

TAXIOL

# Quantum Mechanics

*A Modern Development*

Leslie E. Ballentine

*Simon Fraser University*



**World Scientific**

*Singapore • New Jersey • London • Hong Kong*

Леслі Е. Балентайн

# **КВАНТОВА МЕХАНІКА В СУЧАСНОМУ ВИКЛАДІ**

Видавництво

**TAXION**

Перекладено за виданням:  
Ballentine, Leslie E.,  
*Quantum Mechanics: A Modern Development*,  
World Scientific, 2000.

Переклав з англійської  
*Олег Авраменко.*

# Зміст

<b>Вступ. Квантовомеханічні явища . . . . .</b>	<b>1</b>
<b>Розділ 1. Математичні передумови . . . . .</b>	<b>7</b>
§ 1.1. Лінійний векторний простір . . . . .	8
§ 1.2. Лінійні оператори . . . . .	12
§ 1.3. Самоспряжені оператори . . . . .	15
§ 1.4. Гільбертів простір і оснащений гільбертів простір . . . . .	26
§ 1.5. Теорія ймовірності . . . . .	31
Задачі . . . . .	41
<b>Розділ 2. Формулювання квантової механіки . . . . .</b>	<b>45</b>
§ 2.1. Основні теоретичні поняття . . . . .	45
§ 2.2. Умови для операторів . . . . .	51
§ 2.3. Загальні стани та чисті стани . . . . .	53
§ 2.4. Розподіл імовірності . . . . .	59
Задачі . . . . .	64
<b>Розділ 3. Кінематика та динаміка . . . . .</b>	<b>67</b>
§ 3.1. Перетворення станів і спостережних величин . . . . .	67
§ 3.2. Симетрії простору-часу . . . . .	70
§ 3.3. Генератори групи Галілея . . . . .	72
§ 3.4. Ідентифікація операторів з динамічними змінними . . . . .	81
§ 3.5. Композитні системи . . . . .	90
§ 3.6. Квантування класичної системи . . . . .	93
§ 3.7. Рівняння руху . . . . .	94
§ 3.8. Симетрії та закони збереження . . . . .	98
Задачі . . . . .	100
<b>Розділ 4. Координатне представлення та його застосування . . . . .</b>	<b>102</b>
§ 4.1. Координатне представлення . . . . .	102
§ 4.2. Хвильове рівняння та його інтерпретація . . . . .	104
§ 4.3. Перетворення Галілея для рівняння Шродінгера . . . . .	107
§ 4.4. Струм імовірності . . . . .	110
§ 4.5. Умови для хвильових функцій . . . . .	112
§ 4.6. Власні функції оператора енергії вільних часток . . . . .	115
§ 4.7. Тунельний ефект . . . . .	117
§ 4.8. Функціональні інтеграли . . . . .	123

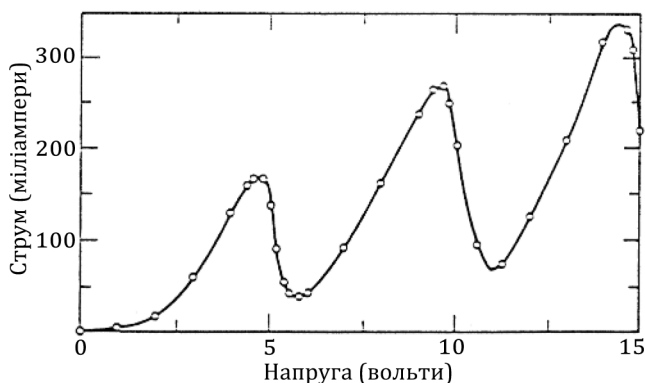
Задачі . . . . .	130
<b>Розділ 5. Імпульсне представлення та його застосування . . . . .</b>	<b>133</b>
§ 5.1. Імпульсне представлення . . . . .	133
§ 5.2. Розподіл імпульсу в атомі . . . . .	136
§ 5.3. Теорема Блоха . . . . .	138
§ 5.4. Дифракційне розсіяння: теорія . . . . .	140
§ 5.5. Дифракційне розсіяння: експеримент . . . . .	147
§ 5.6. Рух в однорідному силовому полі . . . . .	153
Задачі . . . . .	157
<b>Розділ 6. Гармонійний осцилятор . . . . .</b>	<b>159</b>
§ 6.1. Алгебраїчне рішення . . . . .	159
§ 6.2. Рішення в координатному представленні . . . . .	162
§ 6.3. Рішення в представленні гамільтоніана . . . . .	165
Задачі . . . . .	167
<b>Розділ 7. Момент імпульсу . . . . .</b>	<b>169</b>
§ 7.1. Власні значення та матричні елементи . . . . .	169
§ 7.2. Явний вигляд оператора моменту імпульсу . . . . .	173
§ 7.3. Орбітальний момент імпульсу . . . . .	175
§ 7.4. Спін . . . . .	180
§ 7.5. Скінченні обертання . . . . .	184
§ 7.6. Повне обертання . . . . .	191
§ 7.7. Додавання моментів імпульсу . . . . .	194
§ 7.8. Непривідні тензорні оператори . . . . .	202
§ 7.9. Обертальний рух твердого тіла . . . . .	210
Задачі . . . . .	213
<b>Бібліографія . . . . .</b>	<b>216</b>

## Вступ

### Квантовомеханічні явища

Квантова механіка є загальною теорією. Як уявляється, її можна застосувати до всього на світі — від атомів та молекул до зірок і галактик. Проте з природних причин найбільший інтерес викликають ті явища, що є найвизначнішими для квантової механіки і свого часу призвели до її відкриття. Замість переповідати історичний розвиток квантової механіки, про що можна прочитати в багатьох книжках<sup>1</sup>, проілюструємо квантові явища у трьох їхніх характерних проявах — *дискретності*, *дифракції* та *когерентності*. Буде повчально порівняти оригінальні досліди, що призвели до нових відкриттів, з їх відтворенням за допомогою сучасних технологій.

З явища *дискретності* постала сама назва квантової механіки. Певні динамічні змінні могли набувати лише дискретного, квантованого набору значень у цілковитій суперечності до передбачень класичної механіки. Перше пряме свідчення дискретності атомних рівнів енергії було отримано Франком і Герцом у 1914 році. В їхньому експерименті електро-

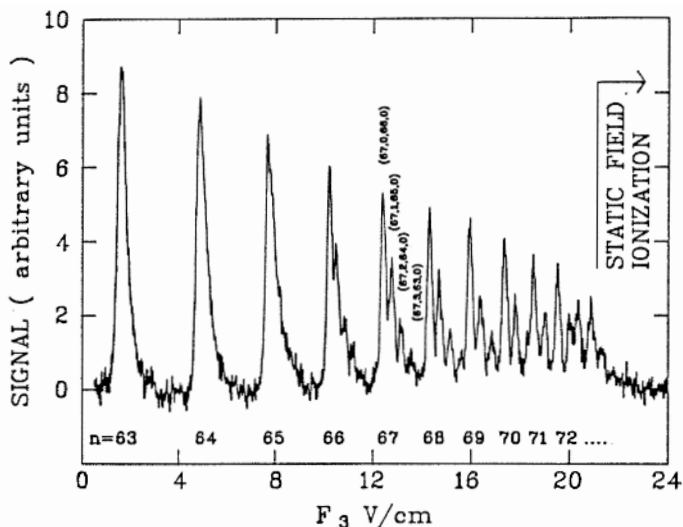


**Рис. 1.** Сила струму через трубку зі ртутною парою в залежності від напруги, за даними Франка і Герца (1914).

<sup>1</sup> Дивіться, наприклад, Айсберг і Резнік [56] для початкового знайомства, або Джамер [95] для подальшого вивчення.

ни, випущені розжареним катодом, проходили через наповнену ртутною парою трубку до анода під дією зовнішньої різниці потенціалів. Залежність струму від напруги, як показано на Рис. 1, не є монотонною, а має серію піків з періодичністю 4,9 вольтів. Тепер нам відомо, що це енергія, необхідна для переведення атома ртуті в перший збуджений стан. Коли напруга стає достатньою для того, щоб електрон набув кінетичної енергії 4,9 eВ, він при зіткненні з атомом передає йому свою енергію. Коли напруга перевищує 4,9 В більш ніж удвічі, електрон на шляху до анода може збудити два атоми ртуті, що й пояснює послідовність піків на Рис. 1.

Утім, ці піки дуже широкі, тому не можуть незаперечно свідчити про наявність чисто дискретних енергетичних рівнів у атомі. І справді, якби не було інших, переконливіших доказів, скептик мав би всі підстави сумніватись у висновках із цього досліду. Проте зараз існує можливість, поєднавши лазерне збудження та фільтрування через електричне поле, утворювати пучки, що складаються з атомів у однаковому квантовому стані. На Рис. 2 наведено результати, отримані Кохом та співробітниками (1988), у яких чітко розділено стани водню з головними квантовими

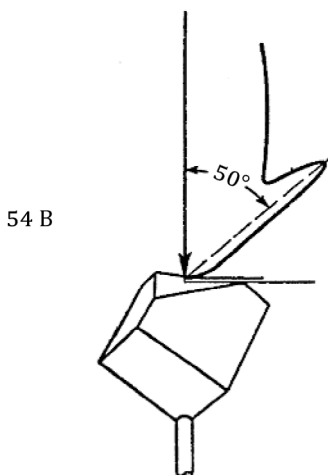


**Рис. 2.** Гострі піки на графіку відповідають різним збудженим станам атомарного водню [передрук з Koch *et al.*, Physica Scripta T 26, 51 (1988)].

числами від  $n = 63$  до  $n = 72$ . А присутність дрібнішим піків пояснюється тим, що для кожного  $n$  існує багато підстанів, вироджених за відсутності електричного поля; найвиразніше їх видно при значенні  $n = 67$ . Регулюючи в цьому досліді частоту лазера і напруженість поля, можна роз-

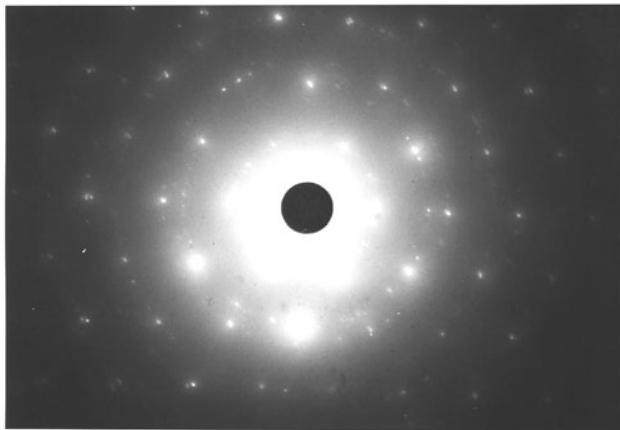


ділити різні атомні стани, а відтак утворити окремі пучки атомів водню з певними заданими квантовими числами. Тепер дискретність атомних рівнів енергії не викликає жодних сумнівів.



**Рис. 3.** Залежність інтенсивності розсіяння електронів від полярного кута в дослідах Девісона і Гермера (1927) свідчить про наявність дифракції.

Явище дифракції, яке найчастіше спостерігається на прикладі світла, загалом характерне для будь-якого хвильового процесу. Воно виникає внаслідок того, що повна амплітуда хвилі є сумою амплітуд часткових хвиль, які приходять до місця призначення різними шляхами. Якщо ці хвилі збігаються у фазі, то їхні амплітуди додаються, утворюючи максимум сумарної інтенсивності; а якщо приходять у протифазі, то взаємно гасять одна одну, і в результаті з'являється мінімум інтенсивності. У 1927 році Девісон і Гермер, виходячи з теоретичного припущення Луї де Бройля про хвильову природу часток, продемонстрували виникнення дифракції при розсіянні електронів на поверхні кристалу нікелю. Деякі їхні дані наведено на Рис. 3, і присутність піку при куті  $50^\circ$  стала доказом електронної дифракції. Через десять років після описаного експерименту Девісон отримав Нобелівську премію з фізики. Сьогодні, маючи в розпорядженні досконаліші технології, навіть студент легко отримає картину електронної дифракції, яка матиме набагато вищу якість ніж ті результати, що в 1937 році були відзначені Нобелівською премією. Зображена на Рис. 4 електронограма графітового кристалу була отримана під час звичайної лабораторної роботи в Університеті Саймона Фрейзера. Гексагональне розташування світлих плям відповідає дифракційному розсіянню від різних кристалічних площин.



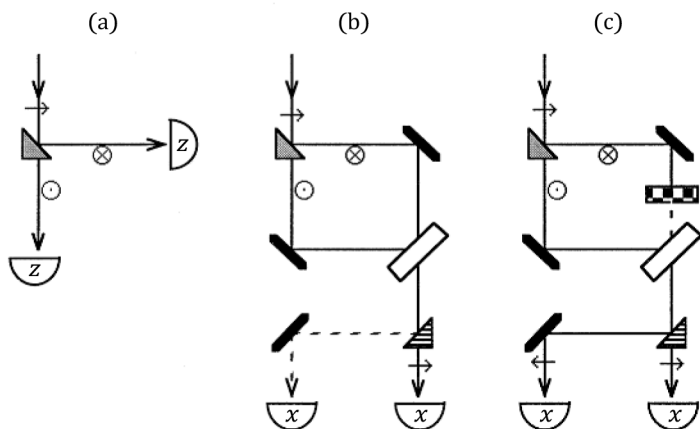
**Рис. 4.** Дифракція 10eV електронів через графітову фольгу; дані отримано в студентському лабораторному експерименті. Деякі плями тьмяні, оскільки фольга містить багато кристалічних блоків, проте гексагональна симетрія зображення очевидна.

Дифракція не є якоюсь унікальною властивістю самих лише електронів. Так само її зазнають усі інші елементарні частки й утворені з них мікроскопічні об'єкти — атоми та молекули. Це універсальне явище, яке ми детальніше обговоримо в Розділі 5. Свого часу відкриття електронної дифракції викликало велику розгубленість серед наукового загалу; всі задавалися питанням, невже частки справді є хвилями і як це пояснити. Ранні досліди з дифракції не давали можливості виявити окремі електрони, на фотографічних плівках фіксувався лише результат розсіювання великої кількості часток. Унаслідок цього сформувалася думка, що корпускулярні та хвильові властивості взаємно несумісні, або *комплементарні* (тобто, доповнювані), в тому розумінні, що для їх спостереження потрібні різні вимірювальні пристрої. Однак це припущення було лише невдалим узагальненням тодішніх технічних обмежень. Тепер існує можливість виявляти окремі електрони й отримати дифракційну картину, як статистичний розподіл дрібних цяток, залишених кожним із них (Тонумура [180]).

У класичній оптиці *когерентність* означає постійну в часі різницю фаз, як необхідну умову виникнення інтерференції. У квантовій теорії поняття когерентності також відсилає нас до постійності фаз, але вже в узагальненій формі, без будь-яких аналогій з хвильовими процесами. За великим рахунком, *когерентна* суперпозиція квантових станів може мати властивості, що якісно відрізнятимуться від поєднання властивостей

складових станів. Наприклад, стан нейтрона зі спіном, орієнтованим у напрямку  $+x$ , можна виразити (у позначеннях, що їх ми детально розглянемо в наступних розділах), як когерентну суму станів з поляризацією  $+z$  і  $-z$ :  $|+x\rangle = (|+z\rangle + |-z\rangle)/\sqrt{2}$ . Аналогічно, стан з поляризацією  $+z$  можна виразити через стани, поляризовані вздовж осі  $x$ :  $|+z\rangle = (|+x\rangle + |-x\rangle)/\sqrt{2}$ .

Експериментальну реалізацію цих формальних співвідношень продемонстровано на Рис. 5. У частині (а) цього рисунка пучок нейтронів, поляризованих у напрямку  $+x$ , потрапляє на прилад, який пропускає крізь себе частки зі спіном, зорієнтованим у  $+z$ , і відбиває ті, чий спін зорієнтовано у  $-z$ . Таким фільтром може бути сильне магнітне поле, спрямоване вздовж осі  $z$ . Енергія магнітного моменту в полі,  $-\mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\mu}$ , діє як потенційна яма для однієї спінової орієнтації і як непроникний потенційний бар'єр для іншої. Ефективність цього пристрою в розділенні  $+z$  і  $-z$  поляризації може бути підтверджена з допомогою детектора, що вимірює  $z$ -складову спіну нейтрона.



**Рис. 5.** (а) Розщеплення  $+x$  поляризованого пучка нейтронів на  $+z$  і  $-z$  компоненти; (б) когерентна рекомбінація цих двох компонентів; (с) розщеплення поляризованого пучка на  $+x$  і  $-x$  компоненти.

У частині (b) обидва пучки знову об'єднуються в один, який проходить через пристрій для розщеплення на  $+x$  і  $-x$  спінові поляризації. Якщо таке об'єднання когерентне і не вносить зсуву по фазі між двома пучками, то буде відтворено стан  $|+x\rangle$ , і в кінцевих детекторах буде виявлено лише  $+x$  поляризацію. В частині (с) пучок  $|-z\rangle$  заблоковано, тому на пристрій для розщеплення потрапляє лише пучок  $|+z\rangle$ . А оскільки  $|+z\rangle = (|+x\rangle + |-x\rangle)/\sqrt{2}$ , цей пучок розділяється на  $+x$  і  $-x$  компоненти.

І хоча експеримент на Рис. 5 є ідеалізованим, кожна його частина ціл-

ком здійснення. Фактично, близькі за змістом досліди було проведено на практиці.

У цьому вступі ми коротко розглянули кілька характерних явищ із царини квантової фізики. Дискретність істотно відрізняється від властивості класичній механіці неперервності. Дифракційне розсіювання пучків часток має строгу аналогію з класичною хвильовою теорією, але й тут присутній елемент дискретності: дифракційна картина, яку ми спостерігаємо в цьому випадку, насправді являє собою статистичний розподіл окремих часток. Можливість об'єднувати квантові стани в когерентні суперпозиції, що якісно відрізняються від їхніх складових, це, можливо, найвідмінніша особливість квантової механіки; вона запроваджує новий, некласичний елемент неперервності. І задача квантової теорії полягає в тому, щоб служити надійним підґрунтям для пояснення всіх цих явищ.

## Розділ 1

### Математичні передумови

Певні математичні теми важливі для квантової механіки не лише для проведення обчислень, а ще й тому, що вони утворюють надзвичайно ефективну мову, з допомогою якої можна сформулювати її теоретичні засади. До таких тем належать теорія лінійних векторних просторів та лінійних операторів у них і теорія ймовірності. Зв'язок між квантовою механікою й лінійною алгеброю виник, як очевидний побічний продукт лінійної природи рівняння Шродінґера. Проте невдовзі теорію було узагальнено за межі її первісних елементарних засад, у ній з'явились абстрактні „хвильові функції“ в  $3N$ -вимірному просторі конфігурації  $N$  часток, а відтак були запроваджені дискретні внутрішні степені свободи, на зразок спіну, що вже не мали жодного стосунку до хвильового руху. Спільною для всіх цих різних випадків математичною структурою є теорія лінійних операторів на векторному просторі. Уніфікована теорія, базована на цій структурі, вперше була запропонована П. А. М. Діраком, і формулювання, що використовуються в цій книзі, на загал є модернізованим варіантом діракового формалізму.

Те, що квантова механіка не дає строго детермінованих передбачень, а швидше маніпулює ймовірностями різних альтернативних можливих подій, було з'ясовано ще на ранніх етапах розвитку теорії, й особливо значна в цьому заслуга Макса Борна. Сучасні застосування дедалі більше залутуються в кореляційних функціях і нетривіальних статистичних розподілах (надто ж у квантовій оптиці), тому виникає потреба у ґрунтовному з'ясуванні стосунків між квантовою теорією та теорією ймовірності.

Фізичний розгляд квантової механіки починається в Розділі 2, і математично підготовлений читач може відразу переходити до нього. А проте, поточний розділ важливий не лише з огляду на наведені в ньому результати; запроваджені в ньому поняття та сама його логічна структура матимуть великий вплив на подальший виклад фізичної теорії, тому ми радили б читачу бодай побіжно ознайомитися з його змістом, перш ніж переходити до наступного.

### § 1.1. Лінійний векторний простір

*Лінійний векторний простір* це множина елементів, що називаються векторами, яка є замкненою відносно операцій додавання та множення на скаляри. Тобто, якщо  $\phi$  і  $\psi$  є векторами, то  $a\phi + b\psi$  також є вектором для будь-якої довільної пари скалярів  $a$  і  $b$ . Якщо скаляри належать до поля комплексних (дійсних) чисел, то ми кажемо про комплексний (дійсний) лінійний векторний простір. Надалі скаляри будуть комплексними числами, якщо окремо не зазначено протилежне.

Серед багатьох прикладів лінійних векторних просторів є два класи, що становлять особливий інтерес:

- (i) *Дискретні вектори*, що можуть бути представленими, як стовпці комплексних чисел,

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix}$$

- (ii) *Простір функцій* певного типу, наприклад, простір усіх диференційованих функцій.

Можна легко переконатися, що ці приклади задовольняють означенню лінійного простору.

Набір векторів  $\{\phi_n\}$  називається *лінійно незалежним*, якщо не існує жодної їх нетривіальної лінійної комбінації, яка б утворювала нульовий вектор. Інакше кажучи, рівність  $\sum_n c_n \phi_n = 0$  виконується лише за умови, що  $c_n = 0$  для всіх  $n$ . Якщо ця умова не дотримана, набір векторів називається *лінійно залежним*, і в цьому разі кожен вектор з такого набору можна виразити через лінійну комбінацію інших векторів (певна річ, за умови, що він входить до рівняння  $\sum_n c_n \phi_n = 0$  з ненульовим коефіцієнтом).

Найбільша кількість лінійно неалежних векторів у просторі називається *розмірністю* цього простору. А максимальний набір лінійно незалежних векторів утворює *базис* простору. Кожен вектор із цього простору можна виразити через лінійну комбінацію базисних векторів.

*Внутрішній добуток* (або скалярний добуток) ставить у відповідність кожній векторній парі  $(\psi, \phi)$  певний скаляр. Внутрішній добуток має відповідати наступним умовам:

(a)  $(\psi, \phi) = \text{комплексне число},$

(b)  $(\phi, \psi) = (\psi, \phi)^*,$

(c)  $(\phi, c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1(\phi, \psi_1) + c_2(\phi, \psi_2),$

(d)  $(\phi, \phi) \geq 0$ , що перетворюється на рівність у тому і лише в тому випадку, коли  $\phi = 0$ .

