many particles by change  
 (13)  $e \vec{x} \rightarrow \sum e_i \vec{x}_i$  (sum to all particles)  
 (14)  $\frac{1}{\tau} = \frac{4}{3} \frac{\omega^3}{\hbar c^3} \left| \sum e_i \langle m | \vec{x}_i | n \rangle \right|^2$

Intensity of radiation proportional to square of matrix element of coordinates (for one electron) or of electric moment (13) for several charged particles.

Discuss - Limitations to validity of (12)

dimensions of atom  $\ll \lambda$  of radiation  
 Quadrupole radiation

Case of central forces - Selection rules (Serest 7)  
 Spherical harmonics identities:

$$\begin{aligned}
 (15) \quad & \left\{ \begin{aligned} \sqrt{\frac{8\pi}{3}} Y_{11} Y_{\ell, m-1} &= \sqrt{\frac{(\ell+m)(\ell+1+m)}{(2\ell+1)(2\ell+3)}} Y_{\ell+1, m} - \sqrt{\frac{(\ell-m)(\ell+1-m)}{(2\ell+1)(2\ell-1)}} Y_{\ell-1, m} \\ \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_{10} Y_{\ell, m} &= \sqrt{\frac{(\ell+1)^2 - m^2}{(2\ell+1)(2\ell+3)}} Y_{\ell+1, m} + \sqrt{\frac{\ell^2 - m^2}{(2\ell+1)(2\ell-1)}} Y_{\ell-1, m} \\ \sqrt{\frac{8\pi}{3}} Y_{1,-1} Y_{\ell, m+1} &= \sqrt{\frac{(\ell-m)(\ell+1+m)}{(2\ell+1)(2\ell+3)}} Y_{\ell+1, m} - \sqrt{\frac{(\ell+m)(\ell+1+m)}{(2\ell+1)(2\ell-1)}} Y_{\ell-1, m} \end{aligned} \right. \\
 (16) \quad & \left\{ \begin{aligned} \sqrt{\frac{8\pi}{3}} Y_{11} &= -\sin \vartheta e^{i\varphi} ; \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_{10} = \cos \vartheta ; \sqrt{\frac{8\pi}{3}} Y_{1,-1} = \sin \vartheta e^{-i\varphi} \end{aligned} \right.
 \end{aligned}$$

Follows: The matrix elements of the coordinates vanish unless

$$(17) \quad \ell' = \ell \pm 1 \quad \text{and} \quad m' = m \pm 1 \quad \text{or} \quad m$$

Selection rules

Отсюда следуют соотношения Эйнштейна

$$\boxed{\mathcal{A} = \frac{\hbar \omega^3}{\pi^2 c^3} \mathcal{B}, \quad \mathcal{C} = \mathcal{B}.} \quad (24.11)$$

Используя значение коэффициента  $\mathcal{B}$  (24.7) для спонтанных (самопроизвольных) переходов, находим:

$$\boxed{\frac{1}{\tau} = \mathcal{A} = \frac{4}{3} \frac{e^2 \omega^3}{\hbar c^3} |\mathbf{x}_{mn}|^2,} \quad (24.12)$$

где  $\tau$  — среднее время жизни возбужденного состояния  $m$  по отношению к спонтанным переходам.

Результат (24.12) можно обобщить на случай системы многих частиц с помощью замены

$$e\mathbf{x} \rightarrow \sum_i e_i \mathbf{x}_i \quad (24.13)$$

(суммирование проводится по всем частицам); таким образом,

$$\frac{1}{\tau} = \frac{4}{3} \frac{\omega^3}{\hbar c^3} \left| \sum_i e_i \langle m | \mathbf{x}_i | n \rangle \right|^2. \quad (24.14)$$

Итак, поток энергии спонтанного излучения пропорционален квадрату матричного элемента радиус-вектора (для одного электрона) или квадрату электрического момента (24.13) для системы заряженных частиц<sup>1)</sup>.

#### Темы для обсуждения:

1. Границы применимости формулы (24.12) (размеры атома  $\ll \lambda$ ), т. е. длины волны излучения.

2. Квадрупольное излучение (следующее приближение теории возмущений)<sup>2)</sup>.

**Случай центральных сил. Правила отбора.** Вспоминая результаты лекции 7, выпишем некоторые тождества для сферических функций:

$$\left. \begin{aligned} \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_{1,0} Y_{l,m} &= \sqrt{\frac{(l+1)^2 - m^2}{(2l+1)(2l+3)}} Y_{l+1,m} + \\ &\quad + \sqrt{\frac{l^2 - m^2}{(2l+1)(2l-1)}} Y_{l-1,m}, \\ \sqrt{\frac{8\pi}{3}} Y_{1,\mp 1} Y_{l,m\pm 1} &= \sqrt{\frac{(l \mp m)(l+1 \mp m)}{(2l+1)(2l+3)}} Y_{l+1,m} - \\ &\quad - \sqrt{\frac{(l \pm m)(l+1 \pm m)}{(2l+1)(2l-1)}} Y_{l-1,m}; \end{aligned} \right\} \quad (24.15)$$

<sup>1)</sup> Последняя интерпретация более физична и, конечно, правомерна также в случае одного электрона, который в волновой механике считается „размазанным“. — *Прим. ред.*

<sup>2)</sup> См., например, Гайтлер, Квантовая теория излучения, ИЛ, 1956. — *Прим. ред.*

Matrix elements

$$(18) \begin{cases} \langle \ell+1, m+1 | x+iy | \ell, m \rangle = -\gamma \sqrt{\frac{(\ell+m^2)(\ell+1+m)}{(2\ell+1)(2\ell+3)}} \\ \langle \ell+1, m+1 | x-iy | \ell, m \rangle = 0 \\ \langle n', \ell+1, m | z | n, \ell, m \rangle = \gamma \sqrt{\frac{(\ell+1)^2 - m^2}{(2\ell+1)(2\ell+3)}} \\ \langle n', \ell+1, m-1 | x+iy | n, \ell, m \rangle = 0 \\ \langle n', \ell+1, m-1 | x-iy | n, \ell, m \rangle = \gamma \sqrt{\frac{(\ell+1-m)(\ell+2-m)}{(2\ell+1)(2\ell+3)}} \end{cases}$$

$$(19) \quad \gamma = \int_0^\infty R_{n\ell}(z) R_{n', \ell+1}(z) z^3 dz$$

Derive

$$(20) \begin{cases} |\langle n', \ell+1, m+1 | \vec{x} | n, \ell, m \rangle|^2 + |\langle n', \ell+1, m | \vec{x} | n, \ell, m \rangle|^2 \\ + |\langle n', \ell+1, m-1 | \vec{x} | n, \ell, m \rangle|^2 = \frac{\ell+1}{2\ell+1} \gamma^2 \text{ (indep. of } m) \end{cases}$$

$$(21) \begin{cases} \text{Therefore: rate of transition} \\ (n, \ell, m) \rightarrow (n', \ell+1, \text{any } m') \\ = \frac{4}{3} \frac{e^2 \omega^3}{\hbar c^3} \frac{\ell+1}{2\ell+1} \gamma^2 \end{cases} \quad \text{Comments on independence of } m$$

Similarly

$$(22) \begin{cases} \text{Rate}(n, \ell, m \rightarrow n', \ell-1, \text{any } m) = \\ = \frac{4}{3} \frac{e^2 \omega^3}{\hbar c^3} \frac{\ell}{2\ell-1} \left\{ \int_0^\infty R_{n\ell}(z) R_{n', \ell-1}(z) z^3 dz \right\}^2 \end{cases}$$

$$\begin{aligned} \sqrt{\frac{8\pi}{3}} Y_{1,1} &= -\sin \theta e^{i\varphi}, & \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_{1,0} &= \cos \theta, \\ \sqrt{\frac{8\pi}{3}} Y_{1,-1} &= \sin \theta e^{-i\varphi}. \end{aligned} \quad (24.16)$$

Из этих тождеств следует, что в центрально-симметричном поле матричные элементы координат отличны от нуля только тогда, когда

$$l' = l \pm 1, \quad m' = m \pm 1 \text{ или } m. \quad (24.17)$$

Эти условия называют *правилами отбора*; они определяют возможность того или иного акта излучения и поглощения и налагают так называемые "запреты" на переходы, не удовлетворяющие условиям (24.17). Исходя из правил (24.17), можно записать следующие выражения для матричных элементов:

$$\begin{aligned} \langle n', l+1, m+1 | x + iy | n, l, m \rangle &= \\ &= -I \sqrt{\frac{(l+2+m)(l+1+m)}{(2l+1)(2l+3)}}, \\ \langle n', l+1, m+1 | x - iy | n, l, m \rangle &= 0, \\ \langle n', l+1, m | z | n, l, m \rangle &= I \sqrt{\frac{(l+1)^2 - m^2}{(2l+1)(2l+3)}}, \\ \langle n', l+1, m-1 | x + iy | n, l, m \rangle &= 0, \\ \langle n', l+1, m-1 | x - iy | n, l, m \rangle &= \\ &= I \sqrt{\frac{(l+1-m)(l+2-m)}{(2l+1)(2l+3)}}. \end{aligned} \quad (24.18)$$

Здесь

$$I = \int_0^\infty R_{nl}(r) R_{n', l+1}(r) r^3 dr. \quad (24.19)$$

Из формул (24.18) следует, что

$$\begin{aligned} |\langle n', l+1, m+1 | \mathbf{x} | n, l, m \rangle|^2 &+ |\langle n', l+1, m | \mathbf{x} | n, l, m \rangle|^2 + \\ &+ |\langle n', l+1, m-1 | \mathbf{x} | n, l, m \rangle|^2 = \frac{l+1}{2l+1} I^2, \end{aligned} \quad (24.20)$$

так что скорость перехода из состояния  $(n, l, m)$  в состояние

$(n', l+1, m' = \begin{cases} m \\ m \pm 1 \end{cases})$  равна

$$\left[ \begin{array}{c} \text{Скорость перехода} \\ (n, l, m) \rightarrow (n', l+1, m') \end{array} \right] = \frac{4}{3} \frac{e^2 \omega^3}{\hbar c^3} \frac{l+1}{2l+1} I^2. \quad (24.21)$$

Отметим, что как соотношения (24.20), так и скорость перехода в (24.21) не зависят от магнитного квантового числа  $m$ , что проявляется в одинаковой яркости спектральных линий.

<sup>1)</sup> Правила отбора для магнитного квантового числа уже рассматривались в лекции 21.— *Прим. ред.*

Example - Life time of  $2p$  state of hydrogen

$$R_{1s}(r) = \frac{2}{a^{3/2}} e^{-r/a}; \quad R_{2p}(r) = \frac{1}{\sqrt{24}a^3} \frac{r}{a} e^{-r/2a}$$

$$\gamma = \int R_{1s} R_{2p} r^3 dr = \frac{192\sqrt{2}}{243} a$$

$$\begin{aligned} \text{Rate}(2p \rightarrow 1s) &= \frac{294912}{177147} \frac{e^2 \omega^3 a^2}{\hbar c^3} & \omega &= \frac{3}{4} \frac{m e^4}{2 \hbar^3} \\ &= \frac{1152}{1561} \left( \frac{e^2}{\hbar c} \right)^3 \left( \frac{m e^4}{2 \hbar^3} \right) & a &= \frac{\hbar^2}{m e^2} \\ &= 1.41 \times 10^9 \text{ sec}^{-1} & \frac{e^2}{\hbar c} &= \frac{1}{137} \end{aligned}$$

$\nearrow = \frac{R_{\text{H}}}{\hbar} = 2.067 \times 10^{16} \text{ sec}^{-1}$

### Topics for discussion

Permitted + forbidden lines

Metastable states

Generalization of selection rules

Irradiation by a linear oscillator

Sum rule + effective number of electrons

Polarization of emitted light

Аналогично скорость перехода из состояния  $(n, l, m)$  в состояние  $(n', l-1, m' = \begin{cases} m \\ m-1 \end{cases})$  равна

$$\left[ \begin{array}{c} \text{Скорость перехода} \\ (n, l, m) \rightarrow (n', l-1, m') \end{array} \right] = \frac{4}{3} \frac{e^2 \omega^3}{\hbar c^3} \frac{l}{2l-1} I^2. \quad (24.22)$$

**ПРИМЕР. Время жизни 2р-состояния водорода.** Согласно правилам отбора, возможен лишь спонтанный переход в состояние 1s; следовательно,

$$R_{1s} = \frac{2}{a^{3/2}} e^{-r/a}, \quad R_{2p} = \frac{1}{\sqrt{24}a^3} \frac{r}{a} e^{-r/2a},$$

$$I = \int R_{1s} R_{2p} r^3 dr = \frac{192}{243} \sqrt{2} a.$$

$$\text{Скорость перехода } (2p \rightarrow 1s) = \frac{294 \cdot 912}{177 \cdot 147} \frac{e^2 \omega^3 a^2}{\hbar c^3} =$$

$$= \frac{1152}{6561} \left( \frac{e^2}{\hbar c} \right)^3 \frac{me^4}{2\hbar^3} = 1,41 \cdot 10^9 \text{ сек}^{-1};$$

здесь  $e^2/\hbar c = 1/137$  — постоянная тонкой структуры, или константа электромагнитного взаимодействия;

$$me^4/2\hbar^3 = 2,067 \cdot 10^{16} \text{ сек}^{-1} = \text{Постоянная Ридберга}/\hbar;$$

$$\omega = (3/4) (me^4/2\hbar^3) — \text{энергия первого боровского уровня};$$

$$a = \hbar^2/me^2 — \text{боровский радиус}.$$

*Темы для обсуждения:*<sup>1)</sup>

1. Разрешенные и запрещенные переходы.
2. Метастабильные состояния.
3. Обобщение правил отбора.
4. Излучение линейного осциллятора.
5. Правило суммы и эффективное число электронов.
6. Поляризация излучаемого света.

<sup>1)</sup> Большую помощь в изучении этих вопросов читателю могут оказывать курсы квантовой механики Л. Шиффа (в частности, см. стр. 292—297, 303—306), Д. И. Блохинцева (стр. 300—317), а также книга А. Зоммерфельда „Строение атома и спектры“, т. II, М., 1956 (см. гл. I, § 8, 9; гл. II, § § 8, 10). — *Прим. ред.*



## 25 - Pauli theory of spin

Int. degree of freedom - dichotomic variable -

Operators on spin variable

$$(1) \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix}$$

Search for operators

$$(2) \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$$

Normalize them to e.v.'s  $\pm 1$  Then

$$(2) \sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1 = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix}$$

Also

$$(3) (\alpha \sigma_x + \beta \sigma_y + \gamma \sigma_z)^2 = 1 \quad \alpha, \beta, \gamma = \text{direction cosines}$$

$$(4) \rightarrow \sigma_x \sigma_y + \sigma_y \sigma_x = 0; \dots \quad (\text{Anticommutation})$$

Choose base for  $\sigma_z$  diagonal

$$(5) \sigma_z = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix}$$

$$(5) \sigma_x = \begin{vmatrix} a & b \\ b^* & c \end{vmatrix} \quad \text{from } \sigma_x \sigma_z + \sigma_z \sigma_x = 1 \text{ follows}$$

$$\begin{vmatrix} a & -b \\ b^* & -c \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} a & b \\ -b^* & -c \end{vmatrix} = 0 \rightarrow \begin{cases} a = c = 0 \end{cases}$$

$$\sigma_x = \begin{vmatrix} 0 & b \\ b^* & 0 \end{vmatrix} \quad \sigma_x^2 = \begin{vmatrix} |b|^2 & 0 \\ 0 & |b|^2 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix} \rightarrow |b|^2 = 1$$

$$B \sigma_x = \begin{vmatrix} 0 & e^{i\alpha} \\ e^{-i\alpha} & 0 \end{vmatrix} \quad \text{Dispose of phases of base vectors to make } \alpha = 1. \text{ Then}$$

$$(6) \sigma_x = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}$$

$$\text{As above } \sigma_y = \begin{vmatrix} 0 & e^{i\beta} \\ e^{-i\beta} & 0 \end{vmatrix}, \text{ From } \sigma_x \sigma_y + \sigma_y \sigma_x = 0, \text{ find } e^{i\beta} + e^{-i\beta} = 0 \text{ or } e^{i\beta} = \pm i$$

### Понятие спина.

Физически спин представляет собой собственный механический момент (момент импульса) частицы и является таким же первичным свойством частицы, как ее масса покоя. Спин ведет себя как векторная (точнее, псевдовекторная) величина. Итак,

Спин — это внутренняя степень свободы.

Рассмотрим в первую очередь спин электрона; проекция его на выделенную ось может принимать лишь два значения:  $+\frac{1}{2}$  и  $-\frac{1}{2}$ . Волновая функция электрона при учете зависимости от спина — величины, имеющей два собственных значения, — становится „векторной“ функцией, имеющей две компоненты  $\psi = \begin{Bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{Bmatrix}$ . Таким образом,

Спин — переменная, принимающая два значения.

**Операторы спина.** Общий вид матриц-операторов, действующих на новую переменную, таков:

$$\hat{A} = \begin{Bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{Bmatrix}. \quad (25.1)$$

Найдем вид трех операторов  $\hat{\sigma}_x$ ,  $\hat{\sigma}_y$ ,  $\hat{\sigma}_z$ , соответствующих новым физическим величинам — проекциям спина на координатные оси. Нормируем собственные функции этих операторов так, чтобы их собственные значения были равны  $\pm 1$ .

Отсюда следуют условия

$$\hat{\sigma}_x^2 = \hat{\sigma}_y^2 = \hat{\sigma}_z^2 = 1 = \begin{Bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{Bmatrix}; \quad (25.2)$$

$$\text{кроме того, } (\alpha \hat{\sigma}_x + \beta \hat{\sigma}_y + \gamma \hat{\sigma}_z)^2 = 1, \quad (25.3)$$

где  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  — направляющие косинусы вектора спина. Из (25.3) вытекают правила антикоммутации для компонент оператора спина

$$\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y + \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_x = 0; \quad \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_z + \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_y = 0; \quad \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_x + \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_z = 0. \quad | \quad (25.4)$$

Выберем базис, в котором матрица  $\hat{\sigma}_z$  диагональна:

$$\hat{\sigma}_z = \begin{Bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{Bmatrix}. \quad (25.5)$$

Общая форма матрицы  $\hat{\sigma}_x$  следует из условия ее эрмитовости:

$$\hat{\sigma}_x = \begin{Bmatrix} a & b \\ b^* & c \end{Bmatrix}.$$

Тогда из правила  $\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_z + \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_x = 0$  следует:

$$\begin{Bmatrix} a & b \\ b^* & c \end{Bmatrix} \cdot \begin{Bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{Bmatrix} \cdot \begin{Bmatrix} a & b \\ b^* & c \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 2a & 0 \\ 0 & -2c \end{Bmatrix} = 0,$$

$$\text{т. е. } a = c = 0, \text{ так что } \hat{\sigma}_x = \begin{Bmatrix} 0 & b \\ b^* & 0 \end{Bmatrix}.$$

$$\sigma_y = \text{either } \begin{vmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{vmatrix} \text{ or } \begin{vmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{vmatrix}$$

Eliminate first choice, because

$$\textcircled{c} \quad \sigma_z = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix} \quad \sigma_x = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix} \quad \sigma_y = \begin{vmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{vmatrix}$$

First consider in place of  $\vec{\sigma}$ ,  $-\vec{\sigma}$  or  $\vec{\sigma} \rightarrow -\vec{\sigma}$

$$\sigma_z = \begin{vmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix} \quad \sigma_x = \begin{vmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{vmatrix} \quad \sigma_y = \begin{vmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{vmatrix}$$

Then unitary transf.  $T = \sigma_y$  transforms to standard form of Pauli spin operators

$$(7) \quad \sigma_x = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}; \quad \sigma_y = \begin{vmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{vmatrix}; \quad \sigma_z = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix}$$

Check from (7)

$$(8) \quad \sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1 \quad \vec{\sigma}^2 = \sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2 = 3$$

$$(9) \quad \sigma_x \sigma_y + \sigma_y \sigma_x = 0; \quad \sigma_y \sigma_z + \sigma_z \sigma_y = 0; \quad \sigma_z \sigma_x + \sigma_x \sigma_z = 0$$

$$(10) \quad \sigma_x \sigma_y = i \sigma_z; \quad \sigma_y \sigma_z = i \sigma_x; \quad \sigma_z \sigma_x = i \sigma_y$$

$$(11) \quad [\sigma_x, \sigma_y] = 2i \sigma_z; \quad [\sigma_y, \sigma_z] = 2i \sigma_x; \quad [\sigma_z, \sigma_x] = 2i \sigma_y$$

$$\text{or} \quad (12) \quad \vec{\sigma} \times \vec{\sigma} = 2i \vec{\sigma}$$

Consider vector

$$(13) \quad \vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \quad \text{Then,}$$

$$(14) \quad \vec{S} \times \vec{S} = i \hbar \vec{S}$$

Identical to ang. mom. rules (18-(5)) or (20-(26)) of ang. mom. vectors. Therefore  $\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$  = intrinsic ang. mom. of electron

С другой стороны,  $\hat{\sigma}_x^2 = \begin{vmatrix} |b|^2 & 0 \\ 0 & |b|^2 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix}$ , т. е.  $|b|^2 = 1$ .

Таким образом, матрица  $\hat{\sigma}_x$  должна иметь вид

$$\hat{\sigma}_x = \begin{vmatrix} 0 & e^{i\alpha} \\ e^{-i\alpha} & 0 \end{vmatrix}.$$

Выберем значения фаз базисных векторов так, чтобы получить  $\alpha=0$ . Тогда окончательно

$$\hat{\sigma}_x = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}. \quad (25.6)$$

Поскольку к матрице  $\hat{\sigma}_y$  приложимы те же самые соображения, что и к  $\hat{\sigma}_x$ , получаем:

$$\hat{\sigma}_y = \begin{vmatrix} 0 & e^{i\beta} \\ e^{-i\beta} & 0 \end{vmatrix}.$$

Но следует удовлетворить еще условию  $\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y + \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_x = 0$ , откуда

$$e^{i\beta} + e^{-i\beta} = 0, \text{ или } e^{\pm i\beta} = \pm i.$$

Следовательно,  $\hat{\sigma}_y = \begin{vmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{vmatrix}$  либо  $\begin{vmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{vmatrix}$ .

Попробуем исключить первый вариант матрицы  $\hat{\sigma}_y$ . Пусть

$$\hat{\sigma}_z = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix}; \quad \hat{\sigma}_x = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}; \quad \hat{\sigma}_y = \begin{vmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{vmatrix}.$$

Произведем теперь преобразование  $\hat{\sigma} \rightarrow -\hat{\sigma}$ , не меняющее общих свойств матриц:

$$\hat{\sigma}_z = \begin{vmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix}; \quad \hat{\sigma}_y = \begin{vmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{vmatrix}; \quad \hat{\sigma}_x = \begin{vmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{vmatrix}.$$

Тогда унитарное преобразование  $\hat{T} = \hat{\sigma}_y$  дает *спиновые операторы Паули* в их стандартной форме (второй вариант):

$$\boxed{\hat{\sigma}_x = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{vmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{vmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix}.} \quad (25.7)$$

Так как оба преобразования унитарны, то в целом преобразование также унитарно; тем самым доказана эквивалентность обоих выборов вида матрицы  $\hat{\sigma}_y$ . В дальнейшем будет использоваться стандартная (вторая) форма спиновых операторов.

**Свойства операторов Паули.** Прямо из (25.7) получим:

$$\hat{\sigma}_x^2 = \hat{\sigma}_y^2 = \hat{\sigma}_z^2 = 1, \quad \hat{\sigma}^2 = \hat{\sigma}_x^2 + \hat{\sigma}_y^2 + \hat{\sigma}_z^2 = 3. \quad (25.8)$$

$$\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y + \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_x = \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_z + \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_y = \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_x + \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_z = 0. \quad (25.9)$$

(15)  $\left\{ \begin{array}{l} \text{E. v. of } s_x, s_y, s_z \text{ are } \pm \frac{\hbar}{2} \\ \text{Also } \vec{s}^2 = s_x^2 + s_y^2 + s_z^2 = \frac{\hbar^2}{4} \sigma^2 = \frac{3}{4} \hbar^2 = \hbar^2 \frac{1}{2} \times (\frac{1}{2} + 1) \\ \text{Both mean: Spin angular momentum} = \hbar/2 \end{array} \right.$

Magnetic moment. Zeeman effect requires that spin carries a magn. moment

(16)  $\vec{\mu} = \mu_0 \vec{\sigma} \quad \mu_0 = \frac{e\hbar}{2mc} = \text{Bohr magneton}$

Same conclusion from Dirac relativistic theory of electron. Schwinger (1948) ~~gave~~ computed radiative correction

(17)  $\mu_0 = \frac{e\hbar}{2mc} \left( 1 + \frac{1}{2\pi} \frac{e^2}{\hbar c} \right) = \frac{e\hbar}{2mc} \times 1.00116$   
in better agreement with expt.

When electron moves in ext magn. field  $B$  ( $\parallel$  to  $z$  axis) add' to Hamiltonian (21-(27)) the term

(18)  $-B\mu_0\sigma_z = -B \frac{e\hbar}{2mc} \sigma_z$

Observe

$$\frac{\text{mag. moment}}{\text{ang. momentum}/\hbar} = \begin{cases} \mu_0 & \text{for orbital motion} \\ 2\mu_0 & \text{for spin} \end{cases}$$

Topics for discussion - Motion of an isolated spin vector in a constant or variable magnetic field.

Meaning of direction of spin vector

$$\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y = i\hat{\sigma}_z, \quad \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_z = i\hat{\sigma}_x, \quad \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_x = i\hat{\sigma}_y. \quad (25.10)$$

$$[\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y] = 2i\hat{\sigma}_z, \quad [\hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z] = 2i\hat{\sigma}_x, \quad [\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_x] = 2i\hat{\sigma}_y, \quad (25.11)$$

или в общем виде

$$[\hat{\sigma} \times \hat{\sigma}] = 2i\hat{\sigma}. \quad (25.12)$$

Все эти свойства удобно выразить в виде одной легко запоминающейся формулы  $\sigma_i \sigma_j = i\epsilon_{ijk} \sigma_k + \sigma_{ij}$ , где  $\epsilon$  — символ Леви-Чивита.

**Вектор спина.** Рассмотрим вектор

$$\hat{S} = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}. \quad (25.13)$$

Из (25.12) для оператора  $\hat{S}$  следует соотношение

$$[\hat{S} \times \hat{S}] = i\hbar \hat{S}. \quad (25.14)$$

Оно имеет в точности форму соотношений (18.5) и (20.26). Следовательно, величину (25.13)  $\hat{S} = (\hbar/2)\hat{\sigma}$  можно интерпретировать как *собственный момент импульса (собственный механический момент) электрона*. Очевидно,

Собственные значения  $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$  равны  $\pm \hbar/2$ ; кроме того,

$$\mathbf{S}^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 = \frac{\hbar^2}{4} \sigma^2 = \frac{3}{4} \hbar^2 = \hbar^2 \frac{1}{2} \left( \frac{1}{2} + 1 \right). \quad (25.15)$$

Последнее явно напоминает собственные значения  $\hat{M}^2$  [см. (18.11)].

Вывод: *Спиновый момент электрона*  $= \hbar/2$ .

**Магнитный момент.** Из экспериментального эффекта Зеемана следует, что спину должен соответствовать магнитный момент

$$\mu = \mu_0 \sigma \left( \mu_0 = \frac{e\hbar}{2mc} \text{ — магнетон Бора} \right). \quad (25.16)$$

В точности такой же вывод следует из релятивистской теории электрона Дирака. В более точной теории, учитывающей радиационные поправки, Швингер в 1948 г. нашел:

$$\mu_0 = \frac{e\hbar}{2mc} \left( 1 + \frac{1}{2\pi} \frac{e^2}{\hbar c} \right) = \frac{e\hbar}{2mc} \cdot 1,00116, \quad (25.17)$$

что еще лучше согласуется с экспериментом.

При движении электрона во внешнем магнитном поле  $B$  ( $B \parallel z$ ) к гамильтониану (21.27) прибавляется член

$$-B\mu_0 \sigma_z = -B \frac{e\hbar}{2mc} \sigma_z. \quad (25.18)$$

Следует обратить внимание на характерное соотношение:

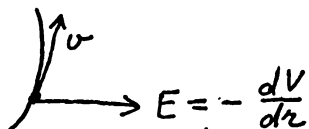
$$\frac{\text{Магнитный момент}}{\text{Момент импульса} / \hbar} = \begin{cases} \mu_0 & \text{для орбитального момента,} \\ 2\mu_0 & \text{для спина.} \end{cases} \quad (25.19)$$

*Темы для обсуждения:*

1. Движение изолированного вектора спинового магнитного момента в постоянном или переменном магнитном поле\*.
2. Смысл «направления» вектора спина\*\*.

# 26 - Electron in central field.

- (1) Potential =  $-e V(r)$   
Spin orbit interaction (Classical)



Apparent mag. field for electron

$$(2) \left\{ \begin{aligned} &\approx -\frac{1}{c} \vec{v} \times \vec{E} & \vec{E} &= -\frac{dV}{dr} \frac{\vec{r}}{r} \\ &= -\frac{1}{c} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \vec{r} \times \vec{v} &= -\frac{1}{mc} \frac{1}{r} V'(r) \vec{M} &= -\frac{\hbar}{mc} \frac{V'(r)}{r} \vec{L} \end{aligned} \right.$$

- (3)  $\vec{M} = \text{orb. ang. momentum} = \hbar \vec{L}$   
Mag. moment of electron =  $\mu_0 \vec{\sigma} = \frac{e\hbar}{2mc} \vec{\sigma}$   
Mutual energy of intrinsic mag. mom and apparent field

$$(4) -\frac{V'(r)}{r} \frac{\hbar \mu_0}{mc} (\vec{L} \cdot \vec{\sigma}) = -\frac{e \hbar^2 V'(r)}{2 m^2 c^2 r} (\vec{L} \cdot \vec{\sigma}) \quad \text{minuses sign because electron negative}$$

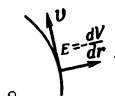
Thomas correction. Is a relativistic term that cancels half of (4) - Also from completely relativistic Dirac theory. In conclusion:

Spin orbit interaction adopted

$$(5) -\frac{\hbar \mu_0}{2mc} \frac{V'(r)}{r} (\vec{L} \cdot \vec{\sigma}) = -\frac{e \hbar^2}{4 m^2 c^2} \frac{V'(r)}{r} (\vec{L} \cdot \vec{\sigma})$$

Hamiltonian of electron

$$(6) H = \frac{1}{2m} p^2 - e V(r) - \frac{e \hbar^2}{4 m^2 c^2} \frac{V'(r)}{r} (\vec{L} \cdot \vec{\sigma})$$



Фиг. 19.

Движение электрона в центральном электростатическом поле

Потенциальная энергия заряда  $e$  в центрально-симметричном электростатическом поле

$$U = -eV(r). \quad (26.1)$$

Рассмотрим сначала классическое спин-орбитальное взаимодействие электрона, движущегося в центрально-симметричном поле ядра (фиг. 19).

При движении в кулоновском поле со скоростью  $\mathbf{v}$  электрон испытывает воздействие эффективного магнитного поля, напряженность которого приближенно равна  $\mathbf{H} = -(1/c) \mathbf{v} \times \mathbf{E}$ . Выражая напряженность кулоновского поля в виде градиента его потенциала, можем ввиду его центральной симметрии записать  $\mathbf{E} = (dV/dr) (\mathbf{x}/r)$ .

Итак, напряженность эффективного магнитного поля для электрона

$$\begin{aligned} \mathbf{H} &\approx -\frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{E}, & \mathbf{E} &= -\frac{dV}{dr} \frac{\mathbf{x}}{r}, \\ \mathbf{H} &\approx -\frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \mathbf{x} \times \mathbf{v} = \\ &= -\frac{1}{mc} \frac{1}{r} V'(r) \mathbf{M} = -\frac{\hbar}{mc} \frac{V'(r)}{r} \mathbf{L}, \end{aligned} \quad (26.2)$$

где «штрих» означает производную по радиальной координате

$$\begin{aligned} \mathbf{M} &= \text{Орбитальный момент} = \hbar \mathbf{L}, \\ \mu_0 \boldsymbol{\sigma} &= \left[ \begin{array}{l} \text{Собственный (спиновый)} \\ \text{магнитный момент} \end{array} \right] = \frac{e\hbar}{2mc} \hat{\boldsymbol{\sigma}}. \end{aligned} \quad (26.3)$$

Энергия взаимодействия собственного (спинового) магнитного момента электрона с эффективным магнитным полем равна

$$-\frac{V'(r)}{r} \frac{\hbar \mu_0}{mc} (\mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = -\frac{e\hbar^2 V'(r)}{2m^2 c^2 r} (\mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\sigma}). \quad (26.4)$$

(Знак «минус» соответствует отрицательному знаку заряда электрона.)

*Поправка Томаса* представляет собой релятивистский член, уменьшающий энергию взаимодействия (26.4) вдвое. Этот вывод подтверждает и последовательно релятивистская теория Дирака.

Окончательно примем следующее выражение для энергии спин-орбитального взаимодействия:

$$-\frac{\hbar \mu_0}{2mc} \frac{V'(r)}{r} (\mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = -\frac{e\hbar^2}{4m^2 c^2} \frac{V'(r)}{r} (\mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\sigma}). \quad (26.5)$$

Полный гамильтониан электрона, движущегося в центрально-симметричном электрическом поле, запишется в виде

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 - eV(r) - \frac{e\hbar^2}{4m^2 c^2} \frac{V'(r)}{r} (\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}). \quad (26.6)$$



Put  $\vec{S} = \frac{\vec{\sigma}}{2}$  (this = intrinsic spin ang. mom. in unit  $\hbar$ )

$$(8) \begin{cases} H = \frac{1}{2m} p^2 - e V(r) - \frac{e \hbar^2 V(r)}{2m^2 c^2} (\vec{L} \cdot \vec{S}) \\ = H_1 + H_2 (\vec{L} \cdot \vec{S}) \end{cases} \quad \begin{aligned} H_1 &= \frac{1}{2m} p^2 - e V(r) \\ H_2 &= -\frac{e \hbar^2}{2m^2 c^2} \frac{V(r)}{r} \end{aligned}$$

Introduce also

$$(9) \quad \vec{J} = \vec{L} + \vec{S} = \text{tot. ang. mom. in } \hbar \text{ units.}$$

List of commutation properties:

$$(10) \begin{cases} \vec{L} \times \vec{L} = i \vec{L} ; \vec{S} \times \vec{S} = i \vec{S} \\ [L_x, L_y] = i L_z \text{ \& similar } [L_x, L^2] = 0, \\ [S_x, S_y] = i S_z \text{ \& similar } [S_x, S^2] = 0, \dots \end{cases}$$

$$(11) \quad \{[L_x, S_x] = 0, [L_x, S_y] = 0 \text{ and similar components}\}$$

$$(12) \quad \begin{cases} S^2 = \frac{3}{4} \end{cases}$$

Follows from (10) (11) (9)

$$(13) \quad \vec{J} \times \vec{J} = i \vec{J} \text{ or } [J_x, J_y] = i J_z \text{ \& similar}$$

$\vec{J}$  behaves like an ang. mom. vector. From (13)

$$(14) \quad [J_x, J^2] = 0, \text{ and similar}$$

$$(15) \quad \begin{cases} \text{All components of } \vec{L}, \vec{S}, \vec{J} \text{ and also } L^2, S^2 = \frac{3}{4}, J^2 \\ \text{commute with } H_1, H_2. \end{cases}$$

$$(16) \quad [(\vec{L} \cdot \vec{S}), J_x] = 0$$

Proof:  $[(L_x S_x + L_y S_y + L_z S_z), (L_x + S_x)] = [L_y L_x] S_y + [L_z L_x] S_z + [S_y S_x] + L_z [S_z S_x] = -i L_z S_y + i L_y S_z - i L_y S_z + i L_z S_y = 0$

Положим

$$\mathbf{S} = \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2}, \quad (26.7)$$

где  $\mathbf{S}$  — собственный (спиновый) механический момент электрона в единицах  $\hbar$ . Тогда (26.6) примет вид

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 - eV(r) - \frac{e\hbar^2 V'(r)}{2m^2 c^2 r} (\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}) \equiv \hat{H}_1 + \hat{H}_2 (\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}), \quad (26.8)$$

$$\hat{H}_1 = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 - eV(r), \quad \hat{H}_2 = -\frac{e\hbar^2}{2m^2 c^2} \frac{V'(r)}{r}.$$

*Оператор полного момента.* Определим

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}} \equiv \text{Оператор полного момента (в единицах } \hbar). \quad (26.9)$$

*Коммутационные свойства введенных операторов:*

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{L}}, \hat{\mathbf{L}}] &= i\hat{\mathbf{L}}, \text{ или } [\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hat{L}_z \text{ и циклические перестановки;} & [\hat{\mathbf{S}}, \hat{\mathbf{S}}] &= i\hat{\mathbf{S}}, \text{ или } [\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hat{S}_z \text{ и циклические перестановки;} \\ [\hat{L}_x, \hat{L}^2] &= 0 \text{ и то же для } \hat{L}_y \text{ и } \hat{L}_z; & [\hat{S}_x, \hat{S}^2] &= 0 \text{ и то же для } \hat{S}_y \text{ и } \hat{S}_z; \end{aligned} \quad (26.10)$$

$$[\hat{L}_x, \hat{S}_x] = [\hat{L}_y, \hat{S}_y] = \dots = 0. \quad (26.11)$$

$$\mathbf{S}^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 = \frac{3}{4}. \quad (26.12)$$

Из соотношений (26.9) — (26.11) следует:

$$\hat{\mathbf{J}} \times \hat{\mathbf{J}} = i\hat{\mathbf{J}} \text{ или } [\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hat{J}_z \text{ и циклические перестановки.} \quad (26.13)$$

Отсюда ясно, что оператор  $\hat{\mathbf{J}}$  обладает свойствами вектора момента импульса. Из соотношений (26.13) следует:

$$[\hat{J}_x, \hat{J}^2] = [\hat{J}_y, \hat{J}^2] = [\hat{J}_z, \hat{J}^2] = 0. \quad (26.14)$$

$$\begin{aligned} &\text{Все компоненты } \hat{\mathbf{L}}, \hat{\mathbf{S}}, \hat{\mathbf{J}}, \\ &\text{а также операторы } \hat{L}^2, \hat{S}^2 (= \frac{3}{4}), \hat{J}^2 \\ &\text{коммутируют с } \hat{H}_1 \text{ и с } \hat{H}_2. \end{aligned} \quad (26.15)$$

Поскольку все эти величины, очевидно, коммутируют с невозмущенным гамильтонианом  $\hat{H}_1$ , достаточно доказать, что они коммутируют с  $\hat{H}_2$ , — тем самым будет доказана их перестановочность и с полным гамильтонианом  $\hat{H}$ . Итак, докажем перестановочность с  $\hat{H}_2$ , например для компоненты оператора  $\hat{J}$ :

$$[(\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}), \hat{J}_x] = 0. \quad (26.16)$$

*Доказательство.*

$$\begin{aligned} [(\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}), \hat{J}_x] &= [(\hat{L}_x \hat{S}_x + \hat{L}_y \hat{S}_y + \hat{L}_z \hat{S}_z), (\hat{L}_x + \hat{S}_x)] = \\ &= [\hat{L}_y, \hat{L}_x] \hat{S}_y + [\hat{L}_z, \hat{L}_x] \hat{S}_z + \hat{L}_y [\hat{S}_y, \hat{S}_x] + \hat{L}_z [\hat{S}_z, \hat{S}_x] = \\ &= -i\hat{L}_z \hat{S}_y + i\hat{L}_y \hat{S}_z - i\hat{L}_y \hat{S}_z + i\hat{L}_z \hat{S}_y = 0. \end{aligned}$$

$$(16) \begin{cases} [(\vec{L} \cdot \vec{S}), J^2] = 0 \\ [(\vec{L} \cdot \vec{S}), L^2] = 0 \\ [(\vec{L} \cdot \vec{S}), S^2] = 0 \end{cases}$$

Therefore

$$(17) [H, J^2] = [H, L^2] = [H, S^2] = 0$$

Also

$$(18) [H, (L \cdot S)] = 0$$

$$(19) [H, J_x] = [H, J_y] = [H, J_z] = 0$$

$$(20) J^2 = L^2 + S^2 + 2(L \cdot S)$$

Hence

$$(21) [J^2, L^2] = [J^2, S^2] = 0$$

$$(22) [J_z, L^2] = [J_z, S^2] = [J_z, J^2] = 0$$

First characterize state by making diagonal following intercommuting quantities

$$23 \begin{cases} H_1, H_2, L^2 = l(l+1), S^2 = \frac{3}{4}, L_z = m_l, S_z = m_s \\ m_l = l, l-1, \dots, -l+1, -l \\ m_s = \pm 1/2 \quad l - \frac{1}{2} \leq J_z \leq l + \frac{1}{2} \end{cases}$$

$H$  in general not diagonal because  $(L \cdot S)$  does not commute with  $L_z$  or  $S_z$ . But  $[(L \cdot S), J_z] = 0$

Therefore  $(L \cdot S)$  mixes states of same  $J_z = m$  and different  $L_z, S_z$ . Two such states:

Согласно (26.15),

$$[(\hat{L} \cdot \hat{S}), \hat{J}^2] = [(\hat{L} \cdot \hat{S}), \hat{L}^2] = [(\hat{L} \cdot \hat{S}), \hat{S}^2] = 0; \quad (26.16a)$$

имеем также соотношения

$$[\hat{H}, \hat{J}^2] = [\hat{H}, \hat{L}^2] = [\hat{H}, \hat{S}^2] = 0, \quad (26.17)$$

$$[\hat{H}, (\hat{L} \cdot \hat{S})] = 0, \quad (26.18)$$

$$[\hat{H}, \hat{J}_x] = [\hat{H}, \hat{J}_y] = [\hat{H}, \hat{J}_z] = 0, \quad (26.19)$$

причем

$$\hat{J}^2 = \hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2(\hat{L} \cdot \hat{S}). \quad (26.20)$$

Отсюда

$$[\hat{J}^2, \hat{L}^2] = [\hat{J}^2, \hat{S}^2] = 0, \quad (26.21)$$

$$[\hat{J}_z, \hat{L}^2] = [\hat{J}_z, \hat{S}^2] = [\hat{J}_z, \hat{J}^2] = 0. \quad (26.22)$$

**Состояние атома.** Будем характеризовать состояние атома, диагонализировав предварительно следующие коммутирующие друг с другом величины:

$$\begin{aligned} \hat{H}, \hat{H}_z, \hat{L}^2 = l(l+1), \hat{S}^2 = \frac{3}{4}, \\ \hat{L}_z = m_l, \hat{S}_z = m_s, \hat{J}_z = m_l + m_s = m, \end{aligned} \quad (26.23)$$

где указаны диагональные элементы (собственные значения):

$$m_l = l, l-1, \dots, -l+1, -l; \quad m_s = \pm \frac{1}{2};$$

$$-l - \frac{1}{2} \leq m \leq l + \frac{1}{2}.$$

Полный гамильтониан  $\hat{H}$ , вообще говоря, не приводится при этом к диагональному виду, так как  $(\hat{L} \cdot \hat{S})$  не коммутирует с  $\hat{L}_z$  или с  $\hat{S}_z$ . Однако величина  $(\hat{L} \cdot \hat{S})$  коммутирует с  $\hat{J}_z$ :

$$[(\hat{L} \cdot \hat{S}), \hat{J}_z] = 0,$$

так что  $(\hat{L} \cdot \hat{S})$  объединяет состояния с одинаковым магнитным квантовым числом  $J_z = m$  и различными значениями  $\hat{L}_z, \hat{S}_z$ .

Существуют два типа таких состояний:

Собственные значения:

$$L_z = m - \frac{1}{2}, \quad S_z = \frac{1}{2}, \quad \text{состояние } \left| m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle,$$

$$L_z = m + \frac{1}{2}, \quad S_z = -\frac{1}{2}, \quad \text{состояние } \left| m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle.$$

Собственные функции:

$$\begin{aligned} \left| m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &= \psi_{m-1/2, 1/2} = f(r) Y_{l, m-1/2} \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \end{vmatrix}, \\ \left| m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle &= \psi_{m+1/2, -1/2} = f(r) Y_{l, m+1/2} \begin{vmatrix} 0 \\ 1 \end{vmatrix}. \end{aligned}$$

(26.24)

$$(24) \left\{ \begin{array}{l} \ell_z = m - \frac{1}{2}, S_z = \frac{1}{2} \text{ state } |m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \\ \text{and} \\ \ell_z = m + \frac{1}{2}, S_z = -\frac{1}{2} \text{ state } |m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \\ \\ \cancel{\text{also}} |m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = \psi_{m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}} = f(r) Y_{\ell, m - \frac{1}{2}} \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \end{vmatrix} \\ \\ |m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = \psi_{m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} = f(r) Y_{\ell, m + \frac{1}{2}} \begin{vmatrix} 0 \\ 1 \end{vmatrix} \end{array} \right.$$

Find from Sects (18 especially (17) (18)) and

$$(25) \left\{ \begin{array}{l} \text{Sect (25)} \\ \text{use} \end{array} \right. \quad S_x + iS_y = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{vmatrix} \quad S_x - iS_y = \begin{vmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{vmatrix} \quad S_z = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix}$$

$$(26) \left\{ \begin{array}{l} \text{also} \end{array} \right. (L \cdot S) = \frac{1}{2} (L_x + iL_y)(S_x - iS_y) + \frac{1}{2} (L_x - iL_y)(S_x + iS_y) + L_z S_z$$

$$(27) \left\{ \begin{array}{l} (L_x + iL_y) Y_{\ell, m - \frac{1}{2}} = \sqrt{(\ell + \frac{1}{2})^2 - m^2} Y_{\ell, m + \frac{1}{2}} \\ (L_x - iL_y) Y_{\ell, m + \frac{1}{2}} = \sqrt{(\ell + \frac{1}{2})^2 - m^2} Y_{\ell, m - \frac{1}{2}} \end{array} \right. \quad \text{m} \pm \frac{1}{2} = \text{integral number}$$

$$(28) \left\{ \begin{array}{l} (S_x + iS_y) \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \end{vmatrix} = 0 \quad (S_x + iS_y) \begin{vmatrix} 0 \\ 1 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 \\ 1 \end{vmatrix} \\ (S_x - iS_y) \begin{vmatrix} 0 \\ 1 \end{vmatrix} = 0 \quad (S_x - iS_y) \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 \\ 1 \end{vmatrix} \end{array} \right.$$

Find

$$(29) \left\{ \begin{array}{l} (L \cdot S) |m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = \frac{1}{2} (m - \frac{1}{2}) |m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle + \frac{1}{2} \sqrt{(\ell + \frac{1}{2})^2 - m^2} |m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \\ (L \cdot S) |m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = \frac{1}{2} \sqrt{(\ell + \frac{1}{2})^2 - m^2} |m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle - \frac{1}{2} (m + \frac{1}{2}) |m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \end{array} \right.$$

$$(30) (L \cdot S) = \left\| \begin{array}{l} \frac{1}{2} (m - \frac{1}{2}), \quad \frac{1}{2} \sqrt{(\ell + \frac{1}{2})^2 - m^2} \\ \frac{1}{2} \sqrt{(\ell + \frac{1}{2})^2 - m^2}, \quad -\frac{1}{2} (m + \frac{1}{2}) \end{array} \right\|$$

Из формул (18.17), (18.18) и из лекции 25 следует, что

$$\hat{S}_x + i\hat{S}_y = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{vmatrix}, \quad \hat{S}_x - i\hat{S}_y = \begin{vmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}, \quad \hat{S}_z = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix}. \quad (26.25)$$

Кроме того,

$$(\hat{L} \cdot \hat{S}) = \frac{1}{2} (\hat{L}_x + i\hat{L}_y)(\hat{S}_x - i\hat{S}_y) + \frac{1}{2} (\hat{L}_x - i\hat{L}_y)(\hat{S}_x + i\hat{S}_y) + \hat{L}_z \hat{S}_z. \quad (26.26)$$

Отсюда

$$\begin{aligned} (\hat{L}_x + i\hat{L}_y) Y_{l, m-1/2} &= \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - m^2} Y_{l, m+1/2}, \\ (\hat{L}_x - i\hat{L}_y) Y_{l, m+1/2} &= \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - m^2} Y_{l, m-1/2}, \end{aligned} \quad (26.27)$$

где величина  $(m \pm 1/2)$  — целое число; далее

$$\begin{aligned} (\hat{S}_x + i\hat{S}_y) \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \end{vmatrix} &= 0, \quad (\hat{S}_x + i\hat{S}_y) \begin{vmatrix} 0 \\ 1 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \end{vmatrix}, \\ (\hat{S}_x - i\hat{S}_y) \begin{vmatrix} 0 \\ 1 \end{vmatrix} &= 0, \quad (\hat{S}_x - i\hat{S}_y) \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 0 \\ 1 \end{vmatrix}. \end{aligned} \quad (26.28)$$

Находим:

$$\begin{aligned} (\hat{L} \cdot \hat{S}) |m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle &= \frac{1}{2} \left(m - \frac{1}{2}\right) |m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle + \\ &+ \frac{1}{2} \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - m^2} |m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle, \\ (\hat{L} \cdot \hat{S}) |m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle &= \frac{1}{2} \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - m^2} \times \\ &\times |m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle - \frac{1}{2} \left(m + \frac{1}{2}\right) |m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle, \end{aligned} \quad (26.29)$$

так что в выбранном представлении матрица  $(\hat{L} \cdot \hat{S})$  принимает вид

$$(\hat{L} \cdot \hat{S}) = \begin{vmatrix} \frac{1}{2} \left(m - \frac{1}{2}\right) & \frac{1}{2} \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - m^2} \\ \frac{1}{2} \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - m^2} & -\frac{1}{2} \left(m + \frac{1}{2}\right) \end{vmatrix}. \quad (26.30)$$

Отсюда следуют

*Собственные значения оператора  $(\hat{L} \cdot \hat{S})$  и соответствующие (нормированные) собственные функции:*

а) Для  $(\hat{L} \cdot \hat{S}) = \frac{1}{2} l$

$$\begin{aligned} \psi_a = & + \sqrt{\frac{1}{2} + \frac{m}{2l+1}} |m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle + \\ & + \sqrt{\frac{1}{2} - \frac{m}{2l+1}} |m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle. \end{aligned} \quad (26.31)$$

e.v.'s of  $(\vec{L} \cdot \vec{S})$  ~~are~~ + corresp e.f.'s are

$$(31) \begin{cases} \vec{L} \cdot \vec{S} = \frac{1}{2} l \text{ with e.f. (unnormalized)} \\ \sqrt{\frac{1}{2} + \frac{m}{2l+1}} \left| m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{\frac{1}{2} - \frac{m}{2l+1}} \left| m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \end{cases}$$

and

$$(32) \begin{cases} \vec{L} \cdot \vec{S} = -\frac{1}{2}(l+1) \text{ with normalized e.f.} \\ -\sqrt{\frac{1}{2} - \frac{m}{2l+1}} \left| m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{\frac{1}{2} + \frac{m}{2l+1}} \left| m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \end{cases}$$

e.v.'s of  $J^2$  from (20) (31) (32)

$$(33) \begin{cases} \text{for } L S = \frac{l}{2}, J^2 = l(l+1) + \frac{3}{4} + l = (l + \frac{1}{2})(l + \frac{1}{2} + 1) \\ \text{ } \parallel \text{ to } l \text{ or vector model, } J = l + \frac{1}{2} \\ J^2 = J(J+1). \text{ e.f. is (31).} \end{cases}$$

$$(34) \begin{cases} \text{for } L S = -\frac{1}{2}(l+1), J^2 = l(l+1) + \frac{3}{4} - l - 1 = (l - \frac{1}{2})(l + \frac{1}{2}) \\ \text{Spin antiparallel to } l, J = l - \frac{1}{2} \\ \text{e.f. is (32).} \quad J^2 = J(J+1) = l^2 - \frac{1}{4} \end{cases}$$

Doublet splitting of energy levels. From (8)

$$(35) -\frac{e \hbar^2}{2 m^2 c^2} \frac{V'(r)}{r} (L \cdot S) \text{ treated as perturbation, yields}$$

energy perturbation this, usually, positive

$$(36) \delta E = \frac{e \hbar^2}{2 m^2 c^2} \int \left\{ V'(r) \right\} R_\ell^2(r) r \, dr \times \begin{cases} l/2 & \text{for } J = l + \frac{1}{2} \\ \text{or} \\ -(l+1)/2 & \text{for } J = l - \frac{1}{2} \end{cases}$$

$R_\ell$  = radial wave function

$$\begin{aligned}
 \text{б) Для } (\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}) &= -\frac{1}{2}(l+1) \\
 \psi_6 &= -\sqrt{\frac{1}{2} - \frac{m}{2l+1}} \left| m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \\
 &\quad + \sqrt{\frac{1}{2} + \frac{m}{2l+1}} \left| m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle.
 \end{aligned} \tag{26.32}$$

Из выражений (26.20)–(26.32) находим  
Собственные значения оператора  $\hat{\mathbf{J}}^2$ :

$$\begin{aligned}
 \text{а) Для } (\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}) &= \frac{1}{2}l \\
 \mathbf{J}^2 &= l(l+1) + \frac{3}{4} + l = \left(l + \frac{1}{2}\right) \left(l + \frac{1}{2} + 1\right). \\
 \text{Спин } \mathbf{s} \text{ либо параллелен } \mathbf{l}, \\
 &\text{либо — векторная модель *; тогда} \\
 J &= \left(l + \frac{1}{2}\right); \quad \mathbf{J}^2 = J(J+1).
 \end{aligned} \tag{26.33}$$

Собственные функции для этого случая уже даны в (26.31).

$$\begin{aligned}
 \text{б) Для } (\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}) &= -\frac{1}{2}(l+1) \\
 \mathbf{J}^2 &= l(l+1) + \frac{3}{4} - l - 1 = \left(l + \frac{1}{2}\right) \left(l - \frac{1}{2}\right). \\
 \text{Спин } \mathbf{S} \text{ антипараллелен } \mathbf{l}; \\
 J &= l - \frac{1}{2}, \quad \mathbf{J}^2 = J(J+1) = l^2 - \frac{1}{4}.
 \end{aligned} \tag{26.34}$$

Соответствующие собственные функции уже даны в (26.32).

**Дублетное расщепление энергетических уровней.** Последний член гамильтониана (26.8)

$$-\frac{e\hbar^2}{2m^2c^2} \frac{V'(r)}{r} (\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}) \tag{26.35}$$

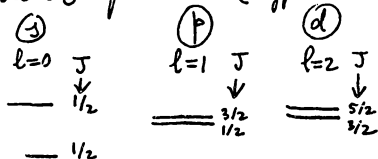
можно рассматривать как возмущение, сдвигающее энергетические уровни; величину этого сдвига дает теория возмущений:

$$\delta E = \frac{e\hbar^2}{2m^2c^2} \left( \int V'(r) R_l^2(r) r dr \right) \times \begin{cases} \frac{l}{2}, & \text{если } J = l + \frac{1}{2}, \\ -\frac{l+1}{2}, & \text{если } J = l - \frac{1}{2}. \end{cases} \tag{26.36}$$

Здесь  $V'(r)$  обычно положительна; через  $R_l(r)$  обозначена радиальная волновая функция.

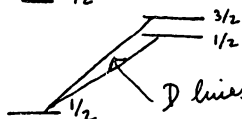


Doublet spectrum (Typical case Alkali atoms)



Notation

$$s_{1/2}, p_{1/2}, p_{3/2}, d_{3/2}, d_{5/2}$$



D lines of sodium

$$\lambda = 5890 \text{ \AA} \text{ and } \lambda = 5896 \text{ \AA}$$

Case of  $n=2$  levels of hydrogen. From last 8

$$E = -\frac{me^4}{2\hbar^2 \times 2^2} \text{ for } 2s \text{ \& } 2p \text{ levels.}$$

Spin perturbation (36) ( $\delta_1 E$ )

$$(37) \left\{ \begin{array}{l} \delta_1 E(2s) = 0 \quad \delta_1 E(2p) = \frac{e^2 \hbar^2}{48 m^2 c^2 a^3} \begin{cases} 1/2 \\ -1/2 \end{cases} \\ \begin{array}{c} 2p_{3/2} \\ 2p_{1/2} \end{array} \quad \begin{array}{c} \propto 1/2 \\ \propto -1 \end{array} \end{array} \right. \quad \left( \text{Use } R_{2p} = \frac{\pi e}{\sqrt{24} a^5} \text{ and } V = \frac{e}{r} \text{ in (36)} \right)$$

Relativity perturbation ( $\delta_2 E$ )

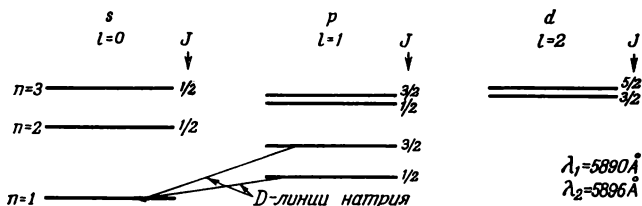
$$(38) \text{ kin. energy} = \sqrt{m^2 c^4 + c^2 p^2} - mc^2 = \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3 c^2} + \dots$$

$$(39) \text{ Perturbation} = -\frac{1}{8m^3 c^2} p^4 = -\frac{\hbar^4}{8m^3 c^2} (\nabla^2)^2$$

$$(40) \left\{ \begin{array}{l} \text{One finds using first approx. perturbation theory} \\ \text{for } 2s \text{ level} \\ \delta_2 E(2s) = -\frac{5}{128} \frac{e^8 m}{\hbar^4 c^2} \quad \delta_2 E(2p) = -\frac{7}{384} \frac{e^8 m}{\hbar^4 c^2} \end{array} \right.$$

(See for general formulas: Schiff p. 325, 326)

**Дублетный спектр.** Типичным примером таких спектров могут служить спектры атомов щелочных металлов (фиг. 20).



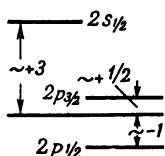
Фиг. 20.

Уровни атома водорода при  $n=2$ . Из лекции 8 без учета спина находим:

$$E = -\frac{me^4}{2\hbar^2 \times 2^2} \text{ для уровней } 2s \text{ и } 2p.$$

Таким образом, получается всего одна линия (вырождение).

Расщепление  $\delta_1 E$  вследствие различных ориентаций спина. Если потенциал  $V$  в (26.36) взять в форме  $V = e/r$ , а в качестве радиальных волновых функций  $R(r)$  — функции (8.20),



$$R_{2p} = \frac{re^{-r/2a}}{\sqrt{24a^3}},$$

то изменения собственных значений энергии за счет спин-орбитального взаимодействия будут равны

Фиг. 21.

Расщепление уровней при различных ориентациях спина (нерелятивистская теория).

$$\delta_1 E(2s) = 0, \quad \delta_1 E(2p) = \frac{e^2 \hbar^2}{48 m^2 c^2} \frac{1}{a^3} \times \begin{cases} \frac{1}{2} & \text{для } J = \frac{3}{2}, \\ -1 & \text{для } J = \frac{1}{2}. \end{cases} \quad (26.37)^{11}$$

**Релятивистский расчет возмущения.** Результаты (26.37) являются нерелятивистскими. Отыщем релятивистскую поправку  $\delta_2 E$  к энергии уровней. Так как кинетическая энергия равна

$$E_k = \sqrt{m^2 c^4 + c^2 p^2} - mc^2 = \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3 c^2} + \dots, \quad (26.38)$$

то возмущающий гамильтониан следует взять в виде

$$\mathcal{H} = \frac{1}{8m^3 c^2} p^4 = -\frac{\hbar^4}{8m^3 c^2} (\nabla^2)^2. \quad (26.39)$$

При таком подходе полностью игнорируется существование спина электрона.

В первом порядке теории возмущений \*

$$\delta_2 E(2s) = -\frac{5}{128} \frac{e^8 m}{\hbar^4 c^2}, \quad \delta_2 E(2p) = -\frac{7}{384} \frac{e^8 m}{\hbar^4 c^2}. \quad (26.40)$$

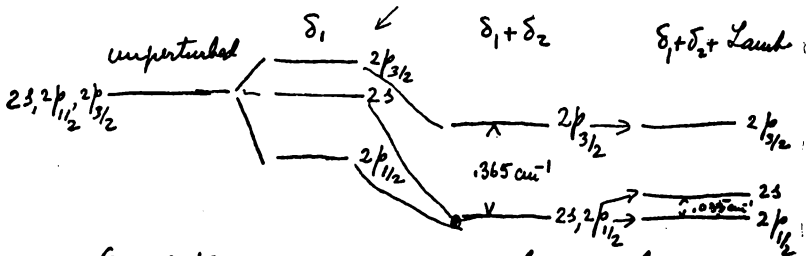
<sup>11</sup> См. более общую формулу у Шиффа, стр. 332, 333. — Прим. ред.

$$\delta_1(E_{2s}) + \delta_2(E_{2s}) = -\frac{5}{128} \frac{e^8 m}{\hbar^4 c^2}$$

!!

$$\delta_1(E_{2p_{1/2}}) + \delta_2(E_{2p_{1/2}}) = \left(-\frac{1}{48} - \frac{7}{384}\right) \frac{e^8 m}{\hbar^4 c^2} = -\frac{5}{128} \frac{e^8 m}{\hbar^4 c^2}$$

$$\delta_1(E_{2p_{3/2}}) + \delta_2(E_{2p_{3/2}}) = \left(\frac{1}{96} - \frac{7}{384}\right) \frac{e^8 m}{\hbar^4 c^2} = -\frac{1}{128} \frac{e^8 m}{\hbar^4 c^2}$$



Qualitative comments on Lamb shift:

Bethe formula for Lamb shift of  $ns$ -levels

$$\frac{8}{3\pi n^3} \frac{me^4}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^3 \overline{\ln \frac{mc^2}{|E_n - E_s|}} + \text{higher order corrections}$$

Вместе оба рассмотренных эффекта приводят к поправкам

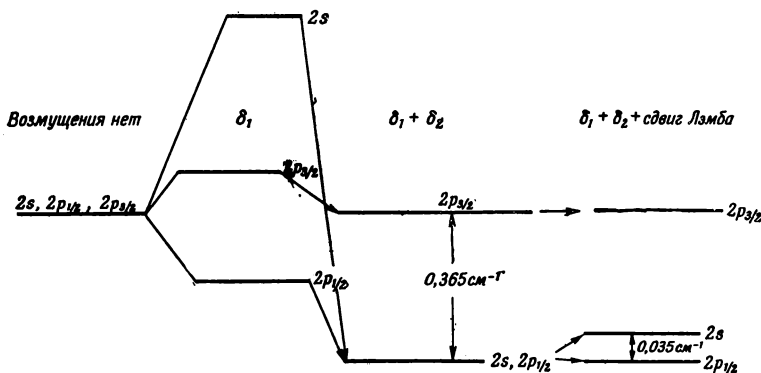
$$\delta_1(E_{2s}) + \delta_2(E_{2s}) = -\frac{5}{128} \frac{e^8 m}{\hbar^4 c^2},$$

$$\delta_1(E_{2p_{1/2}}) + \delta_2(E_{2p_{1/2}}) = \left(-\frac{1}{48} - \frac{7}{384}\right) \frac{e^8 m}{\hbar^4 c^2} = -\frac{5}{128} \frac{e^8 m}{\hbar^4 c^2},$$

$$\delta_1(E_{2p_{3/2}}) + \delta_2(E_{2p_{3/2}}) = \left(\frac{1}{96} - \frac{7}{384}\right) \frac{e^8 m}{\hbar^4 c^2} = -\frac{1}{128} \frac{e^8 m}{\hbar^4 c^2}.$$

(Общие формулы см. у Шиффа, стр. 368, 369.)

Отметим, что первые две поправки совпали, т. е. соответствующие уровни не разошлись! Общая картина для уровней  $2s$ ,  $2p_{1/2}$ ,  $2p_{3/2}$ , когда присутствует возмущение  $\delta_1$ , а затем и возмущение  $\delta_1 + \delta_2$ , дана на фиг. 22.



Фиг. 22.

Картина расщепления уровней при учете спин-орбитального взаимодействия, спин-орбитального взаимодействия и релятивистской поправки к нему, спин-орбитального взаимодействия с релятивистской поправкой и сдвигом Лэмба.

На той же фиг. 22 изображено дальнейшее (и окончательное) снятие вырождения уровней  $2s$  и  $2p_{1/2}$ , носящее название *лэмбовского сдвига*.

Впервые этот эффект измерили Лэмб и Ризерфорд в 1947 г. Лэмбовский сдвиг—это относительный сдвиг  $2s$ - и  $2p_{1/2}$ -уровней водородоподобных атомов, предсказанный и теоретически рассчитанный Бете в том же 1947 г. По идее Бете (и Крамерса) лэмбовский сдвиг представляет собой изменение энергии электрона за счет его взаимодействия с полем излучения (вакуумом фотонов, приводящим к перенормировке собственной энергии, различной для разных состояний, если говорить в терминах квантовой теории поля). Теория и эксперимент дают в хорошем согласии друг с другом численное значение лэмбовского сдвига около 1057,8 Мгц для водорода.

Формула Бете для лэмбовского сдвига  $ns$ -уровней:

$$\frac{8}{3\pi n^3} \frac{me^4}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^3 \ln \frac{mc^2}{|E_n - E_s|} + \text{Поправки более высоких порядков.}$$

### 27 - Anomalous Zeeman effect,

To prev. case add mag. field  $B \parallel$  to  $z$

Magn. energy

$$(1) \quad B\mu_0 (L_z + 2S_z)$$

Unpert. hamiltonian

$$(2) \quad H_1 = \frac{p^2}{2m} - eV(r)$$

Perturbation

$$(3) \quad \mathcal{H}_0 = \frac{e\hbar^2}{2m^2c^2} \frac{-V'(r)}{r} (\vec{L} \cdot \vec{S}) + B\mu_0 (L_z + 2S_z)$$

$$(4) \left\{ \begin{array}{l} \text{Observe } L^2, S^2 = \frac{3}{4}, m = L_z + S_z \text{ commute} \\ \text{with } \mathcal{H}_0, \text{ all these} \end{array} \right.$$

Unperturbed problem has 2-fold deg.

$$(5) \left\{ \begin{array}{l} \text{Unpert. e.f's} \end{array} \right.$$

$$R_\ell(r) Y_{\ell m}(\theta, \varphi) \times \text{spin} \left( \begin{array}{c} \text{up} \\ \text{down} \end{array} \right)$$

that coeff of expression (26)-(36)

$$(6) \quad k = \frac{e\hbar^2}{2m^2c^2} \int (-V'(r)) R_\ell^2(r) r dr$$

Pert. matrix mixes states (26)-(24) see also (26)-(33)

$$(7) \quad \frac{k}{2} \begin{vmatrix} m - \frac{1}{2} & \sqrt{(l + \frac{1}{2})^2 - m^2} \\ \sqrt{(l + \frac{1}{2})^2 - m^2} & -m - \frac{1}{2} \end{vmatrix} + B\mu_0 \begin{vmatrix} m + \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & m - \frac{1}{2} \end{vmatrix}$$

«Аномальным эффектом Зеемана» называется расщепление спектральных линий некоторых атомов в слабых магнитных полях. Таким образом, «аномальный» эффект является более обычным, чем «нормальный», так как для реализации последнего необходимы более сильные поля. Названия этих эффектов сложились исторически в связи с тем, что «нормальный» эффект удалось объяснить на более раннем этапе развития теории. Вместе с тем нормальный эффект Зеемана является частным случаем аномального\*.

Усложним задачу предыдущей лекции, введя магнитное поле  $B$  вдоль оси  $z$ . Энергия взаимодействия атомного электрона с внешним магнитным полем равна

$$B\mu_0 (\hat{L}_z + 2\hat{S}_z), \quad (27.1)$$

а невозмущенный гамильтониан имеет вид

$$\hat{H}_1 = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 - eV(r). \quad (27.2)$$

Гамильтониан возмущения можно записать как

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{e\hbar^2}{2m^2c^2} \frac{-V'(r)}{r} (\hat{L} \cdot \hat{S}) + B\mu_0 (\hat{L}_z + 2\hat{S}_z). \quad (27.3)$$

Отметим, что все величины,  $L^2$ ,  $S^2 = \frac{3}{4}$ ,  $m = L_z + S_z$  коммутируют с  $\hat{\mathcal{H}}$ . (27.4)

В отсутствие возмущения имеет место  $2l$ -кратное вырождение. (27.5)

Невозмущенные собственные функции имеют вид

$$\psi_{lm}(r, \theta, \varphi) = R_l(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \times \text{Спин } \{\uparrow \text{ либо } \downarrow\}.$$

(Спиновая волновая функция характеризует только ориентацию спина и нормирована на 1.)

Обозначая коэффициент в формуле (26.36) через

$$k = -\frac{e\hbar^2}{2m^2c^2} \int [-V'(r)] R_l^2(r) r dr, \quad (27.6)$$

запишем матрицу возмущающего гамильтониана, которая объединяет состояния, согласно (26.24) [см. также (26.30)], как

$$\begin{aligned} \frac{k}{2} \left\| \begin{array}{cc} m - \frac{1}{2} & \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - m^2} \\ \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - m^2} & -m - \frac{1}{2} \end{array} \right\| + \\ + B\mu_0 \left\| \begin{array}{cc} m + \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & m - \frac{1}{2} \end{array} \right\|. \end{aligned} \quad (27.7)$$

Find eigenvalues as roots of

$$(8) \quad x^2 + \left(\frac{k}{2} - 2B\mu_0 m\right)x + \left(m^2 - \frac{1}{4}\right)B^2\mu_0^2 - B\mu_0 km - \frac{k^2}{4}l(l+1) = 0$$

$$(9) \quad \delta E = -\frac{k}{4} + B\mu_0 m \pm \frac{1}{2} \sqrt{k^2 \left(l + \frac{1}{2}\right)^2 + 2B\mu_0 km + B^2\mu^2}$$

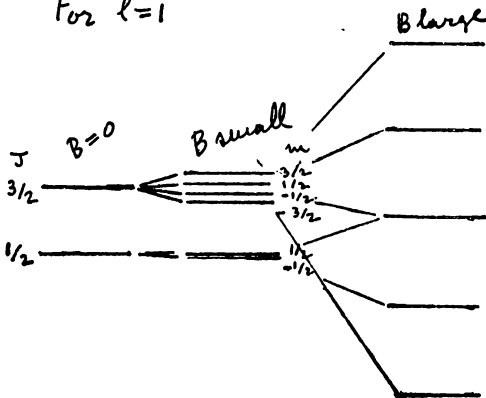
For  $B\mu_0 \ll k$  (9) valid for  $|m| \leq l - \frac{1}{2}$ ,  
for  $m = \pm(l + \frac{1}{2})$ ,  $\delta E = \frac{k}{2}l \pm B\mu_0(l+1)$

$$(10) \quad \delta E = \begin{cases} \frac{k}{2}l + B\mu_0 m \frac{2l+2}{2l+1} & -l - \frac{1}{2} \leq m \leq l + \frac{1}{2} \\ -\frac{k}{2}(l+1) + B\mu_0 m \frac{2l}{2l+1} & -l + \frac{1}{2} \leq m \leq l - \frac{1}{2} \end{cases}$$

For  $B\mu_0 \gg k$

$$(11) \quad \delta E = \begin{cases} B\mu_0 \left(m + \frac{1}{2}\right) \\ B\mu_0 \left(m - \frac{1}{2}\right) \end{cases}$$

For  $l=1$



Собственные значения энергии возмущения являются корнями уравнения

$$x^2 + \left(\frac{k}{2} - 2B\mu_0 m\right)x + \left(m^2 - \frac{1}{4}\right)B^2\mu_0^2 - B\mu_0 km - \frac{k^2}{4}l(l+1) = 0 \quad (27.8)$$

и равны

$$\delta E = -\frac{k}{4} + B\mu_0 m \pm \frac{1}{2} \sqrt{k^2 \left(l + \frac{1}{2}\right)^2 + 2B\mu_0 km + B^2\mu_0^2}. \quad (27.9)$$

Полученная формула для значений  $\delta E$  справедлива при  $|m| \leq l - \frac{1}{2}$ ; в случае же  $m = \pm(l + \frac{1}{2})$  энергия возмущения принимает вид

$$\delta E = \frac{kl}{2} \pm B\mu_0(l+1).$$

В случае слабого магнитного поля  $B\mu_0 \ll k$  сдвиг уровней равен

$$\delta E = \begin{cases} \frac{k}{2}l + B\mu_0 m \frac{2l+2}{2l+1}, & |m| = l + \frac{1}{2}, \\ -\frac{k}{2}(l+1) + B\mu_0 m \frac{2l}{2l+1}, & -l + \frac{1}{2} \leq m \leq l - \frac{1}{2} \end{cases} \quad (27.10)$$

[знак в формуле (27.9) выбирается из сравнения с (26.36)].

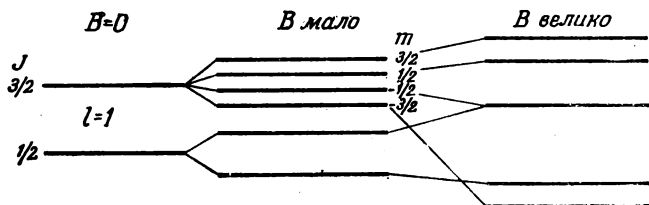
Этот случай соответствует расщеплению *всех* уровней и носит название *аномального эффекта Зеемана*.

Вырождение частично восстанавливается, когда напряженность магнитного поля становится большой,  $B\mu_0 \gg k$ ; тогда

$$\delta E = \begin{cases} B\mu_0 \left(m + \frac{1}{2}\right), \\ B\mu_0 \left(m - \frac{1}{2}\right) \end{cases} \quad (27.11)$$

и имеет место *нормальный эффект Зеемана*.

Картина расщепления уровней  $J = \frac{3}{2}$  и  $J = \frac{1}{2}$  в магнитном поле для случаев, когда  $B = 0$ , когда  $B$  мало и когда  $B$  велико, изображена на фиг. 23.



Фиг. 23.



# 28- Addition of ang. momentum vectors.

$$(1) \quad \vec{L}, \vec{S}, \vec{L} + \vec{S} = \vec{J}$$

Assume

$$(2) \quad [\vec{L}, \vec{S}] = 0$$

L orbital  
S spin  
J total

$$(3) \quad \vec{L} \times \vec{L} = i\hbar \vec{L}, \quad \vec{S} \times \vec{S} = i\hbar \vec{S}$$

$$\hbar = 1$$

Follows

$$(4) \quad \vec{J} \times \vec{J} = i\hbar \vec{J}$$

Two intercommuting sets of operators:

$$(5) \quad \text{Set (a)} \quad L^2, S^2, L_z, S_z$$

$$(6) \quad \text{Set (b)} \quad L^2, S^2, J^2, J_z$$

First: operators (a) diagonal

$$(7) \quad \begin{cases} L^2 = l(l+1) & S^2 = s(s+1) \\ L_z = \lambda & S_z = \mu \\ \lambda = -l, -l+1, \dots, l-2, l-1, l \\ \mu = -s, -s+1, \dots, s-1, s \end{cases}$$

$l, s$  are  
integrals or  
half odd numbers.

when  $l$  is the result  
of orbital ang. mom.  $l$  is  
integral. When  $s$  is  
the resultant spin  $s$

an eigenvector for (7) is integral for even number  
of electrons, half odd for  
odd number of electrons.

$$(8) \quad \left\{ \begin{array}{l} |L_z = \lambda, S_z = \mu\rangle \\ \text{or briefly } |\lambda, \mu\rangle \end{array} \right. \quad (2l+1) \times (2s+1) \text{ such vectors}$$

Representation with vectors  $|\lambda, \mu\rangle$  transformed  
now to a new one with set (b)

В лекции 26 были введены

$$\begin{aligned} \hat{L} &\text{— оператор орбитального момента } L, \\ \hat{S} &\text{— оператор спина или собственного момента } S, \\ \hat{J} &= \hat{L} + \hat{S} \text{— оператор полного момента } J. \end{aligned} \quad (28.1)$$

Пусть, как было показано, имеют место перестановочные соотношения

$$[\hat{L}, \hat{S}] = 0, \quad (28.2)$$

$$[\hat{L} \times \hat{L}] = i\hat{L}, \quad [\hat{S} \times \hat{S}] = i\hat{S} \quad (\hbar = 1); \quad (28.3)$$

тогда, как нетрудно показать,

$$[\hat{J} \times \hat{J}] = i\hat{J}. \quad (28.4)$$

Таким образом, можно построить две системы операторов, таких, что внутри каждой операторы коммутируют между собой:

$$\text{Система 1: } \hat{L}^2, \hat{S}^2, \hat{L}_z, \hat{S}_z; \quad (28.5)$$

$$\text{Система 2: } \hat{L}^2, \hat{S}^2, \hat{J}^2, \hat{J}_z. \quad (28.6)$$

Очевидно, это обстоятельство можно использовать для классификации состояний физических систем (см. лекцию 20).

Взяв первую систему, следует пользоваться таким представлением, в котором ее операторы диагональны; тогда в основу классификации кладутся собственные значения

$$\begin{aligned} L^2 &= l(l+1), & S^2 &= s(s+1), \\ L_z &= \lambda, & S_z &= \mu, \end{aligned} \quad (28.7)$$

где

$$\begin{aligned} \lambda &= -l, -l+1, \dots, l-1, l, \\ \mu &= -s, -s+1, \dots, s-1, s, \end{aligned}$$

причем  $l$  и  $s$  принимают как целые, так и полуцелые значения. Если  $l$ —резльтирующий орбитальный момент, то  $l$  должно быть целым. Если  $s$ —резльтирующий спин, то  $s$  должно быть целым в случае четного числа электронов и полуцелым в случае нечетного числа электронов. В классификации (28.5) и (28.7) собственная функция системы имеет вид

$$|L_z = \lambda, S_z = \mu\rangle, \text{ или, короче, } |\lambda, \mu\rangle.$$

В общей сложности число таких собственных функций („собственных векторов“ гильбертова пространства) равно  $(2l+1) \times (2s+1)$ . (28.8)

Operators for (b) diagonal

$$\begin{cases} L^2 = l(l+1) & S^2 = s(s+1) \\ J^2 = j(j+1) & J_z = L_z + S_z = m \end{cases}$$

(9)  $j = \text{integer or half odd}$   
 $m = -j, -j+1, \dots, j-2, j-1, j$   
 eigenvectors for (9)

$$(10) \begin{cases} |J^2 = j(j+1); J_z = m\rangle & \text{or briefly} \\ |j, m\rangle \end{cases}$$

Question: Given  $l, s$  what are the possible values of  $j$ ?

(11) Vector model rule  $j = l+s, l+s-1, \dots, |l-s|$

Hint of proof:

(12)  $m = \lambda + \mu$   $\lambda \leq l, \mu \leq s$   
 $m \leq l+s$  Therefore  $j_{\max} = l+s$

Observe

(13)  $|\lambda=l, \mu=s\rangle = |j=l+s, m=l+s\rangle$

(14)  $\left\{ \begin{array}{l} \text{Apply to (13)} \quad J_- = J_x - iJ_y = L_x - iL_y + S_x - iS_y \\ \text{to obtain successively} \\ |j=l+s, m=l+s-1\rangle, \dots, |j=l+s, m=-j\rangle \end{array} \right.$   
 There are  $2(l+s)+1$  eigenvectors of type (10)

Перейдем теперь от этого представления к представлению (и соответственно к другой классификации), использующему вторую систему операторов—(28.6).

В этом случае операторы системы (28.6) диагональны, а их собственные значения равны

$$\left. \begin{aligned} L^2 &= l(l+1); & S^2 &= s(s+1); \\ J^2 &= j(j+1); & J_z = L_z + S_z &= m, \end{aligned} \right\} \quad (28.9)$$

где  $j$ —целое или полуцелое число,

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

Собственная функция системы во второй классификации записывается как

$$|J^2 = j(j+1), J_z = m\rangle, \text{ или, короче, } |j, m\rangle. \quad (28.10)$$

Вопрос: какие значения может принимать число  $j$  при данных  $l$  и  $s$ ?

Ответ:

$$\left. \begin{aligned} &\text{Правило векторной модели:} \\ &j = l + s, l + s - 1, \dots, |l - s|. \end{aligned} \right\} \quad (28.11)$$

Набросок доказательства:

$$\left. \begin{aligned} m &= \lambda + \mu, \quad \lambda \leq l, \quad \mu \leq s, \quad m \leq l + s, \\ &\text{следовательно, } j_{\max} = l + s. \end{aligned} \right\} \quad (28.12)$$

Для нахождения  $j_{\min}$  учтем также, что  $\lambda \geq -l, \mu \geq -s$ ; тогда наименьшее из наибольших положительных значений  $m$  [см. также (28.12)] будет равно  $|l-s|$ , так что  $j_{\min} = |l-s|$ . Остается показать, что реализуются все возможные значения, указанные в (28.11).