Із (b) і (c) випливає, що

$$(c_1\psi_1 + c_2\psi_2, \phi) = c_1^*(\psi_1, \phi) + c_2^*(\psi_2, \phi).$$

Отже, ми можемо сказати, що внутрішній добуток є лінійним за другим аргументом і антилінійним — за першим.

Для наших попередніх прикладів лінійних просторів ми можемо запровадити такі внутрішні добутки:

(i) Якщо  $\psi$  є стовпцем векторів з елементами  $a_1, a_2, \dots$ , а  $\phi$  має елементи  $b_1, b_2, \dots$ , то

$$(\psi, \phi) = a_1^*b_1 + a_2^*b_2 + \dots$$

(ii) Якщо  $\psi$  і  $\phi$  є функції дійсної змінної  $x$ , то

$$(\psi, \phi) = \int \psi^*(x)\phi(x)w(x)dx,$$

де  $w(x)$  деяка невід'ємна вагова функція.

Внутрішній добуток узагальнює поняття довжини та кута на довільні простори. Якщо добуток двох векторів дорівнює нулю, вони називаються *ортогональними*.

*Норма* (або довжина) вектора означається, як  $\|\phi\| = (\phi, \phi)^{1/2}$ . Для внутрішнього добутку та норми виконуються дві важливі теореми:

*Нерівність Шварца:*

$$|(\psi, \phi)|^2 \leq (\psi, \psi)(\phi, \phi). \quad (1.1)$$

*Нерівність трикутника:*

$$\|(\psi + \phi)\| \leq \|\psi\| + \|\phi\|. \quad (1.2)$$

В обох випадках рівність виконується лише за умови, що вектори відрізняються один від одного на певний скалярний множник, тобто  $\psi = c\phi$ .

Для знаку рівності в (1.2) необхідно також, щоб  $c$  було дійсним і позитивним.

Набір векторів  $\{\phi_i\}$  ми називаємо *ортонормованим*, якщо всі вони попарно ортогональні і мають одиничну норму; тобто їхній внутрішній добуток задовольняє умові  $(\phi_i, \phi_j) = \delta_{ij}$ .

Для кожного лінійного векторного простору  $V$  існує відповідний йому *спряжений простір лінійних функціоналів на  $V$* . Лінійний функціонал  $F$  призначає кожному векторові  $\phi$  скалярну величину  $F(\phi)$ , таку, що

$$F(a\phi + b\psi) = aF(\phi) + bF(\psi), \quad (1.3)$$

для будь-яких векторів  $\phi$  і  $\psi$  та довільних скалярів  $a$  і  $b$ . Множину всіх лінійних функціоналів на просторі  $V$  можна розглядати, як самостійний лінійний простір  $V'$ , означивши в ньому суму лінійних функціоналів:

$$(F_1 + F_2)(\phi) = F_1(\phi) + F_2(\phi). \quad (1.4)$$

**Теорема Ріса.** Існує така взаємно однозначна відповідність між лінійними функціоналами у  $V'$  і векторами у  $V$ , що для кожного функціонала  $F$  є вектор  $f$ , який задовольняє рівності

$$F(\phi) = (f, \phi) \quad (1.5)$$

для довільного вектора  $\phi$ . Таким чином, простори  $V$  і  $V'$  істотно ізоморфні. Наразі ми доведемо цю теорему, ігноруючи питання збіжності, які виникають при розгляді нескінченновимірних просторів. (Із цими питаннями ми розберемося в § 1.4.)

*Доведення.* Очевидно, що будь-який вектор  $f$  у  $V$  породжує лінійний функціонал за формулою (1.5). Тож ми маємо лише довести, що довільний лінійний функціонал  $F$  утворює вектор  $f$ , що задовольняє рівності (1.5). Нехай  $\{\phi_n\}$  є ортонормованим базисом у  $V$  (тобто для них виконується умова  $(\phi_n, \phi_m) = \delta_{nm}$  і не існує жодного ненульового вектора, ортогонального до них усіх). Розкладемо за цим базисом довільний вектор  $\psi = \sum_n x_n \phi_n$ . Тоді з (1.3) маємо:

$$F(\psi) = \sum_n x_n F(\phi_n).$$

Далі утворимо вектор

$$f = \sum_n [F(\phi_n)]^* \phi_n.$$



Його внутрішній добуток із довільним вектором  $\psi$  є

$$(f, \psi) = \sum_n F(\phi_n) x_n = F(f),$$

що й вимагалось довести.

### Діракові бра- і кет-вектори

У квантовій механіці широко вживаються позначення, запроваджені Діраком, відповідно до яких вектор у просторі  $V$  називається кет-вектором і записується, як  $|\phi\rangle$ , а лінійний функціонал у спряженому просторі  $V'$  називається бра-вектором і пишеться  $\langle F|$ . Числове значення функціонала записується, як

$$F(\phi) = \langle F|\phi\rangle. \quad (1.6)$$

Згідно з теоремою Ріса, існує взаємно однозначна відповідність між бра- і кет-векторами. Отже, ми можемо використовувати той самий алфавітний символ і для функціонала в просторі  $V'$ , і для відповідного йому вектора в просторі  $V$ . Залежно від позначення,  $\langle F|$  або  $|F\rangle$ , буде зрозуміло, про який простір іде мова. Вираз (1.5) можна записати в такому вигляді:

$$\langle F|\phi\rangle = (F, \phi), \quad (1.7)$$

де  $|F\rangle$  є вектором, який ми раніше позначали через  $f$ . Зазначимо, однак, що теорема Ріса встановлює антилінійну відповідність між бра- і кет-векторами. Якщо  $\langle F| \leftrightarrow |F\rangle$ , то

$$c_1^* \langle F| + c_2^* \langle F| \leftrightarrow c_1 |F\rangle + c_2 |F\rangle. \quad (1.8)$$

У силу співвідношення (1.7), вираз  $\langle F|\phi\rangle$  можна розглядати просто як інакший запис для внутрішнього добутку. Проте в певних ситуаціях варто пам'ятати, що початково бра-вектори було запроваджено, як лінійні функціонали на просторі кет-векторів.

[[ У своїй оригінальній презентації Дірак *припустив* існування взаємно однозначної відповідності між бра- і кет-векторами, проте не було до кінця зрозуміло, чи це є фізичне припущення, чи суто математичне. Теорема Ріса засвідчила, що жодні припущення тут не потрібні, та й недоречні. Згодом перед нами постає необхідність розглянути загальніший клас просторів (оснащені гільбертові простори), для яких не існує взаємно однозначної відповідності між бра- і кет-векторами. ]]

## § 1.2. Лінійні оператори

Оператор на векторному просторі переводить вектори у вектори; інакше кажучи, якщо  $A$  — оператор, а  $\psi$  — вектор, то  $\phi = A\psi$  також є вектором. Оператор є повністю визначеним, якщо задано його дію на всі елементи векторного простору (або на елементи певного підпростору, де його дія має сенс, і тоді цей підпростір називається *областю визначення* оператора).

*Лінійний оператор* задовольняє умові

$$A(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1(A\psi_1) + c_2(A\psi_2). \quad (1.9)$$

З цього випливає, що для визначення лінійного оператора досить задати його дію на набір базисних векторів, позаяк кожен вектор можна виразити через лінійну їх комбінацію. Ми матимемо справу лише з лінійними операторами, тому надалі будемо випускати з їхньої назви означення „лінійні“.

Твердження про *рівність* двох операторів,  $A = B$ , означає, що  $A\psi = B\psi$  для всіх  $\psi$  (а точніше, для всіх векторів зі спільної області визначення  $A$  і  $B$ ; проте для стислості ми зазвичай не будемо вдаватися в такі тонкощі). Тож ми можемо дати означення суми та добутку операторів, як

$$\begin{aligned} (A + B)\psi &= A\psi + B\psi, \\ AB\psi &= A(B\psi), \end{aligned}$$

де обидва співвідношення справедливі для всіх  $\psi$ . Із цього означення випливає, що операторне множення з необхідністю є *асоціативним*:  $A(BC) = (AB)C$ . Проте воно не конче має бути *комутативним*:  $AB$  в загальному випадку не дорівнює  $BA$ .

**Приклад (і).** У просторі дискретних векторів, представлених у вигляді стовпців, лінійний комутатор є квадратною матрицею. Фактично, будь-яке операторне рівняння в  $N$ -вимірному просторі можна трансформувати в матричне рівняння. Розглянемо найпростіше з них:

$$M|\psi\rangle = |\phi\rangle. \quad (1.10)$$

Оберемо довільний ортонормований базис  $\{|u_i\rangle, i = 1 \dots N\}$  і розкладемо в ньому вектори:

$$|\psi\rangle = \sum_j a_j |u_j\rangle, \quad |\phi\rangle = \sum_k b_k |u_k\rangle.$$

Подіявши на (1.10) бра-вектором  $\langle u_i |$ , отримуємо:

$$\sum_j \langle u_i | M | u_j \rangle = \sum_k \langle u_i | u_k \rangle b_k = b_i,$$

що має форму системи з  $N$  лінійних рівнянь:

$$\sum_j M_{ij} a_j = b_i. \quad (1.11)$$

Набір  $M_{ij} = \langle u_i | M | u_j \rangle$  відомий, як *матричний елемент* оператора  $M$ . Таким чином, будь-яка задача в  $N$ -вимірному лінійному просторі, незалежно від її походження, зрештою зводиться до матричного рівняння.

Такі ж формальні викладки можна проробити і для нескінченновимірного векторного простору, якщо він має злічений ортонормований базис. Але тоді постає проблема збіжності нескінченних сум, розгляд якої ми відкладемо на майбутнє.

**Приклад (ii).** Оператори у просторі функцій часто мають вигляд похідних або інтегралів. Операторна рівність на зразок

$$\frac{\partial}{\partial x} x = 1 + x \frac{\partial}{\partial x}$$

може видатися безглуздою, коли забути, що оператори визначаються лише через їхню дію на вектори. Тому наведений вище приклад означає

$$\frac{\partial [x \psi(x)]}{\partial x} = \psi(x) + x \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} \quad \text{для всіх } \psi(x).$$

Досі ми розглядали оператори лише за їхньою дією на кет-вектори. Також ми можемо означити їх дію *вліво*, на бра-вектори, як

$$(\langle \phi | A) | \psi \rangle = \langle \phi | (A | \psi \rangle) \quad (1.12)$$

для всіх  $\phi$  і  $\psi$ . Це виглядає тривіальним у діракових позначеннях, і така тривіальність є ще одним свідченням на користь їх практичного застосування. А проте, нам не завадить детальніше дослідити математичний зміст виразу (1.12).

За означенням, бра-вектори є лінійними функціоналами на просторі кет-векторів, і довільний бра-вектор  $\langle \phi |$  можна записати, як

$$F_\phi(\cdot) = (\phi, \cdot), \quad (1.13)$$

де  $\phi$  є вектором, відповідним до  $F_\phi$  за теоремою Ріса, а крапка вказує на місце для векторного аргумента. Ми можемо означити дію оператора  $A$  на простір функціоналів, як

$$AF_\phi(\psi) = F_\phi(A\psi) \quad \text{для всіх } \psi(x). \quad (1.14)$$

Легко переконатися, що права частина (1.14) задовольняє означенню лінійного функціонала з аргументом  $\psi$  (а не лише з аргументом  $A\psi$ ), отже, визначає новий функціонал  $AF_\phi$ . За теоремою Ріса, має існувати такий кет-вектор  $\chi$ , для якого

$$AF_\phi(\psi) = (\chi, \psi) = F_\chi(\psi). \quad (1.15)$$

Оскільки  $\chi$  єдиним чином визначається через  $\phi$  за посередництва  $A$ , то має існувати такий оператор  $A^\dagger$ , що  $\chi = A^\dagger \phi$ . Тому (1.15) можна записати, як

$$AF_\phi = F_{A^\dagger \phi}. \quad (1.16)$$

Із (1.14) та (1.15) маємо  $(\phi, A\psi) = (\chi, \psi)$ , а отже,

$$(A^\dagger \phi, \psi) = (\phi, A\psi) \quad \text{для всіх } \phi \text{ і } \psi. \quad (1.17)$$

Це звичайне означення для  $A^\dagger$  — оператора, *спряженого* до  $A$ . Вся ця нетривіальна математика неявно присутня у простому рівнянні (1.12)!

Спряжений оператор можна формально означити через діраків формалізм: якщо  $\langle \phi |$  і  $| \phi \rangle$  є взаємовідповідні бра- і кет-вектори, то  $\langle \phi | A^\dagger \equiv \langle \phi |$  і  $A | \phi \rangle \equiv | \phi \rangle$  також мають бути взаємовідповідними бра- і кет-векторами. Виходячи з того, що  $\langle \omega | \psi \rangle^* = \langle \psi | \omega \rangle$ , маємо

$$\langle \phi | A^\dagger | \psi \rangle^* = \langle \psi | A | \phi \rangle \quad \text{для всіх } \phi \text{ і } \psi. \quad (1.18)$$

Це співвідношення еквівалентне (1.17). Хоча цей формальний метод і простіший, ніж запровадження  $A^\dagger$  через теорему Ріса, він, проте, не в змозі довести існування оператора  $A^\dagger$ .

Деякі елементарні властивості спряженого оператора впливають безпосередньо із самого означення (1.17):

$$\begin{aligned} (cA)^\dagger &= c^* A^\dagger \quad c, \\ (A + B)^\dagger &= A^\dagger + B^\dagger, \\ (AB)^\dagger &= B^\dagger A^\dagger. \end{aligned}$$

На додачу до внутрішнього добутку бра- і кет-векторів,  $\langle \phi | \psi \rangle$ , що є скаляром, ми можемо запровадити *зовнішній добуток*,  $|\psi\rangle\langle\phi|$ . Скориставшись асоціативною властивістю операції множення, ми бачимо, що цей об'єкт є оператором:

$$(|\psi\rangle\langle\phi|)|\lambda\rangle = |\psi\rangle(\langle\phi|\lambda\rangle). \quad (1.19)$$

Цей вираз повністю визначає дію  $|\psi\rangle\langle\phi|$  на всьому векторному просторі. Із (1.18) випливає, що

$$(|\psi\rangle\langle\phi|)^\dagger = |\phi\rangle\langle\psi| \quad (1.20)$$

На підставі цього співвідношення виникає спокуса записати  $|\psi\rangle^\dagger = \langle\psi|$ . І хоча такі маніпуляції не завдають суттєвої шкоди, їх не варто заохочувати, бо вони застосовують символ спряження  $^\dagger$  до об'єктів, що не є операторами і не задовольняють фундаментальному означенню (1.16).

Корисною характеристикою оператора є його *слід*, що визначається, як

$$\text{Tr } A = \sum_j \langle u_j | A | u_j \rangle,$$

де  $\{|u_j\rangle\}$  — довільний ортонормований базис. Можна показати (див. Задачу 1.3), що значення  $\text{Tr } A$  не залежить від конкретного ортонормованого базису, обраного для обчислень. Слід матриці достоту є сумою її діагональних елементів. Для оператора в нескінченновимірному просторі слід існує лише за умови збіжності нескінченного ряду суми.

## § 1.3. Самоспряжені оператори

Оператор  $A$ , який дорівнює своєму спряженому операторові  $A^\dagger$ , називається *самоспряженим*. Це означає, що він задовольняє умові

$$\langle \phi | A | \psi \rangle = \langle \psi | A | \phi \rangle^* \quad (1.21)$$

і область визначення  $A$  (тобто множина векторів  $\phi$ , для яких існують вектори  $A\phi$ ) збігається з областю  $A^\dagger$ . Оператор, що задовольняє лише умові (1.21) називається *ермітовим*, за аналогією з ермітовими матрицями, для яких  $M_{ij} = M_{ji}^*$ .

[Різниця між ермітовими і самоспряженими операторами істотна лише для операторів у нескінченновимірних лінійних просторах, і її ми оговорюватимемо тільки тоді, коли це буде важливо. Оператори, які ми називаємо ермітовими, в математичній літературі зазвичай мають назву „симетричні“. Така термінологія для нас небажана, оскільки вона суперечить відповідним властивостям матриць. ]]

Наступна теорема корисна для розпізнавання ермітових операторів на векторному просторі з комплексними скалярами.

**Теорема 1.** Якщо  $\langle \psi | A | \psi \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle^*$  для всіх  $|\psi\rangle$ , то з цього випливає, що  $\langle \phi_1 | A | \phi_2 \rangle = \langle \phi_2 | A | \phi_1 \rangle^*$  для всіх  $|\phi_1\rangle$  і  $|\phi_2\rangle$ , а отже,  $A = A^\dagger$ .

*Доведення.* Нехай  $|\psi\rangle = a|\phi_1\rangle + b|\phi_2\rangle$  для довільних  $a, b, |\phi_1\rangle$  і  $|\phi_2\rangle$ . Тоді

$$\begin{aligned} \langle \psi | A | \psi \rangle &= |a|^2 \langle \phi_1 | A | \phi_1 \rangle + |b|^2 \langle \phi_2 | A | \phi_2 \rangle + \\ &+ a^* b \langle \phi_1 | A | \phi_2 \rangle + b^* a \langle \phi_2 | A | \phi_1 \rangle \end{aligned}$$

має бути дійсною величиною. Перший та другий доданки є очевидно дійсними за умовою теореми, тому залишається розглянути тільки третій та четвертий. Оскільки  $a$  і  $b$  довільні величини, встановимо, що  $a = b = 1$ , і це приводить до умови

$$\langle \phi_1 | A | \phi_2 \rangle + \langle \phi_2 | A | \phi_1 \rangle = \langle \phi_1 | A | \phi_2 \rangle^* + \langle \phi_2 | A | \phi_1 \rangle^*.$$

Встановивши натомість  $a = 1$  і  $b = i$ , маємо

$$i \langle \phi_1 | A | \phi_2 \rangle - i \langle \phi_2 | A | \phi_1 \rangle = -i \langle \phi_1 | A | \phi_2 \rangle^* + i \langle \phi_2 | A | \phi_1 \rangle^*.$$

Опустивши множник  $i$  в другому рівнянні і додавши обидві його частини до першого, отримаємо бажаний результат:  $\langle \phi_1 | A | \phi_2 \rangle = \langle \phi_2 | A | \phi_1 \rangle^*$ .

Ця теорема визначна тим, що її передумова є очевидним окремим випадком остаточного результату, і це дуже незвично, що з нього випливає загальний випадок. Зазначимо, що комплексні значення скалярів були вкрай важливі при доведенні, і жодного аналогу цієї теореми не може існувати у векторних просторах над полем дійсних чисел.

Якщо дія оператора на певний вектор призводить до того ж самого вектора, помноженого на скаляр,

$$A|\phi\rangle = a|\phi\rangle, \quad (2.22)$$

ми кажемо, що  $|\phi\rangle$  є *власним вектором*, а скаляр  $a$  — *власним значенням* оператора  $A$ . Антілінійна відповідність (1.8) між бра- і кет-векторами, разом з означенням спряженого оператора  $A^\dagger$ , засвідчують, що „лівобічне“ рівняння на власні значення

$$\langle \phi | A^\dagger = a^* \langle \phi |, \quad (2.23)$$

виконується лише тоді, коли є справедливим (1.22).

**Теорема 2.** Якщо  $A$  є ермітовим оператором, то всі його власні значення дійсні.

*Доведення.* Нехай  $A|\phi\rangle = a|\phi\rangle$ . Оскільки  $A$  є ермітовим, то  $\langle\phi|A|\phi\rangle = \langle\phi|A|\phi\rangle^*$ . Підстановка рівнянь на власні значення (1.22) і (1.23) дає

$$\begin{aligned}\langle\phi|a|\phi\rangle &= \langle\phi|a|\phi\rangle^*, \\ a\langle\phi|\phi\rangle &= a^*\langle\phi|\phi\rangle,\end{aligned}$$

з чого випливає, що  $a = a^*$ , бо лише ненульові вектори можуть розглядатись, як нетривіальні рішення рівняння на власні значення.

Наслідком цієї теореми в поєднанні з (1.23) є те, що для самоспряженого оператора,  $A = A^\dagger$ , спряжений бра-вектор  $\langle\phi|$  до власного кет-вектора  $|\phi\rangle$  також є власним вектором з тим самим власним значенням  $a$ :  $\langle\phi|A = a\langle\phi|$ .

**Теорема 3.** Власні вектори, що відповідають різним власним значенням, мають бути ортогональними.

*Доведення.* Нехай  $A|\phi_1\rangle = a_1\phi_1$  і  $A|\phi_2\rangle = a_2\phi_2$ . Оскільки  $A$  є ермітовим, то з (1.21) виводимо

$$\begin{aligned}0 &= \langle\phi_1|A|\phi_2\rangle - \langle\phi_2|A|\phi_1\rangle^* = \\ &= a_1\langle\phi_2|\phi_1\rangle - a_2\langle\phi_1|\phi_2\rangle^* = \\ &= (a_1 - a_2)\langle\phi_2|\phi_1\rangle.\end{aligned}$$

Отже,  $\langle\phi_2|\phi_1\rangle = 0$ , якщо  $a_1 \neq a_2$ .

При  $a_1 = a_2 = a$  будь-яка лінійна комбінація *вироджених* власних векторів  $|\phi_1\rangle$  і  $|\phi_2\rangle$  також є власним вектором з тим самим власним значенням  $a$ . Це дозволяє замінити набір неортогональних, але лінійно незалежних векторів на такі їхні комбінації, що є взаємно ортогональними. Якщо не буде явно зазначено зворотне, ми вважатимемо, що таку ортогоналізацію було проведено, і, кажучи про набір незалежних власних векторів ермітового оператора, матимемо на увазі, що всі вони ортогональні один до одного.

Якщо вектори мають скінченні норми, ми можемо перевизначити їхню довжину до одиничної. Таким чином, завжди зможемо обирати для роботи *ортонормований* набір векторів:

$$(\phi_i, \phi_j) = \delta_{ij}. \quad (1.24)$$

У багатьох підручниках стверджується (упевнено або з надією), що ортонормований набір власних векторів ермітового оператора є *повним*,

тобто утворює базис, що охоплює весь простір. Перш ніж перевірити математичну обґрунтованість такого твердження, розглянемо корисні наслідки, що випливали б із його істинності.