Множественно действуя на волновую функцию

$$|\lambda = l, \mu = s\rangle = |j = l + s, m = l + s\rangle \quad (28.13)$$

оператором

$$\hat{J}_- = \hat{J}_x - i\hat{J}_y = \hat{L}_x - i\hat{L}_y + \hat{S}_x - i\hat{S}_y, \quad (28.14)$$

получаем последовательно функции

$$\left. \begin{aligned} &|j = l + s, m = l + s\rangle; \quad |j = l + s, m = l + s - 1\rangle; \quad \dots; \\ &|j = l + s, m = -(l + s)\rangle. \end{aligned} \right\}$$

В полученной совокупности имеется  $2(l+s)+1$  собственных функций типа (28.10), причем значению магнитного квантового числа  $m = l + s - 1$  могут соответствовать две функции:

$$\left. \begin{aligned} &|\lambda = l - 1, \mu = s\rangle \\ &\text{либо} \end{aligned} \right\} \quad (28.15)$$

$$|\lambda = l, \mu = s - 1\rangle.$$

$m = l + s - 1$  possible in two ways

$$(15) \quad |\lambda = l-1, \mu = s\rangle \text{ or } |\lambda = l, \mu = s-1\rangle$$

One linear comb. already under (14), other lin. comb., has

$$(16) \quad \left\{ \begin{array}{l} |j = l+s-1, m=j\rangle \\ | \quad \quad \quad j-1 \rangle \\ | \quad \quad \quad j-2 \rangle \\ \vdots \\ | \quad \quad \quad -j \rangle \end{array} \right\} \leftarrow \begin{array}{l} \text{apply } J_- \text{ to form} \\ 2(l+s)-1 \text{ eigen vectors} \\ \text{of type (10)} \end{array}$$

And so forth.

### Clebsch - Gordon coefficients

$$(17) \quad \left\{ \begin{array}{l} \langle \lambda, \mu | j, m \rangle = 0 \quad \text{for } \lambda + \mu \neq m \\ \langle \lambda, m-\lambda | j, m \rangle \text{ obtained by following} \end{array} \right.$$

above procedure - general formulas are extremely complicated. Important special cases:  $s = 1/2$  (see (26)-(31)(32))

$$(18) \quad \left\{ \begin{array}{c} \boxed{s = 1/2} \\ \begin{array}{|c|c|c|} \hline \cancel{\text{Table}} & \begin{array}{l} l_2 = m - \frac{1}{2} \\ s_2 = \frac{1}{2} \end{array} & \begin{array}{l} l_2 = m + \frac{1}{2} \\ s_2 = -\frac{1}{2} \end{array} \\ \hline j = l + \frac{1}{2} & \sqrt{\frac{1}{2} + \frac{m}{2l+1}} & \sqrt{\frac{1}{2} - \frac{m}{2l+1}} \\ \hline j = l - \frac{1}{2} & -\sqrt{\frac{1}{2} - \frac{m}{2l+1}} & \sqrt{\frac{1}{2} + \frac{m}{2l+1}} \\ \hline \end{array} \end{array} \right.$$

Совокупность функций (28.14) уже содержит одну линейную комбинацию функций (28.15), другие же линейные комбинации получаются при многократном действии оператора  $\hat{J}_-$  на следующие  $2(l+s)-1$  собственные функции типа (28.10):

$$\left. \begin{aligned} |j=l+s-1, m=j\rangle, \\ |j=l+s-1, m=j-1\rangle, \\ \dots\dots\dots \\ |j=l+s-1, m=-j\rangle \end{aligned} \right\} \quad (28.16)$$

и т. д.<sup>1)</sup>

**Коэффициенты Клебша — Гордана.** Указанный выше метод позволяет показать, что

$$\left. \begin{aligned} \langle \lambda, \mu | j, m \rangle &= 0 \\ \text{при } \lambda + \mu &\neq m. \end{aligned} \right\} \quad (28.17)$$

Кроме того, с его помощью можно получить численные значения величин  $\langle \lambda, m - \lambda | j, m \rangle$ , т. е. указать коэффициенты разложения функций одного представления по функциям другого представления (сравнение классификаций). Коэффициенты такого разложения называют *коэффициентами векторного сложения* или *коэффициентами Клебша — Гордана*. Общие формулы этих коэффициентов имеют весьма сложный вид. В важных частных случаях  $s=1/2$  и  $s=1$  [см. (26.31) и (26.32)] они могут быть записаны следующим образом:

$$\left. \begin{array}{lll} \boxed{s=\frac{1}{2}} & l_z = m - \frac{1}{2} & l_z = m + \frac{1}{2} \\ & S_z = \frac{1}{2} & S_z = -\frac{1}{2} \\ j = l + \frac{1}{2} & \sqrt{\frac{1}{2} + \frac{m}{2l+1}} & \sqrt{\frac{1}{2} - \frac{m}{2l+1}} \\ j = l - \frac{1}{2} & -\sqrt{\frac{1}{2} - \frac{m}{2l+1}} & \sqrt{\frac{1}{2} + \frac{m}{2l+1}} \end{array} \right\} \quad (28.18)$$

<sup>1)</sup> Полученные результаты характерны для так называемого кронекерского произведения в теории групп. — *Прим. ред.*

$$S=1$$

(A)

|              | $\ell_z = m-1$<br>$s_z = 1$                            | $\ell_z = m$<br>$s_z = 0$                               | $\ell_z = m+1$<br>$s_z = -1$                           |
|--------------|--|---|--|
| $j = \ell+1$ | $\sqrt{\frac{(\ell+m)(\ell+m+1)}{(2\ell+1)(2\ell+2)}}$ | $\sqrt{\frac{(\ell-m+1)(\ell+m+1)}{(2\ell+1)(\ell+1)}}$ | $\sqrt{\frac{(\ell-m)(\ell-m+1)}{(2\ell+1)(2\ell+2)}}$ |
| $j = \ell$   | $-\sqrt{\frac{(\ell+m)(\ell-m+1)}{2\ell(2\ell+1)}}$    | $\frac{m}{\sqrt{\ell(\ell+1)}}$                         | $\sqrt{\frac{(\ell-m)(\ell+m+1)}{2\ell(\ell+1)}}$      |
| $j = \ell-1$ | $\sqrt{\frac{(\ell-m)(\ell-m+1)}{2\ell(2\ell+1)}}$     | $-\sqrt{\frac{(\ell-m)(\ell+m)}{\ell(2\ell+1)}}$        | $\sqrt{\frac{(\ell+m+1)(\ell+m)}{2\ell(2\ell+1)}}$     |

More similar formulas in Condon & Shortley

Value of  $\vec{L} \cdot \vec{S}$

$$(20) \quad \vec{L} \cdot \vec{S} = \frac{1}{2} \{ j(j+1) - \ell(\ell+1) - s(s+1) \}$$

Because  $\vec{L} + \vec{S} = \vec{J}$

$$\vec{J}^2 = \vec{L}^2 + \vec{S}^2 + 2\vec{L} \cdot \vec{S}$$

Observe: (20) independent of  $m$ ! more general.

• Theorem: Classify e.f.'s by

$$(21) \quad |n, j, m\rangle$$

Let  $A$  a rotation invariant operator.

(Means  $[A, \vec{J}] = 0$ ). Then:

|         |   |  |  |         |
|---------|---|--|--|---------|
| $s=1$   | $l_z=m-1$                                   | $S_z=1$                                    |  |         |
| $j=l+1$ | $\sqrt{\frac{(l+m)(l+m+1)}{(2l+1)(2l+2)}}$  |  |  |         |
| $j=l$   | $-\sqrt{\frac{(l+m)(l-m+1)}{(l+1)2l}}$      |  |  |         |
| $j=l-1$ | $\sqrt{\frac{(l-m)(l-m+1)}{2l(2l+1)}}$      |  |  |         |
|         | $l_z=m$                                     | $l_z=m+1$                                  |  | (28.19) |
|         | $S_z=0$                                     | $S_z=-1$                                   |  |         |
| $j=l+1$ | $\sqrt{\frac{(l-m+1)(l+m+1)}{(2l+1)(l+1)}}$ | $\sqrt{\frac{(l-m)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+2)}}$ |  |         |
| $j=l$   | $\frac{m}{\sqrt{l(l+1)}}$                   | $\sqrt{\frac{(l-m)(l+m+1)}{2l(l+1)}}$      |  |         |
| $j=l-1$ | $-\sqrt{\frac{(l-m)(l+m)}{l(2l+1)}}$        | $\sqrt{\frac{(l+m+1)(l+m)}{2l(2l+1)}}$     |  |         |

Другие подобные формулы можно найти в книге Кондона и Шортли<sup>1)</sup>.

Значение произведения  $(\hat{L} \cdot \hat{S})$  равно

$$(\hat{L} \cdot \hat{S}) = \frac{1}{2} \{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)\}, \quad (28.20)$$

что следует из соотношений

$$\begin{aligned} \hat{L} + \hat{S} &= \hat{J}, \\ \hat{J}^2 &= \hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2(\hat{L} \cdot \hat{S}). \end{aligned}$$

Заметим, что результат (28.20) не зависит от  $m$ ! Это обстоятельство можно выразить следующим более общим образом:

■ **ТЕОРЕМА.** Если собственные функции задаются в классификации  $|n, j, m\rangle$  и  $\hat{A}$  есть некоторый оператор, инвариантный относительно поворотов (что означает  $[\hat{A}, \hat{J}] = 0$ ), то

$$\langle n', j', m' | \hat{A} | n, j, m \rangle = \delta_{jj'} \delta_{mm'} f(n, n', j). \quad (28.22)$$

<sup>1)</sup> См. Кондон Г., Шортли Е., Теория атомных спектров, ИЛ, 1949, стр. 80. — Прим. ред.



$$(22) \langle n', j', m' | A | n, j, m \rangle = \delta_{j,j'} \delta_{m,m'} f(n, n', j)$$

Comments & connection with Wigner theorem p. 20-4

Theorem's on matrix elements of a vector operator  $\vec{A}$

$$(23) \begin{cases} \langle n' j', m' | \vec{A} | n, j, m \rangle = 0 \text{ except when} \\ \quad j' = j+1, j, j-1 \\ \quad m' = m+1, m, m-1 \\ \text{also} \\ \langle n', 0, 0 | \vec{A} | n, 0, 0 \rangle = 0 \end{cases}$$

Comments on selection rules for optical transitions

$$(24) \left\{ \begin{array}{l} \text{Permitted transitions: } j \begin{array}{l} \nearrow j+1 \\ \rightarrow j \\ \searrow j-1 \end{array} \quad m \begin{array}{l} \nearrow m+1 \\ \rightarrow m \\ \searrow m-1 \end{array} \\ j=0 \rightarrow j=0 \text{ forbidden} \end{array} \right.$$

$$(25) \left\{ \begin{array}{l} \text{Selection rule for parity: for permitted} \\ \text{transitions, change of parity} \\ \text{(This is because electric moment is a polar} \\ \text{vector)} \end{array} \right.$$

Discuss: selection rules for electric quadrupole, magnetic dipole, etc..

$$(26) \left\{ \begin{array}{l} \text{The matrix elements of the components of a} \\ \text{vector are expressed as the product of} \\ \text{a function } f(n, n', j, j') \\ \text{times certain expression that depend on } j, j', m, m', \text{ and the} \\ \text{component chosen.} \end{array} \right.$$

Эта теорема тесно связана с теоремой Вигнера \* (28.15).

*Теоремы о величине матричных элементов векторного оператора  $\hat{A}$ :*

$$\begin{aligned} \langle n' j' m' | \hat{A} | n, j, m \rangle &= 0, \\ \text{если только не выполняются условия} \\ j' &= j+1, j, j-1; \quad m' = m+1, m, m-1; \\ \text{кроме того,} \\ \langle n', 0, 0 | \hat{A} | n, 0, 0 \rangle &= 0. \end{aligned} \quad (28.23)$$

На основании этих теорем можно сформулировать следующие *Правила отбора для оптических переходов:*

Разрешены переходы

$$\begin{array}{ccc} & j+1 & \\ & \nearrow & \\ j & \rightarrow j & \\ & \searrow & \\ & j-1 & \end{array}, \quad \begin{array}{ccc} & m+1 & \\ & \nearrow & \\ m & \rightarrow m & \\ & \searrow & \\ & m-1 & \end{array}. \quad (28.24)$$

Переход  $j=0 \rightarrow j=0$  запрещен.

*Правила отбора по четности:*

При разрешенных переходах четность меняется,  $(+) \Rightarrow (-)$ . (28.25)

(Это обстоятельство связано с тем фактом, что электрический момент является полярным, а не аксиальным вектором.)

*Темы для обсуждения:*

1. Правила отбора для электрического квадрупольного, магнитного дипольного и других переходов<sup>1)</sup>.

Матричные элементы компонент некоторого вектора выражаются через произведение функций вида  $f(n, n', j, j')$  на некоторый множитель, зависящий от  $j, j'; m, m'$  и от того, какая компонента вектора была взята. (28.26)

<sup>1)</sup> См. А. Зоммерфельд, *Строение атома и спектры*, т. II, М., 1956, стр. 611, 619, 620, 622.— *Прим. ред.*

Only different from zero

$$\langle m+1 | X+iY | m \rangle, \langle m | Z | m \rangle, \langle m-1 | X-iY | m \rangle$$

(explain)

$X, Y, Z = \text{components of } \vec{A}$

$$(27) \left\{ \begin{array}{l} \text{Transitions } j \rightarrow j+1 \\ \langle m+1 | X+iY | m \rangle \propto \sqrt{(j+m+1)(j+m+2)} \\ \langle m | Z | m \rangle \propto \sqrt{(j-m+1)(j+m+1)} \\ \langle m-1 | X-iY | m \rangle \propto \sqrt{(j-m+1)(j-m+2)} \end{array} \right.$$

$$(28) \left\{ \begin{array}{l} \text{Transitions } j \rightarrow j \\ \langle m+1 | X+iY | m \rangle \propto \sqrt{(j+m+1)(j-m)} \\ \langle m | Z | m \rangle \propto m \\ \langle m-1 | X-iY | m \rangle \propto \sqrt{(j-m+1)(j+m)} \end{array} \right.$$

$$(29) \left\{ \begin{array}{l} \text{Transitions } j \rightarrow j-1 \\ \langle m+1 | X+iY | m \rangle \propto \sqrt{(j-m-1)(j-m)} \\ \langle m | Z | m \rangle \propto -\sqrt{j^2 - m^2} \\ \langle m-1 | X-iY | m \rangle \propto \sqrt{(j+m)(j+m-1)} \end{array} \right.$$

Warning. Proportionality coefficients are different for (27)(28)(29).

Observe: in all 3 cases above

$$30) \left\{ \begin{array}{l} \sum_{m'} |\langle m' | X | m \rangle|^2 + |\langle m' | Y | m \rangle|^2 + |\langle m' | Z | m \rangle|^2 \text{ is} \\ \text{independent of } m. \text{ Comments on equal lifetime of states} \\ \text{with different } \underline{m}. \end{array} \right.$$

Укажем единственные отличные от нуля матричные элементы компонент некоторого вектора  $\hat{A}=(\hat{X}, \hat{Y}, \hat{Z})$ :

$$\begin{aligned}\langle m+1 | \hat{X} + i\hat{Y} | m \rangle, \\ \langle m | \hat{Z} | m \rangle, \\ \langle m-1 | \hat{X} - i\hat{Y} | m \rangle.\end{aligned}$$

В различных случаях они следующим образом зависят от квантовых чисел:

Переход  $j \rightarrow j+1$ :

$$\begin{aligned}\langle m+1 | \hat{X} + i\hat{Y} | m \rangle &\sim -V(j+m+1)(j+m+2), \\ \langle m | \hat{Z} | m \rangle &\sim V(j-m+1)(j+m+1), \\ \langle m-1 | \hat{X} - i\hat{Y} | m \rangle &\sim V(j-m+1)(j-m+2).\end{aligned}\quad (28.27)$$

Переход  $j \rightarrow j$ :

$$\begin{aligned}\langle m+1 | \hat{X} + i\hat{Y} | m \rangle &\sim V(j+m+1)(j-m), \\ \langle m | \hat{Z} | m \rangle &\sim m, \\ \langle m-1 | \hat{X} - i\hat{Y} | m \rangle &\sim V(j-m+1)(j+m).\end{aligned}\quad (28.28)$$

Переход  $j \rightarrow j-1$ :

$$\begin{aligned}\langle m+1 | \hat{X} + i\hat{Y} | m \rangle &\sim -V(j-m-1)(j-m), \\ \langle m | \hat{Z} | m \rangle &\sim -V(j^2-m^2), \\ \langle m-1 | \hat{X} - i\hat{Y} | m \rangle &\sim V(j+m)(j+m-1).\end{aligned}\quad (28.29)$$

**Внимание!** Не следует забывать, что коэффициенты пропорциональности во всех формулах (28.27)—(28.29) различны (это отражено знаком „~“). Заметим, что во всех трех приведенных случаях (28.27)—(28.29) сумма

$$\sum_{m'} |\langle m' | \hat{X} | m \rangle|^2 + |\langle m' | \hat{Y} | m \rangle|^2 + |\langle m' | \hat{Z} | m \rangle|^2 \quad (28.30)$$

не зависит от магнитного квантового числа  $m$ . Таким образом, от  $m$  не зависят соответствующие вероятности переходов (в качестве  $\hat{A}$  можно было бы взять вектор электрического момента), и, следовательно, *время жизни* относительно спонтанного перехода для возбужденных состояний при различных значениях  $m$  одинаково<sup>1)</sup>.

<sup>1)</sup> См, например, В. Хейне, Теория групп в квантовой механике, ИЛ, 1963, стр. 119 и далее.—Прим. ред.

## 29-Atomic multiplets

Qualitative discussion

- (1)  $H = H_1 + H_2 (\vec{L} \cdot \vec{S})$   
 $H_1, H_2$  ~~commute~~ commute with  $\vec{L}$  and  $\vec{S}$ . Then  
 $H$  commutes with  $\vec{L}^2, \vec{S}^2, \vec{J}^2, J_z$

Use (28-(20))

(2)  $\vec{L} \cdot \vec{S} = \frac{1}{2} \{J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)\}$

- (3)  $\left\{ \begin{array}{l} \text{note change of notation to usual spectroscopic} \\ \text{notation } \vec{L}, \vec{S}, \vec{J} \text{ are } \text{vector operators} \\ L, S, J \text{ are numbers (integers or halfodd)} \end{array} \right.$

- (4)  $\left\{ \begin{array}{l} \text{Then for fixed values of } L, S \\ \text{ } |L-S| \leq J \leq L+S \quad J \text{ by integral steps} \\ \text{For a set of levels with } n, L, S \text{ fixed} \end{array} \right.$

(5)  $H = H_1 + \frac{1}{2} H_2 \{J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)\}$

Assume  $H_2$  small, then perturbation theory  
 with  $H_1$  diagonal (together with  $\vec{L}^2, \vec{S}^2, \vec{J}^2$ ).

For an isolated group of levels  $H_1 \neq H_2$   
 behave like numbers  $H_2 \rightarrow$  its mean value  
 $H_1 \rightarrow$  its diagonal value.

There is in multiplet one distinct  
 energy level of each  $J$  value. From

- (4)  $J$  takes  $2S+1$  values for  $S \leq L$  or  
 $2L+1$  values for  $S > L$ . However always  
 called  $(2S+1)$ -plet.  $S=0$ , singlet;  $S=\frac{1}{2}$ , doublet

Под мультиплетами понимают *тонкую структуру спектральных линий*, обусловленную снятием вырождения из-за наличия спина у электрона. Теория, игнорирующая взаимодействие спинового магнитного момента с орбитальным, приводит к многократному вырождению ряда уровней; при учете же указанного взаимодействия это вырождение часто снимается, причем соответствующие энергетические поправки бывают малыми, линии в спектре разрешаются слабо, чем и вызвано представление о „тонкой“ структуре линий.

Как и прежде мы запишем

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 (\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}), \quad (29.1a)$$

где  $\hat{H}_1$  — (релятивистский или нерелятивистский) гамильтониан без учета спина, а  $\hat{H}_2 (\mathbf{L} \cdot \mathbf{S})$  — гамильтониан спин-орбитального взаимодействия. Если иметь в виду самый общий случай, то представляется нецелесообразным уточнять заранее форму множителя  $H_2$  в гамильтониане (29.1).

Так как  $\hat{H}_1$  и  $\hat{H}_2$  коммутируют с операторами  $\hat{L}$  и  $\hat{S}$ , то полный гамильтониан  $\hat{H}$  коммутирует с  $\hat{L}^2, \hat{S}^2, \hat{J}^2$  и  $\hat{J}_z$ . (29.16)

Для оператора  $(\hat{L} \cdot \hat{S})$  верна формула (28.20),

$$(\hat{L} \cdot \hat{S}) = \frac{1}{2} \{J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)\}. \quad (29.2)$$

Перейдем к принятым в спектроскопии обозначениям:

$\hat{L}, \hat{S}, \hat{J}$  — векторные операторы,  
 $L, S, J$  — числа (целые или полуцелые), соответствующие  
 собственным значениям операторов. (29.3)

При фиксированных значениях  $L$  и  $S$  число  $J$  может принимать все значения  $|L-S| \leq J \leq |L+S|$ , изменяясь целочисленными степенями. (29.4)

Для системы уровней с одинаковыми числами  $n, L, S$  запишем:

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \frac{1}{2} \hat{H}_2 \{J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)\}. \quad (29.5)$$

Выберем представление, в котором матрица  $\hat{H}_1$  (а также  $\hat{L}^2, \hat{S}^2, \hat{J}^2$ ) диагональна. Пусть добавка  $\hat{H}_2$  будет мала; тогда можно использовать теорию возмущений. В случае изолированной группы уровней операторы  $\hat{H}_1$  и  $\hat{H}_2$  ведут себя подобно числам: вместо  $\hat{H}_2$  берется его среднее значение, а вместо  $\hat{H}_1$  — диагональный элемент соответствующей матрицы.

$S=1$ , triplet; ...

- (6)  $\begin{cases} H_2 > 0 & \text{normal multiplet} \\ H_2 < 0 & \text{inverted multiplet} \end{cases}$

value of  $L$ , by letter  $S, P, D, \dots$

Notation  $^3D_1$  and similar  $^{2S+1}L_J$

Normal D-triplet

$$^3D_3: \lambda$$

$$3H_2$$

$$^3D_2: \frac{\lambda}{2}$$

$$^3D_1: \frac{\lambda}{3}$$

Note: Interval rule -

The spacing between two levels of multiplet with  $J$  and  $J+1$  is  $\propto J+1$

Each of the multiplet levels is  $2J+1$  fold Degeneracy removed by magn. field  $B \parallel z$   
This adds to energy perturbation term

$$(7) \quad H_3 = B\mu_0(L_z + 2S_z) = B\mu_0(J_z + S_z) = B\mu_0(m + S_z)$$

Assume

$$(8) \quad H_3 \ll H_2$$

Then first approx pert. theory. Observe

$$[H_3, J_z] = 0$$

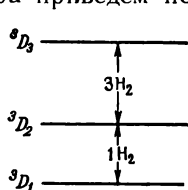
therefore no mixing of  $2J+1$  degenerate terms. Then

$$(9) \quad \delta E_3 = \langle J, m | H_3 | J, m \rangle = B\mu_0(m + \langle J, m | S_z | J, m \rangle)$$

Каждому значению полного момента  $\hat{J}$  в мультиплете соответствует один вполне определенный энергетический уровень. Из формулы (29.4) видно, что число  $J$  принимает  $2S+1$  значение при  $S \leq L$  и  $2L+1$  значение при  $S > L$ . Несмотря на это, мультиплет всегда называют  $(2S+1)$ -плетом, т. е. говорят „ $(S=)$ -синглет,  $(S=1/2)$ -дублет,  $(S=1)$ -триплет“ и т. д. Мультиплеты различают нормальные и аномальные:

$$\left. \begin{array}{l} \text{при } \hat{H}_2 > 0 \text{ — нормальный мультиплет,} \\ \text{при } \hat{H}_2 < 0 \text{ — аномальный мультиплет.} \end{array} \right\} (29.6)$$

Каждое значение орбитального числа  $L$  обозначается соответствующей буквой:  $S, P, D, \dots$ . Таким образом, состояние можно указать, используя одну такую букву с индексами, причем сама буква указывает значение орбитального квантового числа  $L$ , индекс слева вверху — значение  $2S+1$ , индекс справа внизу — значение полного момента  $J$ . В качестве примера приведем нормальный  $D$ -триплет (фиг. 24):



Фиг. 24.  
Нормальный  $D$ -триплет.

$^3D_1$  соответствует  $S=1, L=2, J=1$ ; вообще же  $^{(2S+1)}(L)_J$ .

З а м е ч а н и е.

*Правило интервала.* Расстояние между двумя энергетическими уровнями мультиплета, характеризуемыми соответственно  $J$  и  $J+1$ , пропорционально  $J+1$ .

Каждый уровень мультиплета  $(2J+1)$ -кратно вырожден. Это вырождение снимается магнитным полем, выделяющим в пространстве некоторое направление  $z$  ( $B||z$ ) и дающим добавку к энергии возмущения:

$$\hat{H}_s = B\mu_0(L_z + 2S_z) = B\mu_0(J_z + S_z) = B\mu_0(m + S_z). \quad (29.7)$$

Пусть

$$\hat{H}_s \ll \hat{H}_2; \quad (29.8)$$

тогда рассмотрение ведется в первом порядке теории возмущений. Заметим, что имеет место перестановочное соотношение

$$[\hat{H}_s, \hat{J}] = 0,$$

благодаря чему не происходит комбинирования функций  $(2J+1)$ -кратно вырожденных уровней. При этом

$$\delta_s E = \langle J, m | \hat{H}_s | J, m \rangle = B\mu_0(m + \langle J, m | \hat{S}_z | J, m \rangle). \quad (29.9)$$



From (28)-(28)

$$(10) \quad \langle J, m | S_z | J, m \rangle = \frac{\langle J, J | S_z | J, J \rangle}{J} m$$

also

$$(11) \quad \langle J, J | S_z | J, J \rangle = \frac{S(S+1) + J(J+1) - L(L+1)}{2(J+1)}$$

Outline of proof: From  $\vec{L} = \vec{J} - \vec{S}$

$$2 \vec{J} \cdot \vec{S} = J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)$$

$$2 \vec{J} \cdot \vec{S} = 2 J_z S_z + S_- J_+ + S_+ J_- \quad \begin{array}{l} J_{\pm} = J_x \pm i J_y \\ S_{\pm} = S_x \pm i S_y \\ \text{use } S_x S_y - S_y S_x = i S_z \end{array}$$

$$= 2(J_z+1)S_z + S_- J_+ + J_- S_+ \quad \leftarrow$$

$$\text{Use } J_+ |J, J\rangle = 0 \quad \langle J, J | J_- = 0$$

Find

$$\langle J, J | 2 \vec{J} \cdot \vec{S} | J, J \rangle = 2(J+1) \langle J, J | S_z | J, J \rangle, \text{ hence proof}$$

Then

$$(12) \quad \Delta E_3 = B \mu_0 g m$$

$$(13) \quad \begin{cases} g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \\ g = \frac{3}{2} + \frac{S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \end{cases} \quad \left( \begin{array}{l} \text{Landé} \\ g\text{-factor} \end{array} \right)$$

Compare with (27-(10)) for case  $S = 1/2$

For discussion

$$(14) \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{Limiting case} \\ B \mu_0 \gg H_2 \\ (\text{Paschen Back effect}) \end{array} \right.$$

Из второй формулы (28.8) следует, что

$$\langle J, m | \hat{S}_z | J, m \rangle = \frac{\langle J, J | \hat{S}_z | J, J \rangle}{J} m, \quad (29.10)$$

причем

$$\langle J, J | \hat{S}_z | J, J \rangle = \frac{S(S+1) + J(J+1) - L(L+1)}{2(J+1)}. \quad (29.11)$$

*Набросок доказательства.* Из определения  $\hat{L} = \hat{J} - \hat{S}$  следует, что

$$2(\mathbf{J} \cdot \mathbf{S}) = J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)$$

или

$$2(\mathbf{J} \cdot \mathbf{S}) = 2J_z S_z + S_- J_+ + S_+ J_- = 2(J_z + 1) S_z + S_- J_+ + J_- S_+,$$

где использованы обозначения

$$\hat{J}_{\pm} = \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y, \quad \hat{S}_{\pm} = \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y$$

и соотношение

$$\hat{S}_x \hat{S}_y - \hat{S}_y \hat{S}_x = i\hat{S}_z.$$

Имея далее в виду, что  $\hat{J}_+ |J, J\rangle = 0$  и  $\langle J, J | \hat{J}_- = 0$ , получаем:

$$\langle J, J | 2\hat{J} \cdot \hat{S} | J, J \rangle = 2(J+1) \langle J, J | \hat{S}_z | J, J \rangle,$$

откуда ясна справедливость выражения (29.11).

Энергию (29.9) теперь можно представить в виде

$$\delta_s E = B\mu_0 g m, \quad (29.12)$$

где коэффициент

$$\begin{aligned} g &= 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} = \\ &= \frac{3}{2} + \frac{S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \end{aligned} \quad (29.13)$$

есть *множитель Ланде*.

Рекомендуется сравнить полученный результат с формулой (27.10) для случая  $S=1/2$ .

*Тема для обсуждения.*

Предельный случай  $B\mu_0 \gg H_z$  и эффект Пашена—Бака<sup>1)</sup>. (29.14)

<sup>1)</sup> См., например, Е. Кондон и Г. Шортли, Теория атомных спектров, ИЛ, 1949, стр. 373.—Прим. ред.

Selection & polarization rules from (28-27)(28)(29)

For permitted transitions

$$(15) \quad J \begin{matrix} \nearrow J+1 \\ \rightarrow J \\ \searrow J-1 \end{matrix} \quad (J=0 \rightarrow 0=J \text{ forbidden})$$

$$(16) \quad \left\{ \begin{array}{ll} m \rightarrow m & \text{polarized } \parallel \\ m \rightarrow m+1 & \text{polarized } \nearrow \\ m \rightarrow m-1 & \text{polarized } \searrow \end{array} \right\} \text{ both } \perp$$

also parity rule

$$(17) \quad \begin{array}{l} \text{even} \rightarrow \text{odd} \\ \text{odd} \rightarrow \text{even} \end{array}$$

weaker selection rules

$$(18) \quad \left\{ \begin{array}{l} S \rightarrow S \\ L \begin{matrix} \nearrow L+1 \\ \rightarrow L \\ \searrow L-1 \end{matrix} \end{array} \right\} \text{ especially for light elements}$$

Topics for discussion

General data on atomic structure, Screening  
Pauli principle (as empirical rule)

Atomic shells (table on next page)

Spectra of Alkali's, Alkaline earths and  
earths. Spectral series. Spectra of ions  
Electrons & holes in a shell.

Hyperfine structure  
multiplets

Правила отбора и поляризации можно получить, исходя из формул (28.27)—(28.29).

$$\left. \begin{array}{l} \text{Переходы } J \begin{array}{l} \nearrow J+1 \\ \rightarrow J \\ \searrow J-1 \end{array} \end{array} \right\} \text{ разрешены.} \quad (29.15)$$

Переход  $J=0 \rightarrow J=0$  запрещен.

Разрешены такие переходы, при которых:

$$\begin{array}{l} m \rightarrow m - \text{линейная поляризация излучения параллельно полю,} \\ m \rightarrow m + 1 - \text{круговая } \odot \text{ поляризация излучения в плоскости перпендикулярной полю,} \\ m \rightarrow m - 1 - \text{круговая } \ominus \text{ поляризация излучения в плоскости, перпендикулярной полю.} \end{array} \quad (29.16)$$

В двух последних случаях направления поляризации параллельны между собой и перпендикулярны главному магнитному моменту.

Запрет по четности разрешает переходы между состояниями:

$$\begin{array}{l} \text{Четное} \rightarrow \text{Нечетное,} \\ \text{Нечетное} \rightarrow \text{Четное.} \end{array} \quad (29.17)$$

Более слабые правила отбора:

$$S \rightarrow S, \quad L \begin{array}{l} \nearrow L+1 \\ \rightarrow L \\ \searrow L-1 \end{array} \quad (29.18)$$

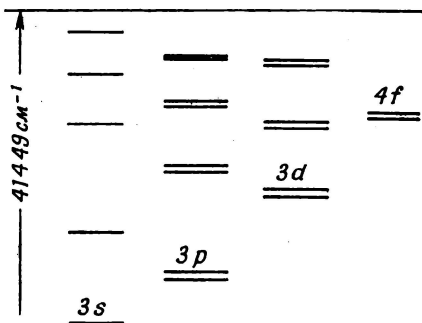
(эти правила существенны главным образом для легких элементов).

Темы для обсуждения<sup>1)</sup>:

1. Общие данные о структуре атома; экранировка.
2. Принцип Паули (как эмпирическое правило).
3. Атомные оболочки (таблица на следующей стр. 272).
4. Спектры атомов щелочных, щелочноземельных и других металлов; спектральные серии, спектры ионов.
5. Электроны и „дырки“ в оболочке атома.
6. Сверхтонкая структура мультиплетов.

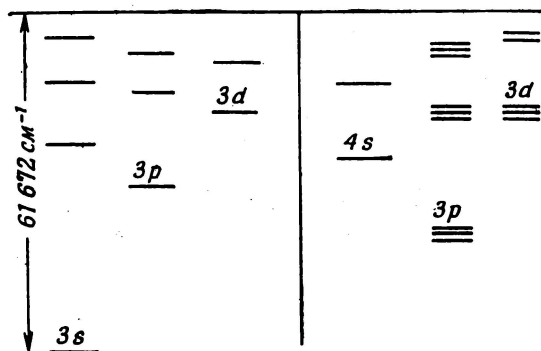
<sup>1)</sup> По этим темам будут полезны стандартные курсы квантовой механики, например курсы Л. Шиффа, Д. И. Блохинцева, а также двухтомная монография А. Зоммерфельда, «Строение атома и спектры» (М, 1956). Отдельные вопросы можно найти в простой книге Г. Семата, «Введение в атомную физику» (ИЛ, 1948). — *Прим. ред.*

| L     | n=1<br>K |   |   | n=2<br>L |   |    | n=3<br>M |   |    | n=4<br>N |   |   | n=5<br>O |    |    |   |   | n=6<br>P |   |   |   |   | n=7<br>Q |   |   |   |   |   |
|-------|----------|---|---|----------|---|----|----------|---|----|----------|---|---|----------|----|----|---|---|----------|---|---|---|---|----------|---|---|---|---|---|
|       | 0        | 0 | 1 | 0        | 1 | 2  | 0        | 1 | 2  | 3        | 0 | 1 | 2        | 3  | 4  | 0 | 1 | 2        | 3 | 4 | 5 | 0 | 1        | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 |
|       |          |   |   |          |   |    |          |   |    |          |   |   |          |    |    |   |   |          |   |   |   |   |          |   |   |   |   |   |
| 1H    | 1        |   |   |          |   |    |          |   |    |          |   |   |          |    |    |   |   |          |   |   |   |   |          |   |   |   |   |   |
| 2He   | 2        |   |   |          |   |    |          |   |    |          |   |   |          |    |    |   |   |          |   |   |   |   |          |   |   |   |   |   |
| 3Li   | 2        | 1 |   |          |   |    |          |   |    |          |   |   |          |    |    |   |   |          |   |   |   |   |          |   |   |   |   |   |
| 4Be   | 2        | 2 |   |          |   |    |          |   |    |          |   |   |          |    |    |   |   |          |   |   |   |   |          |   |   |   |   |   |
| 5B    | 2        | 2 | 1 |          |   |    |          |   |    |          |   |   |          |    |    |   |   |          |   |   |   |   |          |   |   |   |   |   |
| 10Ne  | 2        | 2 | 6 |          |   |    |          |   |    |          |   |   |          |    |    |   |   |          |   |   |   |   |          |   |   |   |   |   |
| 11Na  | 2        | 2 | 6 | 1        |   |    |          |   |    |          |   |   |          |    |    |   |   |          |   |   |   |   |          |   |   |   |   |   |
| 12Mg  | 2        | 2 | 6 | 2        |   |    |          |   |    |          |   |   |          |    |    |   |   |          |   |   |   |   |          |   |   |   |   |   |
| 13Al  | 2        | 2 | 6 | 2        | 1 |    |          |   |    |          |   |   |          |    |    |   |   |          |   |   |   |   |          |   |   |   |   |   |
| 18Ar  | 2        | 2 | 6 | 2        | 6 |    |          |   |    |          |   |   |          |    |    |   |   |          |   |   |   |   |          |   |   |   |   |   |
| 19K   | 2        | 2 | 6 | 2        | 6 | 1  |          |   |    |          |   |   |          |    |    |   |   |          |   |   |   |   |          |   |   |   |   |   |
| 20Ca  | 2        | 2 | 6 | 2        | 6 | 2  |          |   |    |          |   |   |          |    |    |   |   |          |   |   |   |   |          |   |   |   |   |   |
| 29Cu  | 2        | 2 | 6 | 2        | 6 | 10 | 1        |   |    |          |   |   |          |    |    |   |   |          |   |   |   |   |          |   |   |   |   |   |
| 30Zn  | 2        | 2 | 6 | 2        | 6 | 10 | 2        |   |    |          |   |   |          |    |    |   |   |          |   |   |   |   |          |   |   |   |   |   |
| 31Ga  | 2        | 2 | 6 | 2        | 6 | 10 | 2        | 1 |    |          |   |   |          |    |    |   |   |          |   |   |   |   |          |   |   |   |   |   |
| 36Kr  | 2        | 2 | 6 | 2        | 6 | 10 | 2        | 6 |    |          |   |   |          |    |    |   |   |          |   |   |   |   |          |   |   |   |   |   |
| 37Rb  | 2        | 2 | 6 | 2        | 6 | 10 | 2        | 6 |    |          |   | 1 |          |    |    |   |   |          |   |   |   |   |          |   |   |   |   |   |
| 38Sr  | 2        | 2 | 6 | 2        | 6 | 10 | 2        | 6 |    |          |   | 2 |          |    |    |   |   |          |   |   |   |   |          |   |   |   |   |   |
| 47Ag  | 2        | 2 | 6 | 2        | 6 | 10 | 2        | 6 | 10 |          |   | 1 |          |    |    |   |   |          |   |   |   |   |          |   |   |   |   |   |
| 48Cd  | 2        | 2 | 6 | 2        | 6 | 10 | 2        | 6 | 10 |          |   | 2 |          |    |    |   |   |          |   |   |   |   |          |   |   |   |   |   |
| 49In  | 2        | 2 | 6 | 2        | 6 | 10 | 2        | 6 | 10 |          |   | 2 | 1        |    |    |   |   |          |   |   |   |   |          |   |   |   |   |   |
| 54Xe  | 2        | 2 | 6 | 2        | 6 | 10 | 2        | 6 | 10 |          |   | 2 | 6        |    |    |   |   |          |   |   |   |   |          |   |   |   |   |   |
| 55Cs  | 2        | 2 | 6 | 2        | 6 | 10 | 2        | 6 | 10 |          |   | 2 | 6        |    |    |   |   | 1        |   |   |   |   |          |   |   |   |   |   |
| 56Ba  | 2        | 2 | 6 | 2        | 6 | 10 | 2        | 6 | 10 |          |   | 2 | 6        |    |    |   |   | 2        |   |   |   |   |          |   |   |   |   |   |
| 79Au  | 2        | 2 | 6 | 2        | 6 | 10 | 2        | 6 | 10 | 14       |   | 2 | 6        | 10 |    |   |   | 1        |   |   |   |   |          |   |   |   |   |   |
| 80Hg  | 2        | 2 | 6 | 2        | 6 | 10 | 2        | 6 | 10 | 14       |   | 2 | 6        | 10 |    |   |   | 2        |   |   |   |   |          |   |   |   |   |   |
| 81Tl  | 2        | 2 | 6 | 2        | 6 | 10 | 2        | 6 | 10 | 14       |   | 2 | 6        | 10 |    |   |   | 2        | 1 |   |   |   |          |   |   |   |   |   |
| 86Rn  | 2        | 2 | 6 | 2        | 6 | 10 | 2        | 6 | 10 | 14       |   | 2 | 6        | 10 |    |   |   | 2        | 6 |   |   |   |          |   |   |   |   |   |
| 87Fr  | 2        | 2 | 6 | 2        | 6 | 10 | 2        | 6 | 10 | 14       |   | 2 | 6        | 10 |    |   |   | 2        | 6 |   |   |   | 1        |   |   |   |   |   |
| 88Ra  | 2        | 2 | 6 | 2        | 6 | 10 | 2        | 6 | 10 | 14       |   | 2 | 6        | 10 |    |   |   | 2        | 6 |   |   |   | 2        |   |   |   |   |   |
| 92U   | 2        | 2 | 6 | 2        | 6 | 10 | 2        | 6 | 10 | 14       |   | 2 | 6        | 10 | 3  |   |   | 2        | 6 | 1 |   |   | 2        |   |   |   |   |   |
| 100Fm | 2        | 2 | 6 | 2        | 6 | 10 | 2        | 6 | 10 | 14       |   | 2 | 6        | 10 | 11 |   |   | 2        | 6 | 1 |   |   | 2        |   |   |   |   |   |



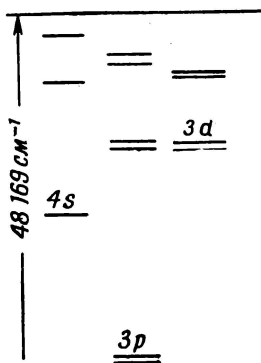
Energy levels of sodium ( $z=11$ ). The doublet separation has been exaggerated to make it visible.