### Властивості повного ортонормованого набору

Якщо набір векторів  $\{\phi_i\}$  є повним, ми можемо розкласти в ньому довільний вектор  $|\nu\rangle$ , як  $|\nu\rangle = \sum_i \nu_i |\phi_i\rangle$ . З умови ортонормованості (1.24) легко знайти коефіцієнти розкладення:  $\nu_i = \langle \phi_i | \nu \rangle$ . Таким чином, можемо записати

$$\begin{aligned} |\nu\rangle &= \sum_i |\phi_i\rangle (\langle \phi_i | \nu \rangle) = \\ &= \left( \sum_i |\phi_i\rangle \langle \phi_i| \right) |\nu\rangle \end{aligned} \quad (1.25)$$

для довільного вектора  $|\nu\rangle$ . Круглі дужки в (1.25) непотрібні і присутні лише для того, щоб підкреслити два способи інтерпретації цього рівняння. Перший рядок указує, що  $|\nu\rangle$  дорівнює сумі базисних векторів, помножених на скалярні коефіцієнти; а в другому рядку певний оператор (у дужках) діє на  $|\nu\rangle$  і в результаті дає той самий вектор. Оскільки рівняння виконується для всіх векторів  $|\nu\rangle$ , цей оператор має бути одиничним оператором (або оператором тотожності):

$$\sum_i |\phi_i\rangle \langle \phi_i| = I. \quad (1.26)$$

Якщо  $A|\phi_i\rangle = a_i|\phi_i\rangle$  і власні вектори утворюють повний ортонормований набір — тобто, справедливі рівності (1.24) і (1.26), — то оператор можна відтворити в зручній діагональній формі через його власні значення і власні вектори:

$$A = \sum_i a_i |\phi_i\rangle \langle \phi_i|. \quad (1.27)$$

Цей вираз легко перевірити, підставивши в (1.27) довільний вектор, розкладений через (1.25). Використовуючи діагональне представлення, можна дати означення *функції від оператора*,

$$f(A) = \sum_i f(a_i) |\phi_i\rangle \langle \phi_i|. \quad (1.28)$$

Корисність цих результатів і є причиною того, чому багато авторів бездоказово припускають, що всі ермітові оператори в квантовій механіці повинні мати повний набір власних векторів. *Та чи це справді так?*



Будь-який оператор у скінченному  $N$ -вимірному векторному просторі можна виразити, як  $N \times N$ -матрицю [див. обговорення після (1.10)]. Умовою нетривіального рішення матричного рівняння на власні значення

$$M\phi = \lambda\phi, \quad (1.29)$$

де  $M$  квадратна матриця, а  $\phi$  вектор-стовпець, є

$$\det |M - \lambda I| = 0. \quad (1.30)$$

Розкладення цього детермінанта дає многочлен за  $\lambda$  степеня  $N$ , який повинен мати  $N$  коренів. Кожен корінь є власним значенням, якому має відповідати власний вектор. Якщо всі  $N$  власних значень різні, то відповідні їм вектори з необхідністю охоплюють увесь  $N$ -розмірний простір. Певна обережність потрібна при розгляді кратних коренів (вироджених власних значень), але й у цьому випадку доведення не є складним. [Див., наприклад, книгу Джордана [99], Теорема 13.1].

Однак ці аргументи не можна перенести на нескінченновимірний простір. І справді, якщо взяти  $N$  рівним нескінченності, то (1.30) дасть нескінченний степеневий ряд за  $\lambda$ , який не конче має корені, навіть за умови збіжності. (Фактично, детермінант нескінченновимірної матриці є невизначеним за винятком деяких окремих випадків.) Простий контрприклад засвідчує, що ця теорема загалом несправедлива для нескінченновимірного простору.

Розглянемо оператор  $D = -id/dx$ , визначений на просторі диференційованих функцій за  $x$  для  $a \leq x \leq b$  (межі  $a$  і  $b$  можуть бути як скінченним, так і нескінченними). Спряжений до нього оператор  $D^\dagger$  визначається через рівняння (1.21), яке наразі має вигляд

$$\begin{aligned} \int_a^b \phi^*(x) D^\dagger \psi(x) dx &= \left\{ \int_a^b \psi^*(x) D \phi(x) dx \right\}^* = \\ &= \int_a^b \phi^*(x) D \psi(x) dx + i [\psi(x) \phi^*(x)] \Big|_b^a. \end{aligned} \quad (1.31)$$

Другий рядок отримано інтегруванням по частинах. Якщо граничні умови накладено так, щоб останній доданок обертався на нуль, то  $D$ , очевидно, є ермітовим оператором.

Рівняння на власні значення

$$-i \frac{d}{dx} \phi(x) = \lambda \phi(x), \quad (1.32)$$

це диференційне рівняння, що має рішення  $\phi(x) = ce^{i\lambda x}$ , де  $c = \text{const}$ . Однак при його розгляді, як рівняння на власні значення оператора  $D$ , нас цікавлять лише власні функції в межах певного лінійного простору. В залежності від граничних умов, можна визначити кілька лінійних просторів:

**Простір V1.** Без граничних умов.

Всі комплексні  $\lambda$  є власними значеннями. Оскільки тоді  $D$  не є ермітовим, цей випадок нас не цікавить.

**Простір V2.**  $a = -\infty, b = +\infty, |\phi(x)|$  обмежена при  $|x| \rightarrow \infty$ .

Всі дійсні  $\lambda$  є власними значеннями. Власні функції  $\phi(x)$  не мають скінченної норми, проте вони утворюють повний набір у тому сенсі, що довільну функцію можна записати через інтеграл Фур'є — який, за бажання, можна розцінити, як неперервну лінійну комбінацію власних функцій.

**Простір V3.**  $a = -L/2, b = +L/2$ , періодичні граничні умови  $\phi(-L/2) = \phi(L/2)$ .

Власні значення утворюють дискретну множину  $\lambda = \lambda_n = 2\pi n/L$ , де  $n$  пробігає всі цілі значення від  $-\infty$  до  $+\infty$ . Власні функції утворюють ортонормований набір (при зручному виборі  $c$ ), повнота якого доводиться в теорії рядів Фур'є.

**Простір V4.**  $a = -\infty, b = +\infty, \phi(x) \rightarrow 0$  при  $x \rightarrow \pm\infty$ .

Хоча оператор  $D$  є ермітовим, він не має власних функцій у цьому просторі.

Ці приклади виразно засвідчують, що *ермітовий оператор у нескінченновимірному векторному просторі може мати, а може й не мати повного набору власних векторів*, залежно від характеру самого оператора та конкретного векторного простору. На щастя, бажані для нас вирази на зразок (1.26), (1.27) і (1.28), можна переформулювати так, що вони не вимагатимуть існування чітко визначених власних векторів.

## Спектральна теорема

Зовнішній добуток  $|\phi_i\rangle\langle\phi_i|$ , утворений з векторів одиничної норми є прикладом *проекційного оператора*. Взагалі, будь-який самоспряжений оператор  $P$ , що задовольняє умові  $P^2 = P$ , є проекційним. Він виокремлює проекцію вектора  $|\phi_i\rangle$  на певний підпростір і знищує решту його складових, що ортогональні цьому підпросторові. Якщо оператор у (1.27) має

вироджений спектр, ми можемо утворити проєкційний оператор на підпростір, натягнений на вироджені вектори з власними значеннями  $a_i = a$ ,

$$P(a) = \sum_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i| \delta_{a,a_i}, \quad (1.33)$$

і (1.27) можна переписати, як

$$A = \sum_a a P(a). \quad (1.34)$$

Сума за  $a$  береться по всьому спектру власних значень. [Та оскільки  $P(a) = 0$  для всіх  $a$ , що не є власними значеннями, то ми вільно можемо поширити суму й на всі дійсні значення  $a$  поза межами спектру.]

Наведені після (1.32) приклади наводять на припущення (як виявляється, правильне), що наявні в них проблеми пов'язані з неперервним спектром, тому слід переписати (1.34) у вигляді, який однаково годився б і для дискретного, і для неперервного спектрів. Найзручніше це зробити за допомогою інтеграла Стильтьєса, що визначається, як

$$\int_a^b g(x) d\sigma(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^n g(x_k) [\sigma(x_k) - \sigma(x_{k-1})], \quad (1.35)$$

де межа береться таким чином, що кожен інтервал  $(x_k - x_{k-1})$  прагне до нуля при  $n \rightarrow \infty$ . Неспадна функція  $\sigma(x)$  називається *мірою*. У випадку  $\sigma(x) = x$ , то (1.35) переходить у більш звичний інтеграл Рімана. Якщо  $d\sigma(x)/dx$  існує, то

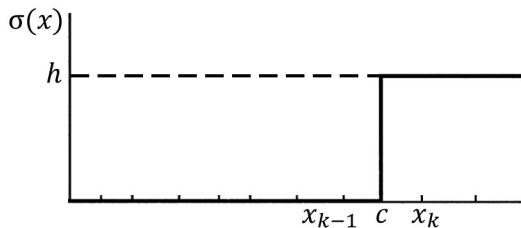
$$\int_{(\text{Стильтьєс})} g(x) d\sigma(x) = \int_{(\text{Ріман})} g(x) \left( \frac{d\sigma(x)}{dx} \right) dx.$$

Це узагальнення стає нетривіальним лише тоді, коли ми дозволяємо  $\sigma(x)$  бути розривною. Припустімо, що

$$\sigma(x) = h\theta(x - c), \quad (1.36)$$

де  $\theta(x) = 0$  для  $x < 0$ ,  $\theta(x) = 1$  для  $x > 0$ . Єдиний доданок у (1.35), який даватиме внесок у інтеграл, це той, для якого  $x_{k-1} < c$ , а  $x_k > c$ . Значенням інтеграла є  $hg(c)$ .

Тепер ми готові сформулювати *спектральну теорему*.



**Рис. 1.1.** Один з прикладів розривної функції міри [див. рівняння (1.36)].

**Теорема 4.**<sup>2</sup> Для кожного самоспряженого оператора  $A$  існує єдина сім'я проєкційних операторів  $E(\lambda)$ , де  $\lambda$  пробігає всі дійсні значення, з такими властивостями:

- (i) Якщо  $\lambda_1 < \lambda_2$  то  $E(\lambda_1)E(\lambda_2) = E(\lambda_2)E(\lambda_1) = E(\lambda_1)$  [простіше кажучи, це означає, що  $E(\lambda)$  проєкує на підпростір, який відповідає власним значенням  $\leq \lambda$ ];
- (ii) Якщо  $\varepsilon > 0$ , то  $E(\lambda + \varepsilon)|\psi\rangle \rightarrow E(\lambda)|\psi\rangle$   $\varepsilon \rightarrow 0$ ;
- (iii)  $E(\lambda)|\psi\rangle \rightarrow 0$  при  $\lambda \rightarrow -\infty$ ;
- (iv)  $E(\lambda)|\psi\rangle \rightarrow |\psi\rangle$  при  $\lambda \rightarrow +\infty$ ;
- (v) 
$$\int_{-\infty}^{+\infty} \lambda dE(\lambda) = A. \quad (1.37)$$

У (ii), (iii) і (iv)  $\psi$  є довільним вектором. Інтеграл у (v) за проєкторозначною мірою  $E(\lambda)$  формально визначається за правилом (1.35), достоту таким самим чином, як звичайна числова міра.

Рівність (1.37) є узагальненням (1.27) для довільного самоспряженого оператора, який може мати дискретний або неперервний спектр, або ж поєднання обох типів спектру. Відповідне узагальнення (1.28) має вигляд

$$f(A) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(\lambda) dE(\lambda). \quad (1.38)$$

<sup>2</sup> Доведення див. у Pica і С.-Надя [153], § 120.

**Приклад: дискретний спектр**

Коли (1.37) застосовується до оператора з дискретним спектром, єдині внески до інтеграла дають розриви у проекторозначній функції

$$E(\lambda) = \sum_i |\phi_i\rangle \langle \phi_i| \theta(\lambda - a_i), \quad (1.39)$$

що стаються на власних значеннях. Розрив при  $\lambda = a$  дає якраз  $P(a)$  з рівняння (1.33). Тож у цьому випадку (1.37) зводиться до (1.34) або (1.27).

**Приклад: неперервний спектр**

За приклад оператора з неперервним спектром, розглянемо оператор  $Q$ , визначений, як  $Q\psi(x) = x\psi(x)$  для всіх функцій  $\psi(x)$ . Очевидно, що  $Q = Q^\dagger$ . Рівняння на власні значення  $Q\phi(x) = \lambda\phi(x)$  має формальне рішення  $\phi(x) = \delta(x - \lambda)$ , де  $\lambda$  є дійсною величиною, а  $\delta(x - \lambda)$  — діракова „дельта-функція“. Насправді  $\delta(x - \lambda)$  не є цілком визначеною функцією<sup>3</sup>, тому, строго кажучи, оператор  $Q$  не має власних функцій.

А проте, спектральна теорема виконується й у цьому випадку. Проекційний оператор для  $Q$  визначається, як

$$E(\lambda)\psi(x) = \theta(x - \lambda)\psi(x); \quad (1.40)$$

він дорівнює  $\psi(x)$  при  $x < \lambda$  і 0 при  $x > \lambda$ . Ми можемо легко перевірити справедливить (1.37) для довільної функції  $\psi(x)$ :

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda dE(\lambda) \psi(x) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda d[\theta(\lambda - x)\psi(x)] = \\ &= x\psi(x) = Q\psi(x). \end{aligned}$$

(При обчисленні цього інтеграла маємо пам'ятати, що  $\lambda$  є змінною інтегрування, а  $x$  у даному разі виступає сталою величиною.)

З часів Дірака у квантовій механіці заведено писати формальні рівняння на власні значення і для операторів на зразок  $Q$ , що мають неперервний спектр:

$$Q|q\rangle = q|q\rangle. \quad (1.41)$$

Умова ортонормованості для цього випадку набуває вигляду

$$\langle q'|q''\rangle = \delta(q' - q''). \quad (1.42)$$

<sup>3</sup>Її можна розглядати, як „розподіл“ або „узагальнену функцію“. Див. Гельфанда й Шилова [71] для систематичного вивчення.

Очевидно, що норма цих формальних власних векторів нескінченна, оскільки (1.42) дає  $\langle q|q \rangle = \infty$ . Замість спектральної теореми (1.37) для  $Q$ , Дірак записав би:

$$Q = \int_{-\infty}^{+\infty} q|q\rangle\langle q| dq, \quad (1.43)$$

що є неперервним аналогом рівняння (1.27).

Діракове формулювання не вписується в математичну теорію *гільбертового простору*, який містить лише вектори зі скінченною нормою. Проекційний оператор (1.40), формально записаний у вигляді

$$E(\lambda) = \int_{-\infty}^{\lambda} |q\rangle\langle q| dq, \quad (1.44)$$

є цілком визначеним на гільбертовому просторі, проте його похідна  $dE(\lambda)/dq = |q\rangle\langle q|$  не існує в межах, окреслених цим простором.

Більшість спроб надати квантовій механіці строгого математичного вигляду полягають у виправленні або обмеженні діракового формалізму для його узгодження з гільбертовим простором. Правабливною альтернативою цьому є розширення структури самого гільбертового простору, що дозволяє включити в послідовний розгляд вектори з нескінченною нормою. Якраз це ми й розглянемо в наступному параграфі.

## Набір комутативних операторів

Досі ми обговорювали лише властивості окремо взятих операторів. Предметом розгляду наступних двох теорем є взаємозв'язок між різними операторами.

**Теорема 5.** Якщо  $A$  і  $B$  є самоспряженими операторами, кожен з яких має повний набір власних векторів, і якщо  $AB = BA$ , то також існує повний набір векторів, які одночасно є власними векторами  $A$  і  $B$ .

*Доведення.* Нехай  $\{|a_n\rangle\}$  і  $\{|b_m\rangle\}$  повні набори власних векторів операторів  $A$  і  $B$  відповідно:  $A|a_n\rangle = a_n|a_n\rangle$ ,  $B|b_b\rangle = b_m|b_m\rangle$ . Ми можемо розкласти будь-який власний вектор  $A$  через набір власних векторів  $B$ :

$$|a_n\rangle = \sum_n c_m |b_m\rangle,$$

де коефіцієнти  $c_m$  залежать від конкретного вектора  $|a_n\rangle$ . Деякі значення  $b_m$  можуть збігатися (у разі виродження спектру), тому бажано поєднати

всі доданки з  $b_m = b$  в один вектор

$$|(a_n)b\rangle = \sum_m c_m |b_m\rangle \delta_{b,b_m}.$$

Відтак ми можемо записати

$$|a_n\rangle = \sum_b |(a_n)b\rangle, \quad (1.45)$$

де сума береться за всіма відмінними власними значеннями  $B$ . Тепер

$$\begin{aligned} (A - a_n)|a_n\rangle &= 0 \\ &= \sum_b (A - a_n)|a_n b\rangle. \end{aligned} \quad (1.46)$$

Далі подіємо оператором  $B$  на кожен окремий доданок у другому рядку (1.46) і застосуємо властивість  $BA = AB$ :

$$\begin{aligned} B(A - a_n)|a_n b\rangle &= (A - a_n)B|a_n b\rangle = \\ &= b(A - a_n)|a_n b\rangle. \end{aligned}$$

Звідси випливає, що  $(A - a_n)|a_n b\rangle$  є власним вектором оператора  $B$  з власним значенням  $b$ . Отже, доданки в (1.46) повинні бути ортогональними, а тому лінійно незалежними. Вся сума може дорівнювати нулю лише за умови, що кожен її окремий член є нульовим:

$$(A - a_n)|a_n b\rangle = 0$$

Таким чином,  $|a_n b\rangle$  є власним вектором як  $A$ , так і  $B$ , з власними значеннями  $a_n$  і  $b$  відповідно. Оскільки набір  $\{|a_n\rangle\}$  є повним, то набір  $\{|a_n b\rangle\}$ , що являє собою його розширення, також є повним. Отже існує повний набір спільних для  $A$  і  $B$  власних векторів.

Цю теорему легко поширити на довільну кількість взаємно комутативних операторів. Наприклад, якщо ми маємо три такі оператори,  $A$ ,  $B$  і  $C$ , то можемо розкласти власний вектор  $C$  через набір спільних власних векторів для  $A$  та  $B$ , і повторити всі кроки з попереднього доведення, щоб отримати повний набір спільних векторів для  $A$ ,  $B$  і  $C$ .

Зворотне до цієї теореми твердження — що  $A$  і  $B$  комутативні, якщо мають повний набір спільних власних векторів, — тривіально доводиться з використанням діагонального представлення (1.27).

Нехай  $(A, B, \dots)$  — взаємно комутативні оператори, що породжують повний набір спільних власних векторів. Окремому власному значенню

кожного з цих операторів може відповідати більше одного власного вектора. Проте якщо для кожної комбінації власних значень  $(a_n, b_m, \dots)$  існує не більше, ніж один власний вектор (не враховуючи різниці у фазі або в нормуванні), тоді кажуть, що оператори  $(A, B, \dots)$  утворюють *повний комутативний набір*.

**Теорема 6.** Будь-який оператор, що комутує з усіма операторами повного комутативного набору, має бути функцією цих операторів.

*Доведення.* Нехай  $(A, B, \dots)$  — повний набір комутативних операторів, чії власні вектори єдиним чином (за винятком фази й нормування) визначаються власними значеннями цих операторів. Запишемо типовий власний вектор, як  $|a_n, b_m, \dots\rangle$ . Нехай  $F$  — оператор, що комутує з кожним елементом набору  $(A, B, \dots)$ . Твердження, що  $F$  є функцією цього набору операторів, означає, що  $F$  має ті ж самі власні вектори, а його власні значення, в узагальненні виразу (1.28), є певними функціями власних значень цього набору операторів. Оскільки  $F$  комутує з  $(A, B, \dots)$ , то, за Теоремою 5, існує повний набір спільних власних векторів для  $(A, B, \dots, F)$ . Та оскільки власні вектори  $\{|a_n, b_m, \dots\rangle\}$  є єдиними спільними для повного комутативного набору  $(A, B, \dots)$ , то з цього випливає, що вони мусять бути також і власними векторами збільшеного набору  $(A, B, \dots, F)$ . Таким чином,

$$F|a_n, b_m, \dots\rangle = f_{nm\dots}|a_n, b_m, \dots\rangle.$$

Позаяк кожен власний вектор єдиним чином визначається через власні значення  $(a_n, b_m, \dots)$ , то існує однозначне відображення  $(a_n, b_m, \dots) \rightarrow f_{nm\dots}$ , а отже, власні значення  $F$  можна розглядати, як функцію власних значень  $(A, B, \dots)$ . Тобто,  $f_{nm\dots} = f(a_n, b_m, \dots)$ . Це доводить, що  $F$  є функцією операторів повного комутативного набору:  $F = f(A, B, \dots)$ .

У багатьох застосуваннях повний набір комутативних операторів можна розглядати, як один оператор з невиродженим спектром власних значень. І справді — один такий оператор сам по собі утворює повний комутативний набір.

## § 1.4. Гільбертів простір і оснащений гільбертів простір

У § 1.1 ми означили лінійний векторний простір, як множину елементів, замкнену відносно операцій додавання та множення на скаляри. Всі скінченновимірні простори однакової розмірності є ізоморфними, проте у випадку нескінченної кількості вимірів між різними просторами можуть існувати певні відмінності. Розглянемо нескінченний ортонормований



набір базисних векторів  $\{\phi_n : n = 1, 2, \dots\}$ . З їх допомогою ми можемо утворити лінійний векторний простір  $V$ , що складається з усіх можливих скінченних лінійних комбінацій базисних векторів. Отже,  $V$  містить усі вектори вигляду  $\psi = \sum_n c_n \phi_n$ , де сума може мати будь-яку скінченну кількість членів.

Простір  $V$  можна розширити, додавши до нього граничні точки нескінченних послідовностей векторів, на зразок суми збіжного векторного ряду. Та спершу ми мусимо дати чітке означення *збіжності* у векторному просторі. Найзручніше це зробити через поняття норми. Ми кажемо, що послідовність  $\{\psi_i\}$  при  $i \rightarrow \infty$  збігається до вектора  $\chi$ , у тому і лише в тому випадку, коли  $\lim_{i \rightarrow \infty} \|\psi_i - \chi\| = 0$

Додавання до простору  $V$  всіх таких векторів дає більший простір, який ми позначимо  $\mathcal{H}$ . Наприклад, вектори вигляду

$$\psi_i = \sum_{n=1}^i c_n \psi_n$$

є елементами  $V$  для всіх скінченних значень  $i$ . Граничний вектор при  $i \rightarrow \infty$  не належить до  $V$ , однак є елементом простору  $\mathcal{H}$  за умови, що  $\sum_n |c_n|^2$  скінченна. Простір  $\mathcal{H}$  називається *гільбертовим простором*, якщо він містить граничні вектор всіх збіжних за нормою послідовностей. (на технічному жаргоні,  $\mathcal{H}$  називається поповненням  $V$  за топологією норми.)