Энергетические уровни натрия ( $z=11$ ). Дублетное расщепление для наглядности утрировано.



Energy levels of magnesium ( $z=12$ ). The separation of triplets has been exaggerated to make it visible.

Энергетические уровни магния ( $z=12$ ). Триpletное расщепление для наглядности утрировано.



Energy levels of aluminium ( $z=13$ ). The separation has been exaggerated to make it visible.

Энергетические уровни алюминия ( $z=13$ ). Расщепление для наглядности утрировано.

30- Systems with identical particles  
generalities.

Case of two ~~particles~~ identical p'tels

$$(1) \quad \begin{aligned} H \psi(x_1, x_2) &= E \psi(x_1, x_2) \\ H \psi(x_2, x_1) &= E \psi(x_2, x_1) \end{aligned}$$

Therefore (E) E non deg. then

$$(2) \quad \psi(x_1, x_2) = k \psi(x_2, x_1)$$

~~but~~ but  $\psi(x_1, x_2) = k \psi(x_2, x_1) = k^2 \psi(x_1, x_2)$

$$(3) \quad k^2 = 1 \quad k = \pm 1$$

$$(4) \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{Either } \psi(x_1, x_2) = \psi(x_2, x_1) \text{ (symmetry)} \\ \text{or } \psi(x_1, x_2) = -\psi(x_2, x_1) \text{ (antisymmetry)} \end{array} \right.$$

If E was deg. two may fail. But instead of base fcts  $\psi(x_1, x_2), \psi(x_2, x_1)$  may choose

$$(5) \quad \left\{ \begin{array}{l} \psi(x_1, x_2) + \psi(x_2, x_1) \text{ (symmetric)} \\ \text{or } \psi(x_1, x_2) - \psi(x_2, x_1) \text{ (antisym)} \end{array} \right.$$

Therefore in general.

$$(6) \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{The e.f.'s of a system with <sup>two</sup> identical p'tels} \\ \text{may always be taken to be ~~some~~ of these} \\ \text{either symmetric or antisymmetric} \end{array} \right.$$

Удобно начать со случая системы двух тождественных частиц. Тогда из самого понятия тождественности\* следует, что волновая функция должна удовлетворять одному и тому же уравнению Шредингера при перемене частиц местами (при этом не изменяется также и собственное значение энергии):

$$\begin{aligned}\hat{H}\psi(x_1, x_2) &= E\psi(x_1, x_2), \\ \hat{H}\psi(x_2, x_1) &= E\psi(x_2, x_1).\end{aligned}\quad (30.1)$$

Ввиду эрмитовости гамильтониана в случае отсутствия вырождения по энергии (при данном  $E$ ) можно заключить, что

$$\psi(x_1, x_2) = k\psi(x_2, x_1); \quad (30.2)$$

однако

$$\psi(x_1, x_2) = k\psi(x_2, x_1) = k^2\psi(x_1, x_2),$$

откуда следует, что

$$k^2 = 1, \quad k = \pm 1. \quad (30.3)$$

Имеем две возможности:

$$\begin{aligned}k = +1; \text{ тогда } \psi(x_1, x_2) &= \psi(x_2, x_1) - \text{симметричная} \\ &\text{волновая функция;} \\ k = -1; \text{ тогда } \psi(x_1, x_2) &= -\psi(x_2, x_1) - \text{антисиммет-} \\ &\text{ричная волновая функция.}\end{aligned}\quad (30.4)$$

Когда собственное значение  $E$  вырождено, равенство (30.2) может и не выполняться. В этом случае, однако, вместо базисных функций  $\psi(x_1, x_2)$ ,  $\psi(x_2, x_1)$  можно взять их линейные комбинации:

$$\begin{aligned}\text{либо } \psi(x_1, x_2) + \psi(x_2, x_1) &- \text{симметричная (по координатам тождественных частиц) комбинация,} \\ \text{либо } \psi(x_1, x_2) - \psi(x_2, x_1) &- \text{антисимметричная (по координатам тождественных частиц) комбинация.}\end{aligned}\quad (30.5)$$

Обе новые функции снова оказываются собственными функциями гамильтониана при том же значении энергии  $E$ , и картина совпадает с уже рассмотренной, однако новые функции обладают тем преимуществом, что автоматически оказываются ортогональными друг другу. Конечно, новые функции нетрудно нормировать.

*Общий вывод:*

$$\text{Волновую функцию системы, состоящей из двух тождественных частиц, всегда можно выбрать симметричной либо антисимметричной относительно операции перестановки этих частиц.} \quad (30.6)$$



(7) { Theorem. If  $\psi(x_1, x_2, \dots)$  is (anti)symmetric, so is  $\psi(x_1, x_2, t)$  }  
 Because

(8)  $H \left\{ \begin{array}{l} \text{sym function} \\ \text{antisym function} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \text{sym} \\ \text{antisym} \end{array} \right\} \text{ function}$

Then

$$\dot{\psi} = \frac{1}{i\hbar} H \psi \text{ has same symmetry of } \psi.$$

Then proof by induction from  $t$  to  $t+dt$

Postulate: Some types of particles (electrons, protons, neutrons, neutrinos, ...) have antisym wave fcts. Others (photons, pions, ...) have symmetric wave functions.

(9)  $\left\{ \begin{array}{l} \psi(x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_k, \dots, x_n) = \pm \psi(x_1, x_2, \dots, x_k, \dots, x_i, \dots, x_n) \\ + \text{sign for photons, pions, } \dots \\ - \text{sign for electron, protons, neutrons, } \dots \end{array} \right.$

(10) { Comments. Pauli has proved that: antisym particles have half odd spin }  
 symmetric integral "

No exceptions are "known"  
 Consider a particle (e.g. an atom) made of other particles (e.g. some electrons, some protons, some neutrons). For this type of particle parity is  $(-1)^N$  where  $N$  is the number of antisymmetric

■ **ТЕОРЕМА.** Если волновая функция в начальный момент времени  $\psi(x_1, x_2, 0)$  является симметричной (антисимметричной), то в любой другой момент времени  $t$  эта функция  $\psi(x_1, x_2, t)$  сохраняет свои свойства симметрии. (30.7)

**Доказательство.** Гамильтониан симметричен относительно перестановки тождественных частиц, поэтому функция  $\hat{H}\psi$  обладает той же симметрией, что и функция  $\psi(x_1, x_2, 0)$ .

$$\hat{H} \left\{ \begin{array}{l} \text{Симметричная функция} \\ \text{Антисимметричная} \\ \text{функция} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \text{Симметричная функция} \\ \text{Антисимметричная} \\ \text{функция} \end{array} \right\}. \quad (30.8)$$

Таким образом, ясно, что производная волновой функции по времени

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \hat{H}\psi$$

также симметрична (антисимметрична) в тот момент, когда функция  $\psi$  симметрична (или соответственно антисимметрична). Следовательно, волновая функция сохранит свои свойства симметрии и в последующий момент  $t + dt$ , так как ее изменение определяется производной, взятой в момент времени  $t$ . Распространение этого доказательства на конечный интервал времени по методу индукции очевидно.

Существуют два различных типа элементарных частиц.

**постулат.** Частицы одного типа (электроны, протоны, нейтроны, нейтрино и т. д.) описываются антисимметричными волновыми функциями; частицы же другого типа (фотоны,  $\pi$ -мезоны и т. д.) описываются симметричными волновыми функциями.

Таким образом,

$$\psi(x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_k, \dots, x_n) = \pm \psi(x_1, \dots, x_k, \dots, x_i, \dots, x_n), \quad (30.9)$$

где знак „+“ берется для волновых функций фотонов,  $\pi$ -мезонов, ..., а знак „—“ — для волновых функций электронов, протонов, нейтронов, ...

**важный факт.** Паули показал, что частицы, описываемые антисимметричными волновыми функциями, имеют *полуцелый спин*, частицы, описываемые симметричными волновыми функциями, — *целый спин*. (30.10)

Исключения из этого правила неизвестны.

Рассмотрим сложную частицу (например, атом), состоящую из других частиц (например, из электронов, протонов и нейтронов).

Такая сложная „частица“ имеет четность  $(-1)^N$ , где  $N$  — число антисимметричных частиц, входящих в данную сложную частицу. (30.11)

particles entering in its structure,

Examples

H atom,  
 $\alpha$  particle  
 deuteron } are sym.

Deuterium atom  
 Tritium nucleus  
 Nitrogen ( $N^{14}$ )  
 atom } are antisym.

Case of independent particles

$$(12) \left\{ \begin{array}{l} H = H_1 + H_2 + \dots + H_m \\ H_1 \text{ operates on particle } 1 \\ H_2 \text{ " " " " } 2 \\ \vdots \end{array} \right\} \text{ e.g. } H_i = \frac{1}{2m_i} p_i^2 + V_i(\vec{r}_i)$$

Do not assume at first that ①, ②, ... are identical particles.

Find immediately eigenfunctions

$$(13) \left\{ \begin{array}{l} \psi(x_1, x_2, \dots, x_m) = \psi_1(x_1) \psi_2(x_2) \dots \psi_m(x_m) \\ E = E_1 + E_2 + \dots + E_m \\ \text{where } H_i \psi_i(x_i) = E_i \psi_i(x_i) \end{array} \right.$$

Namely: The ~~wave~~ <sup>eigen</sup> functions of independent particles are products of the eigenfunctions of the individual particles. The corresponding e.v. is the sum of the individual e.v.'s. Assume now particles identical.

Then (13) is in general not acceptable because

$$(14) \quad \psi_{m_1}(x_1) \psi_{m_2}(x_2) \dots \psi_{m_m}(x_m) \text{ is in general neither sym. nor antisym.}$$

Примеры симметричных и антисимметричных „частиц“:

$$\left. \begin{array}{l} \text{атом водорода Н} \\ \alpha\text{-частица} \\ d \text{ (дейтрон)} \end{array} \right\} \text{— симметричные,}$$

$$\left. \begin{array}{l} \text{атом дейтерия} \\ \text{ядро трития} \\ \text{атом азота (N}^{14}\text{)} \end{array} \right\} \text{— антисимметричные.}$$

Случай системы, состоящей из  $m$  независимых (не взаимодействующих между собой) частиц. Гамильтониан такой системы представляет собой сумму гамильтонианов отдельных частиц:

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \dots + \hat{H}_m, \text{ где}$$

$$\hat{H}_1 \text{ действует на волновую функцию частицы 1,}$$

$$\hat{H}_2 \text{ действует на волновую функцию частицы 2,}$$

$$\dots \dots \dots$$

$$\text{причем } \hat{H}_i = \frac{1}{2m_i} \hat{p}_i^2 + V_i(\mathbf{x}_i), (i = 1, 2, \dots, m).$$
(30.12)

Не будем сначала предполагать, что *частицы*, составляющие систему, тождественны. Собственные функции этой системы, очевидно, выражаются как

$$\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_m) = \psi_1(\mathbf{x}_1) \psi_2(\mathbf{x}_2) \dots \psi_m(\mathbf{x}_m),$$

причем  $E = E_1 + E_2 + \dots + E_m$ .

Собственные значения энергий отдельных частиц задаются уравнениями

(30.13)

$$\hat{H}_i \psi_i(x_i) = E_i \psi_i(x_i).$$

**Вывод.** Собственные функции систем независимых частиц суть произведения собственных функций отдельных частиц; соответствующие собственные значения равны суммам собственных значений для отдельных частиц.

*Теперь предположим, что частицы, составляющие систему, тождественны.*

Тогда волновые функции всех состояний одной и той же системы, состоящей из тождественных частиц, должны иметь одинаковую симметрию; в противном случае волновая функция состояния, представляющего собой суперпозицию состояний различной симметрии, не будет ни симметричной, ни антисимметричной. Поскольку сначала предполагалось, что частицы, составляющие систему, *независимы* друг от друга, но в то же время *не тождественны*, то волновая функция такой системы не имеет в общем случае определенной симметрии.

Из этого следует, что собственные функции вида (30.13), вообще говоря, неприемлемы, так как

$$\text{форма } \psi_{n_1}(\mathbf{x}_1) \psi_{n_2}(\mathbf{x}_2) \dots \psi_{n_m}(\mathbf{x}_m) \text{ в общем случае ни симметрична, ни антисимметрична.}$$
(30.14)

(14) is solution of  $H\psi = E\psi$  with

$$(15) \quad E = \sum_{i=1}^m E_{n_i}$$

Other deg. solutions with same  $E$  are obtained by permuting the lower indices  $n_1, n_2, \dots, n_m$ .

Then: form  $(n_1, n_2, \dots, n_m) \rightarrow \mathcal{P}(P_{n_1}, P_{n_2}, \dots, P_{n_m})$   
Symmetric solution by permutation  $P$

$$(16) \quad \psi_{\text{sym}} = \frac{1}{\sqrt{m!}} \sum_{(P)} \psi_{P_{n_1}}(x_1) \psi_{P_{n_2}}(x_2) \dots \psi_{P_{n_m}}(x_m) \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{For normalized} \\ \text{wave function} \\ \text{see (21)} \end{array} \right.$$

$\Sigma$  over all permutations.

Form antisym solution

$$(17) \quad \psi_{\text{anti}} = \sum_{(P)} (-1)^P \psi_{P_{n_1}}(x_1) \dots \psi_{P_{n_m}}(x_m) =$$

or equivalent

$$(18) \quad \psi_{\text{anti}} = \frac{1}{\sqrt{m!}} \begin{vmatrix} \psi_{n_1}(x_1) & \psi_{n_1}(x_2) & \dots & \psi_{n_1}(x_m) \\ \psi_{n_2}(x_1) & \psi_{n_2}(x_2) & \dots & \psi_{n_2}(x_m) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{n_m}(x_1) & \psi_{n_m}(x_2) & \dots & \psi_{n_m}(x_m) \end{vmatrix} \quad \leftarrow \text{this is a determinant}$$

for normalization factor, see (27)

(16) or (17) will be selected according to the type of particles.

Pauli principle. For antisymmetric particles:

- (19) Solution (18) obviously vanishes when two or more of ~~state~~ individual state indices  $n_1, n_2, \dots, n_m$  are equal. ~~therefore~~ Therefore:  
For these particles (electrons, protons, neutrons, ...) no state exists in which two identical particles are in the same (completely specified) state.



Occupation numbers.

- (20)  $N_1, N_2, \dots, N_s, \dots$ ,  $N_1 + N_2 + \dots + N_s + \dots = m$   
 are no's of id. states in indiv. states  $1, 2, \dots, s, \dots$   
a - Sym. particles: (16) is completely defined by  
 the occupation numbers. Therefore: giving the  
occ. numbers completely defines the state. Rewrite  
 (16) with normalization factor:

$$(21) \quad \psi_{\text{sym}} = \sqrt{\frac{N_1! N_2! \dots N_s! \dots}{m!}} \sum_{(P)} \psi_{p_1}(x_1) \dots \psi_{p_m}(x_m)$$

b - Antisym. particles, Also in this case  
 e.f. (17) or (18) is compl. specified by occ. no's  
 (20). However, only allowable values of occ. no's  
 are 0 and 1. Rewrite (18) with norm. factor

$$(22) \quad \psi_{\text{antis}} = \frac{1}{\sqrt{m!}} \begin{vmatrix} \psi_{n_1}(x_1) & \psi_{n_1}(x_2) & \dots & \psi_{n_m}(x_m) \\ \psi_{n_2}(x_1) & \psi_{n_2}(x_2) & \dots & \psi_{n_2}(x_m) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{n_m}(x_1) & \psi_{n_m}(x_2) & \dots & \psi_{n_m}(x_m) \end{vmatrix}$$

Discuss here foundation of quantum statistics,  
 Statistical roots of (20):

$$(23) \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{Boltzmann) } \frac{N!}{N_1! N_2! \dots}, \text{ B.E.) } 1 \text{ (one),} \\ \text{F.D. } \begin{cases} 1 & \text{if no occ. no is } > 1 \\ 0 & \text{if some " " " " } > 1 \end{cases} \end{array} \right.$$

Discussion & comments: With respect to  
 Boltzmann, B.E. favors bunching, F.D.  
 discourages bunching.

*Числа заполнения.* Величины  $N_1, N_2, \dots, N_s, \dots$ , представляющие собой числа тождественных частиц, находящихся в индивидуальных состояниях  $1, 2, \dots, s, \dots$ , причем  $N_1 + N_2 + \dots + N_s + \dots = m$  (общее число частиц) и называются числами заполнения.

Сделаем теперь некоторые дополнительные замечания о волновых функциях.

**а. Частицы с симметричными волновыми функциями.** Собственная функция (30.16) полностью определяется числами заполнения (30.20); следовательно, *задание чисел заполнения полностью определяет состояние системы*. Перепишем выражение для волновой функции (30.16) с нормировочным множителем:

$$\psi_{sym} = \sqrt{\frac{N_1! N_2! \dots N_s! \dots}{m!}} \sum_{(p)} \psi_{P_{n_1}}(x_1) \dots \psi_{P_{n_m}}(x_m). \quad (30.21)$$

**б. Частицы с антисимметричными волновыми функциями.** Собственная функция (30.17) или (30.18) также полностью определяется числами заполнения (30.20), однако единственными возможными значениями этих чисел могут быть нуль и единица. Перепишем выражение для волновой функции (30.18) с нормировочным множителем:

$$\psi_{antisym} = \frac{1}{\sqrt{m!}} \begin{vmatrix} \psi_{n_1}(x_1), & \psi_{n_1}(x_2), & \dots, & \psi_{n_1}(x_m) \\ \psi_{n_2}(x_1), & \psi_{n_2}(x_2), & \dots, & \psi_{n_2}(x_m) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \psi_{n_m}(x_1), & \psi_{n_m}(x_2), & \dots, & \psi_{n_m}(x_m) \end{vmatrix}. \quad (30.22)$$

*Квантовая статистика\** определяется свойствами частиц, образующих квантовомеханическую систему. Статистический вес состояния, определяемого числами заполнения (30.20), равен

$$\left. \begin{array}{l} \text{В статистике Больцмана} \\ \text{В статистике Бозе—Эйнштейна} \\ \text{В статистике Ферми—Дирака} \end{array} \right\} \begin{array}{l} \frac{N!}{N_1! N_2! \dots N_s!} \\ 1 \\ \begin{cases} 1, \text{ если ни одно число} \\ \text{заполнения не превышает } 1; \\ 0, \text{ если какое-либо число} \\ \text{заполнения превышает } 1. \end{cases} \end{array} \quad (30.23)$$

*Рекомендуется обсудить* вопрос о том, что по сравнению со статистикой Больцмана статистика Бозе—Эйнштейна благоприятствует накоплению частиц в одном и том же состоянии, а статистика Ферми—Дирака препятствует увеличению числа частиц в одном и том же состоянии.



## 31 - Two electron system.

Notation

$$(1) \quad \alpha = \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \end{vmatrix} \quad \beta = \begin{vmatrix} 0 \\ 1 \end{vmatrix} \quad \alpha \text{ spin up} \\ \beta \text{ spin down}$$

For two electrons, 1 &amp; 2, notation: For example

$$(2) \quad \alpha(\psi_1) \beta(\psi_2) = \alpha\beta \text{ \& similar}$$

Then 4 spin functions: ~~are~~

$$(3) \quad \alpha\alpha, \alpha\beta, \beta\alpha, \beta\beta$$

Are the base of all two electron spin fets.  
change the base: ~~the~~ Total spin

$$(4) \quad \vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$$

Make  $\vec{S}^2$  &  $\vec{S}_z$  diagonal

(5) Use general method of sect. 28 (or directly)

|     | Base fets                              | $\vec{S}^2$ | $ \vec{S} $ | $S_z$ | Spins        | Spin symmetry |
|-----|--|-------------|-------------|-------|--------------|---------------|
| (6) | $\alpha\alpha$                         | 2           | 1           | 1     | parallel     | symm.         |
|     | $(\alpha\beta + \beta\alpha)/\sqrt{2}$ | 2           | 1           | 0     | "            | "             |
|     | $\beta\beta$                           | 2           | 1           | -1    | "            | "             |
|     | $(\alpha\beta - \beta\alpha)/\sqrt{2}$ | 0           | 0           | 0     | antiparallel | antisym.      |

(7) Observe:  $\left\{ \begin{array}{l} \text{parallel} \\ \text{antiparallel} \end{array} \right\}$  spins have spin wave fets  $\left\{ \begin{array}{l} \text{symm} \\ \text{antisym} \end{array} \right\}$

Two electron wave fet must be antisymmetric  
then following possibilities

$$(8) \left\{ \begin{array}{l} \alpha\alpha u(\vec{x}_1, \vec{x}_2), \frac{\alpha\beta + \beta\alpha}{\sqrt{2}} u(\vec{x}_1, \vec{x}_2), \beta\beta u(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \\ \frac{\alpha\beta - \beta\alpha}{\sqrt{2}} v(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \text{ with } \begin{array}{l} u(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \text{ antisymmetric} \\ v(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \text{ symmetric} \end{array} \end{array} \right.$$

Обозначим спиновые функции электронов через  $\alpha$  и  $\beta$ :

$$\alpha = \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \end{vmatrix} \text{—спин } \uparrow, \quad \beta = \begin{vmatrix} 0 \\ 1 \end{vmatrix} \text{—спин } \downarrow \quad (31.1)$$

[матрица  $\alpha$  изображает ориентацию вектора спина „вверх“ (в положительном направлении оси  $z$ ), а матрица  $\beta$ —направление спина „вниз“ (в отрицательном направлении оси  $z$ )].

Направление оси  $z$  обычно определяется либо направлением внешнего поля, либо ориентацией импульса частицы.

Спиновая волновая функция системы двух электронов получается перемножением спиновых функций отдельных электронов, например

$$\alpha(\xi_1)\beta(\xi_2) = \alpha\beta \quad (31.2)$$

и т. п., так что четыре спиновые функции

$$\alpha\alpha, \quad \alpha\beta, \quad \beta\alpha, \quad \beta\beta \quad (31.3)$$

составляют базис есезовозможных двухэлектронных спиновых функций.

*Переход к другому базису.* Полный спин системы равен

$$\hat{S} = \hat{S}_1 + \hat{S}_2. \quad (31.4)$$

Приведем матрицы  $\hat{S}^2$  и  $\hat{S}_z$  к диагональному виду

$$s^2 = \text{diag} \quad \text{и} \quad s_z = \text{diag}; \quad (31.5)$$

тогда, используя метод лекции 28 (либо непосредственно), получим характеристику различных спиновых состояний нашей системы:

| Базисные функции                       | $S^2$ | $ S $ | $S_z$ | Спины           | Спиновая симметрия |
|--|-------|-------|-------|-----------------|--------------------|
| $\alpha\alpha$                         | 2     | 1     | 1     | Параллельны     | Симметричная       |
| $(\alpha\beta + \beta\alpha)/\sqrt{2}$ | 2     | 1     | 0     | „               | „                  |
| $\beta\beta$                           | 2     | 1     | —1    | „               | „                  |
| $(\alpha\beta - \beta\alpha)/\sqrt{2}$ | 0     | 0     | 0     | Антипараллельны | Антисимметричная   |

Отсюда видно, что когда

$$\text{Спины} \begin{cases} \text{параллельны,} \\ \text{антипараллельны,} \end{cases} \quad \text{Спиновые функции} \begin{cases} \text{симметричны,} \\ \text{антисимметричны.} \end{cases} \quad (31.7)$$

С другой стороны, *полная* волновая функция системы двух электронов (включающая как обычную, так и спиновую часть) должна быть антисимметричной. Поэтому имеются следующие

Case (2). Two independent electrons

$$(9) \quad H_0 = H(1) + H(2)$$

Neglect spin orbit interaction

Then let

$$(10) \quad H(1) \psi_n(\vec{r}_1) = E_n \psi_n(\vec{r}_1)$$

be soln of one particle problem.

Then two electron problem has e.v.'s  $E_n + E_m$  with following (degenerate) sol'ns

$$(11) \quad \left\{ \begin{array}{l} (\alpha \alpha) [\psi_n(x_1) \psi_m(x_2) - \psi_m(x_1) \psi_n(x_2)] / \sqrt{2} \\ \text{or} \\ \frac{\alpha \beta + \beta \alpha}{\sqrt{2}} [\text{same}] / \sqrt{2} \\ \text{or} \\ (\beta \beta) [\text{same}] / \sqrt{2} \\ \text{or} \\ \frac{\alpha \beta - \beta \alpha}{\sqrt{2}} [\psi_n(x_1) \psi_m(x_2) + \psi_m(x_1) \psi_n(x_2)] / \sqrt{2} \end{array} \right\}$$

These have  $S=1$   
total antisym.  
spin symmetric

This has  $S=1$   
total sym.  
spin antisym.

Introduce now Coulomb interaction

$$(12) \quad H_{\text{Coulomb}} = \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} = \frac{e^2}{r_{12}}$$

Treat (12) as perturbation (first order)

$$(13) \quad \delta E_{\text{Coul}} = \overline{H_{\text{Coul}}} = \frac{1}{\int \sum_{\text{spin}} d^3x_1 d^3x_2} \int \sum_{\text{spin}} d^3x_1 d^3x_2 |\text{wave fun}|^2$$

Result different for  $S=1$  (triplet) states and  $S=0$  (singlet) states

Note: one electron problem has two deg. sol'ns  $\propto \psi_n(\vec{r}_1)$  &  $\psi_n(\vec{r}_2)$

6596

954

возможности выражения волновых функций двухэлектронной системы:

$$\left. \begin{aligned} \alpha\alpha \, u(x_1, x_2), & \quad \frac{\alpha\beta + \beta\alpha}{\sqrt{2}} u(x_1, x_2), \\ \beta\beta \, u(x_1, x_2), & \quad \frac{\alpha\beta - \beta\alpha}{\sqrt{2}} v(x_1, x_2); \end{aligned} \right\} \quad (31.8)$$

здесь  $u(x_1, x_2)$  — антисимметричная,  $v(x_1, x_2)$  — симметричная функции координат.

**случай I. Система двух независимых электронов.** Гамильтониан такой системы можно записать в виде

$$\hat{H}_0 = \hat{H}(1) + \hat{H}(2). \quad (31.9)$$

Если спин-орбитальным взаимодействием пренебречь, то волновая функция одночастичной задачи находится из уравнения

$$\hat{H}(1) \psi_n(x_1) = E_n \psi_n(x_1). \quad (31.10)$$

**Замечание.** Задача для одного электрона приводит здесь к дважды вырожденным решениям:  $\alpha\psi_n(x_1)$  и  $\beta\psi_n(x_2)$ . Следовательно, система, состоящая из двух электронов, имеет собственные значения энергии  $E_n + E_m$  соответственно следующим (вырожденным) полным волновым функциям:

$$\left. \begin{aligned} 1) & \alpha\alpha \frac{\psi_n(x_1) \psi_m(x_2) - \psi_m(x_1) \psi_n(x_2)}{\sqrt{2}}, \\ 2) & \frac{\alpha\beta + \beta\alpha}{\sqrt{2}} \frac{\psi_n(x_1) \psi_m(x_2) - \psi_m(x_1) \psi_n(x_2)}{\sqrt{2}}, \\ 3) & \beta\beta \frac{\psi_n(x_1) \psi_m(x_2) - \psi_m(x_1) \psi_n(x_2)}{\sqrt{2}}, \\ 4) & \frac{\alpha\beta - \beta\alpha}{\sqrt{2}} \frac{\psi_n(x_1) \psi_m(x_2) + \psi_m(x_1) \psi_n(x_2)}{\sqrt{2}}. \end{aligned} \right\} \quad (31.11)$$

Функции 1—3 соответствуют спину  $S=1$  и предполагают пространственную антисимметрию и спиновую симметрию.

Функция 4 соответствует спину  $S=0$  и предполагает пространственную симметрию и спиновую антисимметрию.

**случай II. Кулоновское взаимодействие между электронами.** Соответствующий гамильтониан имеет вид

$$H_c = \frac{e^2}{|x_1 - x_2|} = \frac{e^2}{r_{12}}; \quad (31.12)$$

будем рассматривать его как возмущение (взаимодействие между



двумя электронами считается слабым). В первом порядке теории возмущений добавка к энергии системы равна

$$\delta E_c = \bar{H}_c = \iint \sum_{\text{Спин}} d^3x_1 d^3x_2 \left| \frac{\text{Волновая}}{\text{функция}} \right|^2 \frac{e^2}{r_{12}} \quad (31.13)$$

Спиновым состояниям  $S=1$  (триплетное состояние) и  $S=0$  (синглетное состояние) соответствуют различные значения  $\delta E_c$ . При этом недиагональные члены в матрице гамильтониана отсутствуют. Считая функции  $\psi_1$  и  $\psi_2$  вещественными, находим:

$$\begin{aligned} \delta E_c = & \iint \frac{e^2}{r_{12}} |\psi_1(x_1)|^2 |\psi_2(x_2)|^2 dx_1 dx_2 \mp \\ & \mp \iint \frac{e^2}{r_{12}} \psi_1(x_1) \psi_2(x_1) \psi_1(x_2) \psi_2(x_2) dx_1 dx_2; \end{aligned} \quad (31.14)$$

знак „минус“ соответствует триплетному состоянию системы, знак „плюс“ — синглетному. Первый интеграл справа интерпретируется как энергия электростатического взаимодействия двух электронов; второй интеграл представляет собой специфически квантовую, так называемую обменную энергию.

Темы для обсуждения в связи с формулой (31. 14):

1. Обменный интеграл как эффективное очень сильное спин-спиновое взаимодействие.
2. Связь с теорией ферромагнетизма.
3. Роль спин-орбитального взаимодействия и триплетного расщепления уровней.

#### Спектры гелия (термы даны в $\text{см}^{-1}$ )

|                        |          |                    |          |                       |
|------------------------|----------|--------------------|----------|-----------------------|
| Парагелий<br>(синглет) | $1s^2$   | $^1S_0 = 198\,305$ | $2p\ 1s$ | $^1P_0 = 27\,176$     |
|                        | $2s\ 1s$ | $^1S_0 = 32\,033$  | $3d\ 1s$ | $^1P_0 = 12\,206$     |
|                        | $3s\ 1s$ | $^1S_0 = 19\,446$  |          |                       |
| Ортогелий<br>(триплет) | $2s\ 1s$ | $^3S_1 = 38\,455$  | $2p\ 1s$ | $^3P_0 = 29\,223,87$  |
|                        | $3s\ 1s$ | $^3S_1 = 15\,074$  | $2p\ 1s$ | $^3P_1 = 29\,223,799$ |
|                        |          |                    | $2p\ 1s$ | $^3P_2 = 29\,223,878$ |

Если при расчете воспользоваться методом Ритца (см. лекцию 21), взяв в качестве пробной функции  $\exp[-\alpha(r_1 + r_2)/a]$ , то вариационный параметр будет равен  $\alpha = 27/16$ . При этом основному уровню соответствует значение  $[2 \cdot (27^2/16^2) - 4] \cdot R = = 186\,000\ \text{см}^{-1}$  ( $R$  — постоянная Ридберга)\*.

### 32- Hydrogen molecule

Generalities on molecular spectra

Rotational oscillation and electronic levels.

Electronic levels of  $H_2$ -molecule

①.

②



$$(1) H = \frac{p_1^2 + p_2^2}{2m} + \frac{e^2}{r} + \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_{a1}} - \frac{e^2}{r_{a2}} - \frac{e^2}{r_{b1}} - \frac{e^2}{r_{b2}}$$

Heitler London method.

Discuss two zero approx wave fcts

$$(2) \psi = a(1) b(2) \pm a(2) b(1) \quad \begin{array}{l} + \text{ for } S=0 \text{ (singlet)} \\ - \text{ for } S=1 \text{ (triplet)} \end{array}$$

$a(1)$ ,  $b(1)$  are hydrogen wave fcts for electron

① near nucleus a or b.

Step ②: normalization

$$(3) \int \psi^2 d\vec{x}_1 d\vec{x}_2 = \left( \int a^2(1) dx_1 \right) \left( \int b^2(2) dx_2 \right) + \left( \int a^2(2) dx_2 \right) \left( \int b^2(1) dx_1 \right) \\ \pm 2 \int a(1) b(1) dx_1 \int a(2) b(2) dx_2 \\ = 2(1 + \beta^2)$$

$$(4) \beta = \int a(1) b(1) d\vec{x}_1$$

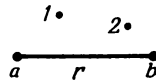
Normalized wave fcts

$$(5) \psi_{\pm} = \frac{a(1) b(2) \pm a(2) b(1)}{\sqrt{2(1 \pm \beta^2)}}$$

**Электронные уровни молекулы водорода.** Будем считать ядра  $a$  и  $b$  двух атомов водорода покоящимися на расстоянии  $r_{ab}=r$  друг от друга. Обозначим:  $r_{a1}$  и  $r_{b1}$  — радиус-векторы первого электрона относительно ядер  $a$  и  $b$ ,  $r_{a2}$  и  $r_{b2}$  — радиус-векторы второго электрона относительно ядер  $a$  и  $b$ ,  $r_{12}$  — радиус-вектор второго электрона относительно первого (фиг. 25). Тогда гамильтониан системы можно записать как

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2 + \hat{p}_2^2}{2m} + \frac{e^2}{r} + \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_{a1}} - \frac{e^2}{r_{a2}} - \frac{e^2}{r_{b1}} - \frac{e^2}{r_{b2}}. \quad (32.1)$$

**Фиг. 25.**  
„Положение“ электронов  
и ядер в молекуле водорода.



### Метод Гайтлера — Лондона.

Гайтлер и Лондон предложили идею объяснения гомеоплярной химической связи, исходя из соображений минимума энергии. Они показали, что минимальная по энергии комбинация волновых функций невозмущенной задачи правильно описывает свойства молекулы водорода, что после усовершенствования расчетов явилось большим триумфом квантовой механики.

Рассмотрим две волновые функции нулевого приближения (систему двух *невозмущенных* атомов водорода)

$$\psi = a(1)b(2) \pm a(2)b(1), \quad (32.2)$$

где знак „плюс“ соответствует  $S=0$  (синглет), знак „минус“ соответствует  $S=1$  (триплет);  $a(1)$  и  $b(1)$  представляют собой волновые функции атома водорода для первого электрона, движущегося около ядра  $a$  или  $b$  соответственно;  $a(2)$  и  $b(2)$  — аналогичные волновые функции второго электрона.

Произведем прежде всего нормировку волновых функций (32.2):

$$\begin{aligned} \int \psi^2 d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 &= \left( \int a^2(1) d\mathbf{x}_1 \right) \left( \int b^2(2) d\mathbf{x}_2 \right) + \left( \int a^2(2) d\mathbf{x}_2 \right) \times \\ &\times \left( \int b^2(1) d\mathbf{x}_1 \right) \pm 2 \int a(1)b(1) d\mathbf{x}_1 \int a(2)b(2) d\mathbf{x}_2 \equiv \\ &\equiv 2(1 + \beta^2), \end{aligned} \quad (32.3)$$

где

$$\beta = \int a(1)b(1) d\mathbf{x}_1. \quad (32.4)$$

Нормированные волновые функции (32.2) принимают вид

$$\psi_{\pm} = \frac{a(1)b(2) \pm a(2)b(1)}{\sqrt{2(1 \pm \beta^2)}}. \quad (32.5)$$



$$(6) \quad E_{\pm} = \iint \Psi_{\pm} \hat{H} \Psi_{\pm} d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2$$

Use

$$(7) \quad \left( \frac{1}{2m} p_1^2 - \frac{e^2}{r_{a1}} \right) a(1) = -R a(1)$$

$$R = \text{Rydberg energy} = +13.6 \text{ eV}$$

Find

$$(8) \quad H a(1) b(2) = \left( -2R + \frac{e^2}{r} + \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_{a2}} - \frac{e^2}{r_{b1}} \right) a(1) b(2)$$

Find

$$(9) \quad E_{\pm} = -2R + \frac{e^2}{r} + \frac{1}{1 \pm \beta^2} \iint \left( \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_{a2}} - \frac{e^2}{r_{b1}} \right) a^2(1) b^2(2) d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 \\ \pm \frac{1}{1 \pm \beta^2} \iint \left( \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_{a2}} - \frac{e^2}{r_{b1}} \right) a(1) b(1) a(2) b(2) d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2$$

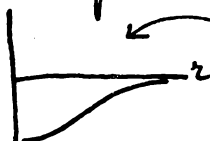
### Discussion

Take  $-2R$  as zero energy (energy of two distant atoms)

Term  $\frac{e^2}{r}$  is potential energy of nuclei

first  $\iint$ -term (apart of small  $\beta$ ) is mutual electrostatic interaction of two electron clouds  $e a^2(1)$  and  $e b^2(2)$  between each other and with the other nucleus.

second  $\iint$  is exchange integral. This is negative and depends on  $\pm$  as follows

 Adding various terms find

Отсюда, как обычно в теории возмущений, находим энергию системы в первом приближении:

$$E_{\pm} = \int \int \psi_{\pm}^* \hat{H} \psi_{\pm} d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2. \quad (32.6)$$

Чтобы выразить эту энергию явно, воспользуемся уравнениями вида

$$\left( \frac{1}{2m} p_1^2 - \frac{e^2}{r_{12}} \right) a(1) = -R a(1), \quad (32.7)$$

где  $R$  — постоянная Ридберга, равная в единицах энергии 13,6 эв; получим:

$$\hat{H} a(1) b(2) = \left( -2R + \frac{e^2}{r} + \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_{a2}} - \frac{e^2}{r_{b1}} \right) a(1) b(2). \quad (32.8)$$

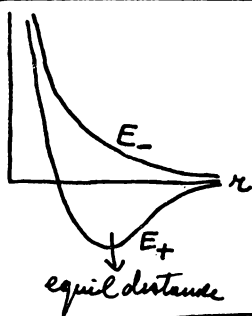
Окончательное выражение для энергии (32.6) имеет вид

$$E_{\pm} = -2R + \frac{e^2}{r} + \frac{1}{1 \pm \beta^2} \int \int \left( \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_{a2}} - \frac{e^2}{r_{b1}} \right) a^2(1) b^2(2) dx_1 dx_2 \pm \\ \pm \frac{1}{1 \pm \beta^2} \int \int \left( \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_{a2}} - \frac{e^2}{r_{b1}} \right) a(1) b(1) a(2) b(2) dx_1 dx_2. \quad (32.9)$$

**Обсуждение.** Рассматривая здесь член  $-2R$  как нулевую энергию (суммарную энергию системы двух пространственно разделенных атомов), можно интерпретировать член  $e^2/r$  как потенциальную энергию ядер, а первый двойной интеграл в выражении (32.9) (не считая малой величины  $\beta$ ) — как энергию электростатического взаимодействия двух электронных облаков  $ea^2(1)$  и  $eb^2(2)$  между собой и с дополнительным ядром (вторым ядром для первого электронного облака и первым — для второго). Вторым двойной интеграл есть обменный интеграл. Он представляет собой отрицательную величину (его зависимость от расстояния между ядрами изображена на фиг. 26).

Фиг. 26.  
График обменного  
интеграла как функции  $r$ .





No binding for  $E_-$

Binding for  $E_+$

For ground state of  $H_2$   
two electrons have their  
opposite spins ( $S=0$ )

Heitler London method sketched above  
is quantitatively poor.

Better for ground state Wang method  
with Ritz trial fit

$$(10) \quad \psi(x_1, x_2) = e^{-\frac{z}{a}(x_{a1} + x_{b2})} + e^{-\frac{z}{a}(x_{b1} + x_{a2})}$$

$a$  = Bohr radius

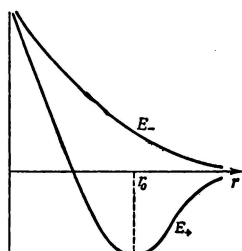
$z$  = adjustable parameter of Ritz method

Minimize for each value of  $z$

$$(11) \quad \bar{H} = \frac{\int \psi(x_1, x_2) H \psi(x_1, x_2) d\vec{x}_1 d\vec{x}_2}{\int |\psi(x_1, x_2)|^2 d\vec{x}_1 d\vec{x}_2}$$

|                     | Wang                   | Experiment             |
|---------------------|------------------------|------------------------|
| 12) { Bind. energy  | .278 Rydberg           | .320 Rydberg           |
| { Mom. of inertia   | $.459 \times 10^{-40}$ | $.467 \times 10^{-40}$ |
| { Oscill. frequency | $4900 \text{ cm}^{-1}$ | $4360 \text{ cm}^{-1}$ |

В сумме эти члены дают (в зависимости от знака при обменном интеграле) энергии  $E_-$  и  $E_+$ , принципиально различным образом зависящие от  $r$  (см. фиг. 27).



Фиг. 27.