Для гільбертового простору залишається справедливою взаємно однозначна відповідність між векторами в  $\mathcal{H}$  і елементами дуального простору  $\mathcal{H}'$ , що складається з неперервних лінійних функціоналів. У § 1.1 ми довели це твердження для скінченновимірних просторів, але опустимо стандартне доведення для гільбертового простору (див. у Джордана [99]). Натомість ми вдамося до альтернативного підходу — не такого загального з математичного погляду, але набагато кориснішого для наших подальших потреб.

Позначимо через  $\Xi$  найширший лінійний простір, що містить усі можливі лінійні комбінації базисних векторів  $\{\phi_n\}$  — як скінченні, так і нескінченні. Довільний елемент  $\xi$  має вигляд  $\xi = \sum_n c_n \phi_n$  без будь-яких накладених на коефіцієнти  $c_n$  обмежень. Ми можемо розглядати його, як нескінченний вектор-стовпець, чиї елементи  $c_n$  не обмежені не за числовим значенням, ні за кількістю. Певна річ, за таких умов норма та внутрішній добуток для багатьох векторів з  $\Xi$  будуть невизначеними, але ми зосередимо нашу увагу на деяких підпросторах  $\Xi$ , що мають кращі властивості.

*Гільбертів простір*  $\mathcal{H}$  є підпростором  $\Xi$ , визначеним таким чином, що

вектор  $h = \sum_n c_n \phi_n$  належить до  $\mathcal{H}$  тоді і лише тоді, коли внутрішній добуток  $(h, h) = \sum_n |c_n|^2$  є скінченним. Тепер ми можемо означити *спряжений простір*  $\mathcal{H}^\times$ , як множину всіх векторів  $f = \sum_n b_n \phi_n$ , для яких внутрішній добуток  $(f, h) = \sum_n b_n^* c_n$  збігається для всіх  $h$  із  $\mathcal{H}$ . Можна обрати вектор  $h$  так, щоб фази  $|c_n|$  дорівнювали фазі  $|b_n|$  і всі  $b_n^* c_n$  були позитивними дійсними величинами. У цьому разі збіжність  $(f, h) = \sum_n b_n^* c_n$  буде забезпечена, якщо при  $n \rightarrow \infty$  послідовність  $\{|b_n|\}$  прагне до нуля так само швидко, як і  $\{|c_n|\}$ , оскільки  $\sum_n |c_n|^2$  є збіжною. А звідси випливає, що  $\sum_n |b_n|^2$  також збігається, тому  $f$  (довільний елемент  $\mathcal{H}^\times$ ) належить і до  $\mathcal{H}$ . Отже, гільбертів простір є спряженим до самого себе<sup>4</sup>:  $\mathcal{H} = \mathcal{H}^\times$ .

Тепер означимо простір  $\Omega$ , що складається з усіх векторів вигляду  $\omega = \sum_n u_n \phi_n$ , коефіцієнти яких задовольняють нескінченному переліку умов:

$$\sum_n |u_n|^2 n^m < \infty \text{ для } m = 1, 2, \dots$$

Простір  $\Omega$  з очевидністю є підпростором  $\mathcal{H}$  і являє собою приклад *ядерного простору*. Спряжений до  $\Omega$  простір,  $\Omega^\times$ , складається з таких векторів  $\sigma = \sum_n v_n \phi_n$ , що добуток  $(\sigma, \omega) = \sum_n v_n^* u_n$  є збіжним для всіх  $\omega$  з  $\Omega$ , а  $(\sigma, \cdot)$  є неперервним лінійним функціоналом на  $\Omega$ . Ясно, що  $\Omega^\times$  набагато більший за  $\Omega$ , бо до нього належить будь-який вектор  $\sigma$ , чиї коефіцієнти  $v_n$  зростають не швидше степеня  $n$  при  $n \rightarrow \infty$ .

Нарешті, звернімо увагу на те, що простір  $V^\times$ , пряжений до  $V$ , є повним простором  $\Xi$ , оскільки вектори у  $V$  мають лише скінченну кількість доданків у сумі  $\psi = \sum_n c_n \phi_n$ , а отже, жодних проблем із їхньою збіжністю не виникає. Таким чином, розглянуті вище лінійні простори і спряжені до них задовольняють співвідношенню вклянення:

$$V \subset \Omega \subset \mathcal{H} = \mathcal{H}^\times \subset \Omega^\times \subset V^\times = \Xi.$$

Важливо пам'ятати наступне:

- (а) що менший або обмеженіший простір, то більшим буде спряжений до нього;

<sup>4</sup>Спряжений простір  $\mathcal{H}^\times$  тісно пов'язаний з дуальним простором  $\mathcal{H}'$ . Єдина істотна відмінність полягає лише в тому, що взаємно однозначна відповідність між векторами в  $\mathcal{H}$  і  $\mathcal{H}'$  є антилінійною (1.8), тоді як  $\mathcal{H}$  і  $\mathcal{H}^\times$  строго ізоморфні. Таким чином,  $\mathcal{H}'$  можна розглядати, як комплексно спряжений  $\mathcal{H}^\times$ . Насправді наша аргументація недостатньо сильна для встановлення повної ідентичності  $\mathcal{H}$  і  $\mathcal{H}^\times$ . Припустімо, що  $c_n \sim n^{-\gamma}$  і  $b_n \sim n^{-\beta}$  для великих  $n$ . Збіжність  $\sum_n |c_n|^2$  вимагає, щоб  $\gamma > 1/2$ . Збіжність  $\sum_n b_n^* c_n$  вимагає, щоб  $\beta + \gamma > 1$ . Тому  $\beta > 1/2$  є припустимим, а  $\beta < 1/2$  неприпустимим. Для виключення крайнього випадку  $\beta = 1/2$  треба скористатися неперервністю функціонала  $(f, \cdot)$ , як у стандартному доведенні в [99].

(b) один лише гільбертів простір ізоморфний до свого спряженого.

Найбільший інтерес для різних застосувань становить триплет  $\Omega \subset \mathcal{H} \subset \Omega^\times$ , що називається *оснащеним гільбертовим простором*. У § 1.3 було показано, що для самоспряженого оператора  $A$  у нескінченновимірному векторному просторі рівняння на власні значення  $A|a_n\rangle = a_n|a_n\rangle$  може мати, а може й не мати рішень. А проте, *узагальнена спектральна теорема* стверджує, що будь-який самоспряжений оператор у гільбертовому просторі  $\mathcal{H}$  має повний набір власних векторів, що існують у розширеному просторі  $\Omega^\times$ , і кожен вектор з області визначення цього оператора можна розкласти за його власними векторами. Точне формулювання цієї теореми та її строге доведення потребують застосування спеціального математичного апарату, тому всіх зацікавлених читачів ми відсилаємо до книги Гельфанда і Віленкіна [72]. А ми обмежимося лише її спрощеним варіантом, цілком достатнім для наших цілей:

**Теорема 7.** Для будь-якого самоспряженого оператора  $A$  з чисто неперервним невиродженим спектром існує така однопараметрична група векторів  $\{\phi_\lambda\}$ , які належать до  $\Omega^\times$ , що для довільного вектора  $\psi$  з  $\Omega$  виконується рівність  $(\phi_\lambda, A\psi) = \lambda(\phi_\lambda, \psi)$ . Крім того,  $\{\phi_\lambda\}$  утворює повний набір у тому сенсі, що довільний  $\psi$  з області визначення оператора  $A$  можна виразити, як

$$\psi = \int_{-\infty}^{+\infty} c(\lambda) \phi_\lambda d\mu(\lambda),$$

а дію на нього оператора  $A$ , як

$$A\psi = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda c(\lambda) \phi_\lambda d\mu(\lambda),$$

де  $c(\lambda) = (\phi_\lambda, \psi)$ , а  $\mu(\lambda)$  — деяка дійсна функція міри.

Цю теорему легко поширити й на випадок чисто неперервного, але виродженого спектру. Треба лише замінити однопараметричну групу  $\{\phi_\lambda\}$  на двопараметричну  $\{\phi_\lambda^i\}$  з  $i = 1, \dots, n$ , де  $n$  — максимальна кратність спектру. Тоді  $(\phi_\lambda^i, A\psi) = \lambda(\phi_\lambda^i, \psi)$ , а розкладення  $\psi$  за власними векторами набуває вигляду

$$\psi = \sum_{i=1}^n \int_{-\infty}^{+\infty} c^i(\lambda) \phi_\lambda^i d\mu(\lambda).$$

І, нарешті, ця теорема без проблем поширюється на оператори, що мають і неперервний і дискретний спектри [зауваження: у загальному випадку, цими двома типами спектр оператора не вичерпується]. Тоді дво-параметрична група  $\{\phi_\lambda^i\}$  доповнюється звичайним ортонормованим набором власних векторів з гільбертового простору  $\{\phi_\alpha\}$ , для яких  $A\phi_\alpha = a_\alpha\phi_\alpha$ , а розкладення за власними векторами стає

$$\psi = \sum_{\alpha} c_{\alpha} \phi_{\alpha} + \sum_{i=1}^n \int_{-\infty}^{+\infty} c^i(\lambda) \phi_{\lambda}^i d\mu(\lambda),$$

де  $c_{\alpha} = (\phi_{\alpha}, \psi)$ .

Випадки складніших спектрів у нашому розгляді не зустрічатимуться. Міра  $\mu(\lambda)$  залежить від нормування векторів  $\phi_{\lambda}$ , яке зазвичай обирається таким чином, щоб  $\mu(\lambda) = \lambda$  на неперервному спектрі. Цю умову можна виразити в математично не зовсім коректному, але цілком придатному для практичних застосувань вигляді  $(\phi_{\lambda'}, \phi_{\lambda}) = \delta(\lambda' - \lambda)$  — дельта функція Дірака.

Також із теорії оснащеного гільбертового простору для нас буде корисним ще один факт. Для будь-якого самоспряженого оператора  $A$  в гільбертовому просторі  $\mathcal{H}$  існує такий оператор  $A^{\times}$  у розширеному просторі  $\Omega^{\times}$ , що для векторів  $\psi \in \Omega$  і  $\phi \in \Omega^{\times}$  виконується рівність

$$(A^{\times}\phi, \psi) = (\phi, A\psi).$$

Це дозволяє знаходити власні значення  $\lambda$  і власні вектори  $\phi_{\lambda}$  для неперервного спектру оператора  $A$ , розв'язуючи рівняння  $A^{\times}\phi_{\lambda} = \lambda\phi_{\lambda}$  у розширеному просторі  $\Omega^{\times}$  (а точніше, в його конкретному представленні, продиктованому умовами фізичної задачі). Надалі ми не будемо робити різниці між  $A$  та  $A^{\times}$  і позначатимемо останній також через  $A$ , бо він є просто розширенням цього оператора на  $\Omega^{\times}$ , а в  $\mathcal{H}$  діє так само, як і  $A$ .

Отже, ми маємо два різні підходи до дослідження самоспряжених операторів без повного набору власних векторів у гільбертовому просторі (тобто, векторів зі скінченною нормою). Перший ґрунтується на спектральній теоремі (Теорема 4, § 1.3) і полягає в тому, щоб переформулювати рівняння на власні значення у термінах проєкційних операторів, які є цілком визначені в гільбертовому просторі, навіть якщо їх не можна записати у вигляді суми зовнішніх добутоків власних векторів зі скінченною нормою. Другий спосіб, базований на узагальненій спектральній теоремі, пропонує розширити наш математичний інструментарій до оснащеного гільбертового простору, в якому гарантовано існує повний набір власних

векторів (можливо, з необмеженою нормою). Перший спосіб свого часу був загальноприйнятим у математичній фізиці, проте другий, найвірогідніше, і далі зростатиме в популярності, оскільки він дозволяє повною мірою застосовувати формалізм діракових бра- і кет-векторів.

Є чимало конкретних прикладів оснащених гільбертових просторів. Вище ми розглянули один із них, у зручному для аналізу представленні як нескінченного набору дискретних компонентів; але ним не вичерпуються всі корисні приклади. Якщо за  $\Xi$  взяти простір усіх функцій однієї змінної, то *гільбертів простір*  $\mathcal{H}$  утворить підмножина квадратично інтегрованих функцій. Тобто, до  $\mathcal{H}$  належать усі функції  $\psi(x)$ , для яких

$$(\psi, \psi) = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx \quad \text{є скінченним.}$$

*Ядерний простір*  $\Omega$  складається з функцій  $\psi(x)$ , що задовольняють нескінченному переліку умов:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 (1 + |x|)^m dx < \infty \quad (m = 1, 2, \dots).$$

Функції  $\psi(x)$ , що належать до  $\Omega$ , мають спадати до нуля швидше за будь-який від'ємний степінь  $x$  при  $|x| \rightarrow \infty$ . *Розширений простір*  $\Omega^\times$ , що є спряженим до  $\Omega$ , складається з таких функцій  $\chi(x)$ , що

$$(\chi, \phi) = \int_{-\infty}^{+\infty} \chi^*(x) \phi(x) dx \quad \text{для всіх } \phi(x) \text{ із } \Omega.$$

На додачу до функцій зі скінченною нормою, які також належать і до  $\mathcal{H}$ , простір  $\Omega^\times$  містить необмежені на нескінченності функції, якщо вони зростають не швидше, ніж будь-який степінь  $x$ . Отже, до  $\Omega^\times$  належить  $e^{ikx}$ , яка є власною функцією оператора  $D = id/dx$ . Так само, елементом цього простору є діракова дельта-функція  $\delta(x - \lambda)$ , що є власною функцією оператора  $Q$ , визначеного, як  $Q\psi(x) = x\psi(x)$ . Ці два приклади переконливо засвідчують, що триплет  $(\Omega, \mathcal{H}, \Omega^\times)$  оснащеного гільбертового простору забезпечує квантову механіку природнішим математичним інструментарієм, ніж один лише гільбертів простір.

## § 1.5. Теорія ймовірності

Математичний зміст теорії ймовірності полягає у вивченні властивостей функції  $\text{Prob}(A|B)$ , яка є *ймовірністю* події  $A$  за умов, визначених подією

В. У цьому параграфі ми вживатимемо скорочене позначення  $P(A|B) \equiv \text{Prob}(A|B)$ , але в подальших застосуваннях, коли символ  $P$  позначатиме іншу величину, повернемося до повного запису. Значення та інтерпретацію терміну „ймовірність“ ми обговоримо згодом, разом із тлумаченням слова „подія“. А поки розглядатимемо їх, як суто математичні поняття, що визначаються лише з набору певних аксіом.

Сукупності подій ми розглядатимемо таким самим чином, як і елементарні події. Тому запровадимо певні операції, які дозволять компонувати їх:  $\bar{A}$  („не  $A$ “) стверджує про відсутність події  $A$ ;  $A \& B$  („ $A$  і  $B$ “) вказує, що відбулися обидві ці події;  $A \vee B$  („ $A$  або  $B$ “) позначає здійснення принаймні одної із зазначених подій. Комбінації подій також будемо вважати подіями. Ці три оператори ( $\bar{\phantom{A}}$ ,  $\&$ ,  $\vee$ ) називаються *заперечення*, *кон'юнкція* і *диз'юнкція*.

Аксіоми теорії ймовірності можна сформулювати в кількох різних, але математично еквівалентних формах. Наведене нижче формулювання ґрунтується на роботі Р. Т. Кокса [46].

**Аксіома 1:**  $0 \leq P(A|B) \leq 1$

**Аксіома 2:**  $P(A|A) = 1$

**Аксіома 3а:**  $P(\bar{A}|B) = 1 - P(A|B)$

**Аксіома 4:**  $P(A \& B|C) = P(A|C) P(B|A \& C)$

Аксіома 2 встановлює домовленість, що достовірна подія (тобто здійснення події  $A$  вже за її наявності) має ймовірність 1, а Аксіома 1 стверджує, що жодна ймовірність не може перевищувати достовірність. Аксіома 3а констатує інтуїтивне розуміння того факту, що ймовірність відсутності події зменшується при зростанні ймовірності її здійснення. З неї також випливає, що  $P(\bar{A}|A) = 0$ ; інакше кажучи, неможлива подія (здійснення події  $A$  за умови її відсутності) має нульову ймовірність. Аксіома 4 стверджує, що ймовірність здійснення двох подій (за певної умови  $C$ ) дорівнює ймовірності здійснення однієї з цих подій помноженій на ймовірність того, що друга подія відбудеться за умови здійснення першої.

Ймовірності заперечення ( $\bar{A}$ ) і кон'юнкції ( $A \& B$ ) подій вимагають свого означення через аксіоми. Водночас, жодна аксіома не потрібна для розгляду диз'юнкції, бо  $A \vee B = \overline{(\bar{A} \& \bar{B})}$ ; іншими словами, твердження „ $A$  або  $B$ “ еквівалентне запереченню твердження „не  $A$  і не  $B$ “. З Аксіоми 3а отримуємо

$$P(A \vee B|C) = 1 - P(\bar{A} \& \bar{B}|C). \quad (1.47)$$

Цей вираз можна додатково видозмінити, вдавшись до наявних аксіом.

Спершу скористаємося Аксиомами 3а і 4 для обчислення виразу:

$$\begin{aligned} P(X \& Y|C) + P(X \& \bar{Y}|C) &= P(X|C) P(Y|X \& C) + P(X|C) P(\bar{Y}|X \& C) = \\ &= P(X|C) \{P(Y|X \& C) + P(\bar{Y}|X \& C)\} = \\ &= P(X|C). \end{aligned} \quad (1.48)$$

Підставивши в (1.48)  $X = \bar{A}$  і  $Y = \bar{B}$ , маємо  $P(\bar{A} \& \bar{B}|C) = P(\bar{A}|C) - P(\bar{A} \& B|C)$ . Застосувавши Аксиому 3а до першого доданка і скориставшись (1.48) з  $X = B$  і  $Y = A$  у другому доданку, одержимо  $P(\bar{A} \& \bar{B}|C) = 1 - P(A|C) - P(B|C) + P(B \& A|C)$ . Тоді (1.47) набуває вигляду

$$P(A \vee B|C) = P(A|C) + P(B|C) - P(A \& B|C). \quad (1.49)$$

Якщо  $P(A \& B|C) = 0$ , ми кажемо, що події  $A$  і  $B$  є *взаємовиключними* за умови  $C$ . У цьому разі (1.49) зводиться до правила додавання ймовірностей для взаємовиключних подій, яке можна використати за альтернативу Аксиоми 3а.

**Аксиома 3б:**  $P(A \vee B|C) = P(A|C) + P(B|C)$  (1.49а)

Дві системи аксіом (1, 2, 3а, 4) і (1, 2, 3б, 4) є еквівалентними. Щойно ми показали, як з Аксиом 3а і 4 випливає Аксиома 3б. І навпаки, оскільки  $A$  і  $\bar{A}$  є взаємовиключними подіями, а  $A \vee \bar{A}$  — достовірна подія, то очевидно, що з Аксиоми 3б випливає Аксиома 3а. Аксиома 3а видається елегантнішою, позаяк її можна застосувати до всіх подій, не лише взаємовиключних. А проте, Аксиома 3б теж корисна, бо має певні практичні переваги.

Аксиому 4 можна переписати у вигляді  $P(B \& A|C) = P(B|C) P(A|B \& C)$  (тут ми просто поміняли місцями  $A$  і  $B$ ). А оскільки  $A \& B = B \& A$ , то, порівнявши два рівнозначні записи цієї аксіоми, маємо

$$P(A|C) P(B|A \& C) = P(B|C) P(A|B \& C). \quad (1.50)$$

Якщо  $P(A|C) \neq 0$ , це дає *теорему Баєса*:

$$P(B|A \& C) = P(A|B \& C) \frac{P(B|C)}{P(A|C)}. \quad (1.51)$$

Ця теорема примітна тим, що пов'язує ймовірність події  $B$  за умови здійснення події  $A$  з ймовірністю  $A$  за умови  $B$ . Тому вона відома, як принцип *оберненої ймовірності*.

*Незалежність.* Твердження, що подія  $B$  незалежна від події  $A$ , означає  $P(B|A \& C) = P(B|C)$ . Тобто, здійснення  $A$  жодним чином не впливає на

ймовірність здійснення  $B$ . З Аксиоми 4 випливає, що в разі, коли  $B$  незалежна від  $A$  за умови  $C$ ,

$$P(A \& B | C) = P(A | C) P(B | C). \quad (1.52)$$

Симетрія цієї засвідчує, що незалежність буває лише взаємною: якщо  $B$  не залежить від  $A$ , то й  $A$  не залежить від  $B$ . Така форма незалежності називається *статистичною* або *стохастичною* незалежністю, щоб відрізнити її від інших понять, на зразок причинної незалежності.

Сукупність  $n$  подій  $\{A\}$  ( $1 < k < n$ ) є стохастично незалежною за умови  $C$ , тоді і лише тоді, коли рівність

$$P(A_i \& A_j \& \dots \& A_k | C) = P(A_i | C) P(A_j | C) \dots P(A_k | C) \quad (1.53)$$

виконується для всіх підмножин  $\{A_k\}$ . Дотримання умови (1.53) лише для набору з усіх  $n$  подій є недостатнім. Так само й попарної незалежності подій у випадку  $n > 2$  недостатньо для незалежності всіх  $n$  подій.

## Інтерпретація ймовірності

До абстрактної теорії ймовірності, що складається з аксіом, означень і теорем, неодмінно має додаватися *інтерпретація* самого терміну „ймовірність“. Цього вимагає правило відповідності, за яким кожна абстрактна теорія може знайти застосування до практичних задач. Існує чимало різних інтерпретацій ймовірності, позаяк кожне явище, кожна властивість, кожне поняття, що задовольняє умовам аксіом може розглядатися, як свого роду ймовірність.

Однією з найдавніших інтерпретацій є *гранично-частотна*. Якщо умова  $C$  призводить до  $A$  або  $\bar{A}$  і якщо в  $n$  повторах цієї ситуації подія  $A$  стається  $m$  разів, то стверджується, що  $P(A | C) = \lim_{n \rightarrow \infty} (m/n)$ . Це не лише забезпечує інтерпретацію ймовірності, а й дає її *означення* через числове вираження *частоти події*. Таким чином, аксіоми абстрактної теорії ймовірності можна вивести як наслідки з цієї частотної теорії. Попри її зовнішню привабливість, від такої інтерпретації відмовилися, передовсім через відсутність гарантій існування вказаної межі для реальних послідовностей подій, які є бажаним об'єктом застосування теорії ймовірності.

Недоліки гранично-частотної інтерпретації, зберігаючи водночас її привабливі риси, усуває *інтерпретація схильності*. Вона розглядає ймовірність  $P(A | C)$ , як числову міру прагнення, або схильності, фізичних умов, описаних через  $C$ , призвести до результату  $A$ . Вона відрізняється



від старої частотної теорії тим, що лише інтерпретує ймовірність, але не перевизначає її і не виводить із чогось фундаментальнішого. З математичного погляду ймовірність залишається невизначеним засадничим поняттям, зв'язок якої з частотою подій належним чином встановлюється через відповідну теорему. Відмінність цієї інтерпретації від частотної теорії полягає ще й у тому, що вона розглядає ймовірність (схильність), як характеристику фізичних умов  $C$ , що потенційно можуть започаткувати послідовність подій, а не як властивість (частоту) самої послідовності подій. Цей факт підкреслюється, зокрема, неодмінним уживанням умовної форми для запису ймовірності  $P(A|C)$  і несприйняттям абсолютної  $P(A)$ . Схильнісна інтерпретація ймовірності особливо зручна для застосування в квантовій механіці. Першим її запровадив у статистичній фізиці (включно з квантовою механікою) К. Р. Попер [148].

Іншим корисним у науці застосуванням абстрактної теорії ймовірності є теорія *індуктивного судження*. „Події“, про які можна робити ймовірнісні твердження, замінюються *припущеннями*, що можуть бути як істинними, так і хибними, а ймовірність  $P(\alpha|\gamma)$  інтерпретується, як ступінь достовірності  $\alpha$  за умови істинності  $\gamma$ . Деякі з припущень, що розглядаються в цій теорії, мають тривіальний зв'язок із подіями теорії схильності; припущення  $\alpha$  може означати, що „подія  $A$  відбулася“. Водночас, у такій інтерпретації ймовірностні припущення можна робити не лише щодо випадкових подій, а й у стосунку до невідомих фактів. Наприклад, ми можемо говорити про ймовірність того, що в певних експериментах заряд електрона матиме величину між  $1,60 \times 10^{-19}$  Кл і  $1,61 \times 10^{-19}$  Кл. Теорія індуктивного судження корисна для перевірки припущень, які дозволяють виводити невідомі величини зі статистичних даних.

Застосування теорії ймовірності для перевірки фізичних припущень і для оцінки ступеня достовірності можна спрощено розглядати, як *об'єктивну* і *суб'єктивну* інтерпретації. (Взагалі, це надмірне спрощення, бо більшість теорій індуктивного судження намагаються бути об'єктивними.) Було чимало запальних і неконструктивних суперечок довкола питання, яка з цих інтерпретацій правильніша. На погляд автора, більшість таких дискусій мали непродуктивний характер, оскільки ці дві теорії стосуються різного класу задач. Будь-яка інтерпретація ймовірності, що узгоджується з аксіомами, є, за великим рахунком, правильною. До прикладу, поняття ймовірності можна використовувати і в теорії чисел. Імовірність того, що два цілі числа є взаємно простими, дорівнює  $6/\pi$ . Проте зрозуміло, що таке поняття „ймовірності“ не вказує ні на фізичну непостійність, ні на суб'єктивну невпевненість!

## Імовірність і частота

Припустімо, що певний дослід  $E$  може призвести до двох результатів —  $A$  або  $\bar{A}$ , з імовірністю (схильністю) до результату  $A$ , рівною  $P(A|E) = p$ . У  $n$  незалежних спробах (позначимо їх  $E^n$ ) результат  $A$  має місце  $n_A$  разів ( $0 < n_A < n$ ). Імовірність отримання певної впорядкованої послідовності, що містить  $A$  точно  $r$  разів, а  $\bar{A}$  — точно  $n-r$  разів, дорівнює  $p^r q^{n-r}$ , де  $q = 1 - p$ . Усі можливі перестановки послідовності є взаємовиключними подіями, тому ми можемо просумувати їхні ймовірності, щоб отримати

$$P(n_A = r|E^n) = \frac{n!}{r!(n-r)!} p^r q^{n-r}. \quad (1.54)$$

Цей вираз відомий, як *біноміальний розподіл імовірності*.

Частота  $A$  в досліді  $E^n$ ,  $f_n = n_A/n$ , концептуально відрізняється від імовірності  $p$ , однак має з нею зв'язок. Розглянемо середнє значення  $n_A$  відносно ймовірнісного розподілу (1.54):

$$\langle n_A \rangle = \sum_{r=1}^n r P(n_A = r|E^n).$$

Суму легко обчислити за методом генеруючої функції, скориставшись біноміальною тотожністю

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{n!}{r!(n-r)!} p^r q^{n-r} = (p+q)^n.$$

Це дає

$$\langle n_A \rangle = p \frac{\partial}{\partial p} (p+q)^n \Big|_{q=1-p} = np.$$

Отже, середня частота  $A$  є

$$\langle f_n \rangle = \frac{\langle n_A \rangle}{n} = p. \quad (1.55)$$

Цей результат встановлює перший зв'язок між імовірністю та частотою, але його ще недостатньо для впевненості, що  $f_n$  буде близькою до  $p$ .

Далі розглянемо загальніший експеримент із неперервним значенням змінної  $X$ , що має ймовірність  $P(x < X < x + dx | E) = g(x) dx$ . При потребі до розгляду можна формально включити й дискретну величину, дозволивши питомій імовірності  $g(x)$  містити дельта-функції.

*Лема.* Якщо  $X$  невід'ємна змінна [тобто,  $g(x) = 0$  при  $x < 0$ ], то для будь-якого  $\varepsilon > 0$  маємо

$$\begin{aligned}\langle X \rangle &= \int_0^{\infty} x g(x) dx \geq \int_{\varepsilon}^{\infty} x g(x) dx \geq \\ &\geq \varepsilon \int_{\varepsilon}^{\infty} g(x) dx = \varepsilon P(X \geq \varepsilon | E).\end{aligned}$$

Отже,  $P(X \geq \varepsilon | E) \leq \langle X \rangle / \varepsilon$ .

Застосувавши цю лему до невід'ємної змінної  $|X - c|$ , де  $c$  — певна константа, отримуємо

$$P(|X - c| \geq \varepsilon | E) \leq \langle |X - c| \rangle / \varepsilon. \quad (1.56)$$

крім того, розглядаючи невід'ємну змінну  $|X - c|^\alpha$  із  $\alpha > 0$ , одержимо

$$\begin{aligned}P(|X - c| \geq \varepsilon | E) &= P(|X - c|^\alpha \geq \varepsilon^\alpha | E) \leq \\ &\leq \frac{\langle |X - c|^\alpha \rangle}{\varepsilon^\alpha}.\end{aligned} \quad (1.57)$$

Цей результат відомий, як *нерівність Чебишева*. Найчастіше її використовують для окремого випадку  $\alpha = 2$  і  $c = \langle X \rangle$  — середнє значення розподілу. Запровадивши поняття дисперсії  $\sigma^2 = \langle |X - \langle X \rangle|^2 \rangle$  і встановивши  $\varepsilon = k\sigma$ , запишемо нерівність у вигляді

$$P(|X - \langle X \rangle| \geq k\sigma | E) \leq \frac{1}{k^2}.$$

Ймовірність того, що  $X$  відрізнятиметься від свого середнього значення на  $k$  або більше стандартних відхилень, не перевищує  $1/k^2$ , незалежно від форми ймовірносного розподілу.

Тепер повернемося до експерименту  $E^n$  ( $n$  повторів процедури  $E$ ) для з'ясування тісніших стосунків між частотою випадання результату  $A$  і ймовірністю  $P(A|E) = p$ . Ми застосуємо (1.57) для  $\alpha = 2$  і  $X = n_A = \sum_{i=1}^n J_i$ . Тут  $J_i = 1$ , якщо результатом  $i$ -того повторення процедури  $E$  є  $A$ , і  $J_i = 0$  у протилежному випадку. Також оберемо константу  $c = \langle X \rangle$ , яка, відповідно до (1.55), дорівнює  $np$ . Звідси,

$$P(|n_A - np| \geq \varepsilon | E) \leq \frac{\langle (n_A - np)^2 \rangle}{\varepsilon^2}.$$

Тепер маємо

$$\langle (n_a - np)^2 \rangle = \left\langle \left\{ \sum_{i=1}^n (J_i - p) \right\}^2 \right\rangle = \sum_i \sum_j \langle (J_i - p)(J_j - p) \rangle.$$

Оскільки різні повторення  $E$  незалежні, отримуємо

$$\langle (J_i - p)(J_j - p) \rangle = \langle J_i - p \rangle \langle J_j - p \rangle = 0 \text{ } i \neq j.$$

Отже,

$$\langle (n_a - np)^2 \rangle = \sum_{i=1}^n \langle (J_i - p)^2 \rangle \leq n.$$

Таким чином,  $P(|n_A - np| \geq \varepsilon | E) \leq n/\varepsilon^2$ . У термінах відносної частоти події  $A$ ,  $f_n = n_A/n$ , цей результат має вигляд  $P(|f_n - p| \geq \varepsilon/n | E) \leq n/\varepsilon^2$ . Підставивши  $\delta = \varepsilon/n$ , ми бачимо, що

$$P(|f_n - p| \geq \delta | E) \leq 1/n\delta^2. \quad (1.58)$$

Цей важливий результат, який є окремим випадком *закону великих чисел*, стверджує, що ймовірність відхилення  $f_n$  (відносної частота події  $A$  в  $n$  незалежних спробах  $E$ ) від  $p$  більше, ніж на задану величину  $\delta$ , прагне до нуля при  $n \rightarrow \infty$ . Цікаво відзначити, що доведення цієї теореми вимагає умови незалежності (1.52), а також Аксиом 1, 2 і 3b. Проте не звертається до Аксиоми 4, якщо прийнято Аксиому 3b, замість 3a.

Слід наголосити, що закон великих чисел не стверджує, що  $f_n$  коли-небудь стане рівною  $p$  чи, принаймні, залишатиметься близькою до  $p$  при  $n \rightarrow \infty$ . Він лише вказує, відхилення  $f_n$  від  $p$  стають дедалі неймовірнішими — тобто, ймовірність будь-якого відхилення врешті стане меншою за довільно задану величину при досить великих значеннях  $n$ . З теорії ймовірності можна отримати лише твердження про ймовірність, а не про неминучість.

## Оцінювання ймовірності

У попередніх прикладах припускалося, що  $p$  відома, і це дозволяло виводити з неї інші ймовірності. В такому підході простежується методологічна схожість із квантовою теорією, де більшість передбачень є ймовірнісними. Однак для перевірки теоретичних висновків у нас повинна бути можливість вивести з експериментальних даних певні емпіричні ймовірності, які можна порівняти з теоретичними ймовірностями. Для цього треба вдатися до теорії *індуктивного судження*.

Припустімо, що схильність  $p$  до появи результату  $A$  у процедурі  $E$  невідома. Проводячи незалежні спроби  $E$  протягом  $n$  разів, ми спостерігаємо результат  $A$  в  $r$  випадках. Який висновок можна зробити щодо невідомої величини  $p$ ?

Позначимо  $E = (C, p = \theta)$ , де  $C$  символізує всі умови досліду за винятком значення  $p$ , а  $D = (n_a \text{ здійснень } A \text{ у } n \text{ спробах})$  є даними, отриманими в результаті  $n$  спроб. Тоді, застосувавши теорему Баєса (1.51), отримуємо

$$P(p = \theta | D \& C) = \frac{P(D | p = \theta, C) P(p = \theta, | C)}{P(D | C)}.$$

(Строго кажучи, ми маємо припустити, що  $p$  лежить у вузькому інтервалі  $\delta$  з центром на  $\theta$ , а відтак визначити питому ймовірність у межі  $\delta \rightarrow 0$ .) Оскільки нас цікавлять лише відносні ймовірності для різних значень  $p$ , ми можемо відкинути всі множники, що не містять  $\theta$ :

$$P(p = \theta | D \& C) \propto \theta^r (1 - \theta)^{n-r} P(p = \theta | C). \quad (1.59)$$

Як і слід було чекати, цей результат нічого не стверджує про значення  $p$ , він дає лише ймовірність різних можливих значень. Проте і в ньому є невизначеність, оскільки ми не маємо змоги обчислити кінцеву ймовірність  $P(p = \theta | D \& C)$ , обумовлену даними  $D$ , поки не знаємо початкової ймовірності  $P(p = \theta | C)$ , яка являє собою ступінь достовірності того, що  $p = \theta$ , за відсутності даних  $D$ . Якщо ми оберемо початкову ймовірність незалежною від  $\theta$ , то *найвірогіднішим* значенням  $p$ , отриманим із максимуму кінцевого розподілу питомої ймовірності за  $\theta$ , буде

$$p = \theta_m = \frac{r}{n}. \quad (1.60)$$

Виправданість вибору початкової ймовірності, як незалежної від  $\theta$ , є досить спірною, але варто зазначити, що в разі, коли  $P(p = \theta | C)$  є повільнозмінною функцією  $\theta$ , локальний максимум у (1.59) буде досить близьким (1.60) при розумно великому значенні  $n$ . Тобто, на кінцеву оцінку достовірного значення  $p$  мають переважний вплив дослідні дані, а початкова оцінка не відіграє практично ніякої ролі. Звичайно, (1.60) збігається з інтуїтивною оцінкою ймовірності  $p$ , яку більшість людей зробили б і без допомоги теореми Баєра. Та навіть у цьому випадку її застосування має переваги:

- (а) На додачу до отримання найвірогіднішого значення  $p$ , (1.59) дозволяє нам обчислити ймовірність того, що  $p$  лежить у певному діапазоні значень. Таким чином, можна визначити надійність оцінки (1.60).

- (b) Залежно від призначення результату, найвірогідніше значення  $\theta_m$  може й не бути найадекватнішою оцінкою  $p$ . Якщо, наприклад, „ціна“ відхилення оцінки  $\theta$  від невідомого справжнього значення  $p$  пропорційна до  $|\theta - p|$  або  $|\theta - p|^2$ , то найкращою оцінкою буде, відповідно, медіана розподілу питомої ймовірності або усереднена ймовірність.
- (c) Замість намагання отримати чисто емпіричне значення  $p$  з експерименту для його порівняння з теоретичним значенням, ми могли б одержати найкращу оцінку для  $p$ , взявши до уваги неточність теоретичних обчислень і обмежений обсяг експериментальних даних. Теорія могла б дати початковий розподіл питомої ймовірності, а найдостовірніше значення можна отримати з максимуму кінцевого розподілу питомої ймовірності (1.59).

## Література до Розділу 1

Повні посилання наведено в Бібліографії наприкінці книги.

### Вектори й оператори

Дірак [49]: виклад формалізму бра- і кет-векторів його автором.

Яух [97]: переформулювання діракового формалізму в межах математичної теорії гільбертового простору.

Джордан [99]: стислий перелік тих аспектів теорії гільбертового простору, що є найістотнішими для квантової механіки.

Бом, А. [30]: застосування оснащеного гільбертового простору у квантовій механіці.

### Ймовірність

Існує велика кількість книжок на цю тему, і тут наведено лише деякі з них, що становлять особливий інтерес.

Кокс [46]: виведення кількісних законів теорії ймовірності з елементарних якісних постулатів.

Рені [152]: строгий розгляд теорії ймовірності на підставі її взаємозв'язку з теорією вимірювання.

Файн [60]: критичний аналіз кількох підходів до теорії ймовірності.

Кек [101]: застосування теорії ймовірності до таких невластивих для неї дисциплін, як теорія чисел.

## Задачі

**1.1.** Доведіть ці нерівності Шварца та трикутника, виходячи з аксіом, що визначають внутрішній добуток.

Вкажіть необхідні та достатні умови для того, щоб нерівності перетворювалися на рівності.

**1.2.** Розгляньте векторний простір, що складається з усіх можливих лінійних комбінацій наступних функцій:  $1, \sin x, \cos x, \sin^2 x, \cos^2 x, \sin(2x), \cos(2x)$ . Яка розмірність цього простору? Вкажіть можливий набір базисних векторів і доведіть, що він повний.

**1.3.** Доведіть, що слід оператора  $A$ ,  $\text{Tr } A = \sum_n \langle u_n | A | u_n \rangle$ , не залежить від конкретного ортонормованого базису  $\{|u_n\rangle\}$ , обраного для обчислень.

**1.4.** Оскільки лінійна комбінація матриць однакової форми дає матрицю такої ж форми, то їх можна розглядати, як елементи векторного простору. Покажіть, що будь-яку  $2 \times 2$ -матрицю можна виразити через лінійну комбінацію таких чотирьох матриць:

$$I = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix},$$

$$\sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

**1.5.** Якщо  $A$  і  $B$  матриці однакової форми, покажіть, що  $(A, B) = \text{Tr}(A^\dagger B)$  має всі властивості внутрішнього добутку. Відтак покажіть, що чотири матриці із Задачі 1.4 ортогональні за цим добутком.

**1.6.** Знайдіть власні значення матриці

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

Побудуйте відповідні проекційні оператори і перевірте для цієї матриці спектральну теорему.

**1.7.** Покажіть, що *симетризатор*  $S$ , визначений на довільній функції  $\phi(x)$ , як  $Sf(x) = \frac{1}{2}[\phi(x) + \phi(-x)]$ , і *антисиметризатор*  $A$ ,  $Af(x) = \frac{1}{2}[\phi(x) - \phi(-x)]$ , є проекційними операторами.

**1.8.** Використовуючи означення функції від оператора,  $f(A) = \sum_i f(a_i)|a_i\rangle\langle a_i|$ , з  $A|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle$  і  $\langle a_i|a_j\rangle = \delta_{ij}$ , доведіть, що степенева функція  $f_n(A) \equiv A^n$  задовольняє співвідношенню  $A^n A^m = A^{n+m}$ .

**1.9.** У цій задачі розглядається ріст квадратично інтегрованих функцій.

- (а) Розгляньте гільбертів простір  $\mathcal{H}$ , що складається з функцій  $\psi(x)$ , для яких

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx < \infty.$$

Покажіть, що в  $\mathcal{H}$  існують такі функції, для яких  $Q\phi(x) \equiv x\phi(x)$  не належить до  $\mathcal{H}$ .

- (б) Розгляньте простір  $\Omega$ , що складається з функцій  $\psi(x)$ , які задовольняють нескінченному переліку умов:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 (1 + |x|^n) dx < \infty \quad \text{для } n = 0, 1, 2, \dots$$

Покажіть, що для будь-якої  $\psi(x)$  із  $\Omega$  функція  $Q\phi(x) \equiv x\phi(x)$  також належить до  $\Omega$ . (Цей результат засвідчує, що область визначення оператора  $Q$  включає весь простір  $\Omega$ , але не поширюється на весь  $\mathcal{H}$ ).

**1.10.** Розширений простір  $\Omega^\times$  складається з функцій  $\chi(x)$ , що задовольняють умові

$$(\chi, \phi) = \int_{-\infty}^{+\infty} \chi^*(x)\phi(x) dx \quad \text{для всіх } \phi \text{ із } \Omega.$$

Ядерний простір  $\Omega$  і гільбертів простір  $\mathcal{H}$  визначені в попередній задачі. Вкажіть, яка з наведених функцій належить до  $\Omega$ , до  $\mathcal{H}$  і (або) до  $\Omega^\times$ : (а)  $\sin x$ ; (б)  $(\sin x)/x$ ; (в)  $x^2 \cos x$ ; (г)  $e^{-ax}$  ( $a > 0$ ); (е)  $[\log(1 + |x|)]/(1 + |x|)$ ; (ф)  $\exp(-x^2)$ ; (г)  $x^4 e^{-|x|}$ .



**1.11.** Які граничні умови треба накласти на функції  $\{\phi(\mathbf{x})\}$ , визначені в певній обмеженій або необмеженій ділянці тривієвимірному простору, щоб оператор лапласіан  $\nabla^2$  був ермітовим?

**1.12.** Нехай  $\langle \psi | A | \psi \rangle = \langle \psi | B | \psi \rangle$  для всіх  $\psi$ . Доведіть, що  $A = B$  в тому сенсі, що  $\langle \phi_1 | A | \phi_2 \rangle = \langle \phi_1 | B | \phi_2 \rangle$  для всіх  $\phi_1$  і  $\phi_2$ .

**1.13.** У нашій галактиці близько  $N = 10^{11}$  зірок. Прийміть, як факт, наступні твердження: ймовірність того, що зірка має планети, є  $p = 10^{-2}$ ; ймовірність, що умови на планеті придатні до життя, є  $q = 10^{-2}$ ; ймовірність, що життя може розвинутиись за сприятливих умов, є  $r = 10^{-2}$ . (Всі наведені значення цілком довільні.)

- (а) Яка ймовірність існування життя в навмання обраній сонячній системі? (Мається на увазі будь-яка зоря з планетами, якщо вони там існують.)
- (б) Яка ймовірність того, що життя існує бодай в одній сонячній системі нашої галактики?

**1.14.** Ця задача ілюструє закон великих чисел.

- (а) Вважатимемо, що ймовірність випадання „орла“ при киданні однієї монети є 0,5. Порівняйте ймовірність отримати 5 „орлів“ у 10 киданнях монети з ймовірністю випадання 50 „орлів“ у 100 спробах.
- (б) Обчисліть для 10 і 100 спроб викидання монет ймовірність того, що частка „орлів“ лежатиме в проміжку від 0,445 до 0,555.

**1.15.** Питома ймовірність розпаду радіоактивного ядра є  $P(t) = \alpha e^{-\alpha t}$ , де  $t \geq 0$  — (непередбачуваний) час життя ядра, а  $\alpha^{-1}$  — середній час його життя. Розрахуйте питому ймовірність для  $|t_1 - t_2|$ , де  $t_1$  і  $t_2$  — час життя двох однакових незалежних ядер.

**1.16.** Нехай  $X_1, X_2, \dots, X_n$  — взаємно незалежні випадкові змінні, кожна з яких має питому ймовірність

$$P_1(x) = \alpha e^{-\alpha x} \quad (x \geq 0)$$

$$P_1(x) = 0 \quad (x \leq 0)$$

за певної умови  $C$ . Тобто,  $\text{Prob}(x < X_j < x + dx | C) = P_1(x) dx$  для  $1 \leq j \leq n$ . Покажіть, що питома ймовірність для суми цих змінних,  $S = X_1 + X_2 + \dots + X_n$ , є

$$P_n(x) = \alpha(\alpha x)^{n-1} e^{-\alpha x} / (n-1)!$$

Скористайтесь цим результатом для прямої демонстрації (без звернення до закону великих чисел), що середнє цих змінних,  $S/n$ , буде ймовірно близьким до  $\langle X_j \rangle = \alpha^{-1}$  при великих  $n$ .