Ясно, что состояние молекулы водорода, характеризуемое в первом приближении энергией  $E_-$ , не может быть связанным, в то время как состояние, соответствующее энергии  $E_+$ , устойчиво (атомы действительно связаны в одну молекулу), причем из фиг. 27 можно составить наглядное представление о равновесном расстоянии  $r_0$  между ядрами двух атомов водорода в молекуле  $H_2$ . Следовательно, в основном состоянии молекулы  $H_2$  спины двух электронов могут быть только *противоположными* ( $S=0$ ).

**Метод Уонга.** Метод Гайтлера — Лондона, схематически изложенный выше, приводит к количественно неудовлетворительным результатам. Основное состояние молекулы водорода может быть более успешно рассчитано по методу Уонга, использовавшего пробную функцию (по Ритцу) вида

$$\psi(x_1, x_2) = e^{-\frac{z}{a}(r_{a1} + r_{b2})} + e^{-\frac{z}{a}(r_{b1} + r_{a2})}, \quad (32.10)$$

где  $a$  — боровский радиус,  $z$  — варьируемый параметр Ритца.

Исследуя на минимум среднюю энергию

$$\bar{H} = \frac{\int \psi(x_1, x_2) H \psi(x_1, x_2) dx_1 dx_2}{\int |\psi(x_1, x_2)|^2 dx_1 dx_2} \quad (32.11)$$

при каждом значении  $r$ , находим, как обычно, соответствующие значения параметра  $z$ . Результаты вычислений и сравнение их с экспериментальными данными имеют вид

|                              | Расчет по методу<br>Уонга | эксперимент            |         |
|------------------------------|---------------------------|------------------------|---------|
| Энергия связи. . . .         | 0,278R                    | 0,326R                 | (32.12) |
| Момент инерции. . . .        | $0,459 \cdot 10^{-40}$    | $0,467 \cdot 10^{-40}$ |         |
| Частота ( $cm^{-1}$ ). . . . | 4900                      | 4360                   |         |

Rotational levels (role of nuclear spin)

Approx. hamiltonian for rotational levels only

$$-\frac{\hbar^2}{2A} \nabla^2 \quad (\text{see Sect 2})$$

$$(13) \quad -\frac{\hbar^2}{2A} \Lambda^2 \quad [\text{see Sect 2 (14)}]$$

$A = \text{mom. of inertia}$   
yields rot. energy levels

$$(14) \quad \left\{ \frac{\hbar^2}{2A} l(l+1) \right. \quad l = 0, 1, 2, \dots$$

$$\psi_l = Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

(14) applies to diatomic molecules when there is no resultant ang. mom. of the electrons along figure axis.

Even in this case, however, complications for identical nuclei.

Example: two nuclei identical with nuclear spin 0, and B.E. statistics require symmetric wave funt. Now

$Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$  sym for interchange of nuclei only when  $l$  even. Therefore in this case all odd  $l$ 's are absent

(Comment as to possible complications due to symmetry of electronic levels)

For hydrogen, the two protons have spin  $1/2$  and antisym. wave funts

**Вращательные уровни и роль ядерного спина.** При определении вращательных энергетических уровней значительную роль играет спин ядер. Приближенный вид чисто вращательного гамильтониана [см. (2.14)]

$$-\frac{\hbar^2}{2A} \Lambda \quad (32.13)$$

приводит к следующим результатам для вращательных уровней:

$$\left. \begin{aligned} E_l &= \frac{\hbar^2}{2A} l(l+1) \\ \psi_l &= Y_{lm}(\theta, \varphi) \end{aligned} \right\} \quad \begin{aligned} l &= 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (32.14)$$

Полученные значения энергии реализуются лишь в случае, когда в двухатомных молекулах результирующий момент электронов относительно оси симметрии молекулы  $H_2$  равен нулю. При этом, однако, возникают некоторые усложнения, если входящие в молекулу атомные ядра одинаковы.

**Пример.** Два одинаковых ядра, ядерный спин  $S$  каждого из которых равен нулю, подчиняющиеся статистике Бозе—Эйнштейна, требуют симметричной волновой функции. Однако функция  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  симметрична относительно перестановки ядер только тогда, когда число  $l$  четное, поэтому все нечетные значения квантового числа  $l$  должны отсутствовать. (Усложнения могут возникнуть в случае симметрии между электронными уровнями.) В молекуле водорода оба протона имеют спины, равные  $1/2$ , и описываются антисимметричными волновыми функциями. Поэтому, как и в системе

Therefore (like for two electron system) ~~rotational~~  
rotational terms split into

Para hydrogen terms

Nuclear spins antiparallel  $l = 0, 2, 4, \dots$

and

Ortho-hydrogen terms

Nuclear spins parallel  $l = 1, 3, 5, \dots$

Comments. Alternating band intensities

Very slow ortho - para conversion in  
hydrogen

Specific heat of hydrogen rotation.

Topics for discussion - Band spectra  
of diatomic molecules.

с двумя электронами (атом гелия), вращательные термы разделяются на

параводородные термы, для которых спины ядер антипараллельны, причем  $l=0, 2, 4, \dots$  ;

ортоводородные термы, для которых спины ядер параллельны, причем  $l=1, 3, 5, \dots$  .

*Замечания и темы для обсуждения\*:*

1. Соотношение интенсивностей вращательных полос и очень медленные (пара  $\rightleftharpoons$  орто)-переходы в водороде.

2. Теплоемкости вращательных степеней свободы в водороде.

3. Полосатые спектры двухатомных молекул.



33 - Collision theory

Scattering by short range central force field.

$$(1) \quad \psi \rightarrow e^{ikz} - f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad \left( \begin{array}{l} \text{asymptotic} \\ \text{for } r \rightarrow \infty \end{array} \right)$$

$$(2) \quad k = \frac{1}{\hbar} p$$

(1) yields diff cross sect

$$(3) \quad \frac{d\sigma}{d\omega} = |f(\theta)|^2$$

Develop (1) in sph. harmonics by

$$(4) \quad e^{ikz} = \frac{\pi\sqrt{2}}{\sqrt{kr}} \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{2l+1} Y_{l0}(\theta) J_{l+\frac{1}{2}}(kr)$$

Also use

$$J_n(x) \rightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos\left(x - \frac{\pi}{4} - \frac{\pi n}{2}\right)$$

$$(5) \quad e^{ikz} \rightarrow \frac{\sqrt{4\pi}}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{2l+1} Y_{l0} \sin\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right) =$$

$$= \frac{\sin kr}{kr} + \dots$$

Also dev.  $f(\theta)$  in sph. harm. by

$$(6) \quad f(\theta) = \sum_l a_l P_l(\cos\theta) = \sqrt{4\pi} \sum_l \frac{a_l}{\sqrt{2l+1}} Y_{l0}(\theta)$$

$$(7) \quad \psi \rightarrow \frac{\sqrt{4\pi}}{kr} \sum_l \frac{Y_{l0}}{\sqrt{2l+1}} \left\{ e^{ikr} \left[ -a_l - \frac{i}{2} \frac{2l+1}{k} \right] + e^{-ikr} (-1)^l \frac{i}{2} \frac{2l+1}{k} \right\}$$

**Рассеяние на короткодействующем центральном потенциале.** В этом случае естественно задаться следующим асимптотическим (при  $r \rightarrow \infty$ ) видом волновой функции:

$$\psi \rightarrow e^{ik \cdot z} - f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}, \quad (33.1)$$

где

$$k = \frac{1}{\hbar} p. \quad (33.2)$$

Первый член (33.1) описывает плоскую падающую волну, распространяющуюся в положительном направлении оси  $z$ ; эта волна соответствует первоначальному потоку частиц, обладающих определенным значением импульса  $p$ . Второе слагаемое, имеющее вид радиально расходящейся волны, соответствует потоку рассеянных частиц.

Формула (33.1) приводит к следующему выражению для дифференциального сечения:

$$\frac{d\sigma}{d\omega} = |f(\theta)|^2 (d\omega - \text{элемент телесного угла}). \quad (23.3)$$

Разложим падающую волну в (33.1) в ряд по сферическим функциям:

$$e^{ik \cdot z} = \frac{\pi \sqrt{2}}{\sqrt{kr}} \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{2l+1} Y_{l,0}(\theta) J_{l+1/2}(k \cdot r). \quad (33.4)$$

Этот прием напрашивается ввиду центральной симметрии рассеивающего поля; вместе с тем ввиду существования выделенного направления (в падающей волне  $k \parallel Oz$ ) на картину рассеяния накладывается аксиальная (цилиндрическая) симметрия, ответственная в разложении (33.4) за появление функций Бесселя  $J_{l+1/2}(k \cdot r)$ .

Используя асимптотику функций Бесселя

$$J_n(x) \rightarrow \left( \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos x - \frac{\pi}{4} - \frac{\pi n}{2} \right),$$

придем к выражению

$$e^{ikz} \rightarrow \sqrt{\frac{4\pi}{kr}} \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{2l+1} Y_{l,0} \sin\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right) = \frac{\sin kr}{kr} + \dots \quad (33.5)$$

(в волновой функции представляет интерес лишь асимптотика, так как рассеяние исследуется на больших расстояниях от центра).

Разложим по сферическим функциям также функцию  $f(\theta)$ :

$$f(\theta) = \sum_l a_l P_l(\cos \theta) = \sqrt{4\pi} \sum_l \frac{a_l}{\sqrt{2l+1}} Y_{l,0}(\theta). \quad (33.6)$$

Comments - In- and outgoing wave ~~have~~ must have = amplitudes. Then

$$(8) \quad a_l + \frac{i}{2} \frac{2l+1}{k} = e^{2i\alpha_l} \left( \frac{i}{2} \frac{2l+1}{k} \right)$$

or

$$(9) \quad a_l = \frac{i}{2} \frac{2l+1}{k} (e^{2i\alpha_{l-1}})$$

and radial wave fct of  $l$ ,  $R_l(r) = \frac{u_l(r)}{r}$

$$(10) \quad \cancel{R_l(r)} \xrightarrow{u_l(r)} \sin(kr - \frac{\pi l}{2} + \alpha_l) \quad \text{phase shift.}$$

Determine  $\alpha_l$  from radial equation

$$(11) \quad \begin{cases} u_l''(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} u_l + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(r)] u_l = 0 \\ E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \end{cases}$$

$$(12) \quad u_l'' + \left\{ k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} U(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} u_l = 0$$

Solution behavior for  $r$  small & large

$$(13) \quad r^{l+1} \leftarrow u_l(r) \rightarrow \text{const} \times \sin(kr + \alpha_l - \frac{\pi l}{2})$$

determines  $\alpha_l$ .

Express  $\frac{d\sigma}{d\omega}$  in terms of  $\alpha_l$  (use (9), (6), (3))

$$(14) \quad \frac{d\sigma}{d\omega} = \frac{1}{4k^2} \left| \sum_l (2l+1) P_l(\cos\theta) (e^{2i\alpha_l} - 1) \right|^2$$

Подставив найденные разложения в формулу (33.1), получим:

$$\psi \rightarrow \frac{\sqrt{4\pi}}{kr} \sum_l \frac{Y_{l,0}}{\sqrt{2l+1}} \left\{ e^{ik \cdot r} \left[ -a_l - \frac{i}{2} \frac{2l+1}{k} \right] + e^{-ik \cdot r} (1)^l \frac{i}{2} \frac{2l+1}{k} \right\}. \quad (33.7)$$

Заметим, что сходящаяся и расходящаяся волны должны иметь равные амплитуды (сохранение числа частиц). Из этого условия следует, что

$$a_l + \frac{i}{2} \frac{2l+1}{k} = e^{2i\alpha_l} \left( \frac{i}{2} \frac{2l+1}{k} \right), \quad (33.8)$$

или

$$a_l = \frac{i}{2} \frac{2l+1}{k} (e^{2i\alpha_l} - 1). \quad (33.9)$$

(Здесь путем введения вещественной величины  $\alpha_l$  учтена возможность различия фазы волн; в дальнейшем будем называть  $\alpha_l$  *фазовым сдвигом* или разностью фаз, соответствующих данному значению  $l$ .) Радиальная волновая функция при этом должна зависеть от  $l$  и иметь вид

$$R_l = u_l(r)/r,$$

где асимптотически

$$u_l(r) \rightarrow \sin \left( kr - \frac{\pi l}{2} + \alpha_l \right). \quad (33.10)$$

Очевидно, разности фаз  $\alpha_l$  полностью определяют картину рассеяния; в частности, дифференциальное сечение обращается в нуль, если все фазы  $\alpha_l$  равны 0 или  $\pi$ .

Для определения сдвига фаз  $\alpha_l$  воспользуемся радиальным уравнением Шредингера в форме

$$\begin{aligned} u_l''(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} u_l(r) + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(r)] u_l &= 0, \\ E &= \frac{\hbar^2}{2m} k^2, \end{aligned} \quad (33.11)$$

или

$$u_l'' + \left\{ k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} U(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} u_l = 0. \quad (33.12)$$

Решение уравнения (33.12) ведет себя при малых значениях  $r$  как

$$u_l(r) \sim r^{l+1},$$

при больших  $r$  как

$$u_l(r) \approx \text{const} \cdot \sin \left( kr + \alpha_l - \frac{\pi l}{2} \right); \quad (33.13)$$

поведением решения (33.12) и определяются сдвиги фаз  $\alpha_l$ .

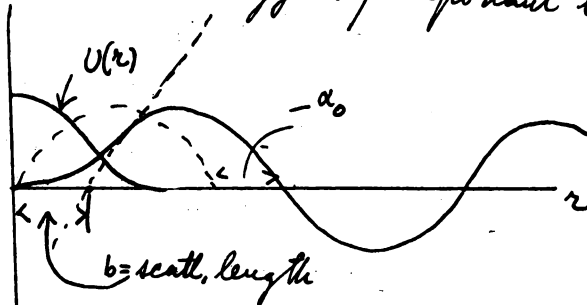
Выразим  $d\sigma/d\omega$  через фазы  $\alpha_l$ , используя формулы (33.9), (33.6) и (33.3):

$$\frac{d\sigma}{d\omega} = \frac{1}{4k^2} \left| \sum_l (2l+1) P_l(\cos \theta) (e^{2i\alpha_l} - 1) \right|^2; \quad (33.14)$$

Integrate:

$$(15) \quad \sigma = 4\pi \lambda^2 \sum_l (2l+1) \sin^2 \alpha_l \quad (\lambda = 1/k)$$

$\alpha_0$  at low energy only important  $l=0$



$$(16) \quad \left\{ \begin{array}{l} \alpha_0 = -k \times \text{scattering length} = -kb_0 \\ \text{(at low energy)} \end{array} \right.$$

Then at low energy

$$(17) \quad \sigma \rightarrow 4\pi b^2$$

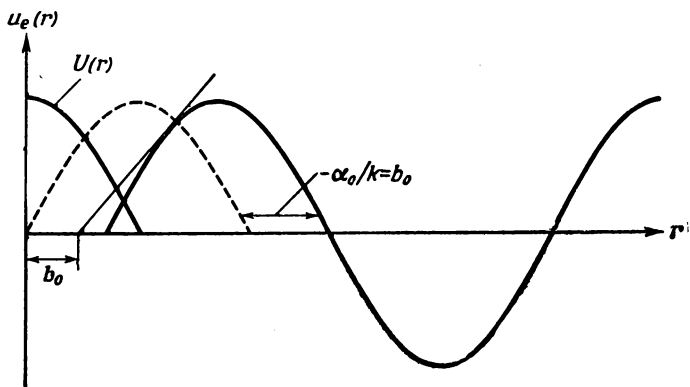
One can prove that in simple cases at low energy

$$\alpha_l \sim k^{2l+1}$$

Comments — Examples — Coulomb forces  
 (See Schiff Sect. 20) — Scattering by hard sphere  
Absorption & shadow scattering — ~~Ex~~

интегрируя это выражение, получим полное сечение рассеяния (фиг. 28)

$$\sigma = 4\pi\lambda^2 \sum_l (2l+1) \sin^2 \alpha_l. \quad (33.15)$$



Фиг. 28.

Поведение волновой функции в присутствии рассеивающего центра.

При малых энергиях достаточно знать величину  $\alpha_0$  ( $l=0$ ). В этом случае

$$\alpha_0 = -k \times \text{Длина рассеяния} = -kb_0. \quad (33.13)$$

Тогда полное сечение принимает вид

$$\sigma \rightarrow 4\pi b^2. \quad (33.17)$$

Можно показать, что в простейших случаях при малых энергиях

$$\alpha_l \sim k^{2l+1}.$$

*Темы для обсуждения:*

В качестве примеров полезно рассмотреть

1. Рассеяние на кулоновском потенциале (см. у Шиффа, § 20).
2. Рассеяние на идеально твердой сфере и эффект теневой области (см. там же, стр. 132).
3. Рассеяние с поглощением<sup>1)</sup>.

<sup>1)</sup> Для рассеяния с поглощением доказывается „оптическая теорема“ (см. курс Блохинцева, стр. 275, 276). — Прим. ред.

34 - Dirac's theory of the <sup>free</sup> electron ~~in relativistic~~  
 Time dep. Schrodinger eq. for particle

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} \right)$$

Treats  $t, x, y, z$  very non symmetrically.

Search for relativistic equation for electron of first order in  $t, x, y, z$ .

Notation

$$(1) \begin{cases} x = x_1, & y = x_2, & z = x_3, & ict = x_4 \quad (ct = x_0) \\ p_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \text{ or } p_i = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_i} \\ p_4 = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_4} = -\frac{\hbar}{c} \frac{\partial}{\partial t} = \frac{i}{c} E \end{cases}$$

use  
 $E = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$

$$(2) \begin{cases} \vec{x} \equiv (x_1, x_2, x_3), & \vec{p} \equiv (p_1, p_2, p_3) \end{cases}$$

Sum over equal indices

$$(3) \begin{cases} \text{Four vectors} \\ \underline{x} \equiv (x_1, x_2, x_3, x_4) \text{ or } \underline{p} \equiv (p_1, p_2, p_3, p_4) \end{cases}$$

If  $\psi$  were a scalar, simplest first order eqn would be (constant coeff.)

$$\psi = a_{(1)}^{(1)} \frac{\partial \psi}{\partial x_1} + a_{(2)}^{(2)} \frac{\partial \psi}{\partial x_2} + a_{(3)}^{(3)} \frac{\partial \psi}{\partial x_3} + a_{(4)}^{(4)} \frac{\partial \psi}{\partial x_4} = \frac{i}{\hbar} a_{\mu}^{(\mu)} p_{\mu} \psi$$

It will prove necessary however to take  $\psi$  to have several (four) components. Instead of above, write

$$(4) \quad i m c \psi_k = \gamma_{k\ell}^{(\mu)} p_{\mu} \psi_{\ell} = \frac{\hbar}{i} \gamma_{k\ell}^{(\mu)} \frac{\partial \psi_{\ell}}{\partial x_{\mu}}$$

**Релятивистское волновое уравнение.** Общее уравнение Шредингера (зависящее от времени) для частицы массой  $m$

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right)$$

в высшей степени несимметричным образом включает координаты  $t, x, y, z$ . Это обстоятельство явно противоречит традиционным требованиям частной теории относительности, и в целях обобщения нерелятивистского уравнения Шредингера на случай частиц больших (сравнимых с  $c$ ) скоростей проведем следующее исследование: попытаемся найти такое релятивистское уравнение для электрона, которое включало бы производные только первого порядка по  $t, x, y, z$ . Введем стандартные обозначения:

$$\begin{aligned} x &= x_1, \quad y = x_2, \quad z = x_3, \quad ict = x_4 \quad (ct = x_0), \\ p_x &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \quad \text{или} \quad p_i = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_i}, \\ p_4 &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_4} = -\frac{\hbar}{c} \frac{\partial}{\partial t} = \frac{i}{c} E. \end{aligned} \quad (34.1)$$

В последней строке использовано операторное выражение  $[E = i\hbar (\partial/\partial t)]$ . Итак, вместо трехмерных векторов

$$\mathbf{x} \equiv (x_1, x_2, x_3), \quad \mathbf{p} \equiv (p_1, p_2, p_3) \quad (34.2)$$

введем четырехмерные векторы (4-векторы)

$$\vec{x} \equiv (x_1, x_2, x_3, x_4), \quad \vec{p} \equiv (p_1, p_2, p_3, p_4). \quad (34.3)$$

Если бы волновая функция  $\psi$  была скаляром, то простейшее уравнение первого порядка имело бы вид (коэффициенты  $a^{(\mu)}$  считаются постоянными)

$$\kappa \psi = a^{(1)} \frac{\partial \psi}{\partial x_1} + a^{(2)} \frac{\partial \psi}{\partial x_2} + a^{(3)} \frac{\partial \psi}{\partial x_3} + a^{(4)} \frac{\partial \psi}{\partial x_4} = \frac{i}{\hbar} a^{(\mu)} p_\mu \psi;$$

здесь и далее используется правило суммирования Эйнштейна по повторяющимся индексам от 1 до 4. Оказывается, однако, что волновую функцию  $\psi$  необходимо выбрать такой, чтобы она имела несколько компонент (именно *четыре*.) Вместо за-



In matrix notation:  $\psi$  a vertical slot of (four) elements  $\gamma_\mu = \parallel \gamma_{kl}^{(\mu)} \parallel$  a square matrix (four  $\times$  four matrix)

$$(5) \quad i m c \psi = \gamma_\mu p_\mu \psi \quad (\text{sum over } \mu) \\ = \frac{\hbar}{i} \gamma_\mu \frac{\partial \psi}{\partial x_\mu}$$

$p_\mu = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_\mu}$  operates on dependence of  $\psi$  on  $x_\mu$

$\gamma_\mu$  operates on an internal variable similar to the spin variable of Pauli, however with 4 components as will be seen. Follows:

$$(6) \quad \left\{ \begin{array}{l} \gamma_\mu \text{ commutes with } p_\nu \text{ and } x_\nu \end{array} \right.$$

From (5)

$$(i m c)^2 \psi = (\gamma_\mu p_\mu)^2 \psi$$

Or (omitting  $\psi$ )

$$-m^2 c^2 = \gamma_1^2 p_1^2 + \gamma_2^2 p_2^2 + \gamma_3^2 p_3^2 + \gamma_4^2 \frac{E^2}{c^2} + \\ + (\gamma_1 \gamma_2 + \gamma_2 \gamma_1) p_1 p_2 + \text{similar terms}$$

use (1)  $p_4^2 = -\frac{E^2}{c^2}$   
use (6)

This can be identified with the relativistic momentum energy relation

$$(7) \quad m^2 c^2 + \vec{p}^2 = \frac{E^2}{c^2} \quad \text{by postulating}$$

$$(8) \quad \text{for } \gamma_1^2 = \gamma_2^2 = \gamma_3^2 = \gamma_4^2 = 1 \quad \gamma_\mu \gamma_\nu + \gamma_\nu \gamma_\mu = 0 \text{ for } \mu \neq \nu$$

писанного уравнения для  $\psi$  тогда следует составить другое уравнение:

$$imc\psi_k = \gamma_{kl}^{(\mu)} p_\mu \psi_l = \frac{\hbar}{i} \gamma_{kl}^{(\mu)} \frac{\partial \psi_l}{\partial x_\mu}. \quad (34.4)$$

**Уравнение Дирака. Матрицы Дирака.** В матричных обозначениях  $\psi$  представляет собой вертикальный столбец, состоящий из четырех элементов, а матрица  $\gamma_\mu = \|\gamma_{kl}^{(\mu)}\|$  квадратная и состоит из четырех строк и четырех столбцов ( $4 \times 4$ -матрица).

Таким образом, получаем матричное линейное дифференциальное уравнение первого порядка (по  $\mu$  — суммирование):

$$imc\psi = \gamma_\mu \hat{p}_\mu \psi = \frac{\hbar}{i} \gamma_\mu \frac{\partial \psi}{\partial x_\mu}. \quad (34.5)$$

называемое уравнением Дирака. Дифференциальные операторы

$$\hat{p}_\mu = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_\mu}$$

действуют на волновую функцию-столбец  $\psi$ , зависящую от всех координат  $x_\mu$ , а матрицы  $\gamma_\mu$  следует толковать как операторы, относящиеся к внутренней переменной, подобной спиновой переменной Паули, однако имеющей, как выяснится, четыре компоненты. Следовательно,

Матрицы  $\gamma_\mu$  должны коммутировать с операторами 4-импульса  $\hat{p}_\nu$  и с координатами  $x_\nu$ :

$$[\gamma_\mu, \hat{p}_\nu] = [\gamma_\mu, x_\nu] = 0. \quad (34.6)$$

Из равенства (34.5) следует, что

$$(imc)^2 \psi = (\gamma_\mu p_\mu)^2 \psi$$

или [символически опуская  $\psi$ , используя соотношения (34.1), (34.6) и очевидное равенство  $p_4^2 = -E^2/c^2$ ]

$$\begin{aligned} -m^2 c^2 &= \gamma_1^2 p_1^2 + \gamma_2^2 p_2^2 + \gamma_3^2 p_3^2 - \gamma_4^2 \frac{E^2}{c^2} + \\ &+ (\gamma_1 \gamma_2 + \gamma_2 \gamma_1) p_1 p_2 + \text{Аналогичные члены.} \end{aligned}$$

Последнее соотношение можно отождествить с известным релятивистским соотношением между импульсом и энергией

$$m^2 c^2 + p^2 = \frac{E^2}{c^2}, \quad (34.7)$$

если постулировать, что

$$\begin{aligned} \gamma_1^2 &= \gamma_2^2 = \gamma_3^2 = \gamma_4^2 = 1, \\ \gamma_\mu \gamma_\nu + \gamma_\nu \gamma_\mu &= 0 \quad \text{при } \mu \neq \nu. \end{aligned} \quad (34.8)$$

One finds that the lowest order matrices for which (8) can be fulfilled is the 4-th.

For order four there are many solutions that are essentially equivalent. We choose the "standard" solution

$$(9) \quad \gamma_1 = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}; \quad \gamma_2 = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}; \quad \gamma_3 = \begin{vmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \end{vmatrix}$$

and

$$(10) \quad \beta = \gamma_4 = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}$$

$\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$  act in many ways as the components of a vector and will be denoted by

$$(11) \quad \vec{\gamma} = (\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3) \text{ also } \underline{\gamma} = (\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_4) \text{ four vector}$$

Then (5) becomes

$$(12) \quad i m c \psi = (\vec{\gamma} \cdot \vec{p} + \frac{i}{c} E \gamma_4) \psi = \underline{\gamma} \cdot \underline{p} \psi$$

Multiply to left by  $\gamma_4 = \beta$  using  $\gamma_4^2 = \beta^2 = 1$

$$(13) \quad \boxed{E \psi = (m c^2 \beta + c \vec{\alpha} \cdot \vec{p}) \psi}$$

where

$$(14) \quad \vec{\alpha} = i \beta \vec{\gamma} \quad (\text{or } \alpha_1 = i \beta \gamma_1 \quad \alpha_2 = i \beta \gamma_2 \quad \alpha_3 = i \beta \gamma_3)$$

$$(15) \quad \alpha_1 = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}; \quad \alpha_2 = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix} \quad \alpha_3 = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{vmatrix}$$

Как можно показать, наиболее низкий порядок матриц, при котором выполняются условия (34.8), равен 4. Ограничиваясь  $4 \times 4$ -матрицами, можно построить много вариантов набора  $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_4$ , по существу эквивалентных. Выберем „стандартную“ систему:

$$\left. \begin{aligned} \gamma_1 &= \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 0 & -i\sigma_1 \\ i\sigma_1 & 0 \end{vmatrix}, \\ \gamma_2 &= \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 0 & -i\sigma_2 \\ i\sigma_2 & 0 \end{vmatrix}, \\ \gamma_3 &= \begin{vmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 0 & -i\sigma_3 \\ i\sigma_3 & 0 \end{vmatrix} \end{aligned} \right\} \quad (34.9)$$

и

$$\beta = \gamma_4 = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix}. \quad (34.10)$$

Тройка  $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$  во многих отношениях ведет себя как компоненты вектора; удобны обозначения:

„вектор“  $\gamma = (\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3)$ , аналог 4-вектора  $\vec{\gamma} \equiv (\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_4)$ . (34.11)

В этих обозначениях уравнение (34.5) принимает вид

$$imc\psi = \left( \gamma \cdot \mathbf{p} + \frac{i}{c} E \gamma_4 \right) \psi = \vec{\gamma} \cdot \vec{p} \psi. \quad (34.12)$$

Умножим это уравнение слева на матрицу  $\gamma_4 = \beta$  и используем свойство  $\gamma_4^2 = \beta^2 = 1$ ; получим эквивалентное уравнение

$$\boxed{E\psi = (mc^2\beta + c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}) \psi}, \quad (34.13)$$

(другая запись уравнения Дирака), где введена тройка матриц

$$\boldsymbol{\alpha} = i\beta\boldsymbol{\gamma} \quad \text{или} \quad \alpha_1 = i\beta\gamma_1, \quad \alpha_2 = i\beta\gamma_2, \quad \alpha_3 = i\beta\gamma_3. \quad (34.14)$$

Properties (check directly)

$$(16) \quad \beta^2 = \alpha_1^2 = \alpha_2^2 = \alpha_3^2 = 1$$

$$(17) \quad \begin{cases} \beta \alpha_1 + \alpha_1 \beta = 0 & \beta \alpha_2 + \alpha_2 \beta = 0 & \beta \alpha_3 + \alpha_3 \beta = 0 \\ \alpha_1 \alpha_2 + \alpha_2 \alpha_1 = 0 & \alpha_2 \alpha_3 + \alpha_3 \alpha_2 = 0 & \alpha_3 \alpha_1 + \alpha_1 \alpha_3 = 0 \end{cases}$$

- (18)  $\beta$  & the  $\alpha$ 's have square = unit matrix  
 $\beta$  & the  $\alpha$ 's anticommute with each other.  
 $\beta$  & the  $\alpha$ 's are hermitian.  
 One can prove that all the physical consequences of (13) do not depend on the special choice (10), (15) of  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \beta$ . They would be the same if a different set of four  $4 \times 4$  matrices with the specifications (18) had been chosen. In particular it is possible by unitary transformation to interchange the roles of the four matrices. So that their differences are only apparent.

- (19)  $\left\{ \begin{array}{l} \text{Check that for each of the 4 matrices} \\ \gamma_4 = \beta, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3 \text{ the eigenvalues} \\ \text{are } +1, \text{ twice and } -1 \text{ twice} \end{array} \right.$

Здесь

$$\alpha_1 = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 0 & \sigma_1 \\ \sigma_1 & 0 \end{vmatrix}, \quad \alpha_2 = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 0 & \sigma_2 \\ \sigma_2 & 0 \end{vmatrix},$$

$$\alpha_3 = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 0 & \sigma_3 \\ \sigma_3 & 0 \end{vmatrix}. \quad (34.15)$$

Свойства введенных матриц (проверяемые непосредственно):

$$\beta^2 = \alpha_1^2 = \alpha_2^2 = \alpha_3^2 = 1; \quad (34.16)$$

$$\begin{aligned} \beta\alpha_1 + \alpha_1\beta &= 0, & \beta\alpha_2 + \alpha_2\beta &= 0, & \beta\alpha_3 + \alpha_3\beta &= 0, \\ \alpha_1\alpha_2 + \alpha_2\alpha_1 &= 0, & \alpha_2\alpha_3 + \alpha_3\alpha_2 &= 0, & \alpha_3\alpha_1 + \alpha_1\alpha_3 &= 0, \end{aligned} \quad (34.17)$$

т. е.

Квадраты матриц  $\beta$  и  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$  равны единичным матрицам; матрица  $\beta$  и все матрицы  $\alpha$  антикоммутируют друг с другом; матрица  $\beta$  и все матрицы  $\alpha$  эрмитовы. (34.18)

Можно показать, что физические следствия, вытекающие из уравнения (34.13), не зависят от способа выбора системы матриц  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$  и  $\beta$ , имеющих в частном случае вид (34.15) и (34.10). Иными словами, все следствия, вытекающие из теории, останутся прежними при переходе к другой системе  $4 \times 4$ -матриц, если только матрицы новой системы также имеют свойства (34.18). В частности, с помощью унитарного преобразования можно прийти к такому представлению, в котором прежние четыре матрицы поменяются ролями. Таким образом, их различие является лишь кажущимся.

Рекомендуется проверить, что собственные значения каждой из матриц

$$\gamma_4 = \beta, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3 \quad (34.19)$$

равны  $+1$  и  $-1$ , причем оба эти значения дважды вырождены.

Уравнение (34.13) можно записать в виде

$$\hat{H}\psi = E\psi, \quad (34.20)$$

где

$$\text{Оператор } \hat{H} \text{ должен, очевидно, интерпретироваться как гамильтониан: } \hat{H} = mc^2\beta - c\alpha p. \quad (34.21)$$

(13) is written also

(20) ~~(18)~~  $E\psi = H\psi$

(21) ~~(18)~~  $\left\{ \begin{array}{l} H = \text{hamiltonian} \\ H = mc^2\beta + c\vec{\alpha}\cdot\vec{p} \end{array} \right.$

Time indep. equation for  $\psi = \begin{vmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{vmatrix}$

(22) ~~(18)~~  $\left\{ \begin{array}{l} E\psi_1 = mc^2\psi_1 + \frac{c\hbar}{i} \left\{ \frac{\partial\psi_4}{\partial x} - i\frac{\partial\psi_4}{\partial y} + \frac{\partial\psi_3}{\partial z} \right\} \\ E\psi_2 = mc^2\psi_2 + \frac{c\hbar}{i} \left\{ \frac{\partial\psi_3}{\partial x} + i\frac{\partial\psi_3}{\partial y} - \frac{\partial\psi_4}{\partial z} \right\} \\ E\psi_3 = -mc^2\psi_3 + \frac{c\hbar}{i} \left\{ \frac{\partial\psi_2}{\partial x} - i\frac{\partial\psi_2}{\partial y} + \frac{\partial\psi_1}{\partial z} \right\} \\ E\psi_4 = -mc^2\psi_4 + \frac{c\hbar}{i} \left\{ \frac{\partial\psi_1}{\partial x} + i\frac{\partial\psi_1}{\partial y} - \frac{\partial\psi_2}{\partial z} \right\} \end{array} \right.$

also time dep. Sch. eq by  $E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$

Plane wave solution. Take

(23) ~~(18)~~  $\psi = \begin{vmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{vmatrix} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}}$  ( $\vec{p}$  now a numerical vector)

$u_1, u_2, u_3, u_4$  are constants.

Substitute in ~~(18)~~ (22) (Divide by common exp. factor)

(24)  $\left\{ \begin{array}{l} Eu_1 = mc^2 u_1 + c(p_x - i p_y) u_4 + c p_z u_3 \\ Eu_2 = mc^2 u_2 + c(p_x + i p_y) u_3 - c p_z u_4 \\ Eu_3 = -mc^2 u_3 + c(p_x - i p_y) u_2 + c p_z u_1 \\ Eu_4 = -mc^2 u_4 + c(p_x + i p_y) u_1 - c p_z u_2 \end{array} \right.$

Four homog. linear eq. for  $u_1, u_2, u_3, u_4$ .

Require  $\det = 0$ . One finds e.v.'s of  $E$

(25)  $E = +\sqrt{m^2 c^4 + c^2 p^2}$  twice and  $E = -\sqrt{m^2 c^4 + c^2 p^2}$  twice

Не зависящее от времени уравнение Шредингера для спинорной волновой функции

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$$

распадается на четыре „зацепляющихся“ уравнения

$$\begin{aligned} E\psi_1 &= mc^2\psi_1 + \frac{c\hbar}{i} \left\{ \frac{\partial\psi_4}{\partial x} - i \frac{\partial\psi_4}{\partial y} + \frac{\partial\psi_3}{\partial z} \right\}, \\ E\psi_2 &= mc^2\psi_2 + \frac{c\hbar}{i} \left\{ \frac{\partial\psi_3}{\partial x} + i \frac{\partial\psi_3}{\partial y} - \frac{\partial\psi_4}{\partial z} \right\}, \\ E\psi_3 &= -mc^2\psi_3 + \frac{c\hbar}{i} \left\{ \frac{\partial\psi_2}{\partial x} - i \frac{\partial\psi_2}{\partial y} + \frac{\partial\psi_1}{\partial z} \right\}, \\ E\psi_4 &= -mc^2\psi_4 + \frac{c\hbar}{i} \left\{ \frac{\partial\psi_1}{\partial x} + i \frac{\partial\psi_1}{\partial y} - \frac{\partial\psi_2}{\partial z} \right\}. \end{aligned} \quad (34.22)$$

Нетрудно записать также уравнение Шредингера с зависимостью от времени, воспользовавшись заменой

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}.$$

**Решение с плоской волной.** Волновая функция свободного электрона должна, очевидно, представлять собой плоскую волну:

$$\psi = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}}, \quad (34.23)$$

где спинорные компоненты  $u_1, u_2, u_3, u_4$  постоянны, а компоненты вектора  $\mathbf{p}$  — просто числа.

Подставим функцию (34.23) в уравнение (34.22); разделив левую и правую части на общий множитель  $e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}}$ , получим систему алгебраических уравнений

$$\begin{aligned} Eu_1 &= mc^2u_1 + c(p_x - ip_y)u_4 + cp_zu_3, \\ Eu_2 &= mc^2u_2 + c(p_x + ip_y)u_3 - cp_zu_4, \\ Eu_3 &= -mc^2u_3 + c(p_x - ip_y)u_2 + cp_zu_1, \\ Eu_4 &= -mc^2u_4 + c(p_x + ip_y)u_1 - cp_zu_2, \end{aligned} \quad (34.24)$$

однородную относительно четырех неизвестных постоянных  $u_i$ . Такая система имеет решения, только если детерминант из коэффициентов при неизвестных равен нулю. Детерминант (34.24) приводится к виду

$$(E^2 - m^2c^4 - c^2p^2)^2,$$



For each  $\vec{p}$ ,  $E$  has twice the value  $E = \sqrt{m^2 c^4 + c^2 p^2}$  but also twice the negative value  $E = -\sqrt{m^2 c^4 + c^2 p^2}$  (Comments)

A set of  $4$  orthogonal <sup>normalized</sup> spinors  $u$  is

$$(26) \left\{ \begin{array}{l} \text{For } E = +\sqrt{m^2 c^4 + c^2 p^2} = R \\ u^{(1)} = \sqrt{\frac{mc^2 + R}{2R}} \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{c p_x}{mc^2 + R} \\ \frac{c(p_x + i p_y)}{mc^2 + R} \end{vmatrix} \quad \text{or} \quad u^{(2)} = \sqrt{\frac{mc^2 + R}{2R}} \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{c(p_x - i p_y)}{mc^2 + R} \\ \frac{-c p_y}{mc^2 + R} \end{vmatrix} \end{array} \right.$$

$$(27) \left\{ \begin{array}{l} \text{For } E = -R = -\sqrt{m^2 c^4 + c^2 p^2} \\ u^{(3)} = \sqrt{\frac{R - mc^2}{2R}} \begin{vmatrix} \frac{c p_x}{R - mc^2} \\ \frac{c(p_x + i p_y)}{R - mc^2} \\ 1 \\ 0 \end{vmatrix} \quad \text{or} \quad u^{(4)} = \sqrt{\frac{R - mc^2}{2R}} \begin{vmatrix} \frac{c(p_x - i p_y)}{R - mc^2} \\ \frac{-c p_y}{R - mc^2} \\ 0 \\ 1 \end{vmatrix} \end{array} \right.$$

Observe: for  $|p| < mc$  the third & fourth components of the positive energy solutions  $u^{(1)} + u^{(2)}$  are very small and the first and second component of the neg. en. solutions  $u^{(3)} + u^{(4)}$  are very small (of order  $p/mc$ )

откуда следуют дважды вырожденные собственные значения  $E$ :

$$\begin{aligned} E &= +\sqrt{m^2c^4 + c^2p^2}, \\ E &= -\sqrt{m^2c^4 + c^2p^2}. \end{aligned} \quad (34.25)$$

Таким образом, каждому данному значению импульса  $p$  соответствует дважды вырожденное значение  $E = +\sqrt{m^2c^4 + c^2p^2}$  и дважды вырожденное значение  $E = -\sqrt{m^2c^4 + c^2p^2}$ .

Вырождение собственных значений энергии (34.25) следует интерпретировать как независимость энергии электрона от ориентации его спина, проекция которого на выделенную ось может принимать именно два значения ( $\pm \hbar/2$ ). Что же касается знака энергии, то его смысл гораздо глубже, чем просто факт неоднозначности при извлечении квадратного корня: два знака энергии отражают соответствие электрону его античастицы — позитрона, как это будет показано в дальнейшем.

Систему четырех ортонормированных спиноров  $u_i$  можно выбрать в виде

$$u^{(1)} = \sqrt{\frac{mc^2 + R}{2R}} \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{cp_z}{mc^2 + R} \\ \frac{c(p_x + ip_y)}{mc^2 + R} \end{vmatrix}, \quad u^{(2)} = \sqrt{\frac{mc^2 + R}{2R}} \begin{vmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{c(p_x - ip_y)}{mc^2 + R} \\ \frac{-cp_z}{mc^2 + R} \end{vmatrix} \quad (34.26)$$

для  $E = +\sqrt{m^2c^4 + c^2p^2} = +R$ ;

$$u^{(3)} = \sqrt{\frac{R - mc^2}{2R}} \begin{vmatrix} \frac{cp_z}{R - mc^2} \\ \frac{c(p_x + ip_y)}{R - mc^2} \\ 1 \\ 0 \end{vmatrix}, \quad u^{(4)} = \sqrt{\frac{R - mc^2}{2R}} \begin{vmatrix} \frac{c(p_x - ip_y)}{R - mc^2} \\ \frac{-cp_z}{R - mc^2} \\ 0 \\ 1 \end{vmatrix} \quad (34.27)$$

для  $E = -\sqrt{m^2c^4 + c^2p^2} = -R$ .

**Замечание.** В нерелятивистском пределе (при  $|p| < mc$ ) третья и четвертая компоненты решений  $u^{(1)}$  и  $u^{(2)}$  с положительной энергией, а также первая и вторая компоненты решений  $u^{(3)}$  и  $u^{(4)}$  с отрицательной энергией очень малы и имеют порядок  $p/mc$ .

Meaning of neg. + pos. energy levels.

The Dirac sea - Vacuum state

Positrons as holes.

(28)

Mom + energy of the positron are  $(-\vec{p} + -\vec{E})$  of the "hole" state.

$u^{(1)} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}}, u^{(2)} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}}$

electron states (spin up + down)  
(mom. =  $\vec{p}$ , energy =  $+\sqrt{m^2 c^4 + c^2 p^2}$ )

(29)  $\left\{ \begin{array}{l} u^{(3)} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} \\ u^{(4)} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} \end{array} \right\}$  are positron states with  
momentum =  $-\vec{p}$ , energy =  $+\sqrt{m^2 c^4 + c^2 p^2}$

given.  $\psi = u e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}}$  ( $u = 4$  component spinor)

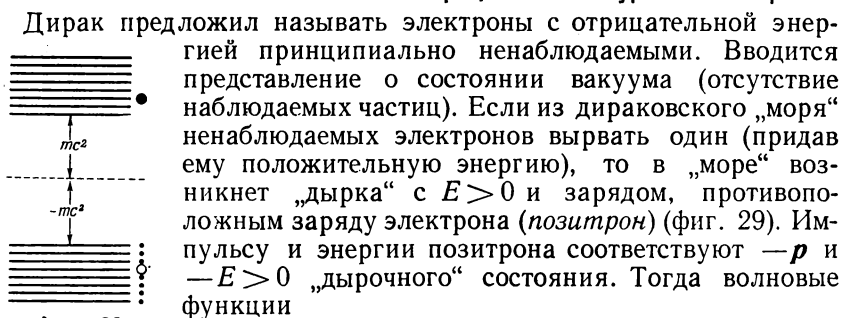
it is important to have two operators  $P$  &  $N$  (projection operators) such that  $P\psi$  contains only electron wave fcts,  $N\psi$  contains only neg. energy wave fcts (positron states).  $P, N$

(30)  $\left\{ \begin{array}{l} \text{are spinor operators defined by } P u^{(1)} = u^{(1)}, \\ P u^{(2)} = u^{(2)}, P u^{(3)} = 0, P u^{(4)} = 0 \text{ and} \end{array} \right.$

(31)  $N u^{(1)} = 0, N u^{(2)} = 0, N u^{(3)} = u^{(3)}, N u^{(4)} = u^{(4)}$

These properties define uniquely  $P$  &  $N$

### Смысл положительных и отрицательных уровней энергии\*.



Фиг. 29.

$$\begin{aligned} u^{(1)} e^{\frac{i}{\hbar} p \cdot x} & \text{ описывают электронные состояния с ориентацией} \\ u^{(2)} e^{\frac{i}{\hbar} p \cdot x} & \text{ спина „вверх“ и „вниз“} \end{aligned} \quad (34.28)$$

с импульсом  $\mathbf{p}$  и энергией  $+\sqrt{m^2 c^4 + c^2 \mathbf{p}^2}$ , а волновые функции

$$\begin{aligned} u^{(3)} e^{-\frac{i}{\hbar} p \cdot x} & \text{ описывают позитронные состояния с ориентацией} \\ u^{(4)} e^{-\frac{i}{\hbar} p \cdot x} & \text{ спина „вверх“ и „вниз“} \end{aligned} \quad (34.29)$$

с импульсом  $-\mathbf{p}$  и энергией  $-\sqrt{m^2 c^4 + c^2 \mathbf{p}^2}$ .

Если задана функция

$$\psi = u e^{\frac{i}{\hbar} p \cdot x},$$

где  $u$  — четырехкомпонентный спинор, то полезно сконструировать также два оператора  $\hat{\mathcal{P}}$  и  $\hat{\mathcal{N}}$  — операторы проектирования — так, чтобы произведение  $\hat{\mathcal{P}}\psi$  содержало только обычные электронные волновые функции, а  $\hat{\mathcal{N}}\psi$  — только электронные волновые функции отрицательной энергии, соответствующие позитронным состояниям.

Операторы проектирования спиноров  $\hat{\mathcal{P}}$  и  $\hat{\mathcal{N}}$  определяются равенствами

$$\hat{\mathcal{P}}u^{(1)} = u^{(1)}, \quad \hat{\mathcal{P}}u^{(2)} = u^{(2)}, \quad \hat{\mathcal{P}}u^{(3)} = 0, \quad \hat{\mathcal{P}}u^{(4)} = 0; \quad (34.30)$$

$$\hat{\mathcal{N}}u^{(1)} = 0, \quad \hat{\mathcal{N}}u^{(2)} = 0, \quad \hat{\mathcal{N}}u^{(3)} = u^{(3)}, \quad \hat{\mathcal{N}}u^{(4)} = u^{(4)}. \quad (34.31)$$

Эти свойства однозначно определяют вид операторов  $\hat{\mathcal{P}}$  и  $\hat{\mathcal{N}}$ . Заметим, что

$$\hat{H}u^{(1)} = Ru^{(1)}, \quad \hat{H}u^{(2)} = Ru^{(2)}, \quad \hat{H}u^{(3)} = -Ru^{(3)}, \quad \hat{H}u^{(4)} = -Ru^{(4)},$$

где

$$R = +\sqrt{m^2 c^4 + c^2 \mathbf{p}^2}.$$

Observe:  $H u^{(1)} = R u^{(1)}$ ,  $H u^{(2)} = R u^{(2)}$ ,  $H u^{(3)} = R u^{(3)}$

$$H u^{(4)} = -R u^{(4)}$$

with

$$R = +\sqrt{m^2 c^4 + c^2 p^2} \quad (\vec{p} \text{ here a } c\text{-vector})$$

and  $H$  from (21). Then

$$(32) \quad \mathcal{P} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2R} H \quad ; \quad \mathcal{N} = \frac{1}{2} - \frac{1}{2R} H$$

Angular momentum. From (21)

$$(33) \quad [H, x p_y - y p_x] = \frac{\hbar c}{i} (\alpha_1 p_y - \alpha_2 p_x) \neq 0$$

Therefore  $x p_y - y p_x$  not a time constant for free Dirac electron. However

$$(34) \quad x p_y - y p_x + \frac{1}{2} \frac{\hbar}{i} \alpha_1 \alpha_2 = \hbar J_z$$

Commutes with  $H$ . Interpret  $\hbar J_z$  as  $\hbar$  component of ang. mom.

$$(35) \quad \hbar \vec{J} = \underbrace{\vec{x} \times \vec{p}}_{\text{orbital part}} + \underbrace{\frac{\hbar}{2i} \begin{pmatrix} \alpha_2 \alpha_3 \\ \alpha_3 \alpha_1 \\ \alpha_1 \alpha_2 \end{pmatrix}}_{\text{spin part}} = \vec{x} \times \vec{p} + \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$$

with

$$(36) \quad \frac{\sigma_z}{2} = \frac{1}{2} \alpha_2 \alpha_3 = \begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{vmatrix} \quad ; \quad \frac{1}{2} \alpha_3 \alpha_1 = \begin{vmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{vmatrix} \quad ; \quad \frac{1}{2} \alpha_1 \alpha_2 = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}$$

Observe analogy with Pauli operators  $\vec{\sigma} + \vec{\sigma}'$

Здесь  $\mathbf{p}$  есть  $c$ -вектор (т. е. вектор, все компоненты которого  $c$ -числа), а  $\hat{H}$  — гамильтониан (34.21). Тогда

$$\hat{\mathcal{P}} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2R} \hat{H}, \quad \hat{\mathcal{N}} = \frac{1}{2} - \frac{1}{2R} \hat{H}. \quad (34.32)$$

**Момент импульса электрона.** Особый интерес представляет метод введения момента импульса электрона. Используя гамильтониан (34.21), можно записать

$$[\hat{H}, \hat{x} \hat{p}_y - \hat{y} \hat{p}_x] = \frac{\hbar c}{i} (\hat{\alpha}_1 \hat{p}_y - \hat{\alpha}_2 \hat{p}_x) \neq 0; \quad (34.33)$$

следовательно, для свободного дираковского электрона обычная комбинация  $\hat{x} \hat{p}_y - \hat{y} \hat{p}_x$  не постоянна во времени. Однако легко проверить, что величина

$$\hat{x} \hat{p}_y - \hat{y} \hat{p}_x + \frac{1}{2} \frac{\hbar}{i} \hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_2 \equiv \hbar \hat{J}_z \quad (34.34)$$

коммутирует с гамильтонианом  $H$ . Поэтому ее следует интерпретировать как компоненту вектора момента импульса. Оператор же вектора момента может быть тогда записан в виде

$$\hbar \mathbf{J} = \mathbf{x} \times \mathbf{p} + \frac{\hbar}{2i} \left\{ \begin{array}{l} \alpha_2 \cdot \alpha_3 \\ \alpha_3 \cdot \alpha_1 \\ \alpha_1 \cdot \alpha_2 \end{array} \right\} = \mathbf{x} \times \mathbf{p} + \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}', \quad (34.35)$$

где первый член справа представляет собой орбитальную часть момента, а второй — спиновую часть, описываемую матрицами

$$\left. \begin{aligned} \hat{\sigma}'_x &= \frac{1}{i} \hat{\alpha}_2 \cdot \hat{\alpha}_3 = \begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{vmatrix}, \\ \hat{\sigma}'_y &= \frac{1}{i} \hat{\alpha}_3 \cdot \hat{\alpha}_1 = \begin{vmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{vmatrix}, \\ \hat{\sigma}'_z &= \frac{1}{i} \hat{\alpha}_1 \cdot \hat{\alpha}_2 = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}. \end{aligned} \right\} \quad (34.36)$$

Здесь бросается в глаза сходство  $4 \times 4$ -матриц  $\boldsymbol{\sigma}'$  с уже известными  $2 \times 2$ -матрицами Паули  $\boldsymbol{\sigma}$ .

Действительно, можно записать

$$\boldsymbol{\sigma}' = \begin{vmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{vmatrix}, \quad \text{где } 0 = \begin{vmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{vmatrix} \text{ — нулевая } 2 \times 2 \text{-матрица};$$

Действуя матрицей  $\boldsymbol{\sigma}'$  на спинор  $u$ , получим:

$$\boldsymbol{\sigma}' u = \begin{vmatrix} \boldsymbol{\sigma} \cdot \begin{vmatrix} u_1 \\ u_2 \end{vmatrix} \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \begin{vmatrix} u_3 \\ u_4 \end{vmatrix} \end{vmatrix},$$

т. е. операторы спина Паули действуют при этом по отдельности на первую и вторую пары компонент 4-спинора; следовательно, каждой паре компонент могут соответствовать оба значения спина ( $\uparrow$  и  $\downarrow$ ).

### 35-Dirac electron in electromagnetic field

Notation

$$(1) \quad \begin{cases} \vec{A} \equiv (A_1, A_2, A_3) = \text{vector potential} \\ A_4 = i\varphi = (i \times \text{scalar potential}) \\ \underline{A} \equiv (A_1, A_2, A_3, A_4) = 4\text{-vector potential} \end{cases}$$

$$(2) \quad F_{ik} = \frac{\partial A_k}{\partial x_i} - \frac{\partial A_i}{\partial x_k} = \text{antisym. tensor} \\ \text{"electromagnetic field"}$$

$$(3) \quad \begin{cases} (F_{12}, F_{23}, F_{31}) \equiv \vec{B} = \text{magnetic field} \\ (F_{41}, F_{42}, F_{43}) \equiv i\vec{E} \quad (\vec{E} = \text{electric field}) \end{cases}$$

Introduce e.m. field in Dirac equation  
(34-(12) or (20)(21)) by

$$(4) \quad \vec{p} \rightarrow \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \quad E \rightarrow E - e\varphi$$

or equivalents

$$(5) \quad \begin{cases} \underline{p} \rightarrow \underline{p} - \frac{e}{c} \underline{A} \\ \frac{\partial}{\partial x_l} \rightarrow \frac{\partial}{\partial x_l} - \frac{ie}{\hbar c} A_l \quad (l=1, 2, 3, 4) \\ \underline{\nabla} \rightarrow \underline{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c} \underline{A} \end{cases}$$

Find equivalent equations

$$(6) \quad i\hbar c \psi = \gamma \cdot \left( \underline{p} - \frac{e}{c} \underline{A} \right) \psi$$

or

Введем обозначения:

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &\equiv (A_1, A_2, A_3) \text{— векторный потенциал,} \\ \varphi &= \frac{1}{i} A_4 \text{— скалярный потенциал,} \end{aligned} \quad (35.1)$$

$$\begin{aligned} \vec{A} &\equiv (A_1, A_2, A_3, A_4) \text{— четырехмерный потенциал} \\ &\quad \text{электромагнитного поля;} \\ F_{ik} &= \frac{\partial A_k}{\partial x_i} - \frac{\partial A_i}{\partial x_k} \text{— антисимметричный тензор напряженности} \\ &\quad \text{электромагнитного поля;} \end{aligned} \quad (35.2)$$

$$\begin{aligned} (F_{12}, F_{23}, F_{31}) &\equiv \mathbf{B} \text{— индукция магнитного поля;} \\ (F_{41}, F_{42}, F_{43}) &\equiv i\mathbf{E}, \text{ где } \mathbf{E} \text{— напряженность электрического} \\ &\quad \text{поля.} \end{aligned} \quad (35.3)$$

Взаимодействие электронов и позитронов с электромагнитным полем может быть включено в уравнение Дирака (34.12) или (34.20)—(34.21), если воспользоваться заменой

$$\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}, \quad E \rightarrow E - e\varphi, \quad (35.4)$$

( $E$ —полная энергия частицы с зарядом  $e$ ) или эквивалентно

$$\begin{aligned} \vec{p} &\rightarrow \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}, \\ \frac{\partial}{\partial x_l} &\rightarrow \frac{\partial}{\partial x_l} - \frac{ie}{\hbar c} A_l \quad (l=1, 2, 3, 4); \\ \vec{\nabla} &\rightarrow \vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c} \vec{A}. \end{aligned} \quad (35.5)$$

При этом получаются следующие эквивалентные формы уравнения для электрона в электромагнитном поле:

$$imc\psi = \vec{\gamma} \cdot \left( \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) \psi, \quad (35.6)$$



$$(7) \left( \frac{mc}{\hbar} + \gamma \cdot \nabla - \frac{ie}{\hbar c} \mathbf{A} \cdot \gamma \right) \psi = 0$$

or

$$(8) \quad E\psi = H\psi$$

with hamiltonian

$$(9) \quad H = +e\varphi - e\vec{A} \cdot \vec{\alpha} + mc^2\beta + c\vec{\alpha} \cdot \vec{p}$$

(8) is equiv to four eq.us similar to (34-(24))

$$(10) \begin{cases} (E - e\varphi - mc^2)\psi_1 = \frac{c\hbar}{i} \left( \frac{\partial\psi_4}{\partial x} - i \frac{\partial\psi_4}{\partial y} + \frac{\partial\psi_3}{\partial z} \right) - e \{ (A_x - iA_y)\psi_4 + A_z\psi_3 \} \\ (E - e\varphi - mc^2)\psi_2 = \frac{c\hbar}{i} \left( \frac{\partial\psi_3}{\partial x} + i \frac{\partial\psi_3}{\partial y} - \frac{\partial\psi_4}{\partial z} \right) - e \{ (A_x + iA_y)\psi_3 - A_z\psi_4 \} \\ (E - e\varphi + mc^2)\psi_3 = \frac{c\hbar}{i} \left( \frac{\partial\psi_2}{\partial x} - i \frac{\partial\psi_2}{\partial y} + \frac{\partial\psi_1}{\partial z} \right) - e \{ (A_x - iA_y)\psi_2 + A_z\psi_1 \} \\ (E - e\varphi + mc^2)\psi_4 = \frac{c\hbar}{i} \left( \frac{\partial\psi_1}{\partial x} + i \frac{\partial\psi_1}{\partial y} - \frac{\partial\psi_2}{\partial z} \right) - e \{ (A_x + iA_y)\psi_1 - A_z\psi_2 \} \end{cases}$$

Introduce two dichotomic variables

$$(11) \quad u = \begin{vmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{vmatrix} \quad v = \begin{vmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{vmatrix}$$

And the Pauli operators  $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ . (10) becomes

$$(12) \begin{cases} \frac{i}{c\hbar} (E - mc^2 - e\varphi) u = \vec{\sigma} \cdot \left( \vec{\nabla} - \frac{ie}{c\hbar} \vec{A} \right) v \\ \frac{i}{c\hbar} (E + mc^2 - e\varphi) v = \vec{\sigma} \cdot \left( \vec{\nabla} - \frac{ie}{c\hbar} \vec{A} \right) u \end{cases}$$

$$(13) \begin{cases} \frac{1}{c} (E - mc^2 - e\varphi) u = \vec{\sigma} \cdot \left( \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) v \\ \frac{1}{c} (E + mc^2 - e\varphi) v = \vec{\sigma} \cdot \left( \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) u \end{cases}$$

или

$$\left(\frac{mc}{\hbar} + \vec{\gamma} \cdot \vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c} \vec{A} \cdot \vec{\gamma}\right) \psi = 0, \quad (35.7)$$

или, наконец,

$$\hat{H}\psi = E\psi, \quad (35.8)$$

где гамильтониан  $\hat{H}$  есть

$$\hat{H} = e\varphi - e\mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\alpha} + mc^2\beta + c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}. \quad (35.9)$$

Уравнение (35.8) эквивалентно системе четырех уравнений, подобной (34.22):

$$\begin{aligned} (E - e\varphi - mc^2)\psi_1 &= \frac{c\hbar}{i} \left( \frac{\partial\psi_4}{\partial x} - i \frac{\partial\psi_4}{\partial y} + \frac{\partial\psi_3}{\partial z} \right) - \\ &\quad - e \{ (A_x - iA_y)\psi_4 + A_z\psi_3 \}, \\ (E - e\varphi - mc^2)\psi_2 &= \frac{c\hbar}{i} \left( \frac{\partial\psi_3}{\partial x} + i \frac{\partial\psi_3}{\partial y} - \frac{\partial\psi_4}{\partial z} \right) - \\ &\quad - e \{ (A_x + iA_y)\psi_3 - A_z\psi_4 \}, \\ (E - e\varphi + mc^2)\psi_3 &= \frac{c\hbar}{i} \left( \frac{\partial\psi_2}{\partial x} - i \frac{\partial\psi_2}{\partial y} + \frac{\partial\psi_1}{\partial z} \right) - \\ &\quad - e \{ (A_x - iA_y)\psi_2 + A_z\psi_1 \}, \\ (E - e\varphi + mc^2)\psi_4 &= \frac{c\hbar}{i} \left( \frac{\partial\psi_1}{\partial x} + i \frac{\partial\psi_1}{\partial y} - \frac{\partial\psi_2}{\partial z} \right) - \\ &\quad - e \{ (A_x + iA_y)\psi_1 - A_z\psi_2 \}. \end{aligned} \quad (35.10)$$

Введем две двухкомпонентные переменные

$$u = \begin{vmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{vmatrix}, \quad v = \begin{vmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{vmatrix} \quad (35.11)$$

и спинные операторы Паули

$$\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z).$$

Тогда уравнения (35.10) примут вид

$$\frac{i}{c\hbar} (E - mc^2 - e\varphi) u = \boldsymbol{\sigma} \cdot \left( \nabla - \frac{ie}{c\hbar} \mathbf{A} \right) v, \quad (35.12)$$

$$\frac{i}{c\hbar} (E + mc^2 - e\varphi) v = \boldsymbol{\sigma} \cdot \left( \nabla - \frac{ie}{c\hbar} \mathbf{A} \right) u,$$

$$\frac{1}{c} (E - mc^2 - e\varphi) u = \boldsymbol{\sigma} \cdot \left( \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) v, \quad (35.13)$$

$$\frac{1}{c} (E + mc^2 - e\varphi) v = \boldsymbol{\sigma} \cdot \left( \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) u.$$



Исключим из уравнений (35.13) переменную  $v$ , используя операцию квадрирования\*:

$$\begin{aligned} \frac{1}{c^2} (E + mc^2 - e\varphi) (E - mc^2 - e\varphi) u &= \frac{1}{c^2} \{ (E - e\varphi)^2 - m^2 c^4 \} u = \\ &= \frac{1}{c} (E + mc^2 - e\varphi) \sigma \cdot \left( \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) v = \\ &= \left\{ \left( \sigma \cdot \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \frac{E + mc^2 - e\varphi}{c} - \frac{e}{c^2} \sigma \cdot [E, \mathbf{A}] - \frac{e}{c} \sigma \cdot [\varphi, \mathbf{p}] \right\} v = \\ &= \left[ \sigma \cdot \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right]^2 u + \left( \frac{e\hbar}{ic^2} \sigma \cdot \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \frac{e\hbar}{ic} \sigma \cdot \nabla \varphi \right) v = \\ &= \left( \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 u + i\sigma \cdot \left[ \left( \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \times \left( \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \right] u - \frac{e\hbar}{ic} (\sigma \cdot \mathbf{E}) v; \end{aligned}$$

здесь  $\mathbf{E} = -\nabla\varphi - (1/c)(\partial\mathbf{A}/\partial t)$  — вектор электрической напряженности. Если теперь принять во внимание, что

$$\begin{aligned} \left[ \left( \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \times \left( \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \right] &= -\frac{e}{c} (\mathbf{p} \times \mathbf{A} + \mathbf{A} \times \mathbf{p}), \\ \mathbf{p} \times \mathbf{A} &= \left( \frac{\hbar}{i} \nabla \times \mathbf{A} - \mathbf{A} \times \mathbf{p} \right), \end{aligned}$$

то получим окончательно:

$$\begin{aligned} \left\{ \frac{(E - e\varphi)^2}{c^2} - m^2 c^2 - \left( \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 \right\} u &= \\ &= -\frac{e\hbar}{c} (\mathbf{B} \cdot \sigma) u - \frac{e\hbar}{ic} (\sigma \cdot \mathbf{E}) v, \end{aligned} \quad (35.14)$$

где  $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$  — вектор магнитной индукции. Только левая часть этого уравнения приводит к уравнению Клейна — Гордона; правая дает искомые поправки к нему. Пренебрегая в дальнейшем членами порядка  $1/c^3$ , приведем выражение для энергии к виду

$$E = mc^2 + W, \quad (35.15)$$

где  $W$  — кинетическая энергия. Тогда из второго уравнения (35.13) в наинизшем приближении следует:

$$v \approx \frac{1}{2mc} \sigma \cdot \mathbf{p} u. \quad (35.16)$$

Это выражение достаточно точно с точки зрения его подстановки в уравнение (35.14), так как дает в нем порядок  $1/c^2$ .

Используя равенство

$$(\sigma \cdot \mathbf{E})(\sigma \cdot \mathbf{p}) = \mathbf{E} \cdot \mathbf{p} + i\sigma \cdot \mathbf{E} \times \mathbf{p},$$

приведем уравнение (35.14) к виду

$$W u = \hat{\mathcal{H}} u, \quad (35.17)$$

где  $\hat{\mathcal{H}}$  — приближенный гамильтониан

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}} &= \frac{1}{2m} \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + e\varphi - \\ &\quad - \frac{e\hbar}{4im^2c^2} (\mathbf{E} \cdot \mathbf{p}) - \frac{e\hbar}{4m^2c^2} \sigma \cdot \mathbf{E} \times \mathbf{p} - \frac{e\hbar}{2mc} \mathbf{B} \cdot \sigma. \end{aligned} \quad (35.18)$$

First two terms are classical hamiltonian.  
 Next two terms are spin independent relativistic corrections, The interesting terms are the last two:

$$(19) \quad -\frac{e\hbar}{2mc} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}$$

Is energy of mag. mom  $\frac{e\hbar}{2mc} \vec{\sigma} = \mu_B \vec{\sigma}$   
 in mag. field  $\underline{B}$ .

$$(20) \quad -\frac{e\hbar}{4mc^2} \vec{\sigma} \cdot \vec{\ell} \times \vec{p}$$

is the mutual energy of  $\mu_B \vec{\sigma}$  in apparent  
 magn. field  $\vec{\ell} \times \frac{\vec{v}}{c} \approx \frac{1}{mc} \vec{\ell} \times \vec{p}$  divided  
 by 2 (Thomas correction) see Lect. 26

Первые два члена (35.18) представляют собой классический гамильтониан заряженной частицы, находящейся в электромагнитном поле. Следующий член — не зависящая от спина релятивистская поправка. Интересны, однако, лишь последние два слагаемых; одно из них равно

$$-\frac{e\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{B} \quad (35.19)$$

и имеет смысл энергии взаимодействия спинового магнитного момента электрона

$$\left(\frac{e\hbar}{2mc}\right)\boldsymbol{\sigma}=\mu_0\boldsymbol{\sigma}$$

с внешним магнитным полем  $\mathbf{B}$ ; другое слагаемое

$$-\frac{e\hbar}{4m^2c^2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{E}\times\mathbf{p} \quad (35.20)$$

представляет собой энергию взаимодействия спинового магнитного момента электрона  $\mu_0\boldsymbol{\sigma}$  с эффективным магнитным полем:

$$\mathbf{B}=\frac{1}{c}\mathbf{E}\times\mathbf{v}\approx\frac{1}{mc}\mathbf{E}\times\mathbf{p},$$

уже автоматически уменьшенную в два раза (поправка Томаса; см. лекцию 26).

36 - Dirac Electron in Central field - Hydrogen atom

Assume

$$(1) \quad \varphi = \varphi(r) \quad \vec{A} = 0$$

(26-(9))  $\rightarrow$

$$(2) \quad H = -e \varphi(r) + mc^2 \beta + c \vec{\alpha} \cdot \vec{p}$$

(26-(13))  $\rightarrow$

$$(3) \quad \begin{cases} \frac{1}{c} (E - mc^2 + e\varphi) u = \vec{\sigma} \cdot \vec{p} v \\ \frac{1}{c} (E + mc^2 + e\varphi) v = \vec{\sigma} \cdot \vec{p} u \end{cases}$$

Aug. mom (34-(35))

$$(4) \quad \vec{J} = \vec{r} \times \vec{p} + \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$$

Commutes with  $H$ , Take then

$$(5) \quad \begin{cases} \vec{J}^2 = j(j+1) & \text{and} \\ J_z = m & -j \leq m \leq j \end{cases}$$

diagonal

Observe  $\vec{\sigma}$  has same commutation properties of  $\vec{\sigma}$

$$(6) \quad \sigma_x'^2 = \sigma_y'^2 = \sigma_z'^2 = 1 \quad \vec{\sigma}' \times \vec{\sigma}' = 2i \vec{\sigma}'$$

Then from (4) + (5) allowable values of  $\vec{l}, l_z$  are

$$(7) \quad l = j \pm \frac{1}{2} \quad \& \quad l_z = m \pm \frac{1}{2}$$

From (3) follows (because  $\vec{\sigma} \cdot \vec{p}$  is a pseudoscalar) that  $u, v$  have opposite parity. From this

Formulas written for electron of charge  $-e$

Для описания центрально-симметричного электрического поля достаточно в формулах предыдущей лекции положить

$$\varphi = \varphi(r), \quad A = 0, \quad (36.1)$$

где  $r$  — радиальная координата сферической системы координат. Гамильтониан для электрона с зарядом  $-e$ , находящегося в центрально-симметричном поле [ср. с (35.9)], имеет вид

$$\hat{H} = -e\varphi(r) + mc^2\beta + c\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}}. \quad (36.2)$$

Уравнения (35.13) в этом случае переписываются следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{1}{c}(E - mc^2 + e\varphi)u &= \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}v, \\ \frac{1}{c}(E + mc^2 + e\varphi)v &= \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}u. \end{aligned} \quad (36.3)$$

Момент (34.35)

$$\hbar \hat{\mathbf{J}} = \mathbf{x} \times \hat{\mathbf{p}} + \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}' \quad (36.4)$$

коммутирует с гамильтонианом  $\hat{H}$  (36.2), так как имеет место симметрия относительно поворотов около центра.

Диагонализирова операторы  $\hat{J}^2$  и  $\hat{J}_z$ , необходимо принять

$$\mathbf{J}^2 = j(j+1), \quad J_z = m, \quad -j \leq m \leq +j. \quad (36.5)$$

Заметим, что матрица  $\boldsymbol{\sigma}'$  подчиняется тем же перестановочным соотношениям, что и  $\boldsymbol{\sigma}$ , так что

$$\begin{aligned} \sigma_x'^2 &= \sigma_y'^2 = \sigma_z'^2 = 1, \\ \boldsymbol{\sigma}' \times \boldsymbol{\sigma}' &= 2i\boldsymbol{\sigma}'. \end{aligned} \quad (36.6)^*$$

Тогда уравнения (36.4) и (36.5) дают допустимые значения чисел  $l$  и  $l_z$ :

$$l = j \pm \frac{1}{2}, \quad l_z = m \pm \frac{1}{2}. \quad (36.7)$$

Из уравнений (36.3) и псевдоскалярных свойств произведения  $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})$  следует, что спиноры  $u$  и  $v$  обладают противоположными четностями. Это обстоятельство приводит к следующим двум типам решений [ср. с (34.26) и (34.27)]:



As an expression find as on p. 26-5 two types of solutions.

First type ( $l = j - \frac{1}{2}$ )

$$(8) \begin{cases} u = \frac{R(r)}{\sqrt{2j}} \begin{vmatrix} \sqrt{j+m} Y_{j-\frac{1}{2}, m-\frac{1}{2}} \\ \sqrt{j-m} Y_{j-\frac{1}{2}, m+\frac{1}{2}} \end{vmatrix} & \begin{matrix} \leftarrow 1st \\ \leftarrow 2nd \end{matrix} \\ v = \frac{iS(r)}{\sqrt{2(j+1)}} \begin{vmatrix} \sqrt{j+1-m} Y_{j+\frac{1}{2}, m-\frac{1}{2}} \\ \sqrt{j+1+m} Y_{j+\frac{1}{2}, m+\frac{1}{2}} \end{vmatrix} & \begin{matrix} \leftarrow 3rd \\ \leftarrow 4th \end{matrix} \end{cases} \left. \begin{matrix} \\ \\ \end{matrix} \right\} \text{Linear components}$$

$= R(r) Z_{j, j-\frac{1}{2}, m}$   
 $= iS(r) Z_{j, j+\frac{1}{2}, m}$

Properties of the  $Z_{j, j \pm \frac{1}{2}, m}$  *dicotomic functions*

These functions play the role of the spherical harmonics for problems with spin. They all have  $l = j \pm \frac{1}{2}$ .

$$(9) (\vec{\sigma} \cdot \vec{x}) (f(r) Z_{j, j \pm \frac{1}{2}, m}) = r f(r) Z_{j, j \mp \frac{1}{2}, m}$$

$$(10) (\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) (f(r) Z_{j, j \pm \frac{1}{2}, m}) = \frac{\hbar}{i} \left( f'(r) + (1 \pm j \pm \frac{1}{2}) \frac{f}{r} \right) Z_{j, j \mp \frac{1}{2}, m}$$

Substituting (8) in (3)

$$(11) \begin{cases} \frac{1}{\hbar c} (E - mc^2 + e\varphi) R(r) = S'(r) + (j + \frac{3}{2}) S(r)/r \\ \frac{1}{\hbar c} (E + mc^2 + e\varphi) S(r) = -R'(r) + (j - \frac{1}{2}) R(r)/r \end{cases}$$

Первый тип ( $l=j-1/2$ ). Волновая функция  $\psi$  имеет две матричные компоненты  $u$  и  $v$

$$\begin{aligned}
 u &= \frac{R(r)}{\sqrt{2j}} \begin{vmatrix} \sqrt{j+m} Y_{j-1/2, m-1/2} \\ \sqrt{j-m} Y_{j-1/2, m+1/2} \end{vmatrix} \begin{array}{l} \text{1-я компонента} \\ \text{по Дираку} \\ \equiv R(r) Z_{j, j-1/2, m} \\ \text{2-я компонента} \\ \text{по Дираку} \end{array} \\
 v &= \frac{iS(r)}{\sqrt{2(j+1)}} \begin{vmatrix} \sqrt{j+1-m} Y_{j+1/2, m-1/2} \\ -\sqrt{j+1+m} Y_{j+1/2, m+1/2} \end{vmatrix} \begin{array}{l} \text{3-я компонента} \\ \text{по Дираку} \\ \equiv iS(r) Z_{j, j+1/2, m} \\ \text{4-я компонента} \\ \text{по Дираку} \end{array}
 \end{aligned} \quad (36.8)$$

Здесь двухкомпонентные функции  $Z_{j, j\pm 1/2, m}$  играют роль сферических функций при решении задач с учетом спина. Заметим, что для них  $l=j\pm 1/2$ . При подстановке их в волновое уравнение (36.3) с учетом соотношений

$$(\sigma \cdot x)(f(r) Z_{j, j\pm 1/2, m}) = rf(r) Z_{j, j\mp 1/2, m}, \quad (36.9)$$

$$\begin{aligned}
 &(\sigma \cdot p)(f(r) Z_{j, j\pm 1/2, m}) = \\
 &= \frac{\hbar}{i} \left( f'(r) + \left( 1 \pm j \pm \frac{1}{2} \right) \frac{f(r)}{r} \right) Z_{j, j\mp 1/2, m}
 \end{aligned} \quad (36.10)$$

получим систему уравнений для определения  $R(r)$  и  $S(r)$ :

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{\hbar c} (E - mc^2 + e\varphi) R(r) &= S'(r) + \left( j + \frac{3}{2} \right) \frac{S(r)}{r}, \\
 \frac{1}{\hbar c} (E + mc^2 + e\varphi) S(r) &= -R'(r) + \left( j - \frac{1}{2} \right) \frac{R(r)}{r}.
 \end{aligned} \quad (36.11)$$

The two first order eqns (11) are the equivalent of the single non relativistic radial eqn of the second order. In this solution ~~the~~

$$\begin{array}{l} R \text{ large} \\ S \text{ small} \end{array} \quad l = j - \frac{1}{2}$$

Another type solution has  $l = j + \frac{1}{2}$ . For it (8) & (11) are instead

Q Second type ( $l = j + \frac{1}{2}$ )

$$(12) \quad \begin{cases} u = R(r) Z_{j, j+\frac{1}{2}, m} \\ v = -i S Z_{j, j-\frac{1}{2}, m} \end{cases}$$

And the two coupled radial equations are instead of (11)

$$(13) \quad \begin{cases} \frac{E - mc^2 + e\varphi}{\hbar c} R = -S' + (j - \frac{1}{2}) S/r \\ \frac{E + mc^2 + e\varphi}{\hbar c} S = R' + (j + \frac{3}{2}) R/r \end{cases}$$

For the Coulomb potential  $e\varphi = \frac{Ze^2}{r}$

(11) + (13) can be solved exactly (See Schiff Sect. 44)

Полученные два уравнения первого порядка соответствуют одному нерелятивистскому радиальному уравнению второго порядка. Вспоминая, что в рассматриваемом случае  $l = j - \frac{1}{2}$ , найдем в нерелятивистском пределе, что функция  $R(r)$  принимает большие, а функция  $S(r)$  — малые значения.

**Второй тип ( $l = j + 1/2$ ).** В этом случае

$$\begin{aligned} u &= R(r) Z_{j, j+1/2, m}, \\ v &= -iS(r) Z_{j, j-1/2, m}, \end{aligned} \quad (36.12)$$

т. е. сферические спинорные функции меняются в равенствах (36.8) местами и изменяется знак получившейся при этом функции  $v$ . Вместо уравнений (36.11) получим теперь два новых „зацепляющихся“ уравнения:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hbar c} (E - mc^2 + e\varphi) R(r) &= -S'(r) + \left(j - \frac{1}{2}\right) \frac{S(r)}{r}, \\ \frac{1}{\hbar c} (E + mc^2 + e\varphi) S(r) &= R' + \left(j + \frac{3}{2}\right) \frac{R(r)}{r}. \end{aligned} \quad (36.13)$$

*В случае кулоновского потенциала*

$$e\varphi = \frac{Ze^2}{r}$$

уравнения (36.11) и (36.13) могут быть решены точно (см. у Шиффа, § 44).

For example: ground state of hydrogen-like atom  
 $j = \frac{1}{2}$ ,  $l = 0$  (the first type (8) (11) (11) are

$$(14) \begin{cases} (\epsilon - \mu + \frac{z}{\kappa}) R = S' + \frac{z}{\kappa} S \\ (\epsilon + \mu + \frac{z}{\kappa}) S = -R' \end{cases}$$

$$(15) \begin{cases} \epsilon = \frac{E}{\hbar c} & \mu = \frac{mc}{\hbar} & z = \frac{Ze^2}{\hbar c} = \frac{Z}{137} \end{cases}$$

Try  $R = \kappa^\gamma e^{-\lambda \kappa}$

Substituting in (14) find solution with

$$(16) \begin{cases} \gamma = -1 + \sqrt{1 - z^2} & \lambda = z\mu = Z \frac{e^2 m}{\hbar^2} \\ \frac{S(\kappa)}{R(\kappa)} = \frac{1 - \sqrt{1 - z^2}}{z} = \text{constant} \end{cases}$$

$$(17) \begin{cases} \epsilon = \mu \sqrt{1 - z^2} \text{ or } E = mc^2 \sqrt{1 - \left(\frac{Ze^2}{\hbar c}\right)^2} = \\ = mc^2 - \frac{Z^2 e^4 m}{2 \hbar^2} - \frac{Z^4 e^8}{8 \hbar^4 c^2} + \dots \end{cases}$$

↑ This is non relativistic value  
 ↑ This is rest energy

Normalized solution is

$$(18) \begin{cases} R(\kappa) = (z\mu)^{\sqrt{1-z^2}} \sqrt{\frac{z\mu(1+\sqrt{1-z^2})}{(2\sqrt{1-z^2})!}} \kappa^{-1+\sqrt{1-z^2}} e^{-z\mu\kappa} \\ S(\kappa) = \frac{1 - \sqrt{1 - z^2}}{z} R(\kappa) \end{cases}$$

Substitute these in (8) with  $j = \frac{1}{2}$ ,  $m = \pm \frac{1}{2}$  to find the two normalized ground state solutions with electron spin up or down

**ПРИМЕР. Водородоподобный атом.** Основное состояние водородоподобного атома соответствует значениям квантовых чисел  $j = 1/2$ ,  $l = 0$  [используем первый тип решений (36.8) и (36.11)]. Уравнения (36.11) в этом случае принимают вид

$$\begin{cases} \left(\varepsilon - \mu + \frac{z}{r}\right) R = S' + \frac{2}{r} S, \\ \left(\varepsilon + \mu + \frac{z}{r}\right) S = -R', \end{cases} \quad (36.14)$$

где

$$\varepsilon = \frac{E}{\hbar c}, \quad \mu = \frac{mc}{\hbar}, \quad z = \frac{Ze^2}{\hbar c} = \frac{Z}{137}. \quad (36.15)$$

Зададим решение системы в виде

$$R(r) = r^\gamma e^{-\lambda r},$$

где  $\gamma$  и  $\lambda$  — подлежащие определению константы. Подставляя эту функцию в уравнения (36.14), заметим, что она удовлетворяет им при

$$\gamma = -1 + \sqrt{1 - z^2}, \quad \lambda = z\mu = Z \frac{em}{\hbar^2}, \quad (36.16)$$

причем

$$\frac{S(r)}{R(r)} = \frac{1 - \sqrt{1 - z^2}}{z} = \text{const.}$$

Кроме того,

$$\varepsilon = \mu \sqrt{1 - z^2},$$

или

$$E = mc^2 \sqrt{1 - \left(\frac{Ze^2}{\hbar c}\right)^2} = mc^2 - \frac{Z^2 e^4 m}{2\hbar^2} - \frac{Z^4 e^8 m}{8\hbar^4 c^2} + \dots, \quad (36.17)$$

где последовательные члены разложения энергии в ряд по степеням  $(Ze^2/\hbar c)^2$  имеют соответственно смысл энергии покоя, энергии нерелятивистской задачи, первого релятивистского приближения и т. д.