**1.17.** Джерело випускає частки із середньою інтенсивністю  $\lambda$  часток за секунду, проте кожен викид частки стохастично незалежний від попереднього. Обчисліть імовірність того, що джерело випустить рівно  $n$  часток протягом часу  $t$ .

## Розділ 2

# Формулювання квантової механіки

### § 2.1. Основні теоретичні поняття

Кожна фізична теорія складається з певних засадничих понять, математичного формалізму та набору правил, що пов'язують ці поняття з математичними об'єктами, які їх представляють. Ці правила відповідності спершу застосовують, щоб виразити фізичну задачу мовою математики. Коли задачу сформульовано в математичному вигляді, її можна розв'язати чисто математичними методами, що не потребують ніякої фізичної інтерпретації. Після чого формальне рішення, через правила відповідності, знову повертається в світ фізики для належного тлумачення.

Часом цей взаємозв'язок між фізичними та математичними об'єктами настільки очевидний, що нам не доводиться й замислюватися над ним. У класичній механіці положення частки (фізичне поняття) відображається на дійсне число або набір дійсних чисел (математичне поняття). І хоча ідея дійсного числа з погляду математики аж ніяк не тривіальна, більшість людей здатні інтуїтивно збагнути це правило відповідності без найменшого ризику заплутатися. Математичний формалізм квантової механіки набагато абстрактніший і не такий інтуїтивний, як у класичній механіці. Світ не здається створеним із ермітових операторів<sup>5</sup> та нескінченновимірних векторів, тому ми маємо надзвичайно уважно, з граничною обережністю підходити до правил відповідності, які пов'язують абстрактний формалізм зі спостережною дійсністю.

Є два важливі аспекти квантової теорії, що потребують математичного вираження, — механічний і статистичний.

---

<sup>5</sup>Тут і далі автор переважно вживає термін „ермітові оператори“, що, з огляду на його високу математичну прискіпливість, є лише даниною прийнятій у фізичній літературі традиції. Насправді ж, і оператори стану і оператори для спостережних величин повинні бути самоспряженими, а ще точніше, в істотному самоспряженими — тобто, мати єдине самоспряжене розширення. Загалом, ермітовий оператор, що має повний набір власних векторів у сенсі узагальненої спектральної теореми (§ 1.4) є в істотному самоспряженим. (Прим. перекл.)

## Механічний аспект

Певні динамічні змінні, які, згідно з класичною механікою, мали б набувати неперервного континууму значень, насправді виявляються дискретними, „квантованими“. Деякі експериментальні свідчення цього ми розглянули у Вступі. Ще один гарний приклад дають атомні спектри. Відповідно до класичної механіки та електродинаміки, електрон в атомі мусив би випромінювати електромагнітні хвилі з неперервно змінною частотою, поступово втрачаючи енергію і по спіральній траєкторії наближаючись до ядра. Але насправді спостерігається лише дискретний спектр випромінювання, і на цій підставі Н. Бор дійшов висновку, що зв'язаний в атомі електрон може займати лише дискретний набір енергетичних рівнів, і при переході між ним випромінює з частотою, пропорційною різниці енергій цих рівнів.

Проте сама енергія не завжди квантована, і вільний електрон може набувати будь-якого її значення, а під час руху з прискоренням випромінювати в неперервному діапазоні частот. Відтак стає очевидним, що для обчислення припустимих значень динамічних змінних ми потребуємо принципово інших, порівняно з класичною теорією, засобів, які одночасно дозволяли б розглядати і дискретні, і неперервні величини. Це досягається таким чином:

**Постулат 1.** Кожній *динамічній змінній* (фізичне поняття) ставиться у відповідність *лінійний оператор* (математичний об'єкт), і її можливі значення є власними значеннями цього оператора.

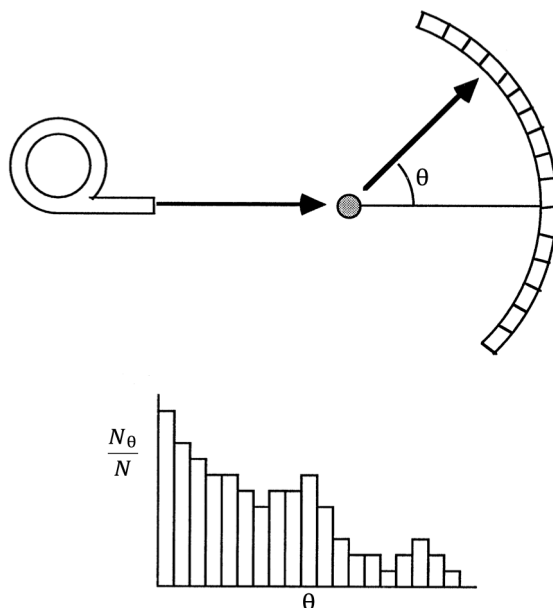
Єдине виправдання цього постулату наразі полягає в тому, що оператори можуть мати і чисто дискретний спектр власних значень, і чисто неперервний, і різні комбінації того й іншого, охоплюючи таким чином усі можливі варіанти. Проте це твердження не набуде глибокого змісту, поки ми не виробимо правила призначення конкретних операторів конкретним динамічним змінним.

## Статистичний аспект

Ми потребуємо певних засобів для обчислення ймовірності або відносної частоти появи різних припустимих значень динамічних змінних за певних визначених фізичних обставин. Це можна проілюструвати на прикладі атомного спектру, в якому спостережна інтенсивність спектральних ліній пропорційна кількості переходів між енергетичними рівнями на одиницю часу; а ця величина, своєю чергою, залежить від імовірності

переходу атома з одного рівня енергії на інший. Проте ще нагляднішою ілюстрацією ймовірнісного аспекту нашої задачі буде експеримент з розсіюння.

Частку було піддано процедурі *приготування*, що полягала в прискоренні й колімації (тобто, вирівнюванні її траєкторії) за допомогою пристрою, схематично зображеного на Рис 2.1. Частка розсіюється на мішені



**Рис. 2.1.** Експеримент із розсіюння: вгорі показано пристрій, нижче — отримані результати.

й відлітає під кутом  $\theta$  на детектор у правій частині рисунка. А одиничне *вимірювання* полягає в тому, щоб зареєструвати частку й визначити кут її розсіювання  $\theta$ . Якщо так само приготувати ідентичну (або навіть цю саму) частку, то кут розсіювання, загалом, буде іншим. Кожна така подія, попри ідентичність усіх умов, даватиме індивідуальний, не відтворюваний результат.<sup>6</sup>

А проте, в *статистичному експерименті*, що складається з довгої низки ідентичних приготувань і вимірювань, відносні частоти різних можливих наслідків окремих вимірювань зазвичай наближаються до стій-

<sup>6</sup>Чи є така невідтворюваність наслідком індетермінізму, чи просто обмеженням (практичним або фундаментальним) у процедурі приготування — питання, на яке ми не можемо тут відповісти, та й не маємо в цьому потреби. Статистичний підхід виправдовує себе за будь-яких обставин.

кої межі. Це наглядно ілюструє графік у нижній частині Рис. 2.1, де показано відносну кількість часток, зареєстрованих кожним детектором, у залежності від кута його розташування. У цьому полягає характерна риса статистичного експерименту: невідтворювані одиничні події, в результаті великої кількості їх повторів, дають стабільну граничну частоту.

У квантовій механіці ця особливість проявляється якнайвиразніше. Вона не здатна передбачити наслідки окремої події; не існує жодного способу обчислити кут розсіювання для однієї конкретної частки, зате можна розрахувати *ймовірність* різних можливих результатів такого експерименту. Фундаментальний зв'язок між імовірністю та частотою (див. § 1.5) дозволяє нам порівняти теоретичні ймовірності зі спостережними відносними частотами в статистичному експерименті.

Зручно поділяти статистичний експеримент на дві фази — *приготування* і *вимірювання*. В досліді з розсіювання приготування полягає в проходженні частки через прискорювальний та колімаційний пристрій і в її допущенні до взаємодії з мішенню. Вимірювання складається з реєстрації частки й визначення кута, на який вона відхилилася від початкової траєкторії. Такий поділ виправданий тим, що ці дві фази істотно незалежні. Описану процедуру приготування можна поєднати з детекторами іншого типу, які вимірюватимуть енергію частки замість її положення. І навпаки — зображений на Рис. 2.1 набір детекторів може працювати з іншими мішенями і навіть із цілком відмінними пристроями для приготування часток.

Встановлюючи різницю між приготуванням та вимірюванням, ми маємо точніше визначитися з тим, що насправді є наслідком першої процедури. Передовсім напрошується відповідь, що це частки (або, загальніше, об'єкти для подальшого вимірювання). Попри свою очевидність, таке твердження для нас неприйнятне, оскільки воно не в змозі пояснити специфічний результат експерименту. Два ідентичні об'єкти, що зазнали однакової процедури приготування, можуть поводитися різним чином при подальшому вимірюванні. З іншого боку, два об'єкти, що дали однаковий результат при вимірюванні, могли бути приготовлені цілком інакше. У прикладі на Рис. 2.1 вимірювання визначає лише напрямок руху частки після розсіювання на мішені. Якщо нічого не відомо про розташування пристрою для приготування, то з цього результату не можна з'ясувати, в якому напрямку летіла частка до зустрічі з мішенню. Якщо ми хочемо охарактеризувати приготування за наслідком, до якого воно призводить, то мусимо ототожнити цей наслідок із чимось іншим, ніж конкретний об'єкт, що зазнав приготування, оскільки, як уже зазначалося

вище, ідентичні приготування можуть призвести до різних результатів вимірювання, а однакові результати вимірювання можуть бути наслідком різних приготувань.

Певне приготування визначає не результат подальшого вимірювання, а *ймовірність* різних можливих його наслідків. Оскільки приготування є незалежним від конкретного механізму вимірювання, воно має визначати розподіли ймовірності для всіх можливих вимірювань. Це підводить нас до запровадження поняття *стану*, який дає повну характеристику розподілу ймовірності для кожної спостережної величини. (*Спостережна* є динамічною величиною, яку, в принципі, можна виміряти.)

Будь-який повторюваний процес, що призводить до цілком визначених імовірностей для всіх спостережних величин, називається *процедурою приготування станів*. Це може бути продуманою лабораторною операцією, як у нашому випадку, а може бути й природним процесом, що відбувається без людського втручання. Якщо дві або більше процедур утворюють такі ж самі набори ймовірностей, вони є еквівалентними і дозволяють приготувати однакові стани.

Емпіричний зміст імовірнісного твердження виявляється лише у відносних частотах отримання певних результатів у послідовності подій, спричинених однаковими (або еквівалентними) процедурами приготування станів. Тому, поряд із первісним означенням стану, як абстрактного набору ймовірностей для різних спостережних величин, ми також можемо асоціювати його з *ансамблем* однаково приготовлених систем. Проте важливо пам'ятати, що цей ансамбль є ідеалізованим поняттям, нескінченною сукупністю всіх таких систем, що можуть утворитися в результаті процедури приготування станів, а не конкретними системами, які реально співіснують у просторі. У випадку з експериментом розсіювання, системою є одинична частка, а ансамблем — уявний набір точних копій такої частки з усім її оточенням. Не слід плутати ансамбль з пучком часток, який є зовсім іншою (багаточастковою) системою. Строго кажучи, прискорювальні й колімаційні пристрої в експерименті з розсіювання можуть розглядатися, як процедура приготування для одночасткового стану винятково за умови, коли густина пучка часток така мала, що в один і той самий час на шляху між прискорювачем і детектором перебуває лише одна з них, а тому відсутня будь-яка кореляція між нею та попередньою й наступною частками.

Математичне представлення стану має бути таким, що дозволяло б нам обчислювати розподіли ймовірності для всіх спостережних величин. Як виявляється, для цього досить постулювати лише формулу для сере-

днього значення.

**Постулат 2.** Кожному стану відповідає єдиний *оператор стану*. Середнє значення динамічної змінної  $\mathcal{R}$ , представлені оператором  $R$ , у віртуальному ансамблі подій, що можуть бути наслідком процедури приготування стану, представленого оператором  $\rho$ , є

$$\langle \mathcal{R} \rangle = \frac{\text{Tr}(\rho R)}{\text{Tr} \rho} \quad (2.1)$$

Тут  $\text{Tr}$  позначає операторний слід. Оператор стану також відомий, як *статистичний оператор*, а іноді його називають *матрицею густини*, хоча останній термін зводить його до матричної форми в координатному представленні. Існують певні обмеження на те, який вигляд може мати оператор  $\rho$ ; їх ми розглянемо згодом. Формулювання цього постулату навмисно було зроблено таким важким і багатослівним, щоб відокремити фізичні поняття від математичних об'єктів, які їх представляють. А коли не боятися, що відсутність такого чіткого розмежування призведе до плутанини, можна просто сказати: „Середнє значення спостережної  $R$  у стані  $\rho$  є ... (2.1).“

[Поняття стану є одним із найвразливіших і найспірніших у квантовій механіці. У класичній механіці слово „стан“ вживається щодо координат та імпульсу окремої системи, тож попервах припускалося, що й опис квантового стану має вказувати на певні характеристики окремої системи. Оскільки мета фізики завжди полягала в тому, щоб надати об'єктивну й реалістичну картину світу, то здавалося найприроднішим інтерпретувати квантовий стан (оператор стану, вектор стану або хвильову функцію), як елемент реальності в тому ж самому сенсі, в якому таким елементом реальності є електромагнітне поле. Такі ідеї, дуже поширені в літературі, найчастіше виникають, як неявні припущення, зроблені без достатнього розгляду, ніж як явно сформульовані аргументи. Однак такі припущення призводять до суперечностей (див. Розділ 9), тому від них треба відмовитися.]

Опис квантового стану має ґрунтуватися на аналізі поведінки ансамблю однаково приготовлених систем. Одним із найперших і, звичайно, найвидатнішим прибічником ансамблевої інтерпретації був А. Ейнштейн. Свої погляди на це питання він стисло виклав у наведеній нижче цитаті (див. [55]):

„Спроба збагнути квантову теорію, як повний опис окремих систем, призводить до неприродних теоретичних інтерпретацій, які негайно стають непотрібними, коли ви приймаєте інтерпретацію, яка розглядає ансамбль систем, а не на одну окрему систему.“



Критичні зауваження на адресу *ансамблевої* інтерпретації часто були викликані нерозумінням різниці між віртуальним нескінченним набором однаково підготовлених систем і конкретної послідовності або сукупності схожих систем. Цю критику, хоча вона й хибна, можна трохи пом'якшити, вдавшись до абстрактнішої інтерпретації, в якій стан ототожнюється з *процедурою* його приготування. Тобто, „стан“ є просто скороченням для словосполучення „процедура приготування стану“. Такий підхід має свої переваги, але водночас схиляється до операціоналізму, бо не припускає можливості, що дві незмінні процедури можуть утворити однаковий стан. Крім того, він зводить застосування квантової механіки до лабораторних умов у присутності дослідника, що проводить приготування й вимірювання. Але, звісно ж, закони квантової механіки так само чинні й для атомів у зорях, і вони діяли навіть тоді, коли на Землі ще не виникло життя!

Ототожнення поняття стану безпосередньо з набором розподілів імовірності дозволяє уникнути всіх заперечень. Цей підхід також робить очевидним той факт, що інтерпретація квантової механіки залежить від вибору інтерпретації ймовірності. ]]

## § 2.2. Умови для операторів

Сформульовані в попередньому параграфі постулати пов'язують із кожним станом та кожною динамічною змінною певні оператори. Далі ми розглянемо умови, які треба накласти на ці оператори, щоб вони відповідали реальним фізичним системам.

Перша з них, це просто домовленість про нормалізацію

$$\text{Tr } \rho = 1, \quad (2.2)$$

яка дозволяє позбутися знаменника в (2.1).

Наступні дві умови менш тривіальні. Розглянемо гіпотетичну спостережну, представлену проекційним оператором  $P_u = |u\rangle\langle u|$ , де  $|u\rangle$  — певний вектор одиничної норми. Цей оператор можна розглядати, як відповідник такої змінної, що набуває лише двох значень — 1 і 2. Далі, середнє динамічної змінної, яка набуває лише *дійсних* значень, також має бути дійсним, а отже,  $\text{Tr}(\rho P_u) = \langle u|\rho|u\rangle$  дійсне. Якщо ця вимога накладена на *всі* вектори  $|u\rangle$ , то з Теорема 1 у § 1.3, маємо

$$\rho = \rho^\dagger. \quad (2.3)$$

Крім того, середнє значення змінної, яка набуває лише невід'ємних значень, також має бути невід'ємним. Звідси,

$$\langle u|\rho|u\rangle \geq 0. \quad (2.4)$$

Це виконується для всіх  $|u\rangle$ , тому  $\rho$  називається *невід'ємним* оператором.

Якби ми напевно знали, що всі проекційні оператори пов'язані зі спостережними, то необхідність умов (2.3) і (2.4) було б доведено. Але в нас немає підстав для такого твердження, тому ми мусимо задовольнитися запровадженням Постулату 2а (позначеного так, бо він є посиленою версією Постулату 1).

**Постулат 2а.** Кожному станові відповідає єдиний оператор стану, що має бути ермітовим, невід'ємним, з одиничним слідом.

Попри те, що ми не довели доконечної необхідності такого постулату, він має досить вагоме обґрунтування, а можливість його доведення залишається відкритою для випадків, коли набір спостережних виявиться доволі широким.

З того факту, що значення динамічних змінних є дійсними, а отже, будь-яке їх середнє значення також має бути дійсним, ми можемо вивести відповідну умову для відповідних їм операторів. Розгляне оператор стану у вигляді  $\rho = \text{Tr}(|\Psi\rangle\langle\Psi|R)$ , де  $|\Psi\rangle$  є вектором одиничної норми. Очевидно, що такий  $\rho$  відповідає всім трьом вимогам Постулату 2а. У цьому стані середнє значення динамічної змінної, представлені оператором  $R$ , є

$$\text{Tr}(\rho R) = \text{Tr}(|\Psi\rangle\langle\Psi|R) = \langle\Psi|R|\Psi\rangle.$$

Якщо цей вираз із необхідністю має бути дійсним для всіх  $|\Psi\rangle$ , то Теорема 1 із § 1.3 дає

$$R = R^\dagger. \quad (2.5)$$

На цьому початковому етапі розвитку теорії ми не можемо обґрунтувати припущення, що кожен вектор  $|\Psi\rangle$  відповідає фізично реалізованому станові, тому мусимо запровадити посилену версію Постулату 1:

**Постулат 1а.** Кожній динамічній змінній відповідає ермітовий оператор, власні значення якого є можливими значеннями цієї змінної.

Наведена вище аргументація (або певні її різновиди) є найпоширенішою підставою для накладення на оператори, що представляють спостережні величини, вимогу ермітовості. На жаль, така аргументація має ще менше підстав, ніж це може здаватися. Використання дійсних чисел для представлення значень фізичних величин насправді є лише домовленістю. Дві пов'язані фізичні змінні цілком могли б бути вираженими через комплексні числа; а одна окрема величина могла б бути описаною набором вкладених інтервалів, що вказувало б на їхню невизначеність. Із того, що динамічні змінні є дійсними в метафізичному сенсі, тобто не є

нереальними, аж ніяк не впливає, що вони мають відповідати дійсним числам у математичному сенсі.

Фактично, для формулювання квантової теорії істотним є те, що всі ермітові оператори мають спектральне представлення — у дискретній формі (1.27) або в неперервній (1.37). Обчислення ймовірності, яке ми проведемо в § 2.4, цілком ґрунтуватиметься на спектральному представленні оператора, а питання про те, дійсні його власні значення чи комплексні, є другорядним і неважливим. У Задачі 2.1 наводиться приклад оператора з чисто дійсними власними значеннями, але неповним набором власних векторів, тому він не має спектрального представлення. Якби дійсність власних значень була єдиним істотним критерієм, то такий оператор був би прийнятним для динамічної змінної. Проте для нього не існує жодної несуперечливої ймовірнісної інтерпретації, оскільки його „середнє значення“ за формулою (2.1) може бути комплексною величиною, незважаючи на те, що всі власні значення дійсні.

[ [ Тут ми послідовно вживаємо термін *спостережна*, як фізичне поняття, що позначає динамічну змінну, яку, в принципі, можна виміряти, і відрізняємо її від оператора, що виражає цю змінну в математичному формалізмі. Дірак, якому ми завдячуємо більшою частиною сучасного формулювання квантової механіки, на жаль, надто вільно поводився зі словом „спостережна“, вживаючи її без розбору і щодо фізичної динамічної змінної, і щодо відповідного їй математичного оператора. Часто це призводить до непорозумінь, на зразок відомої в літературі суперечки про те, чи є векторний потенціал спостережною величиною. Одна сторона стверджувала, що так, і наводила за доказ виконання всіх необхідних вимог для відповідного цій змінній оператора; інша ж сторона це заперечувала на підставі того, що векторний потенціал неможливо виміряти. ] ]

## § 2.3. Загальні стани та чисті стани

Як було показано в попередньому параграфі, математично прийнятний оператор стану має задовольняти трьом умовам:

$$\text{Tr } \rho = 1 \quad (2.6)$$

$$\rho = \rho^\dagger \quad (2.7)$$

$$\langle u | \rho | u \rangle \geq 0 \quad \text{для всіх } |u\rangle \quad (2.8)$$

Кілька інших корисних результатів впливають безпосередньо з них. Як самоспряжений оператор,  $\rho$  має спектральне представлення

$$\rho = \sum_n \rho |\Phi_n\rangle \langle \Phi_n|, \quad (2.9)$$

через власні значення і ортонормовані власні вектори (припустімо для зручності, що спектр дискретний). Кожна з трьох зазначених властивостей оператора  $\rho$  породжує відповідну властивість власних значень:

$$\text{із (2.6) випливає } \sum_n \rho_n = 1; \quad (2.10)$$

$$\text{із (2.7) випливає } \rho_n = \rho_n^*; \quad (2.11)$$

$$\text{із (2.8) випливає } \rho_n \geq 0. \quad (2.12)$$

Утім, не лише (2.12) випливає з (2.8), що можна показати, обравши  $|u\rangle = |\phi_n\rangle$ ; а також і (2.8) випливає з (2.12). Це легко доводиться із використанням (2.9), щоб обчислити  $\langle u|\rho|u\rangle = \sum_n \rho_n |\langle u|\phi_n\rangle|^2$  для довільного  $|u\rangle$ . Якщо всі  $\rho_n$  невід'ємні, то й ця сума з очевидністю буде невід'ємною. Нерівність (2.12) дає зручніший з практичного погляду спосіб перевірки  $\rho$  на невід'ємність, ніж безпосереднє застосування виразу (2.8). А поєднавши (2.10) із (2.12), ми отримаємо

$$0 \leq \rho_n \leq 1. \quad (2.13)$$

Друга нерівність виконується тому, що сума невід'ємних доданків не може бути меншою за будь-який з цих доданків.