*Нормированное решение* имеет теперь вид

$$\begin{cases} R(r) = (2z\mu)^{\sqrt{1-z^2}} \sqrt{\frac{z\mu(1+\sqrt{1-z^2})}{(2\sqrt{1-z^2})!}} r^{-1+\sqrt{1-z^2}} e^{-z\mu r}, \\ S(r) = \frac{1-\sqrt{1-z^2}}{z} R(r). \end{cases} \quad (36.18)$$

Предлагается найти два нормированных решения для основного состояния, соответствующих электрону со спином, ориентированным „вверх“ или „вниз“, путем подстановки этих функций в выражения для волновых функций (36.8), взятых при  $j = 1/2$ ,  $m = \pm 1/2$ .

### 37 - Transformation of Dirac spinors.

Rewrite (35-51) Dirac eq. as

$$(1) \left( \frac{mc}{\hbar} + \gamma_0 \cdot \nabla - \frac{i\epsilon}{\hbar c} \gamma_0 \cdot A \right) \psi = 0$$

Indep. of frame requires: In new frame

$$(2) x_\mu \rightarrow x'_\mu = a_{\mu\nu} x_\nu \quad (\text{sum over equal indices})$$

$$(3) \psi \rightarrow \psi' = T\psi \quad \left( T \text{ is } 4 \times 4 \text{ Dirac-like matrix} \right)$$

$$(4) \begin{cases} \nabla_\mu \rightarrow \nabla'_\mu = a_{\mu\nu} \nabla_\nu \\ A_\mu \rightarrow A'_\mu = a_{\mu\nu} A_\nu \end{cases} \quad \left( a_{\mu\nu} \text{ is orthogonal} \right)$$

In new frame same eq. for  $\psi'$ ,  $\nabla'$ ,  $A'$

$$\left( \frac{mc}{\hbar} + \gamma_0 \cdot \nabla' \right) \psi' = 0 \quad \left( \text{omit } A \text{ for brevity} \right)$$

$$\downarrow$$

$$(T^{-1}\psi)$$

multiply left by  $T$   
& find

$$\left( \frac{mc}{\hbar} + T \gamma_0 T^{-1} \cdot \nabla' \right) \psi = 0$$

This must be = (1) without  $A$  term, which requires

$$(5) \boxed{T \gamma_\mu T^{-1} = a_{\mu\nu} \gamma_\nu}$$

consider infinitesimal transformation

$$(6) a_{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu} + \epsilon_{\mu\nu} \quad \text{neglect squares of } \epsilon$$

Orthogonality requirement

$$(7) \epsilon_{\mu\nu} = -\epsilon_{\nu\mu} \quad (\epsilon_{\nu\nu} = 0)$$

$$(8) \left\{ \begin{array}{l} \text{Reality requirement: } \epsilon_{mm} \text{ are real} \\ \epsilon_{4n} = -\epsilon_{n4} \text{ are pure imag. } n=1,2,3 \end{array} \right.$$

Найдем закон преобразования волновой функции уравнения Дирака при переходе от одной системы координат к другой.

Запишем уравнение Дирака (35.7):

$$\left(\frac{mc}{\hbar} + \vec{\gamma} \cdot \vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c} \vec{\gamma} \cdot \vec{A}\right) \psi = 0. \quad (37.1)$$

Предположим, что оно не зависит от выбора системы отсчета, т. е. потребуем, чтобы при переходе к новой системе

$$x_\mu \rightarrow x'_\mu = a_{\mu\nu} x_\nu, \quad (37.2)$$

где  $a_{\mu\nu}$  — коэффициенты ортогонального преобразования, выполнялись следующие соотношения \*:

$$\psi \rightarrow \psi' = T^{-1} \psi \quad (37.3)$$

( $T$  — квадратная  $4 \times 4$ -матрица типа матриц Дирака \*\*),

$$\begin{aligned} \nabla_\mu &\rightarrow \nabla'_\mu = a_{\mu\nu} \nabla_\nu, \\ A_\mu &\rightarrow A'_\mu = a_{\mu\nu} A_\nu. \end{aligned} \quad (37.4)$$

Напомним, что по повторяющимся греческим индексам автоматически производится суммирование от 1 до 4 (правило Эйнштейна).

Нетрудно проверить, что при указанных преобразованиях уравнение Дирака (37.1) не меняет вида и в новых координатах записывается как

$$\left(\frac{mc}{\hbar} + \vec{\gamma}' \cdot \vec{\nabla}' - \frac{ie}{\hbar c} \vec{\gamma}' \cdot \vec{A}'\right) \psi' = 0,$$

если сделать определенные предположения о свойствах матрицы  $\hat{T}$ . Для выяснения этих свойств умножим записанное выше уравнение слева на  $T$  и заменим  $\psi'$  на  $\psi$  по закону  $\psi' = \hat{T}^{-1} \psi$ . Тогда

$$\left(\frac{mc}{\hbar} + T \vec{\gamma} T^{-1} \vec{\nabla}' - \frac{ie}{\hbar c} T \vec{\gamma} \cdot \vec{A}' T^{-1}\right) \psi = 0$$

или

$$\left(\frac{mc}{\hbar} + T \gamma_\lambda T^{-1} a_{\lambda\nu} \nabla_\nu - \frac{ie}{\hbar c} T \gamma_\lambda a_{\lambda\nu} A_\nu T^{-1}\right) \psi = 0.$$

Полученное уравнение должно совпадать с (37.1); сравнивая их, находим соотношение  $T a_{\lambda\nu} \gamma_\nu T^{-1} = \gamma_\lambda$  или

$$T \gamma_\mu T^{-1} = a_{\mu\nu} \gamma_\nu. \quad (37.5)$$

Здесь использовано свойство ортогональности преобразования (37.2) в форме  $a_{\mu\nu} a_{\mu\lambda} = a_{\nu\mu} a_{\lambda\mu} = \delta_{\nu\lambda}$ .

Рассмотрим бесконечно малые преобразования

$$a_{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu} + \varepsilon_{\mu\nu} \quad (37.6)$$



Assume  $T$  differs from unit matrix by order  $\epsilon$

$$(9) \quad T = 1 + S \quad (\text{S order } \epsilon)$$

then

$$(10) \quad T^{-1} = 1 - S$$

and (5)  $\rightarrow$

$$(11) \quad \cancel{S \gamma_\mu - \gamma_\mu S} = \epsilon_{\mu\nu} \gamma_\nu$$

This condition is satisfied by

$$(12) \quad S = -\frac{i}{4} \epsilon_{\mu\nu} \gamma_\mu \gamma_\nu$$

Therefore

$$(13) \quad T = 1 - \frac{i}{4} \sum_{\mu\nu} \epsilon_{\mu\nu} \gamma_\mu \gamma_\nu$$

Lorentz group combined from infinitesimal transformations (6) on coordinates (13) on  $\psi$

Example: infinitesimal rotation around  $z$

$$(14) \quad \begin{cases} x'_4 = x_4 & x'_3 = x_3 & x'_1 = x_1 - \epsilon x_2 \\ & & x'_2 = x_2 + \epsilon x_1 \end{cases}$$

or  $\epsilon_{12} = -\epsilon \quad \epsilon_{21} = \epsilon \quad \text{all others zero}$

$$T_\epsilon = 1 + \frac{\epsilon}{2} \gamma_1 \gamma_2 = \begin{vmatrix} 1 + \frac{i\epsilon}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 - \frac{i\epsilon}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 + \frac{i\epsilon}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 - \frac{i\epsilon}{2} \end{vmatrix}$$

For finite rotation

around  $z$  by angle  $\varphi$

(take  $T_\epsilon^{\varphi/\epsilon} = T_\varphi$ ) find:

$$(15) \quad T_\varphi = \begin{vmatrix} e^{\frac{i\varphi}{2}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-\frac{i\varphi}{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{\frac{i\varphi}{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-\frac{i\varphi}{2}} \end{vmatrix}$$

( $\varepsilon_{\mu\nu} \ll 1$ ) и будем пренебрегать высшими степенями  $\varepsilon_{\mu\nu}$ , что, однако, не нарушит общности выводов. Из ортогональности преобразования (37.2) следует, что

$$\varepsilon_{\mu\nu} = -\varepsilon_{\nu\mu}, \text{ так что } \varepsilon_{\nu\nu} = 0. \quad (37.7)$$

Для того чтобы координаты  $x, y, z, t$  всегда оставались вещественными, необходимо также сделать следующие предположения:

$$\left. \begin{array}{l} \varepsilon_{nm} \text{ — вещественные величины} \\ \varepsilon_{4m} = -\varepsilon_{m4} \text{ — чисто мнимые величины} \end{array} \right\} n, m = 1, 2, 3. \quad (37.8)$$

Предположим, что  $T$  отличается от единичной матрицы в первом порядке по  $\varepsilon$

$$T = 1 + \hat{s}, \quad (37.9)$$

где матрица  $\hat{s}$  имеет порядок  $\varepsilon$ ; тогда с той же точностью

$$T^{-1} = 1 - \hat{s}, \quad (37.10)$$

и формула (37.5) примет вид

$$\hat{s}\gamma_\mu - \gamma_\mu \hat{s} = \varepsilon_{\mu\nu} \gamma_\nu. \quad (37.11)$$

Это равенство автоматически удовлетворяется, если

$$\hat{s} = -\frac{1}{4} \varepsilon_{\mu\nu} \gamma_\mu \gamma_\nu. \quad (37.12)$$

Следовательно, матрица трансформации спиноров  $T$  при преобразованиях координат (37.2) и (37.6) имеет вид

$$T = 1 - \frac{1}{4} \sum_{\mu\nu} \varepsilon_{\mu\nu} \gamma_\mu \gamma_\nu. \quad (37.13)$$

*Группа преобразований Лоренца*, играющая фундаментальную роль в релятивистской теории, складывается из бесконечно малых преобразований координат (37.6) и из преобразований (37.13) спиноров  $\psi$ , так как отсюда можно получить путем интегрирования соответствующие *конечные* преобразования.

**ПРИМЕР.** *Бесконечно малый поворот вокруг оси  $z$*

$$\begin{aligned} x'_1 &= x_1 - \varepsilon x_2, & x'_3 &= x_3, \\ x'_2 &= x_2 + \varepsilon x_1, & x'_4 &= x_4 \end{aligned}$$

соответствует следующим значениям  $\varepsilon_{\mu\nu}$ :

$$\varepsilon_{12} = -\varepsilon, \quad \varepsilon_{21} = \varepsilon$$

(все остальные компоненты  $\varepsilon_{\mu\nu}$  равны нулю).

Тогда

$$T = 1 + \frac{\varepsilon}{2} \gamma_1 \gamma_2 = \left\| \begin{array}{cccc} 1 + \frac{i}{2} \varepsilon & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 - \frac{i}{2} \varepsilon & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 + \frac{i}{2} \varepsilon & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 - \frac{i}{2} \varepsilon \end{array} \right\|. \quad (37.146)$$

Corresp. transformation of  $\psi$

$$(16) \quad \psi'_1 = e^{i\frac{\varphi}{2}} \psi_1 \quad \psi'_2 = e^{-i\frac{\varphi}{2}} \psi_2 \quad \psi'_3 = e^{i\frac{\varphi}{2}} \psi_3 \quad \psi'_4 = e^{-i\frac{\varphi}{2}} \psi_4$$

Observe; for  $\varphi = 2\pi$   $\psi' = -\psi$  (Comments)

Example: Infinitesimal Lorentz transform

$$(17) \quad \begin{aligned} x'_1 &= x_1 - \varepsilon t c = x_1 + i\varepsilon x_4 & x'_2 &= x_2 \\ x'_4 &= x_4 - i\varepsilon x_1 & x'_3 &= x_3 \end{aligned}$$

$$(18) \quad T_\varepsilon = 1 - \frac{i\varepsilon}{2} \gamma_1 \gamma_4 = 1 + \frac{\varepsilon}{2} \alpha_1 = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & \frac{\varepsilon}{2} \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\varepsilon}{2} & 1 & 0 \\ \frac{\varepsilon}{2} & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$$

Obtain finite Lorentz transf.

$$(19) \quad \boxed{x_0 = ct} \quad \begin{aligned} x'_1 &= \frac{x_1 - \beta x_0}{\sqrt{1-\beta^2}} & x'_0 &= \frac{x_0 - \beta x_1}{\sqrt{1-\beta^2}} \end{aligned}$$

by iterating (17) a number of times

$$n = \frac{1}{\varepsilon} \operatorname{artgh} \beta$$

Take corresp

$$(20) \quad \begin{cases} T_\beta = T_\varepsilon^n = \left(1 + \frac{\varepsilon}{2} \alpha_1\right)^n = e^{\frac{n\varepsilon}{2} \alpha_1} = \\ = \cosh \frac{n\varepsilon}{2} + \alpha_1 \sinh \frac{n\varepsilon}{2} = \\ = \cosh \left(\frac{1}{2} \operatorname{artgh} \beta\right) + \alpha_1 \sinh \left(\frac{1}{2} \operatorname{artgh} \beta\right) = \\ = \sqrt{\frac{1+\sqrt{1-\beta^2}}{2\sqrt{1-\beta^2}}} + \alpha_1 \sqrt{\frac{1-\sqrt{1-\beta^2}}{2\sqrt{1-\beta^2}}} \end{cases}$$

(because  $\alpha_1^2 = 1$ )

Поворот вокруг оси  $z$  на конечный угол  $\varphi$  описывается матрицей  $T_\varphi$ : взять  $(T_\varepsilon)^{\varphi/\varepsilon} = T_\varphi$  и устремить  $\varepsilon$  к 0

$$T_\varphi = \begin{pmatrix} e^{\frac{i\varphi}{2}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-\frac{i\varphi}{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{\frac{i\varphi}{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-\frac{i\varphi}{2}} \end{pmatrix}. \quad (37.15)$$

При этом спинорная волновая функция  $\psi$  преобразуется как

$$\begin{aligned} \psi'_1 &= e^{\frac{i\varphi}{2}} \psi_1, & \psi'_2 &= e^{-\frac{i\varphi}{2}} \psi_2, \\ \psi'_3 &= e^{\frac{i\varphi}{2}} \psi_3, & \psi'_4 &= e^{-\frac{i\varphi}{2}} \psi_4. \end{aligned} \quad (37.16)$$

Заметим, что при повороте на угол  $\varphi = 2\pi$ , т. е. при полном повороте системы координат вокруг оси, спинорная волновая функция  $\psi$  меняет знак.

**ПРИМЕР.** Бесконечно малое преобразование Лоренца

$$\begin{aligned} x'_1 &= x_1 - \varepsilon t c = x_1 + i\varepsilon x_4, & x'_2 &= x_2, \\ x'_3 &= x_3, & x'_4 &= x_4 - i\varepsilon x_1 \end{aligned} \quad (37.17)$$

соответствует матрице

$$T_\varepsilon = 1 - \frac{i\varepsilon}{2} \gamma_1 \gamma_4 = 1 + \frac{\varepsilon}{2} \alpha_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \varepsilon/2 \\ 0 & 1 & \varepsilon/2 & 0 \\ 0 & \varepsilon/2 & 1 & 0 \\ \varepsilon/2 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (37.18)$$

Для конечного преобразования Лоренца

$$x'_1 = \frac{x_1 - \beta x_0}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \quad x'_0 = \frac{x_0 - \beta x_1}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \quad x_0 = ct \quad (37.19)$$

следует итерировать преобразование (37.17)  $n$  раз, причем  $n = (1/\varepsilon) \operatorname{Arth} \beta$  ( $\varepsilon \rightarrow 0$ ,  $n \rightarrow \infty$ ); тогда

$$\begin{aligned} T_\beta &= (T_\varepsilon)^n = \left(1 + \frac{\varepsilon}{2} \alpha_1\right)^n \rightarrow e^{\frac{n\varepsilon}{2} \alpha_1} = \\ &= \operatorname{ch} \frac{n\varepsilon}{2} + \alpha_1 \operatorname{sh} \frac{n\varepsilon}{2} = \operatorname{ch} \left(\frac{1}{2} \operatorname{Arth} \beta\right) + \alpha_1 \operatorname{sh} \left(\frac{1}{2} \operatorname{Arth} \beta\right) = \\ &= \sqrt{\frac{1 + \sqrt{1 - \beta^2}}{2 \sqrt{1 - \beta^2}}} + \alpha_1 \sqrt{\frac{1 - \sqrt{1 - \beta^2}}{2 \sqrt{1 - \beta^2}}}. \end{aligned} \quad (37.20)$$

Здесь был использован тот факт, что  $\alpha_1^2 = 1$ .

Space reflection

$$(21) \quad \begin{cases} x'_m = -x_m & m = 1, 2, 3 \\ x'_4 = x_4 \end{cases}$$

$$(22) \quad \begin{cases} \psi \rightarrow \psi' = T_{ref} \psi \end{cases}$$

From (5)

$$(23) \quad T_{ref} \gamma_m T_{ref}^{-1} = -\gamma_m, \quad T_{ref} \gamma_4 T_{ref}^{-1} = \gamma_4$$

Satisfied by

$$(24) \quad \boxed{T_{ref} = \gamma_4 = \beta}$$

Observe:

$$(25) \quad T_{ref} = T_{ref}^{-1} = \widetilde{T_{ref}}$$

Observe: for our choice of  $\gamma_4$  (34-10)

$$(26) \quad \psi'_1 = \psi_1, \quad \psi'_2 = \psi_2, \quad \psi'_3 = -\psi_3, \quad \psi'_4 = -\psi_4$$

Parity behavior change between  $\psi_1, \psi_2$  and  $\psi_3, \psi_4$ . Then: for an even state

$$(27) \quad \begin{cases} \psi_1(\vec{x}) = \psi_1(-\vec{x}), \quad \psi_2(\vec{x}) = \psi_2(-\vec{x}), \quad \psi_3(\vec{x}) = -\psi_3(-\vec{x}), \quad \psi_4(\vec{x}) = -\psi_4(-\vec{x}) \\ \text{and for an odd state} \\ \psi_1(\vec{x}) = -\psi_1(-\vec{x}); \quad \psi_3(\vec{x}) = \psi_3(-\vec{x}) \end{cases}$$

Compare with (36-(8)(12)). Find: parity of  $l$  = parity of state for electron states. For positron states the large components are  $\psi_3, \psi_4$  which have parity reversed.

Properties

$$(28) \quad T_{ref} \gamma_\mu \widetilde{T_{ref}} = \begin{cases} -\gamma_\mu & \text{for } \mu = 1, 2, 3 \\ \gamma_\mu & \text{for } \mu = 4 \end{cases} \quad \text{and} \quad T_{ref} \beta \gamma_\mu \widetilde{T_{ref}} = \begin{cases} -\beta \gamma_\mu & (\mu=1, 2, 3) \\ \beta \gamma_\mu & (\mu=4) \end{cases}$$

**Инверсия (отражение) пространственных координат.** Преобразование координат и спинорной волновой функции  $\psi$  в случае пространственной инверсии производится по правилу:

$$x'_n = -x_n, \quad x'_4 = x_4, \quad n = 1, 2, 3, \quad (37.21)$$

$$\psi \rightarrow \psi' = T_{ref} \psi. \quad (37.22)$$

Из условия (37.5) находим:

$$\left. \begin{aligned} T_{ref} \gamma_n T_{ref}^{-1} &= -\gamma_n, \\ T_{ref} \gamma_4 T_{ref}^{-1} &= \gamma_4. \end{aligned} \right\} \quad (37.23)$$

Эти равенства удовлетворяются, если матрицу  $T$  выбрать в виде

$$T_{ref} = \gamma_4 = \beta. \quad (37.24)$$

Очевидно, что матрица  $T_{ref}$  обладает свойством

$$T_{ref} = T_{ref}^{-1} = T_{ref}^+. \quad (37.25)$$

При выборе  $\hat{T}_{ref} = \gamma_4$  компоненты спинорной волновой функции в новых координатах принимают вид

$$\psi'_1 = \psi_1, \quad \psi'_2 = \psi_2, \quad \psi'_3 = -\psi_3, \quad \psi'_4 = -\psi_4. \quad (37.26)$$

Отсюда видно, что пары компонент  $\psi_1, \psi_2$  и  $\psi_3, \psi_4$  обладают взаимно противоположной четностью относительно пространственной инверсии.

Следовательно,

в четном состоянии имеет место закон

$$\left. \begin{aligned} \psi_1(x) &= \psi_1(-x), & \psi_2(x) &= \psi_2(-x), \\ \psi_3(x) &= -\psi_3(-x), & \psi_4(x) &= -\psi_4(-x), \end{aligned} \right\} \quad (37.27)$$

в нечетном состоянии — закон

$$\left. \begin{aligned} \psi_1(x) &= -\psi_1(-x), & \psi_2(x) &= -\psi_2(-x), \\ \psi_3(x) &= \psi_3(-x), & \psi_4(x) &= \psi_4(-x). \end{aligned} \right\}$$

Сравнивая законы (37.27) с выражениями (36.8) и (36.12), находим, что четности состояний электрона равны четностям, определяемым квантовым числом  $l$ . Для состояний позитрона доминирующими компонентами являются  $\psi_3, \psi_4$ , четность которых противоположна четности компонент  $\psi_1, \psi_2$ .

*Некоторые свойства оператора пространственного отражения:*

$$\left. \begin{aligned} T_{ref} \gamma_\mu T_{ref}^+ &= \begin{cases} -\gamma_\mu, & \mu = 1, 2, 3, \\ +\gamma_\mu, & \mu = 4; \end{cases} \\ T_{ref} \beta \gamma_\mu T_{ref}^+ &= \begin{cases} -\beta \gamma_\mu, & \mu = 1, 2, 3, \\ +\beta \gamma_\mu, & \mu = 4. \end{cases} \end{aligned} \right\} \quad (37.28)$$

Treat spinor operators as scalars, vectors, tensors.

From (8) (13)

Latin indices = 1, 2, 3  
Greek indices = 1, 2, 3, 4  
sum over equal indices

$$(29) \left\{ \begin{aligned} T &= 1 - \frac{1}{4} \varepsilon_{\mu\nu} \gamma_\mu \gamma_\nu = 1 - \frac{1}{4} \varepsilon_{mn} \gamma_m \gamma_n - \frac{1}{2} \varepsilon_{4n} \beta \gamma_n \\ &\quad (\beta = \gamma_4) \quad (\gamma_\mu \gamma_\nu + \gamma_\nu \gamma_\mu = 0) \quad (\text{real}) \quad (\text{imaginary}) \\ T^{-1} &= 1 + \frac{1}{4} \varepsilon_{\mu\nu} \gamma_\mu \gamma_\nu = 1 + \frac{1}{4} \varepsilon_{mn} \gamma_m \gamma_n + \frac{1}{2} \varepsilon_{4n} \beta \gamma_n \\ \tilde{T} &= 1 + \frac{1}{4} \varepsilon_{\mu\nu}^* \gamma_\mu \gamma_\nu = 1 + \frac{1}{4} \varepsilon_{mn} \gamma_m \gamma_n - \frac{1}{2} \varepsilon_{4n} \beta \gamma_n \end{aligned} \right.$$

(30) { In general  $\tilde{T} \neq T^{-1}$  ( $T$  non unitary: comments)  
 $T$  is unitary when  $\varepsilon_{4n} = 0$  (i.e. pure space rotation)

Finds

$$(31) \left\{ \begin{aligned} \beta \tilde{T} \beta &= T^{-1} \\ \tilde{T} \beta &= \beta T^{-1}, \quad \beta \tilde{T} = T^{-1} \beta \end{aligned} \right.$$

(a) Search for spinor <sup>(u)</sup>matrices behaving as a scalar. Means: for frame change (2)

~~$x_\mu \rightarrow x'_\mu = \alpha_{\mu\nu} x_\nu$~~   $x'_\mu \rightarrow x_\mu = \alpha_{\mu\nu} x'_\nu$  and associated spinor change

$$\psi \rightarrow \psi' = T \psi$$

(32) The expression  $\tilde{\psi} u \psi \rightarrow \tilde{\psi}' u \psi' = \tilde{\psi} u \psi$

$$\tilde{\psi}' u \psi' = \tilde{T} \tilde{\psi} u T \psi = \tilde{\psi} \tilde{T} u T \psi$$

Then should be

$$\tilde{T} u T = u$$

$$\tilde{T} u T = \beta T^{-1} \beta u T = u \quad \text{hence } (\beta^2 = 1)$$

(34)  $T = T(\beta u)$  satisfied for  $T = (29)$

by

$$(33) \quad \beta u = 1 \quad \text{and} \quad \beta u = \gamma_1 \gamma_2 \gamma_3 \gamma_4 = \gamma_5$$

Построение с помощью спиноров и матриц Дирака величин, обладающих различными тензорными свойствами. Напомним, что в наших обозначениях латинские индексы пробегают значения 1, 2, 3, а греческие индексы — 1, 2, 3, 4; соответственно используется правило суммирования Эйнштейна. Тогда из формул (37.8) и (37.13) следует, что

$$T = 1 - \frac{1}{4} \varepsilon_{\mu\nu} \gamma_\mu \gamma_\nu = 1 - \frac{1}{4} \varepsilon_{mn} \gamma_m \gamma_n - \frac{1}{2} \varepsilon_{4n} \beta \gamma_n,$$

где член  $-\frac{1}{4} \varepsilon_{mn} \gamma_m \gamma_n$  — действительный,

член  $-\frac{1}{2} \varepsilon_{4n} \beta \gamma_n$  — чисто мнимый.

$\gamma$ -матрицы удовлетворяют равенствам:

$$\beta = \gamma_4 \gamma_\mu \gamma_\nu + \gamma_\nu \gamma_\mu = 2\delta_{\mu\nu}.$$

Заметим, что

$$T^{-1} = 1 + \frac{1}{4} \varepsilon_{\mu\nu} \gamma_\mu \gamma_\nu = 1 + \frac{1}{4} \varepsilon_{mn} \gamma_m \gamma_n + \frac{1}{2} \varepsilon_{4n} \beta \gamma_n,$$

$$T^+ = 1 + \frac{1}{4} \varepsilon_{\mu\nu}^* \gamma_\mu \gamma_\nu = 1 + \frac{1}{4} \varepsilon_{mn} \gamma_m \gamma_n - \frac{1}{2} \varepsilon_{4n} \beta \gamma_n.$$

В общем случае  $T^+ \neq T^{-1}$  (т. е. матрица  $T$  не унитарная). Лишь при  $\varepsilon_{4n} = 0$  (чисто пространственный поворот)  $T$  становится унитарной.

Вообще же справедливы соотношения

$$\beta T^+ \beta = T^{-1}, \quad T^+ \beta = \beta T^{-1}, \quad \beta T^+ = T^{-1} \beta. \quad (37.31)$$

Приступим теперь к решению важной задачи о построении величин различных тензорных размерностей. Найдем прежде всего такую матрицу  $u$ , которая в квадратичной конструкции со спинором  $\psi$  дает скалярную величину.

Иначе говоря, при преобразованиях системы отсчета (37.2)  $x_\mu \rightarrow x'_\mu = a_{\mu\nu} x_\nu$  и соответствующем преобразовании спинорной волновой функции  $\psi \rightarrow \psi' = T\psi$  выражение  $\psi^+ u \psi$  должно обладать свойством

$$\psi^+ u \psi \rightarrow \psi'^+ u \psi' = \psi^+ u \psi. \quad (37.32)$$

На основании закона (37.3)

$$\psi'^+ u \psi' = (T\psi')^+ u T\psi = \psi^+ T^+ u T\psi,$$

и из требования (37.32) следует эквивалентное условие

$$\psi^+ u \psi = \psi^+ T^+ u T\psi.$$

Отсюда: матрица  $u$  должна удовлетворять требованию

$$u = T^+ u T \text{ при всех } T.$$



Two soln's

$$u = \beta \cdot 1 \quad \text{and} \quad u = \beta \gamma_5$$

behave differently for space reflection  $T_{\text{ref}} = \beta$ 

$$\tilde{T}_{\text{ref}} \beta \cdot 1 T_{\text{ref}} = \beta \beta \cdot 1 \beta = 1 \beta = \beta \cdot 1$$

$$\tilde{T}_{\text{ref}} \beta \gamma_5 T_{\text{ref}} = \beta \beta \gamma_5 \beta = \gamma_5 \beta = -\beta \gamma_5$$

Therefore:

$$\beta \cdot 1 = \text{scalar} \leftarrow \tilde{\psi} \beta \cdot 1 \psi$$

$$\beta \gamma_5 = \text{pseudoscalar} \leftarrow \tilde{\psi} \beta \gamma_5 \psi$$

Comments on  $\beta$ -factor (notation)

$$\psi^\dagger = \tilde{\psi} \beta \quad \leftarrow \text{Then}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \psi^\dagger \cdot \psi \text{ transforms like a scalar} \\ \psi^\dagger \gamma_5 \psi \quad \quad \quad \text{"} \quad \quad \quad \text{" a pseudoscalar} \end{array} \right.$$

Comment: pseudoscalar pion interaction term

$$\bar{\psi} \psi \gamma_5 \psi \text{ if field theory}$$

Other Dirac operators are such that

(35)  $\psi^\dagger u_\mu \psi$  or  $\psi^\dagger u_{\mu\nu} \psi$  transform like the components of ~~four vectors~~ four vectors, axial four vectors or ~~antisymmetric~~ antisymmetric tensor.

$$\left\{ \begin{array}{ll} 1 & \text{scalar} \\ \gamma_5 & \text{pseudoscalar} \\ \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_4 & \text{four vector} \\ \gamma_2 \gamma_3 \gamma_4, \gamma_3 \gamma_1 \gamma_4, \gamma_1 \gamma_2 \gamma_4, \gamma_1 \gamma_2 \gamma_3 & \text{axial four vector} \\ \gamma_2 \gamma_3, \gamma_3 \gamma_1, \gamma_1 \gamma_2, \gamma_1 \gamma_4, \gamma_2 \gamma_4, \gamma_3 \gamma_4 & \text{antisym. tensor} \end{array} \right.$$

Observe: all spinor operators are linear combinations of the 16 below

This means e.g.

$$\psi'^\dagger u'_\mu \psi' = \psi^\dagger u_\mu \psi \quad \text{with } u'_\mu = a_\mu \quad (34)$$

Пользуясь соотношениями (37.31), находим:

$$T^+ u T = \beta T^{-1} \beta u T = u,$$

а так как  $\beta^2 = 1$ , отсюда получим:

$$(\beta u) T = T (\beta u),$$

где матрица  $T$  должна иметь вид (37.29). Это условие удовлетворяется, если выбрать

$$\beta u = 1 \text{ или } \beta u = \gamma_1 \gamma_2 \gamma_3 \gamma_4 = \gamma_5. \quad (37.33)$$

Полученные два решения показывают, что матрицу  $u$  можно выбрать двояко:  $u = \beta \cdot 1$ , либо  $u = \beta \gamma_5$ . Заметим, что при отыскании вида  $u$  использовались инфинитезимальные преобразования (37.29) и, таким образом, не учитывалось отражение (существенно *конечное* преобразование); между тем именно при пространственной инверсии  $T_{ref} = \beta$  конструкции  $\beta \cdot 1$  и  $\beta \gamma_5$  ведут себя прямо противоположным образом:

$$\begin{aligned} T_{ref}^+ \beta \cdot 1 T_{ref} &= \beta \beta 1 \beta = 1 \beta = \beta 1, \\ T_{ref}^+ \beta \gamma_5 T_{ref} &= \beta \beta \gamma_5 \beta = \gamma_5 \beta = -\beta \gamma_5. \end{aligned}$$

Поэтому

матрице  $\beta 1$  соответствует *истинный скаляр*  $\psi^+ \beta 1 \psi$ ,

матрице  $\beta \gamma_5$  — *псевдоскаляр*  $\psi^+ \beta \gamma_5 \psi$ .

Введем обозначение  $\bar{\psi} = \psi^+ \beta$ ; тогда

квадратичная форма  $\bar{\psi} 1 \psi$  преобразуется как скаляр,

квадратичная форма  $\bar{\psi} \gamma_5 \psi$  — как псевдоскаляр.

(37.34)

**З а м е ч а н и е.** Лагранжиан спинорно- $\pi$ -мезонного взаимодействия  $\bar{\psi} \gamma_5 \psi$ , используемый в теории поля, предполагает псевдоскалярные свойства мезонной волновой функции  $\phi$  (псевдоскалярные мезоны).

Аналогичным путем нетрудно найти и другие дираковские матрицы-операторы, приводящие к квадратичным формам типа  $\bar{\psi} u_{\mu} \dots \lambda \psi$ , обладающим различными тензорными свойствами. Тогда величина  $\bar{\psi} u_{\mu} \psi$  должна быть вектором (псевдовектором), а величина  $\bar{\psi} u_{\mu\nu} \psi$  — антисимметричным тензором второго ранга. Например, для  $\bar{\psi} u_{\mu} \psi$  сказанное означает, что

$$\bar{\psi}' u_{\mu} \psi' = a_{\mu\nu} \bar{\psi} u_{\nu} \psi,$$

где  $x'_{\mu} = a_{\mu\nu} x_{\nu}$  [см. преобразование (37.2)].

Важно, что любую  $4 \times 4$ -матрицу (оператор, действующий на спиновую переменную) можно представить как линейную комбинацию 16 базисных матриц, служащих для построения соответствующих тензорных величин; именно,

$1 \rightarrow$  скаляр;

$\gamma_5 \rightarrow$  псевдоскаляр;

$\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_4 \rightarrow$  четырехмерный вектор;

$\gamma_2 \gamma_3 \gamma_4, \gamma_3 \gamma_1 \gamma_4, \gamma_1 \gamma_2 \gamma_4, \gamma_1 \gamma_2 \gamma_3 \rightarrow$  четырехмерный псевдотензор (аксиальный 4-вектор);

$\gamma_2 \gamma_3, \gamma_3 \gamma_1, \gamma_1 \gamma_2, \gamma_1 \gamma_4, \gamma_2 \gamma_4, \gamma_3 \gamma_4 \rightarrow$  антисимметричный тензор.

(37.35)

Time reversal - (general comments)

$$(36) \quad \left\{ \begin{array}{lll} \vec{x} \rightarrow \vec{x} & \vec{A} \rightarrow -\vec{A} & \vec{\nabla} \rightarrow \vec{\nabla} \\ \vec{x}_4 \rightarrow -\vec{x}_4 & A_4 \rightarrow A_4 & \nabla_4 \rightarrow -\nabla_4 \end{array} \right.$$

Then (2)  $\psi$  a solution of (1)

$$(37) \quad 0 = \frac{mc}{\hbar} \psi + \vec{\gamma} \cdot \left( \vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c} \vec{A} \right) \psi + \gamma_4 \left( \frac{\partial}{\partial x_4} - \frac{ie}{\hbar c} A_4 \right) \psi$$

The corresp. time reversed solution  $\psi'$  must solve time reversed eq'n of (37)

$$(38) \quad 0 = \frac{mc}{\hbar} \psi' + \vec{\gamma} \cdot \left( \vec{\nabla} + \frac{ie}{\hbar c} \vec{A} \right) \psi' - \gamma_4 \left( \frac{\partial}{\partial x_4} + \frac{ie}{\hbar c} A_4 \right) \psi'$$

Clearly impossible to solve with  $T\psi$ .

However

$$(39) \quad \psi' = S \psi^*$$

may work. From (37) ( $i \rightarrow -i$ )

$$(40) \quad 0 = \frac{mc}{\hbar} \psi^* + \vec{\gamma}^* \cdot \left( \vec{\nabla} + \frac{ie}{\hbar c} \vec{A} \right) \psi^* - \gamma_4^* \left( \frac{\partial}{\partial x_4} + \frac{ie}{\hbar c} A_4 \right) \psi^*$$

Multiply to left by  $S$ . Identify to (38). Required

$$(41) \quad S \vec{\gamma}^* S^{-1} = \vec{\gamma} \quad S \gamma_4^* S^{-1} = \gamma_4 \quad \psi' = S \psi^*$$

(41) can be fulfilled e.g. for standard form (34-36), of  $\gamma$ 's by

$$(42) \quad S = i \gamma_1 \gamma_3 = \begin{vmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{vmatrix} = \sqrt{\sigma_y} \quad \text{see (34-36)}$$

**Обращение времени.** При обращении (инверсии) временной координаты имеют место преобразования

$$\begin{aligned} x &\rightarrow x, & \nabla &\rightarrow \nabla, & A &\rightarrow -A, \\ x_4 &\rightarrow -x_4, & \nabla_4 &\rightarrow -\nabla_4, & A_4 &\rightarrow A_4. \end{aligned} \quad (37.36)$$

Пусть спинорная волновая функция  $\psi$  является решением уравнения (37.1)

$$\frac{mc}{\hbar} \psi + \gamma \cdot \left( \nabla - \frac{ie}{\hbar c} A \right) \psi + \gamma_4 \left( \frac{\partial}{\partial x_4} - \frac{ie}{\hbar c} A_4 \right) \psi = 0; \quad (37.37)$$

тогда для получения решения  $\psi'$ , соответствующего обращению времени, следует решить уравнение (37.37), в котором также производится обращение времени:

$$\frac{mc}{\hbar} \psi' + \gamma \cdot \left( \nabla + \frac{ie}{\hbar c} A \right) \psi' - \gamma_4 \left( \frac{\partial}{\partial x_4} + \frac{ie}{\hbar c} A_4 \right) \psi' = 0. \quad (37.38)$$

Ясно, что эта задача не сводится к преобразованию типа  $\psi' = T\psi$ . Если, однако, положить

$$\psi' = \hat{S}\psi^*, \quad (37.39)$$

то задача легко решается. Уравнение, комплексно сопряженное (37.37), дает:

$$\frac{mc}{\hbar} \psi^* + \gamma^* \cdot \left( \nabla + \frac{ie}{\hbar c} A \right) \psi^* - \gamma_4^* \left( \frac{\partial}{\partial x_4} + \frac{ie}{\hbar c} A_4 \right) \psi^* = 0. \quad (37.40)$$

Умножив (37.40) слева на  $\hat{S}$ , получим уравнение, которое можно отождествить с временным обращением уравнений (37.38), если потребовать выполнения условий

$$\hat{S}\gamma^*\hat{S}^{-1} = \gamma, \quad \hat{S}\gamma_4^*\hat{S}^{-1} = \gamma_4, \quad \psi' = \hat{S}\psi^* \quad (37.41)$$

Условия (37.41) будут соблюдены при выборе стандартной формы  $\gamma_\mu$ -матриц [см. (34.9) и (34.10)], если взять матрицу  $\hat{S}$  в виде

$$\hat{S} = i\gamma_1\gamma_4 = \begin{vmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{vmatrix} = \sigma'_y \quad (37.42)$$

[ср. (34.36)].

Charge conjugation. General comments.

Solutions of (37) contain both electron + positron sol'ns. Then expect that from each solution  $\psi$  it should be possible to obtain a  $\psi'$  obeying (37) with

$$(43) \quad e \rightarrow -e$$

$$(44) \quad \frac{mc}{\hbar} \psi' + \vec{\gamma} \cdot \left( \vec{\nabla} + \frac{ie}{\hbar c} \vec{A} \right) \psi' + \gamma_4 \left( \nabla_4 + \frac{ie}{\hbar c} A_4 \right) \psi' = 0$$

Try transform

$$(45) \quad \psi' = C \psi^*$$

Apply  $C$  to left of compl. conj. eq. n (40). Find that it goes into (44) provided:

$$(46) \quad C \vec{\gamma}^* C^{-1} = \vec{\gamma}, \quad C \gamma_4^* C^{-1} = -\gamma_4$$

For standard form of  $\gamma$ 's (34-p 3)

Solution of (46) is  $C = \gamma_2$

Charge conjugate solution is

$$(47) \quad \boxed{\psi_{\text{ch. conj.}} = \gamma_2 \psi^*}$$

**Зарядовое сопряжение.** Среди решений уравнения (37.37) содержатся как электронные, так и позитронные. Поэтому естественно предположить, что из каждого решения  $\psi$  этого уравнения можно получить другое, удовлетворяющее уравнению (37.37) решение  $\psi^c$ , описывающее частицы с зарядом противоположного знака, т. е. осуществить преобразование

$$e \rightarrow -e, \quad (37.43)$$

причем уравнение (37.37) примет вид

$$\frac{mc}{\hbar} \psi^c + \gamma \cdot \left( \nabla + \frac{ie}{\hbar c} \mathbf{A} \right) \psi^c + \gamma_4 \left( \nabla_4 + \frac{ie}{\hbar c} A_4 \right) \psi^c = 0. \quad (37.44)$$

Для описания рассмотренного перехода к частицам с противоположным знаком заряда попытаемся ввести новое преобразование

$$\psi^c = \hat{C} \psi^* \quad (37.45)$$

(назовем его преобразованием *зарядового сопряжения*). Применяя оператор  $\hat{C}$  слева к уравнению, комплексно сопряженному (37.40), найдем, что оно переходит в (37.44), если удовлетворяются условия

$$\hat{C} \gamma^* \hat{C}^{-1} = \gamma, \quad \hat{C} \gamma_4^* \hat{C}^{-1} = -\gamma_4. \quad (37.46)$$

Легко проверить, что для стандартной формы  $\gamma$ -матриц [см. (34.9) и (34.10)] оператор  $\hat{C}$  совпадает с матрицей  $\gamma_2$ :

$$\hat{C} = \gamma_2.$$

Таким образом, зарядово сопряженное решение связано с исходным через равенство\*

$$\psi^c = \gamma_2 \psi^*. \quad (37.47)$$



## КОММЕНТАРИИ

К стр. 15 (\*) Подставляя равенства  $\delta ds = \frac{dx}{ds} \delta dx$  и  $\delta U = \frac{\partial U}{\partial x} \delta x$  в вариацию действия, получим:

$$\int \sqrt{E-U} \frac{dx}{ds} \delta dx - \int \frac{\partial U / \partial x}{2 \sqrt{E-U}} \delta x ds = 0.$$

Интегрируя первое слагаемое по частям, будем иметь:

$$\begin{aligned} \int_1^2 \sqrt{E-U} \frac{dx}{ds} \delta dx &= \\ &= \sqrt{E-U} \frac{dx}{ds} \delta x \Big|_1^2 - \int_1^2 \frac{d}{ds} \left\{ \sqrt{E-U} \frac{dx}{ds} \right\} \delta x ds. \end{aligned}$$

Первый член справа обращается в нуль вместе с вариациями  $\delta x^i$  на концах отрезка интегрирования. Теперь выражение для вариации действия приобретает вид

$$\int \left\{ \frac{d}{ds} \left[ \sqrt{E-U} \frac{dx}{ds} \right] + \frac{\partial U / \partial x}{2 \sqrt{E-U}} \right\} \delta x ds = 0.$$

В силу произвольности вариаций  $\delta x$  мы заключаем, что подынтегральное выражение должно быть равно нулю, откуда и имеем уравнение экстремали.