Сукупність усіх прийнятних з математичного погляду операторів стану утворює так звану *опуклу множину*. Це означає, що в разі, коли двоє або більше операторів  $\{\rho^{(i)}\}$  задовольняють умовам (2.6)–(2.8), то їм задовольняє і  $\rho = \sum_i a_i \rho^{(i)}$ , за умови, що  $0 \leq a_i \leq 1$  і  $\sum_i a_i = 1$ . Такий оператор  $\rho$  називається *опуклою комбінацією* множини  $\{\rho^{(i)}\}$ .

## Чисті стани

Серед усіх станів існує особливий клас *чистих станів*, які відрізняються від решти своїми простішими властивостями. *Оператор чистого стану*, за означенням, має вигляд

$$\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|, \quad (2.14)$$

де нормований вектор  $|\Psi\rangle$  називається *вектором стану*. Середнє значення спостережної  $\mathcal{R}$  у цьому чистому стані є

$$\langle\mathcal{R}\rangle = \text{Tr}(|\Psi\rangle\langle\Psi|\mathcal{R}). \quad (2.15)$$

Вектор стану не є єдино визначеним; будь-який вектор вигляду  $e^{i\alpha}|\Psi\rangle$  з довільним дійсним  $\alpha$  фізично еквівалентний йому, бо позначає один і той

самий стан, оскільки оператор у (2.14) не залежить від фазового множника вектора  $|\Psi\rangle$ .

Альтернативним способом означення чистого стану є умова

$$\rho^2 = \rho. \quad (2.16)$$

Вона є необхідною умовою для (2.14), бо  $\rho^2 = |\Psi\rangle\langle\Psi|\Psi\rangle\langle\Psi| = |\Psi\rangle\langle\Psi| = \rho$ , і водночас є достатньою — що можна довести, розглядаючи власні значення  $\rho$ , які, в силу (2.16), мають задовольняти умові  $\rho_n^2 = \rho$ . Оскільки  $\rho_n$  є дійсними і невід'ємними, то існує лише два можливі власні значення,  $\rho_n = 0$  і  $\rho_n = 1$ . Та оскільки, згідно з (2.10), сума власних значень оператора стану дорівнює одиниці, то звідси випливає, що всі вони, крім одного, мають бути нульовими. Отже, спектральне представлення (2.9) містить лише один доданок, тому вираз для  $\rho$  набуває вигляду (2.14) для чистого стану.

Ще одна, третя умова, що дає означення чистого стану, виглядає слабшою, хоч насправді еквівалентна двом попереднім:

$$\text{Tr } \rho^2 = 1. \quad (2.17)$$

Необхідність цієї умови очевидна, тож ми потребуємо лише доведення достатності. Із (2.13) ми маємо  $\rho_n^2 \leq \rho_n$ , тому  $\text{Tr } \rho^2 = \sum_n \rho_n^2 \leq \sum_n \rho_n = 1$ . Таким чином,  $\text{Tr } \rho^2 \leq 1$  для загальних станів. Рівність виконується лише за умови, що  $\rho_n^2 = \rho_n$  для всіх  $n$ , а при розгляді другого способу означення ми вже показали, що це можливо винятково для чистих станів.

Наступна теорема, що виокремлює чисті стани з-поміж усіх інших, також може служити означенням чистого стану:

**Теорема.** *Чистий стан неможливо виразити у вигляді нетривіальної опуклої комбінації інших станів, тоді як змішаний стан<sup>7</sup> завжди є такою комбінацією.*

*Доведення.* Друге твердження теореми є очевидним, оскільки спектральне представлення (2.10) для змішаних станів якраз і є нетривіальною опуклою комбінацією чистих станів. Для доведення першого твердження ми припустимо зворотне — що оператор чистого стану можна записати, як опуклу комбінацію інших операторів:

$$\rho = \sum_i a_i \rho^{(i)}, \quad 0 \leq a_i \leq 1, \quad \sum_i a_i = 1, \quad (2.18)$$

<sup>7</sup>В оригіналі вживається термін „unpure state“ (нечистий стан) замість „mixed state“ (змішаний стан), проте українському перекладі ми будемо дотримуватися загальноприйнятої термінології. (Прим. перекл.)

а далі скористаємося (2.17), щоб продемонструвати суперечність.

Із (2.18) отримуємо

$$\text{Tr } \rho^2 = \sum_i \sum_j a_i a_j \text{Tr} \{ \rho^{(i)} \rho^{(j)} \}. \quad (2.19)$$

Кожен оператор у цій сумі має власне спектральне представлення  $\rho^{(i)} = \sum_n \rho_n^{(i)} |\phi_n^{(i)}\rangle \langle \phi_n^{(i)}|$ . Тому

$$\begin{aligned} \text{Tr} \{ \rho^{(i)} \rho^{(j)} \} &= \sum_n \sum_m \rho_n^{(i)} \rho_m^{(j)} \text{Tr} \{ |\phi_n^{(i)}\rangle \langle \phi_n^{(i)}| |\phi_m^{(j)}\rangle \langle \phi_m^{(j)}| \} = \\ &= \sum_n \sum_m \rho_n^{(i)} \rho_m^{(j)} |\langle \phi_n^{(i)} | \phi_m^{(j)} \rangle|^2 \leq \\ &\leq \sum_n \sum_m \rho_n^{(i)} \rho_m^{(j)} = \left( \sum_m \rho_m^{(i)} \right) \left( \sum_n \rho_n^{(j)} \right) = 1. \end{aligned} \quad (2.19a)$$

Ця нерівність переходить у рівність тоді і лише тоді, коли  $|\langle \phi_n^{(i)} | \phi_m^{(j)} \rangle|^2 = 1$  для всіх  $n$  і  $m$  таких, що  $\rho_n^{(i)} \rho_m^{(j)} \neq 0$ . А оскільки власні вектори мають одиничну норму, то нерівність Шварца (1.1) стверджує, що такі  $|\phi_n^{(i)}\rangle$  і  $|\phi_m^{(j)}\rangle$  відрізняються тільки фазовим множником. Проте кожен набір власних векторів є ортогональним, тому для кожного значення  $n$  може існувати лише одне значення  $m$ , що дає нетривіальний внесок у другий рядок (2.19a). Перевпорядкувавши набір  $\{|\phi_m^{(j)}\rangle\}$  таким чином, щоб його вектори, колінеарні векторам із  $\{|\phi_n^{(i)}\rangle\}$ , мали з ними однаковий номер, ми можемо переписати цей рядок у вигляді

$$\sum_n \sum_m \rho_n^{(i)} \rho_m^{(j)} |\langle \phi_n^{(i)} | \phi_m^{(j)} \rangle|^2 = \sum_n \rho_n^{(i)} \rho_n^{(j)}.$$

Коли припустити, що обидва стани є змішаним,  $\text{tr}_n^{(i)} < 1$  і  $\rho_n^{(j)} < 1$  для всіх  $n$ , а отже, й  $\sum_n \rho_n^{(i)} \rho_n^{(j)} < 1$ . Строга нерівність зберігається й у випадку, коли один зі станів змішаний, а інший чистий, бо тоді в сумі залишається єдиний доданок  $\rho_n^{(i)} \rho_n^{(j)}$ , що являє собою добуток єдиного ненульового власного значення оператора чистого стану (рівного одиниці) і одного з власних значень оператора змішаного стану (строого меншого за одиницю). Внаслідок цього аналізу ми доходимо висновку, що нерівність у (2.19a) стає рівністю лише у випадку, коли  $\rho_n^{(i)} = \rho_m^{(j)} = 1$  для якоїсь єдиної пари  $n, m$  і  $\rho_n^{(i)} = \rho_m^{(j)} = 0$  для решти можливих пар, тобто обидва оператори представляють однаковий чистий стан. Цей наш висновок сформулюємо у вигляді леми:

**Лема.** Для двох операторів стану,  $\rho^{(i)}$  і  $\rho^{(j)}$ , маємо нерівність

$$0 \leq \text{Tr}\{\rho^{(i)}\rho^{(j)}\} \leq 1, \quad (2.20)$$

причому верхня межа досягається тоді і лише тоді, коли  $\rho^{(i)} = \rho^{(j)}$  є оператором чистого стану.

Застосувавши цю лему до (2.19), отримуємо

$$\begin{aligned} \text{Tr } \rho^2 &= \sum_i \sum_j a_i a_j \text{Tr}\{\rho^{(i)}\rho^{(j)}\} \leq \\ &\leq \sum_i \sum_j a_i a_j = 1. \end{aligned}$$

Проте, за нашим припущенням,  $\rho$  представляє чистий стан, тому, згідно з (2.17), нерівність має переходити в рівність, а за щойно доведеною лемою це можливо лише у випадку, коли  $\rho^{(i)} = \rho^{(j)}$  для всіх  $i$  та  $j$ . А такий результат суперечить припущенню, що сума в (2.18) є *нетривіальною* опуклою комбінацією операторів, бо фактично виходить, що всі оператори в цій сумі тотожні. Отже, вдавшись до прийому *ad absurdum*, ми довели, що чистий стан не можна виразити через нетривіальну опуклу комбінацію інших станів.

Ця теорема наводить на думку, що чисті стани, в певному сенсі, фундаментальніші за змішані, а останні можуть розглядатися, як статистична суміш чистих станів. Проте таку інтерпретацію не варто сприймати буквально, оскільки представлення оператора змішаного стану через опуклу комбінацію операторів чистого стану ніколи не буває єдиним. Двовимірний приклад у достатній мірі демонструє цей факт. Розглянемо оператор стану

$$\rho_a = a|u\rangle\langle u| + (1 - a)|v\rangle\langle v|, \quad (2.21)$$

де  $0 < a < 1$ , а  $|u\rangle$  і  $|v\rangle$  — ортогональні вектори з одиничною нормою. Визначимо два вектори,

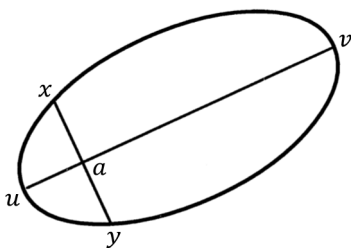
$$\begin{aligned} |x\rangle &= \sqrt{a}|u\rangle + \sqrt{1-a}|v\rangle, \\ |y\rangle &= \sqrt{a}|u\rangle - \sqrt{1-a}|v\rangle. \end{aligned}$$

Легко переконатися, що

$$\rho_a = \frac{1}{2}|x\rangle\langle x| + \frac{1}{2}|y\rangle\langle y|. \quad (2.22)$$

Фактично, існує нескінченна кількість способів представлення будь-якого змішаного оператора стану у вигляді опуклої комбінації операторів чистого стану.

Опуклу комбінацію квантових станів схематично показано на Рис. 2.2. Точки на границі опуклої множини представляють чисті стани, а внутрішні точки — змішані стани. Змішаний стан  $\rho_a$  можна математично виразити через суміш чистих станів  $u$  і  $v$ , як у (2.21), із питомою вагою, обернено пропорційною до відстаней точок  $u$  і  $v$  від точки  $a$ . Так само цей стан можна представити через суміш чистих станів  $x$  та  $y$ , як у (2.22), або багатьма іншими способами. Фізичне значення такої неоднозначності по-



**Рис. 2.2.** Схематичне зображення чистих і змішаних станів, як елементів опуклої множини.

лягає в тому, що і чисті, і змішані стани в квантовій механіці описують статистично нетривіальні ансамблі. Ми повернемося до цієї важливої теми в Розділі 9.

Чимало прикладів чистих і змішаних станів буде вивчено в подальших розділах, а наразі буде корисно вказати в загальних рисах, де ці два типи станів можуть з'явитися. Невироджений енергетичний рівень атома, або будь-якої іншої ізольованої системи, є прикладом чистого стану. Стан теплової рівноваги завжди є змішаним, за винятком ситуації при абсолютному нулі температури. Стан утвореного лазером поляризованого монохроматичного світла може наближатися до чистого стану електромагнітного поля. Неполаризоване монохроматичне світло, а також випромінення абсолютно чорного тіла, є прикладами змішаного стану електромагнітного поля. Характер інформації, необхідної для визначення квантового стану і з'ясування, чи чистий він чи змішаний, ми будемо досліджувати в Розділі 8.



## § 2.4. Розподіл імовірності

Відповідно до Постулату 2, середнє значення спостережної величини  $\mathcal{R}$ , представлені ермітовим оператором  $R$ , у стані, що описується оператором  $\rho$ , є таким:

$$\langle \mathcal{R} \rangle = \text{Tr}(\rho R). \quad (2.23)$$

Ми обрали оператор  $\rho$  нормованим за домовленістю (2.2). Цієї формули для середнього виявляється достатньо, щоб вивести повний розподіл імовірності, за умови справедливості наступного твердження: дійсна функція  $F(\mathcal{R})$  спостережної величини  $\mathcal{R}$  також є спостережною величиною і математично представлена оператором  $F(R)$ , утвореного з  $R$  за спектральним розкладенням (1.28) або (1.38). Таке твердження є цілком обґрунтованим, бо якщо фізична величина має значення  $r$ , то її функція повинна мати значення  $F(r)$ , і таким самим співвідношенням задовольняють власні значення операторів  $R$  і  $F(R)$ .

Нехай  $g(r) dr$  — імовірність того, що значення спостережної  $\mathcal{R}$  лежить у проміжку  $[r, r + dr]$ . Відтак, за означенням,

$$\langle F(\mathcal{R}) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} f(r') g(r') dr'. \quad (2.24)$$

А застосування (2.23) до спостережної  $F(\mathcal{R})$  дає

$$\langle F(\mathcal{R}) \rangle = \text{Tr}\{\rho F(R)\}. \quad (2.25)$$

Обиравши належну функцію  $F$ , можна використати ці два рівняння, щоб добути з них питому ймовірність  $g(r)$ . Ми зробимо це окремо для дискретного й неперервного спектрів.

**Дискретний спектр.** Нехай  $R$  — самоспряжений оператор із чисто дискретним спектром. Його можна виразити через власні значення  $r_n$  і ортонормовані власні вектори  $|r_n\rangle$ :

$$R = \sum_n r_n |r_n\rangle \langle r_n|.$$

Розглянемо функцію  $F(\mathcal{R}) = \theta(r - \mathcal{R})$ , що дорівнює одиниці при  $\mathcal{R} < r$ , і нулю при  $\mathcal{R} > r$ . Середнє значення цієї функції, згідно з (2.24), є

$$\begin{aligned} \langle \theta(r - \mathcal{R}) \rangle &= \int_{-\infty}^r g(r') dr' = \\ &= \text{Prob}(\mathcal{R} > r | \rho). \end{aligned}$$

Це є достоту ймовірність, що величина спостережної  $\mathcal{R}$  менша за  $r$ . Проте з (2.25) маємо

$$\begin{aligned}\langle \theta(r - \mathcal{R}) \rangle &= \text{Tr}\{\rho \theta(r - R)\} = \\ &= \text{Tr}\left\{\rho \sum_n \theta(r - r_n) |r_n\rangle \langle r_n|\right\} = \\ &= \sum_n \langle r_n | \rho | r_n \rangle \theta(r - r_n).\end{aligned}$$

Прирівнявши праві частини обох виразів і продиференціювавши їх за  $r$ , отримуємо питому ймовірність:

$$\begin{aligned}g(r) &= \frac{\partial}{\partial r} \text{Prob}(\mathcal{R} < r | \rho) = \\ &= \sum_n \langle r_n | \rho | r_n \rangle \delta(r - r_n).\end{aligned}$$

Єдина причина, чому ми провели обчислення *питомої* ймовірності для дискретної спостережної полягає в тому, щоб показати, що  $g(r) = 0$  для всіх  $r$ , які не є власними значеннями відповідного оператора. А отже, ймовірність того, що динамічна змінна набуде значень поза межами спектру, дорівнює нулю; інакше кажучи, у випадку дискретного спектру вона може набувати лише певних дискретних значень, які збігаються з власними значеннями оператора. Це дуже приємне свідчення узгодженості статистичного Постулату 2 із механічним Постулатом 1.

Ймовірність, що динамічна змінна  $\mathcal{R}$  матиме дискретне значення  $r$  у віртуальному ансамблі, який описується оператором стану  $\rho$ , є

$$\begin{aligned}\text{Prob}(\mathcal{R} = r | \rho) &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \{\text{Prob}(\mathcal{R} < r + \varepsilon | \rho) - \text{Prob}(\mathcal{R} < r - \varepsilon | \rho)\} = \\ &= \sum_n \langle r_n | \rho | r_n \rangle \delta_{r, r_n}.\end{aligned}\tag{2.26}$$

Цей результат можна стисліше виразити через проекційний оператор  $P(r) = \sum_n |r_n\rangle \langle r_n| \delta_{r, r_n}$ , який проектує на підпростір, натягнений на всі вироджені власні вектори з власним значенням  $r_n = r$ :

$$\text{Prob}(\mathcal{R} = r | \rho) = \text{Tr}\{\rho P(r)\}.\tag{2.27}$$

У спеціальному випадку *чистого* стану  $\rho = |\Psi\rangle \langle \Psi|$  і не виродженого власного значення  $r$  цей результат зводиться до

$$\text{Prob}(\mathcal{R} = r_n | \Psi) = |\langle r | \Psi \rangle|^2.\tag{2.28}$$

**Власні стани.** У загальному випадку, динамічна змінна матиме ненульовий статистичний розкид по певній частині спектру своїх допустимих значень. Проте для дискретної змінної можлива ситуація, що вся ймовірність буде скорцентована лише на одному значенні. Якщо динамічна змінна  $\mathcal{R}$  набуває єдиного значення  $r_0$  (нехай для простоти це буде не-вироджене власне значення) з імовірністю 1 у певному стані, то з (2.26) випливає, що оператор стану  $\rho$  має задовольняти умові  $\langle r_0 | \rho | r_0 \rangle = 1$ . А оскільки для будь-якого оператора стану  $\text{Tr } \rho^2 \leq 1$ , то

$$\sum_{n,m} \langle r_n | \rho | r_m \rangle \langle r_m | \rho | r_n \rangle = \sum_{n,m} |\langle r_n | \rho | r_m \rangle|^2 \leq 1.$$

У силу того, що один член цієї суми,  $\langle r_0 | \rho | r_0 \rangle = 1$ , уже забезпечує перехід нерівності в рівність, то всі решта діагональних і недіагональних елементів  $\rho$  мають обернутися на нуль. Отже, єдиний стан, у якому  $\mathcal{R}$  набуває невиродженого власного значення  $r_0$  з імовірністю 1, є чистий стан  $\rho = |r_0\rangle\langle r_0|$ . Такий стан, представлений оператором  $\rho$  або вектором  $|r_0\rangle$ , розглядається, як *власний стан* спостережної  $\mathcal{R}$ .

**Неперервний спектр.** Нехай  $Q$  — самоспряжений оператор, що має чисто неперервний спектр:

$$Q = \int q' |q'\rangle\langle q'| dq'.$$

Його нескінченні за нормою власні вектори (у сенсі узагальненої спектральної теореми) задовольняють ортонормувальному співвідношенню  $\langle q' | q'' \rangle = \delta(q' - q'')$ . Нехай  $g(q) dq$  буде ймовірністю того, що відповідна спостережна  $Q$  лежить у проміжку  $[q, q + dq]$ . Як і в попередньому випадку, маємо

$$\begin{aligned} \langle \theta(q - Q) \rangle &= \int_{-\infty}^q g(q') dq' = \\ &= \text{Prob}(Q < q | \rho), \end{aligned}$$

що є ймовірністю для  $Q$  набувати значень менших за  $q$ . Але також ми має-

мо співвідношення

$$\begin{aligned}\langle \theta(q - Q) \rangle &= \text{Tr}\{\rho \theta(q - Q)\} = \\ &= \text{Tr}\left\{ \rho \int_{-\infty}^{+\infty} \theta(q - q') |q'\rangle \langle q'| dq' \right\} = \\ &= \int_{-\infty}^q \langle q' | \rho | q' \rangle dq'.\end{aligned}$$

Таким чином, питома ймовірність для спостережної  $Q$  у віртуальному ансамблі, який описується оператором стану  $\rho$ , є

$$\begin{aligned}g(q) &= \frac{\partial}{\partial q} \text{Prob}(Q < q | \rho) = \\ &= \langle q | \rho | q \rangle.\end{aligned}\tag{2.29}$$

Для окремого випадку *чистого стану*  $\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$  це дає

$$g(q) = |\langle q | \Psi \rangle|^2\tag{2.30}$$

І хоча вирази для ймовірності та питомої ймовірності різняться в деталях, вони завжди містять співвідношення між двома аргументами: один характеризує стан, а другий — частину спектру динамічної змінної, що є спостережною величиною. Ми називатимемо їх, відповідно, *функцією стану* і *фільтр-функцією*. У (2.27) це оператор стану  $\rho$  і проєкційний оператор  $P(r)$ . А у (2.28) і (2.30) ними виступають вектор стану  $\Psi$  і власні функції, що відповідають спостережній величині. Проте симетричність, із якою ці два аргументи з'являються в рівняннях, не повинна відвертати увагу від їх різної зутності. Зокрема, нормований вектор стану  $|\Psi\rangle$  належить до гільбертового простору, а фільтр-функція  $|q\rangle$  в (2.30) не є його елементом, а належить до розширеного простору  $\Omega^\times$  із триплета оснащеного гільбертового простору (див. § 1.4).

**Перевірка аксіом теорії ймовірності.** У цьому параграфі ми навели кілька формул для квантових імовірностей, але поки не маємо вагомих підстав стверджувати, що вони справді виражають імовірність, бо для цього ще треба довести їх узгодженість із аксіомами теорії ймовірності. Перш ніж зробити це, буде корисно сконструювати загальну формулу для ймовірності, яка включатиме в себе всі розглянуті вище випадки.