К стр. 21 (\*) В классической физике комплексные величины играют роль лишь *способа* одновременной записи двух независимых решений (что особенно полезно при исследовании линейных дифференциальных уравнений второго порядка с вещественными коэффициентами), причем мнимая единица  $i$  не позволяет тогда этим решениям смешиваться друг с другом. Напротив, в квантовой механике роль комплексности волновой функции  $\psi$  выходит за рамки простого технического приема, так как мнимая единица фигурирует в *коэффициентах* уравнений [например, (2.4)]; тем самым вещественная и мнимая части оказываются нетривиальным образом „взаимосвязанными“.

К стр. 21 (\*\*) Стационарным состояниям соответствуют определенные значения энергии системы. Прочие состояния можно представить как суперпозицию (смесь) различных стационарных состояний. В последнем случае волновая функция будет линейной комбинацией волновых функций стационарных состояний.

Уравнение Шредингера для стационарных состояний называют также уравнением, не зависящим от времени, и хотя фактически время должно входить в его решение в форме (2.2), соответствующая экспонента часто не пишется.



*К стр. 23 (\*)* Уравнение (2.7)—типичное уравнение непрерывности, аналогичное дифференциальному закону сохранения заряда в электродинамике. В согласии с интерпретацией, предложенной М. Борном, величину (2.8) следует понимать как отнесенную к единице объема вероятность найти частицу в окрестности данной точки. Тогда из уравнения (2.7) естественно следует интерпретация вектора (2.9) как плотности потока вероятности. Заметим, что в стационарном состоянии плотность вероятности не зависит от времени (распределение вероятности стационарно).

*К стр. 23 (\*\*)* Оператор Лапласа (лапласиан)

$$\nabla^2 \equiv \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

в сферических координатах имеет вид

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\}.$$

Так как точка все время остается на сфере, то достаточно взять угловую часть лапласиана  $\Delta$ , которую мы обозначим через  $\Lambda$

$$\Lambda = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}.$$

При этом

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \left[ r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right] + \Lambda.$$

В этих обозначениях следует записать (2.13).

*К стр. 29 (\*)* Заметим, что ситуация (в смысле вероятности нахождения частицы в разных точках прямоугольной ямы) резко отличается от аналогичной ситуации в классической механике (мяч, упруго скачущий между двумя стенками). Полезно для иллюстрации полученных выводов изобразить волновую функцию графически при различных  $n$ .

*К стр. 51 (\*)* Обсуждая атом водорода, Ферми в выражении для потенциальной энергии (8.1) и в последующих формулах употребляет величину  $Z$ , так что все полученные им выводы годятся для  $Z=1$ -кратно ионизованного атома любого элемента ( $Ze$ —заряд ядра, где  $Z$ —порядковый номер элемента в периодической системе Менделеева). В частном случае  $Z=1$  эти выводы относятся к атому водорода.

*К стр. 67 (\*)* Говоря о *полноте* системы (набора) собственных функций, имеют в виду тот факт, что не существует функции, ортогональной (в смысле Гильберта) всем функциям системы и при этом не равной тождественно нулю.

Коэффициенты разложения  $c_k$  в (9.17) имеют следующий физический смысл: квадрат модуля  $|c_k|^2$  представляет собой относительную вероятность нахождения исследуемой системы в состоянии с энергией  $E_k$ .

*К стр. 85 (\*)* Существенно, что  $\delta$ -функция Дирака (как и ряд других так называемых несобственных функций) не является функцией в обычном смысле, так как не может быть задана никаким обычным методом задания функций (аналитическим, графическим или табличным). Ее определение существенно опирается на операцию интегрирования, т. е. все ее свойства имеют чисто интегральный смысл. Записанные без связи с операциями интегрирования, как это часто делается, они приобретают символический характер.

В квантовой механике  $\delta$ -функцию часто используют при нормировке собственных функций непрерывного спектра.

Подробнее об аппарате  $\delta$ -функции можно прочесть в книге Д. Д. Иваненко и А. А. Соколова «Классическая теория поля», (М., 1960).

К стр. 103(\*) Доказательство формулы (13.6) (по курсу Э. Персико, стр. 110—119).

Возьмем волновую функцию  $f(x, t)$  в виде

$$\int_{-\infty}^{+\infty} A(k) e^{i(kx - \omega t)} dk.$$

Тогда центр спектральной линии (в смысле частот) или „центр тяжести“ интенсивности можно определить как

$$\bar{k} = \frac{1}{I} \int_{-\infty}^{+\infty} k |A|^2 dk, \quad (1)$$

где полная интенсивность спектра обозначена через

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} |A|^2 dk. \quad (2)$$

Полуширину  $\Delta k$  спектральной линии следует определять по формуле, аналогичной формуле средней квадратичной погрешности в теории ошибок:

$$(\Delta k)^2 = \frac{1}{I} \int_{-\infty}^{+\infty} (k - \bar{k})^2 |A|^2 dk. \quad (3)$$

Совершенно аналогичным образом определим „центр одномерного волнового пакета“  $x$ :

$$\bar{x} = \frac{1}{I} \int_{-\infty}^{+\infty} x |f|^2 dx, \quad (4)$$

где интеграл

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} |f|^2 dx, \quad (2')$$

очевидно, совпадает с (2) по определению волновой функции  $f(x, t)$ . В качестве полуширины пакета  $\Delta x$  возьмем величину, определяемую соотношением

$$(\Delta x)^2 = \frac{1}{I} \int_{-\infty}^{+\infty} (x - \bar{x})^2 |f|^2 dx. \quad (5)$$

По предположению о существовании пакета волн функция  $f$  заметно отличается от нуля только внутри некоторой одномерной области и практически равна нулю за ее пределами.

После этих предварительных замечаний покажем, что „более компактному“ одномерному волновому пакету должна соответствовать большая ширина спектральной линии, точнее: полуширина пакета  $\Delta x$  и полуширина линии  $\Delta k$  связаны неравенством

$$\Delta k \cdot \Delta x \geq \frac{1}{4\pi}, \quad (6)$$

играющим весьма важную роль в волновой механике; оно следует из теоремы Фурье и выполняется независимо от конкретного физического смысла входящих в него величин.

Чтобы доказать это утверждение, введем функцию

$$F(x) = f(x, 0) e^{-ikx} \quad (7)$$

и отметим очевидный факт неотрицательности величины

$$D = \left| \frac{x - \bar{x}}{2(\Delta x)^2} F + \frac{\partial F}{\partial x} \right|^2.$$

Раскрывая это выражение, получаем:

$$\begin{aligned} D &= \frac{(x - \bar{x})^2}{4(\Delta x)^4} FF^* + \frac{x - \bar{x}}{2(\Delta x)^2} \times \left( F \frac{\partial F^*}{\partial x} + F^* \frac{\partial F}{\partial x} \right) + \frac{\partial F}{\partial x} \frac{\partial F^*}{\partial x} = \\ &= \frac{(x - \bar{x})^2}{4(\Delta x)^4} FF^* + \frac{1}{2(\Delta x)^2} \frac{\partial}{\partial x} [(x - \bar{x}) FF^*] - \\ &\quad - \frac{FF^*}{2(\Delta x)^2} + \frac{\partial}{\partial x} \left( F^* \frac{\partial F}{\partial x} \right) - F^* \frac{\partial^2 F}{\partial x^2} \geq 0. \end{aligned}$$

Умножим последнее равенство на  $dx$  и проинтегрируем в бесконечных пределах. Заметим при этом, что  $FF^* = ff^* = |f|^2$ . Используя обозначения (5) и (2), можно записать

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} D dx &= \frac{1}{4(\Delta x)^2} + \frac{1}{2(\Delta x)^2} [(x - \bar{x}) FF^*] \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \\ &\quad - \frac{1}{2(\Delta x)^2} + \left[ F^* \frac{\partial F}{\partial x} \right] \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} F^* \frac{\partial^2 F}{\partial x^2} dx \geq 0. \end{aligned}$$

Если  $F$  достаточно быстро стремится к нулю при  $x \rightarrow \pm \infty$ , то второй и четвертый члены обращаются в нуль, так что

$$-\frac{1}{4(\Delta x)^2} - \int_{-\infty}^{+\infty} F^* \frac{\partial^2 F}{\partial x^2} dx \geq 0. \quad (8)$$

Здесь второе слагаемое можно связать с  $\Delta k$ , именно: используя (3) и (7), а также равенство

$$A(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x, 0) e^{-ikx} dx,$$

получаем:

$$\begin{aligned} (\Delta k)^2 &= \frac{1}{I} \int_{-\infty}^{+\infty} (k - \bar{k}) AA^* dk = \frac{1}{I} \int_{-\infty}^{+\infty} (k - \bar{k})^2 A dk \int_{-\infty}^{+\infty} f(x, 0) e^{-2\pi i k x} dx = \\ &= \frac{1}{I} \int_{-\infty}^{+\infty} (k - \bar{k})^2 A dk \int_{-\infty}^{+\infty} F^*(x) e^{2\pi i (k - \bar{k}) x} dx. \end{aligned}$$

Меняя порядок интегрирования, просто найдем:

$$(\Delta k)^2 = \frac{1}{I} \int_{-\infty}^{+\infty} F^*(x) dx \int_{-\infty}^{+\infty} (k - \bar{k}) A e^{2\pi i (k - \bar{k}) x} dk. \quad (9)$$

Чтобы освободиться здесь от интегрирования по  $k$ , прежде всего заметим, что с помощью очевидного равенства

$$f(x, 0) = \int_{-\infty}^{+\infty} A(k) e^{ikx} dk$$

выражение (7) можно переписать в виде

$$F(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} A(k) e^{2\pi i (k - \bar{k}) x} dk;$$

дважды продифференцировав это равенство, получим:

$$\frac{\partial^2 F(x)}{\partial x^2} = -4\pi^2 \int_{-\infty}^{+\infty} (k - \bar{k})^2 A e^{2\pi i (k - \bar{k}) x} dk.$$

Подстановка полученного выражения в (9) дает:

$$(\Delta k)^2 = -\frac{1}{4\pi^2 I} \int_{-\infty}^{+\infty} F^* \frac{\partial^2 F}{\partial x^2} dx.$$

Таким образом, здесь получается интеграл, уже знакомый нам по соотношению (8), которое теперь можно переписать в виде

$$-\frac{I}{4(\Delta x)^2} + 4\pi^2 I (\Delta k)^2 \geq 0.$$

Отсюда на основании неравенства  $I > 0$  следует соотношение (6). Произведение  $\Delta k \cdot \Delta x$  принимает минимальное значение  $(4\pi)^{-1}$  при  $D=0$ , иначе говоря, при выполнении условия

$$\frac{x - \bar{x}}{2(\Delta x)^2} F + \frac{\partial F}{\partial x} = 0.$$

Интегрируя последнее равенство, получаем:

$$F = ce^{-\frac{(x - \bar{x})^2}{4(\Delta x)^2}}$$

или

$$f(x, 0) = c \exp \left\{ -\frac{(x - \bar{x})^2}{4(\Delta x)^2} + 2\pi i k x \right\} \quad (10)$$

(синусоида, модулированная кривой типа Гаусса с максимумом при  $x = \bar{x}$ ).

Интересно (и вполне закономерно), что фурье-амплитуда  $A(k)$  имеет при этом форму, аналогичную  $F(x)$ , причем вместо  $x$  и  $\bar{x}$  в ней фигурируют, конечно,  $k$  и  $\bar{k}$ .

Доказательство равенства (6) можно без труда распространить на случай трехмерной области. Учитывая, что  $k = (1/h)p$ , получаем соотношение (13.6), что и требовалось доказать.

К стр. 115 (\*) При определении детерминантов удобно использовать символ Леви-Чивиты  $\varepsilon_{ij \dots l}$  — полностью антисимметричный аксиальный тензор ранга (валентности), совпадающего с размерностью  $n$  рассматриваемого пространства, т. е. в данном случае — с порядком матрицы, причем  $\varepsilon_{12 \dots n} = +1$ . Тогда

$$\varepsilon_{ij \dots l} \det A = \sum_{p, q, \dots, s} a_{pi} a_{qj} \dots a_{sl} \varepsilon_{pq \dots s}$$

или

$$\det A = \frac{1}{n!} \sum_{\substack{p, q, \dots, s \\ i, j, \dots, l}} \varepsilon_{ij \dots l} \varepsilon_{pq \dots s} a_{pi} a_{qj} \dots a_{sl}.$$

Отсюда нетрудно получить алгебраическое дополнение к элементу  $a_{ip}$  матрицы  $A$  (т. е.  $\text{Adj } a_{ip}$ ), взяв просто

$$\text{Adj } a_{ip} = \frac{\partial}{\partial a_{ip}} \det A = \frac{1}{(n-1)!} \sum_{\substack{q, \dots, s \\ j, \dots, l}} \varepsilon_{ij \dots l} \varepsilon_{pq \dots s} a_{qj} \dots a_{sl}.$$

Эти формулы позволяют автоматически получать ряд важных соотношений, используемых в «Конспектах».

К стр. 115 (\*\*) Элементы единичной матрицы можно записать в виде

$$1 = \parallel e_{ij} \parallel, \\ e_{ij} = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{при } i=j, \\ 0 & \text{при } i \neq j. \end{cases}$$

Введенный таким образом тензор второго ранга  $\delta_{ij}$  носит название *дельта-символа Кронекера*. Его можно назвать «оператором замены индекса при суммировании» (в самом деле,  $a_i \delta_{ik} = a_k$ ) точно так же, как  $\delta$ -функцию Дирака — «оператором замены аргумента при интегрировании» [см. формулы (11.21)]. Более того, переходя от матрицы (14.29) к бесконечномерной матрице ( $n \rightarrow \infty$ ) и тем самым к гильбертову пространству функций, мы непосредственно получим  $\delta$ -функцию в матричной записи, причем сама единичная матрица переходит при этом в матрицу  $\delta$ -функции, умноженную на элемент объема соответствующего пространства.

К стр. 161 (\*) Векторное произведение двух векторов (операторов)  $\mathbf{a}$  и  $\mathbf{b}$  удобно представить в форме  $[\mathbf{a} \times \mathbf{b}]_i = \varepsilon_{ijk} a_j b_k$  и учесть соотношение  $\varepsilon_{ijk} \varepsilon_{ilm} = \delta_{jl} \delta_{km} - \delta_{jm} \delta_{kl}$  ( $\varepsilon_{ijk}$  — трехмерный символ Леви-Чивиты; по повторяющимся индексам подразумевается суммирование от 1 до 3).

К стр. 175 (\*) Полезно заметить, что в релятивистской механике энергия представляет собой четвертую компоненту четырехмерного вектора импульса; ее сохранение следует из свойств однородности (симметрии по отношению к трансляциям) времени. Важно, что и *структура сохраняющихся величин* может быть получена при рассмотрении соответствующих свойств симметрии.

К стр. 181 (\*) Группой  $G$  называется совокупность элементов произвольной природы, для которых определена групповая операция («умножение») и которые удовлетворяют следующим условиям:

1) Результат «умножения» двух элементов группы является также элементом этой группы: если  $A \in G$ ,  $B \in G$ , то  $AB \in G$ .  
2) Среди элементов группы должен быть единичный элемент ( $IA = AI = A$ ,  $I \in G$ ).

3) Каждому элементу группы соответствует обратный ему элемент, содержащийся в этой группе ( $A^{-1}A = AA^{-1} = I$ ,  $A \in G$ ,  $A^{-1} \in G$ ).

4) Групповая операция подчиняется ассоциативному закону:

$$A(BC) = (AB)C.$$

Заметим, что, вообще говоря, групповая операция некоммутативна, т. е.

$$AB \neq BA.$$

Важным примером группы является совокупность всех неособенных квадратных  $n \times n$ -матриц; из них группу же образуют все унитарные матрицы (подгруппа предыдущей). Если между всеми элементами некоторой данной группы и соответствующими элементами группы унитарных  $n \times n$ -матриц можно установить однозначное соответствие, то исследование исходной группы сводится к исследованию группы унитарных матриц, и последняя называется представлением первой.

Теория групп широко используется в теоретической физике, особенно в квантовой механике и в теории элементарных частиц. Прежде всего, как мы сейчас видели, симметрия относительно групп преобразований связана с законом сохранения физических величин. Эти законы сохранения в их групповой интерпретации полезны при классификации элементарных частиц и их взаимодействий. Естественно, что и в квантовой механике состояния систем удобно классифицировать на групповой основе (см. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, „Квантовая механика“, М., 1963, § 96). Если симметрия, свойственная невозмущенному гамильтониану (в теории возмущений, см. лекции 21—23), нарушается при наложении возмущения, то снятие исходного вырождения уровней можно определить, исходя из поведения возмущающего гамильтониана относительно рассматриваемых групп преобразований.

Наконец, эта же связь законов сохранения с группами преобразований определяет вероятности допустимых квантовых переходов между различными состояниями физических систем, т. е. позволяет просто получать правила отбора и оценивать матричные элементы, соответствующие этим переходам.

Из теории представлений групп следуют, с другой стороны, трансформационные свойства волновых функций, описывающих частицы и системы частиц, и простейшие формы дифференциальных уравнений, которым должны удовлетворять эти функции. Так можно, например, прийти (исходя из группы Лоренца) к уравнению Дирака (другой подход к которому см. в лекции 34) и к (би-) спинорам. Этот аспект проблемы, конечно, тесно связан и с законами сохранения; он в равной мере существен в теории квантованных полей и элементарных частиц.

Имея в виду, что отличная книга Б. Л. Ван-дер-Вардена „Метод теории групп в квантовой механике“ (Харьков, 1938) стала уже большой редкостью, читателю следует рекомендовать для изучения этих вопросов следующие книги: Г. Я. Любарский, „Теория групп и ее применение в физике“, М., 1957; В. Хейне, „Теория групп в квантовой механике“, ИЛ, 1963, и Е. Вигнер, „Теория групп и ее приложения к квантовой механике“, ИЛ, 1961, где можно найти более полное перечисление соответствующей литературы.

*К стр. 185 (\*)* В задаче многих тел ( $n \geq 2$ , где  $n$  — число тел) количество неизвестных равно  $3n$  (число степеней свободы); однако нетрудно упростить эту задачу, снизив число неизвестных на 3. Именно, переходя к системе центра масс, заметим, что координаты центра масс системы являются *циклическими переменными* (см. стандартные курсы классической механики), и их можно отбросить, не нарушая общности рассмотрения. Отсюда следует универсальность использования относительных координат частиц, составляющих рассматриваемую изолированную физическую систему, и практическая предпочтительность системы центра масс.

К стр. 197 (\*) Здесь  $U(r)$  — энергия взаимодействия заряженной частицы с кулоновским центром. Таким образом, выражение (21.25) представляет собой гамильтониан одной бесспиновой частицы, движущейся в магнитном и центральном кулоновском полях.

Раскрывая квадрат  $\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}\right)^2$ , необходимо иметь в виду, что оператор  $\mathbf{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla$ , вообще говоря, не коммутирует с вектором  $\mathbf{A}$ . Однако  $\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} - \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} = \frac{\hbar}{i} (\nabla \cdot \mathbf{A})$ ; при этом стоящую справа величину  $\text{div } \mathbf{A}$  в статическом случае можно обратить в нуль с помощью градиентного преобразования, что здесь и используется.

К стр. 199 (\*) Несколько замечаний по поводу „правил отбора“, характеризующих возможные переходы между различными энергетическими уровнями: вспоминая, что эволюция системы (т. е. изменение  $\psi$ -функции во времени) описывается  $S$ -матрицей (см. лекцию 19), можно без труда заключить, что переход между состояниями  $\psi_a$  и  $\psi_b$  возможен, если только  $\langle \psi_b | S \psi_a \rangle \neq 0$ . В противном случае переход запрещен. Правила, по которым должны изменяться квантовые числа при разрешенных переходах, и называются *правилами отбора*. Поскольку эволюция системы рассматривается в рамках теории возмущений, в первом порядке достаточно ограничиться членом разложения  $S$ -матрицы, пропорциональным первой степени гамильтониана  $\mathcal{H}$ . Разрешенными будут, таким образом, те переходы, для которых матричные элементы гамильтониана отличны от нуля. На основании гамильтониана (24.1) и свойств ортогональности волновых функций легко найти соответствующие правила отбора:

$$\Delta m = \pm 1 \text{ или } 0 \quad \left( m \begin{matrix} \nearrow m \pm 1 \\ \searrow m \end{matrix} \right).$$

К стр. 215 (\*) Выражение (23.11) для вероятности  $n \rightarrow s$  перехода системы, очевидно, характеризует распределение конечных энергетических состояний в зависимости от времени  $t$ . С другой стороны, согласно соотношению неопределенностей (13.7),  $\delta t \delta E \approx \hbar$ . Между этими обстоятельствами существует следующая взаимосвязь (которую и предлагает на обсуждение читателю Э. Ферми): границы центрального (соответствующего наименьшим изменениям энергии) максимума функции (23.11) определяются равенством  $(t/2\hbar) (E_0^{(1)} - E_0^{(n)}) = \pm \pi$  или  $t^{1/2} (E_0^{(s)} - E_0^{(n)}) = \pm \hbar$ ; подобным же образом определяются и границы побочных максимумов вероятности перехода. С ростом времени  $t$  эти области постепенно суживаются, концентрируясь около исходной энергии  $E_0^{(n)}$ , что соответствует смыслу соотношения неопределенностей (13.7).

К стр. 217 (\*) Так как  $\Delta(1/r) = -4\pi\delta(r)$ , то на основании формулы (11.22) для фурье-образа функции  $1/r$  имеем  $(1/2\pi^2) (1/k^2)$ . При подстановке в интеграл (23.20) получим при этом

$$\begin{aligned} \int \frac{e^{\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p} - \mathbf{p}') \cdot \mathbf{r}}}{r} d^3x &= \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{d^3k}{k^2} \int \exp \left\{ i \left( \frac{\mathbf{p} - \mathbf{p}'}{\hbar} + \mathbf{k} \right) \cdot \mathbf{r} \right\} d^3x = \\ &= \frac{(2\pi)^3}{2\pi^2} \int \frac{\delta \left( \mathbf{k} + \frac{\mathbf{p} - \mathbf{p}'}{\hbar} \right)}{k^2} d^3k = \frac{4\pi\hbar^2}{|\mathbf{p} - \mathbf{p}'|^2}. \end{aligned}$$

К стр. 233 (\*) В однородном магнитном поле вектор спинового магнитного момента должен, естественно, прецессировать, но в случае неоднородного поля кроме пары сил имеется еще сила, приводящая к поступательному движению. Именно это обстоятельство привело к известным результатам опыта Штерна и Герлаха, правильно интерпретированным Уленбеком и Гаудсмитом (см. курс Д. И. Блохинцева „Основы квантовой механики“, М., 1961, стр. 24, 196 и далее).

К стр. 243 (\*) Векторная модель. Можно сформулировать простые и удобные правила для определения основных характеристик (квантовых чисел) сложных систем, содержащих несколько электронов. Прежде всего проекции результирующих векторов моментов должны быть кратными  $\hbar$ , причем, кроме целых коэффициентов (квантовых чисел), как при сложении орбитальных моментов, в случае участия спиновых моментов электронов возможны также полуцелые числа. Это соответствует дискретным допустимым поворотам векторов моментов в пространстве. Например, при сложении моментов двух электронов с  $l=2$  и  $l=3$  соответственно получается следующая совокупность возможных результирующих значений  $k: 1, 2, 3, 4$  и  $5$ . Для каждого из этих состояний по отдельности значения магнитного квантового числа определяются обычным образом. Этот способ нахождения результирующих квантовых чисел можно связать с теорией групп; он значительно проще, чем использование в вычислениях модулей соответствующих векторов [например,  $\sqrt{l(l+1)}$  и  $\sqrt{s(s+1)}$ ] с последующим требованием, чтобы взаимная ориентация этих векторов соответствовала целым значениям результирующего  $l$  и целым либо полуцелым значениям результирующего  $s$ . Вместе с тем оба подхода полностью эквивалентны.

Применяя метод векторной модели, удобно пользоваться наглядными диаграммами [не отражающими, однако, непосредственно *реальной* ориентации соответствующих векторов в пространстве и даже не учитывающими правильного определения модуля этих векторов (типа  $\sqrt{l(l+1)}$ )]. На таких вспомогательных диаграммах в качестве длины новых (вспомогательных) векторов принимаются значения проекции соответствующих *реальных физических* векторов на выделенную ось. (См., например, книгу Г. Семата „Введение в атомную физику“, ИЛ, 1948, гл. 6. § 84).

К стр. 245 (\*) Здесь Ферми, по-видимому, привлекла наглядность интерпретации „в  $s$ -состоянии  $l=0$  и, следовательно,  $sl$ -взаимодействие равно нулю“. Помня результат строгого расчета  $\delta_1 E(2s) + \delta_2 E(2s) = - (5/128) (e^8 m / \hbar^4 c^2)$ , он записал  $\delta_2 E(2s) = - (5/128) \dots$ . Более точный расчет дает  $\delta_1 E(2s) = - (1/16) e^8 m / \hbar^4 c^2$ ,  $\delta_2 E(2s) = - (13/128) e^8 m / \hbar^4 c^2$  и в результате  $\delta_1 E(2s) + \delta_2 E(2s) = - (5/128) (e^8 m / \hbar^4 c^2)$  [см., например, формулу (42.21) у Шиффа для  $n=2$ ,  $l=0$ ].

При  $l=0$ , вообще говоря, получается *не нулевое* значение  $\delta_1 E$ , если учесть *контактное взаимодействие* [см. книгу А. А. Соколова, Ю. М. Лоскутова и И. М. Тернова „Квантовая механика“ (М., 1962), стр. 338—339, формулы (20.10) и (20.15)]. Однако этот подход все же можно применять при  $l=0$ , если одновременно  $J = L + 1/2$ , так как расходимость типа  $1/l$  компенсируется тогда линейной зависимостью числителя от  $l$  [см. формулы (39.4) и (39.5) у Шиффа].

К стр. 249 (\*) Приведенные в этой лекции выводы не являются последовательными с точки зрения полного синтеза релятивистской теории и теории, учитывающей спин электрона. Даже в такой теории учет спин-орбитального взаимодействия приводит к более полным результатам, если использовать некоторые простые следствия теории представлений групп (см. лекцию 29), после рассмотрения которых тем не менее полезно оглянуться на выводы этой лекции.

С более детальной теорией эффекта Зеемана можно ознакомиться, например, по учебнику Д. И. Блохинцева.



К стр. 257 (\*) В микромире частицы одного „сорта“ *тождественны* не только в том смысле, что их свойства (масса покоя, заряд и пр.) в точности совпадают между собой, но и ввиду принципиальной невозможности проследить эволюцию индивидуальной частицы в системе (вследствие соотношений неопределенности не существует траекторий частиц!).

К стр. 261 (\*) Полученный вывод очень просто вытекает из теоремы Вигнера (28.15). В самом деле, так как кеты  $|n, j, m\rangle$ , взятые в качестве базисных векторов, при различных  $j$  или  $m$  приводят к разным неприводимым представлениям группы поворотов (или, как говорят чаще, но менее точно, вращений), то матричные элементы оператора  $\hat{A}$ , коммутирующего со всеми операторами этой группы, должны быть равны нулю при  $m' \neq m$  и  $j' \neq j$ .

Следующие теоремы и их следствия вытекают из теоремы (28.22).

К стр. 283 (\*) Квантовая статистика представляет собой обширный раздел науки. Здесь мы приведем лишь несколько основных понятий и результатов этой теории. Хорошее систематическое изложение квантовой статистики можно найти в монографии А. Я. Хинчина „Математические основания квантовой статистики“, М., 1951; вопросы, затронутые в этой части лекций Э. Ферми, у Хинчина излагаются в гл. III (§§ 3 и 5).

Соответственно свойствам симметрии волновых функций систем частиц следует говорить о *статистике Бозе—Эйнштейна* (симметричная статистика) и о *статистике Ферми — Дирака* (антисимметричная статистика). Принцип Паули и дальнейшее обсуждение, приведенное Э. Ферми, достаточно хорошо характеризуют основные утверждения указанных альтернативных статистик. Таким образом, в статистике Бозе—Эйнштейна одинаковые частицы симметричны в отношении занимаемых ими положений (в широком смысле—включая как просто координаты, так и всевозможные внутренние характеристики в совокупности) и не „мешают“ друг другу занимать одинаковые физические состояния. Напротив, в статистике Ферми — Дирака одинаковые частицы в указанном смысле антисимметричны, и действует принцип исключения Паули. Здесь существенно подчеркнуть *принципиальную неразличимость* рассматриваемых одинаковых частиц. Если же из понятия „неразличимости“ исключить хотя бы соображения принципа неопределенности Гейзенберга, то мы пришли бы (в симметричном варианте) к известной из классической теории статистике Больцмана („полная статистика“, по терминологии Хинчина). Однако с другой точки зрения можно говорить, что в некотором смысле статистика Больцмана лежит *между* двумя альтернативными квантовыми статистиками, и по сравнению с ней статистика Бозе—Эйнштейна более благоприятствует накоплению одинаковых частиц в одном и том же физическом состоянии, а статистика Ферми — Дирака соответствует своего рода „расталкиванию“.

Для различных статистик характерны различные определения статистических весов состояний физических систем. Именно: каждому *конкретному* набору чисел заполнения  $N_1, N_2, \dots, N_s$  (при данном числе частиц в системе и данной полной энергии) соответствует, вообще говоря, несколько конфигураций. Иначе говоря, каждое состояние должно браться с некоторым *статистическим весом*, который нетрудно вычислить для каждой конкретной статистики.

В статистике Больцмана (неразличимости нет!) статистический вес состояния, задаваемого конкретными значениями  $N: N_1, N_2, \dots, N_s, \dots$ , равен

$$\Omega_B = \frac{N!}{N_1! N_2! \dots N_s!} \quad (30.23a)$$

и определяется как число различных способов, с помощью которых можно расставить группу из одинаковых (но различных)  $N$  элементов, распадающуюся на подгруппы из  $N_1, N_2, \dots, N_s, \dots$  элементов.

В статистике Бозе—Эйнштейна все частицы неразличимы (рассматриваются частицы одного и того же сорта, например фотоны или л-мезоны), а волновые функции симметричны по всем частицам. Тогда при попытке переставить частицы (как в статистике Больцмана) мы в противоположность статистике Больцмана вовсе не получим нового состояния системы. Следовательно, в статистике Бозе—Эйнштейна статистический вес любого реализуемого состояния всегда равен единице:

$$\Omega_{B-E} = 1. \quad (30.236)$$

В статистике Ферми—Дирака статистический вес может принимать два значения: 0 и 1. Первое (нуль)—в том случае, когда хотя бы одно число заполнения больше 1; второе (единица)—во всех остальных случаях (когда все числа заполнения равны либо 0, либо 1):

$$\Omega_{F-D} = \begin{cases} 0, \\ 1. \end{cases} \quad (30.23в)$$

Для знакомства с основами квантовой статистики можно также рекомендовать книгу Э. Ферми, „Молекулы и кристаллы“, ИЛ, 1947, ч. III.

К стр. 289(\*) Следует заметить, что пара- и ортосостояния атома гелия в некотором смысле изолированы друг от друга, так как существует запрет перехода от одних к другим (соответствующие матричные элементы в низшем порядке теории обращаются в нуль). Этот запрет, конечно, не абсолютен, и существует возможность интеркомбинаций состояний, характеризуемая, однако, весьма большим временем, так что соответствующие линии в спектре гелия очень слабы (Зоммерфельд, „Строение атома и спектры“, т. II, стр. 529).

К стр. 299(\*) Переходы между пара- и ортосостояниями молекул водорода [как и между пара- и ортогелием (см. лекцию 31)] запрещены, так что эти состояния не „смешиваются“. Так как полный ядерный спин параводородного атома равен нулю, ему соответствует лишь одна (нулевая) проекция на выделенную ось; в случае ортоводорода возможны три проекции (+1, 0 и —1), так как полный ядерный спин в этом случае равен единице. Таким образом, с точки зрения вероятности статистического распределения по состояниям можно заключить, что в условиях термодинамического равновесия молекулы пара- и ортоводорода представлены в пропорции 1:3. Это обстоятельство приводит к важным следствиям, отлично подтверждаемым экспериментом. Именно таково, например, соотношение *интенсивностей* соответствующих линий вращательных спектров молекулярного водорода. Только таким распределением удастся объяснить также поведение вращательной теплоемкости газобразного водорода  $H_2$  при низких температурах. Эти эффекты представляют собой весьма наглядные *макроскопические* проявления таких своеобразных *квантовых* законов, как принцип Паули, запреты переходов и, наконец, наличие спина у протона. Конечно, и здесь существует (весьма малая) вероятность переходов между пара- и ортосостояниями, приводящая к появлению слабых спектральных линий. По этим вопросам и в связи с полосатыми спектрами двухатомных молекул см. монографию А. Зоммерфельда, „Строение атома и спектры“ (т. I, стр. 488 и далее, т. II, стр. 553), а также книгу Э. Ферми, „Молекулы и кристаллы“.

К стр. 319(\*) Рассмотренные выше соотношения касаются одночастичного состояния, хотя нетрудно было бы рассмотреть случай системы  $N$  частиц. Тогда было бы полезно вновь ввести *числа заполнения*, с помощью которых удобно дать предварительное определение понятия физического

вакуума. В этом смысле вакуумом можно назвать такое состояние, при котором все числа заполнения, соответствующие реальным частицам, равны нулю. Читатель заметит осторожность выражения „реальные частицы“; дело в том, что состояния с отрицательными энергиями не имеют непосредственного физического смысла, и Дирак предложил считать электроны с  $E < 0$  *принципиально ненаблюдаемыми*. Говоря о различных значениях чисел заполнения, мы апеллируем уже к теории с переменным числом частиц — к квантовой теории поля (вторичное квантование!), где и дается наиболее полное определение понятия физического вакуума (см., например, Н. Н. Боголюбов и Д. В. Ширков, „Введение в теорию квантованных полей“, М., 1957, стр. 75; С. Шегерер, „Введение в релятивистскую квантовую теорию поля“, ИЛ, 1963, стр. 135, 216, 245, 616).

Если, следуя Дираку, считать ненаблюдаемыми все электроны отрицательных энергий, то, во-первых, устраняется трудность, связанная с принципом минимума энергии. Именно, если бы состояния с  $E < 0$  были свободны, а с  $E > 0$  имелось хотя бы одно занятое состояние, то электрон стремился бы перейти оттуда в состояние с  $E < 0$ , причем  $E \rightarrow -\infty$ , а  $|\mathbf{p}| \rightarrow +\infty$  [см. (34.25)], и мы пришли бы к бессмысленному результату (самоускорению электронов!). Следует заметить, что в классической теории указанная трудность отсутствует, так как между уровнями  $E > 0$  и  $E < 0$  существует свободный интервал  $\Delta E = 2mc^2$ , а дискретные скачки энергии в классических системах невозможны. С другой стороны, возможно (затратив соответствующее количество энергии) „вырвать“, например, один электрон из состояния с  $E < 0$  и придать ему положительную энергию, так что он *станет наблюдаемым*. (Здесь содержится неявное предположение о „косвенной“ наблюдаемости и электронов с отрицательной энергией ввиду существования взаимодействия, переводящего их на положительные энергетические уровни.) Одновременно на фоне вакуума появится „дырка“, которая будет вести себя во всех отношениях как частица с  $E > 0$ , но знака заряда, противоположного знаку заряда электрона (см. фиг. 32). Электрон и „дырка“ могут снова встретиться и электрон вновь попадет на уровень с  $E < 0$ , став тогда ненаблюдаемым (аннигиляция); при этом будет излучен фотон (к тому же не один, а по крайней мере два или три), унося затраченную вначале энергию.

К стр. 319(\*\*) „Море“ ненаблюдаемых электронов Дирака с отрицательной энергией. В нем изображена одна „дырка“ — позитрон; в области положительной энергии виден один электрон, вырванный из ненаблюдаемого состояния (пара электрон — позитрон).

К стр. 331 (\*) Здесь полезно воспользоваться свойством  $\sigma_i \sigma_k = \delta_{ik} I + i \epsilon_{ikl} \sigma_l$ , где  $\epsilon_{ikl}$  — 3-мерный символ Леви-Чивиты (см. комментарии к стр. 115 и 161).

К стр. 339 (\*) Здесь существенно предположение о независимости матриц Дирака  $\gamma^\mu$  от выбора системы отсчета. Другая формулировка теории Дирака была предложена А. Зоммерфельдом (см. „Строение атома и спектры“, т. II, стр. 220 и далее).

К стр. 339(\*\*) Мы изменили выражение (37.3) ( $T \rightarrow T^{-1}$ ), чтобы сохранить форму дальнейших рассуждений автора, однако ниже в аналогичном случае формула, предшествующая (37.32), и последующие формулы оставлены без изменений, так как это не отражается на полученных результатах.

К стр. 353 (\*) Последний результат важен для квантовой теории поля и является основой альтернативы „дырочной“ интерпретации позитрона. Тогда оказывается, что последовательный учет статистики Ферми — Дирака приводит к положительно определенной энергии электрононо-

позитронного поля, в то время как знак заряда этого поля становится неопределенным (без учета принципа Паули все было бы наоборот!). Поэтому уже нет необходимости вводить гипотезу о „море“ ненаблюдаемых электронов отрицательной энергии.

Лагранжиан свободного электронно-позитронного поля имеет вид

$$\mathcal{L}_{sp} = -\frac{\hbar c}{2} \left( \bar{\psi} \gamma^\mu \frac{\partial \psi}{\partial x^\mu} - \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial x^\mu} \gamma^\mu \psi \right) - mc^2 \bar{\psi} \psi.$$

Для учета взаимодействия с электромагнитным полем к нему следует добавить лагранжиан взаимодействия

$$\mathcal{L}_{int} = ie \bar{\psi} \gamma^\mu \psi A_\mu.$$

Варьируя полный интеграл действия, получим уравнение (37.1) и сопряженное ему. Легко проверить, что в силу этих уравнений полный лагранжиан электронно-позитронного поля обращается в нуль.

Последние вопросы, рассмотренные Ферми в его лекциях, чаще излагаются в курсах квантовой теории поля, с которой связано и все их дальнейшее развитие (см. многочисленные курсы и монографии по квантовой электродинамике и квантовой теории поля).

**Энрико Ферми**  
**КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА**

Второе издание

Редактор Н. Телеснин

Художник Л. Лерман

Художественный редактор С. Подмарькова

Технический редактор Л. Харьковская

Корректор В. И. Николаева

Подписано к печати с матриц 6/V 1968 г.

Бумага № 1  $60 \times 90^{1/16} = 11,5$  бум. л.

23,0 печ. л.

Уч.-изд. л. 18,76. Изд. № 2/4513

Цена 1 р. 58 к. Зак. 2643

ИЗДАТЕЛЬСТВО «МИР»

Москва, 1-й Рижский пер., 2

Ордена Трудового Красного Знамени  
Первая Образцовая типография  
имени А. А. Жданова Главполиграфпрома  
Комитета по печати  
при Совете Министров СССР  
Москва Ж-54. Валовая, 28



1p.58x.