Відповідно до спектральної теореми, для будь-якої динамічної змінної  $\mathcal{R}$  та її самоспряженого оператора  $R$  існує сім'я проєкційних операторів  $M_R(\Delta)$ , пов'язана з власними значеннями і власними векторам  $R$  наступним чином:

$$M_R(\Delta) = \sum_{r_n \in \Delta} |r_n\rangle\langle r_n|. \quad (2.31)$$

Сума береться за всіма власними значеннями (можливо виродженими), що належать до підмножини  $\Delta$ ; у випадку неперервного спектру ця сума переходить в інтеграл. Імовірність того, що значення змінної  $\mathcal{R}$  лежить у  $\Delta$ , визначається формулою

$$\text{Prob}(\mathcal{R} \in \Delta | \rho) = \text{Tr}\{\rho M_R(\Delta)\}. \quad (2.32)$$

Якщо область  $\Delta$  містить лише одне власне значення, то ця формула переходить у (2.26) або (2.27). У випадку неперервного спектру (2.32) дорівнює інтегралу притомої ймовірності по області  $\Delta$ .

Легко переконатися, що (2.32) задовольняє Аксиомам 1, 2 та 3 із § 1.5. Передовсім зазначимо, що оскільки  $M_R(\Delta)$  є проєкційним оператором, то операція сліду в (2.32) насправді обмежується лише підпростором, на який  $M_R(\Delta)$  здійснює проєкцію. Із цієї обставини, в поєднанні з домовленістю про нормалізацію (2.6) і умовою невід'ємності (2.8) для  $\rho$ , випливає, що  $0 \leq \text{Tr}\{\rho M_R(\Delta)\} \leq \text{Tr} \rho = 1$ . Це підтверджує Аксиому 1.

Щоб установити справедливність Аксиоми 2, треба взяти стан, приготовлений таким чином, що значення спостережної  $\mathcal{R}$  гарантовано лежатиме в області  $\Delta$ . Це буде такий стан, що задовольняє умові

$$\rho = M_R(\Delta)\rho M_R(\Delta). \quad (2.33)$$

В окремому випадку, коли  $\Delta$  містить лише одне власне значення, це зводиться до умови, що  $\rho$  є власним станом  $R$ . Очевидно, що (2.33) тотожно дорівнює одиниці.

Для перевірки Аксиоми 3b (з якої випливає Аксиома 3a) розглянемо дві неперехресні множини,  $\Delta_1$  і  $\Delta_2$ , а отже, умови  $\mathcal{R} \in \Delta_1$  і  $\mathcal{R} \in \Delta_2$  будуть несумісними і відображатимуть взаємовиключні події. Твердження  $(\mathcal{R} \in \Delta_1) \vee (\mathcal{R} \in \Delta_2)$  еквівалентне твердженню  $\mathcal{R} \in (\Delta_1 \cup \Delta_2)$ , де  $\Delta \cup \Delta_2$  позначає об'єднання двох множин. Оскільки множини  $\Delta_1$  і  $\Delta_2$  неперехресні, то  $M_R(\Delta_1)M_R(\Delta_2) = 0$ , а проєкційний оператор, що відповідає об'єднанню цих множин, є просто сумою окремих проєкційних операторів:  $M_R(\Delta_1 \cup \Delta_2) = M_R(\Delta_1) + M_R(\Delta_2)$ . У цьому разі (2.32) набуває вигляду

$$\begin{aligned} \text{Prob}\{(\mathcal{R} \in \Delta_1) \vee (\mathcal{R} \in \Delta_2) | \rho\} &= \text{Tr}\{\rho M_R(\Delta_1 \cup \Delta_2)\} = \\ &= \text{Tr}\{M_R(\Delta_1)\} + \text{Tr}\{M_R(\Delta_2)\}, \end{aligned}$$

що задовольняє Аксиоми 3b.

Останнє обчислення можна проявити за допомогою такого простого прикладу. Замість довільного ермітового оператора  $R$  розглянемо оператор  $Q$ , визначений, як  $Q\Psi(x) = x\Psi(x)$ , який у Розділі 3 ми ідентифікуємо, як оператор положення (або оператор координати). Нехай  $\Delta_1$  буде інтервалом  $\alpha \leq x \leq \beta$ , а  $\Delta_2$  —  $\gamma \leq x \leq \delta$ . Тоді дія проєкційного оператора  $M_Q(\Delta_1)$  визначатиметься:

$$\begin{aligned} M_Q(\Delta_1)\Psi(x) &= \Psi(x) && \text{для } \alpha \leq x \leq \beta, \\ M_Q(\Delta_1)\Psi(x) &= 0 && \text{для } x \leq \alpha \text{ або } \beta \leq x. \end{aligned}$$

Схоже означення отримаємо і для  $M_Q(\Delta_2)$ , замінивши  $\alpha$  на  $\gamma$  і  $\beta$  на  $\delta$ . Проєкційний оператор  $M_Q(\Delta_1 \cup \Delta_2)$  дає  $M_Q(\Delta_1 \cup \Delta_2)\Psi(x) = \Psi(x)$  для  $\alpha \leq x \leq \beta$  або  $\gamma \leq x \leq \delta$ , і  $M_Q(\Delta_1 \cup \Delta_2)\Psi(x) = 0$  в іншому випадку. Якщо  $\alpha < \beta < \gamma < \delta$  або  $\gamma < \beta < \alpha < \delta$ , тоді  $\Delta_1$  і  $\Delta_2$  не перетинаються, і очевидно, що  $M_Q(\Delta_1)\Psi(x) + M_Q(\Delta_2)\Psi(x) = M_Q(\Delta_1 \cup \Delta_2)\Psi(x)$ , а отже, наведені вище викладки підтверджують чинність Аксиоми 3b. А з іншого боку, припустимо, що  $\alpha < \gamma < \beta < \delta$ , тоді інтервали  $\Delta_1$  та  $\Delta_2$  перетинаються і події  $x \in \Delta_1$  та  $x \in \Delta_2$  не є незалежними. В області їх перетину,  $\gamma \leq x \leq \beta$ , ми матимемо  $M_Q(\Delta_1)\Psi(x) + M_Q(\Delta_2)\Psi(x) = 2\Psi(x)$ , але  $M_Q(\Delta_1 \cup \Delta_2)\Psi(x) = \Psi(x)$ . Таким чином, залежні ймовірності не будуть адитивними.

Непідтвердженою залишилась Аксиома 4, яку ми розглянемо в § 9.6.

## Література до Розділу 2

Інтерпретацію поняття стану в квантовій механіці і деякі пов'язані з цим суперечки розглянуто у [10]. Стаття [12] досліджує використання ймовірнісних методів у квантовій механіці і наводить кілька прикладів помилкового застосування теорії ймовірності в цьому контексті. Посилання на низку праць із засад квантової механіки містяться в “Resource Letter”, L. Ballentine (1987), *Am. J. Phys.* **55**, 785–791.

## Задачі

**2.1.** Покажіть, що неермітова матриця  $M = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$  має лише дійсні значення, проте її власні вектори не утворюють повного набору.

В силу своєї неермітовості, ця матриця має порушувати умови Теорему 1 з § 1.3. Знайдіть вектор  $|v\rangle$ , для якого  $\langle v|M|v\rangle$  є комплексним числом. (Цей

приклад ілюструє необхідність представлення дійсних спостережних через ермітові оператори, а не просто через оператори, що мають чисто дійсні власні значення. А оскільки  $\langle M \rangle = \langle v|M|v \rangle$ , то цю величину жодним чином не можна інтерпретувати, як середнє від власних значень  $M$ .

**2.2.** Покажіть, що  $\text{Tr}(AB) = \text{Tr}(BA)$ , і, загальніше, що слід добутку кількох операторів інваріантний відносно їх циклічних перестановок:  $\text{Tr}(AB \dots YZ) = \text{Tr}(ZAB \dots Y)$ .

**2.3.** Доведіть, що  $\text{Tr}(|u\rangle\langle v|) = \text{Tr}\langle v|u \rangle$ .

**2.4.** Із властивості невід'ємності (2.8) або (2.13) оператора загального стану  $\rho$  випливає, що  $\text{Tr} \rho^2 \leq 1$ , як було показано в процесі доведення достатності умови (2.17). Покажіть, що для матриць  $2 \times 2$  справедливе і зворотне твердження: із умови  $\text{Tr} \rho^2 \leq 1$ , у поєднанні з (2.6) і (2.7), випливає невід'ємність  $\rho$ . Далі продемонструйте, що ці умови не є достатніми для гарантування невід'ємності  $\rho$  у трьох і більше вимірах.

**2.5.** Які з нижченаведених операторів є прийнятними для представлення квантових станів? Знайдіть вектори стану для тих із них, що представляють чисті стани.

$$\rho_1 = \begin{bmatrix} \frac{1}{4} & \frac{3}{4} \\ \frac{3}{4} & \frac{3}{4} \end{bmatrix}, \quad \rho_2 = \begin{bmatrix} \frac{9}{25} & \frac{12}{25} \\ \frac{12}{25} & \frac{16}{25} \end{bmatrix},$$

$$\rho_3 = \frac{1}{3}|u\rangle\langle u| + \frac{2}{3}|v\rangle\langle v| + \frac{\sqrt{2}}{3}|u\rangle\langle v| + \frac{\sqrt{2}}{3}|v\rangle\langle u|,$$

де  $\langle u|u \rangle = \langle v|v \rangle = 1$  і  $\langle v|u \rangle = 0$ ,

$$\rho_4 = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{4} \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ \frac{1}{4} & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \rho_5 = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{4} \\ 0 & \frac{1}{4} & 0 \\ \frac{1}{4} & 0 & \frac{1}{4} \end{bmatrix}.$$

**2.6.** Нехай оператор  $\sigma$  представляє динамічну змінну, що може набувати лише двох значень,  $+1$  або  $-1$ . Власні вектори  $\sigma$  позначаються, як  $|+\rangle$  і  $|-\rangle$ . Тепер розгляньте такі стани: однопараметрична сім'я чистих станів, представлених векторами  $|\theta\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}}(|+\rangle + e^{i\theta}|-\rangle)$  для довільного  $\theta$ ; і змішаний стан  $\rho = \frac{1}{2}(|+\rangle\langle +| + |-\rangle\langle -|)$ . Покажіть, що  $\langle \sigma \rangle = 0$  для всіх цих станів. Чи існують між ними фізичні відмінності, а коли так, то які конкретно і як їх можна виміряти?

**2.7.** У Розділі 7 буде показано, що матричний оператор  $\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$  відповідає компоненті спіну електрона в одиницях  $\hbar/2$ . Для стану, представленого вектором  $|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$ , де  $\alpha$  і  $\beta$  — комплексні числа, розрахуйте ймовірність того, що спіновий компонент позитивний.

**2.8.** Припустіть, що оператор

$$M = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

представляє динамічну змінну. Обчисліть ймовірність  $\text{Prob}(M = 0 | \rho)$  для таких операторів стану:

$$(a) \rho = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{4} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{4} \end{bmatrix}; \quad (b) \rho = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix}; \quad (c) \rho = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix}.$$

**2.9.** Нехай  $R = \begin{bmatrix} 6 & -2 \\ -2 & 9 \end{bmatrix}$  представляє динамічну змінну, а  $|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$  — довільний вектор стану (з  $|a|^2 + |b|^2 = 1$ ). Обчисліть  $\langle R^2 \rangle$  двома способами:

(a) Виведіть  $\langle R^2 \rangle = \langle \Psi | R^2 | \Psi \rangle$  безпосередньо.

(b) Знайдіть власні значення і власні вектори  $R$ :

$$R|r_n\rangle = r_n|r_n\rangle,$$

розкладіть вектор стану, як лінійну комбінацію власних векторів:

$$|\Psi\rangle = c_1|r_1\rangle + c_2|r_2\rangle,$$

$$\text{і отримайте } \langle R^2 \rangle = r_1^2|c_1|^2 + r_2^2|c_2|^2.$$

**2.10.** Рівняння (2.21) і (2.22) засвідчують, що будь-який змішаний стан можна розкласти на чисті стани принаймні двома способами. Покажіть (навівши приклад з неперервним параметром), що це можна зробити нескінченною кількістю способів.



## Розділ 3

### Кінематика та динаміка

Результати Розділу 2 іноді називають „формальною структурою квантової механіки“. І хоча багато було написано про її інтерпретацію, про виведення з ще елементарніших аксіом і можливі узагальнення, насправді вона має в собі дуже мало фізичного змісту. За самим цим формалізмом неможливо розв'язати жодної фізичної задачі, аж поки не буде встановлено *правила відповідності*, що ототожнять конкретні динамічні змінні з конкретними операторами. Якраз це буде зроблено в поточному розділі.

Фундаментальні фізичні величини, на зразок імпульсу та моменту імпульсу, мають тісний зв'язок із просторово-часовими перетвореннями симетрії. Вивчення цих перетворень служить двом цілям: фундаментальній — виявлення операторів для найважливіших динамічних змінних, і практичній — ознайомлення з концепцією та методикою перетворень симетрії.

#### § 3.1. Перетворення станів і спостережних величин

Прийнято вважати, що закони природи інваріантні відносно просторово-часових операцій симетрії, включно з переміщеннями, обертаннями і переходами між різними системами відліку, що перебувають у рівномірному відносному русі. Кожному такому просторово-часовому перетворенню має відповідати перетворення спостережних  $A \rightarrow A'$  і станів  $|\Psi\rangle \rightarrow |\Psi'\rangle$ . (Ми розглядатимемо лише чисті стани, представлені векторами, позаяк загальний випадок не додає нічого нового.) Ці перетворення мають зберігати певні співвідношення, що виражають фундаментальні властивості станів та спостережних.

- (а) Якщо  $A|\phi_n\rangle = a_n|\phi_n\rangle$ , то після перетворення маємо отримати  $A'|\phi'_n\rangle = a_n|\phi'_n\rangle$ . Власні значення  $A$  і  $A'$  є однаковими, бо оператор  $A'$  представляє, по суті, ту саму спостережну, що й оператор  $A$ , лише в іншій системі відліку, а отже, вони повинні мати однаковий набір власних значень.

- (b) Якщо вектор стану задано через  $|\psi\rangle = \sum_n c_n |\phi_n\rangle$ , де  $\{|\phi_n\rangle\}$  — власні вектори  $A$ , то перетворений вектор матиме вигляд  $|\psi'\rangle = \sum_n c'_n |\phi'_n\rangle$ , де  $\{|\phi'_n\rangle\}$  — власні вектори  $A'$ . Ці два вектори повинні задовольняти умовам  $|c_n|^2 = |c'_n|^2$ ; тобто,  $|\langle\phi_n|\psi\rangle|^2 = |\langle\phi'_n|\psi'\rangle|^2$ . Це співвідношення має виконуватися, бо воно виражає рівність імовірностей для еквівалентних подій у різних системах відліку.

Математичний характер таких перетворень прояснює наступна теорема:

**Теорема Вігнера.** Будь-яке відображення векторного простору на себе, що зберігає значення  $|\langle\phi|\psi\rangle|$ , можна реалізувати за допомогою *унітарного* або *антиунітарного* оператора  $U$ :

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &\rightarrow |\psi'\rangle = U|\psi\rangle, \\ |\phi\rangle &\rightarrow |\phi'\rangle = U|\phi\rangle, \end{aligned} \quad (3.1)$$

*Пояснення.* Лінійний оператор  $U$  називається *унітарним*, якщо  $U^{-1} = U^\dagger$ , тобто  $UU^\dagger = U^\dagger U = I$  — одиничний оператор. Отже,  $\langle\psi'|\phi'\rangle = (\langle\psi|U^\dagger)(U|\phi\rangle) = \langle\psi|\phi\rangle$ . Унітарне перетворення зберігає не лише абсолютне, а й комплексне значення внутрішнього добутку. *Антиунітарним* називається оператор зі схожими властивостями, проте не лінійний, а *антилінійний*, тобто такий, що  $U(c|\psi\rangle) = c^*U|\psi\rangle$ . Якщо оператор антиунітарний, то  $\langle\psi'|\phi'\rangle = (\langle\psi|U^\dagger)(U|\phi\rangle) = \langle\psi|\phi\rangle^* = \langle\phi|\psi\rangle$ .

Елементарне доведення теореми Вігнера дав Бергман [22].

Лише лінійні оператори можуть описувати неперервні перетворення, бо в кожному такому перетворенні неявно присутній квадратний корінь. Припустімо, для прикладу, що  $U(\ell)$  описує переміщення на відстань  $\ell$ . Це можна зробити й двома послідовними переміщеннями на  $\ell/2$ , тому  $U(\ell) = U(\ell/2)U(\ell/2)$  — власне, те, що й малося на увазі під квадратним коренем. Добуток двох антилінійних операторів дає лінійний оператор, оскільки друге комплексне спряження анулює попереднє. Таким чином, незалежно від того, лінійний  $U(\ell/2)$  чи антилінійний, оператор  $U(\ell)$  виявляється лінійним. А оператор неперервного перетворення не може дискретно мінятися з лінійного на антилінійний, як функція  $\ell$ , тому  $U(\ell)$  має бути лінійним для всіх  $\ell$ . Антилінійні оператори потрібні для опису дискретних симетрій (див. Розділ 13), а в цьому розділі ми їх не розглядатимемо.

Перетворення векторів стану (3.1) супроводжується перетворенням  $A \rightarrow A'$  операторів спостережних величин. Воно повинно бути таким, щоб перетворена спостережна мала такий самий взаємозв'язок із перетвореним станом, як початкова спостережна з початковим станом. Зокрема,

якщо  $A|\phi_n\rangle = a_n|\phi_n\rangle$ , то  $A'|\phi'_n\rangle = a_n|\phi'_n\rangle$ . Підстановка  $|\phi'_n\rangle = U|\phi_n\rangle$  із застосуванням (3.1) дає  $A'U|\phi_n\rangle = a_nU|\phi_n\rangle$ , а звідси,  $U^{-1}A'U|\phi_n\rangle = a_n|\phi_n\rangle$ . Оскільки  $a_n|\phi_n\rangle = A|\phi_n\rangle$ , то маємо  $(A - U^{-1}A'U)|\phi_n\rangle = 0$ . Це справедливо для всіх векторів з повного набору  $\{|\phi_n\rangle\}$ , тому  $A - U^{-1}A'U = 0$ . Тому потрібне нам перетворення, яким супроводжується (3.1), є

$$A \rightarrow A' = UAU^{-1}. \quad (3.2)$$

Розглянемо сім'ю унітарних операторів  $U(s)$ , які залежать від одного неперервного параметра  $s$ . Нехай  $U(0) = I$ , одиничний оператор, і нехай  $U(s_1 + s_2) = U(s_1)U(s_2)$ . Можна показати, що для кожної однопараметричної групи операторів завжди знайдеться таке перевизначення параметра у вигляді неперервної функції  $s' = f(s)$ , що  $U'(s) = U(f(s))$  задовольнятиме умові  $U'(s_1 + s_2) = U'(s_1)U'(s_2)$ . Доведення нам не потрібне, бо всі операції симетрії, які ми розглядатимемо (переміщення, обертання і перетворення Галілея до рухомої системи відліку), з очевидністю задовольняють цьому співвідношенню.

Для нескінченно малого  $s$  ми можемо виразити результат *інфінітезимального* унітарного перетворення, як

$$U(s) = I + \left. \frac{dU}{ds} \right|_{s=0} s + \mathcal{O}(s^2).$$

Умова унітарності вимагає, щоб

$$UU^\dagger = I + s \left[ \left. \frac{dU}{ds} + \frac{dU^\dagger}{ds} \right] \right|_{s=0} + \mathcal{O}(s^2)$$

просто дорівнювало  $I$  незалежно від значення  $s$ . Отже, коефіцієнт при  $s$  має бути нульовим, і ми можемо записати

$$\left. \frac{dU}{ds} \right| = iK, \quad \text{де } K = K^\dagger. \quad (3.3)$$

Ермітовий оператор  $K$  називається *генератором* сім'ї унітарних операторів, оскільки він визначає  $U(s)$  не лише для інфінітезимальних  $s$ , а й для всіх  $s$ . Це можна показати, продиференціювавши вираз

$$U(s_1 + s_2) = U(s_1)U(s_2)$$

за змінною  $s_2$  і застосувавши (3.3):

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial}{\partial s_2} U(s_1 + s_2) \right|_{s_2=0} &= U(s_1) \left. \frac{d}{ds_2} U(s_2) \right|_{s_2=0}, \\ \left. \frac{dU(s)}{ds} \right|_{s=s_1} &= U(s_1) iK. \end{aligned}$$

Диференційне рівняння першого порядку з початковою умовою  $U(0) = I$  має єдине рішення:

$$U(s) = e^{iKs}. \quad (3.4)$$

Отже, оператор для будь-яких скінченних перетворень визначається генератором інфінітезимальних перетворень.

### § 3.2. Симетрії простору-часу

Просторово-часові симетрії включають обертання, переміщення в просторі та часі й переходи між рівномірно рухомими системами відліку. Останні, в загальному випадку, є перетвореннями Лоренца, однак ми обмежимося розглядом швидкостей, набагато менших за швидкість світла, тому можемо замінити ці загальні перетворення на нерелятивістські, Галілеєві. Набір усіх вищенаведених перетворень називається *групою Галілея*. Наслідком таких перетворень є

$$\begin{aligned} \mathbf{x} &\rightarrow \mathbf{x}' = R\mathbf{x} + \mathbf{a} + \mathbf{v}t \\ t &\rightarrow t' = t + s. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Тут  $R$  — оператор обертання (проста  $3 \times 3$  матриця, що діє на трикомпонентний вектор  $\mathbf{x}$ ),  $\mathbf{a}$  — вектор просторового переміщення,  $\mathbf{v}$  — швидкість рухомого координатного перетворення (або *бусту*), а  $s$  — часова трансляція.

Нехай  $\tau(R, \mathbf{x}, \mathbf{v}, s)$  позначає таке перетворення. Нехай  $\tau_3 = \tau_1 \tau_2$  одиначне перетворення, що дає такий самий результат, як і послідовне здійснення перетворень  $\tau_1$  і  $\tau_2$ . Тобто, якщо  $\tau_1\{\mathbf{x}, t\} = \{\mathbf{x}', t'\}$  і  $\tau_2\{\mathbf{x}', t'\} = \{\mathbf{x}'', t''\}$ , то  $\tau_3\{\mathbf{x}, t\} = \{\mathbf{x}'', t''\}$ . Виконавши ці операції, отримаємо

$$\begin{aligned} \mathbf{x}'' &= R_2(R_1\mathbf{x} + \mathbf{a}_1 + \mathbf{v}_1t) + \mathbf{a}_2 + \mathbf{v}_2(t + s_1), \\ t'' &= t + s_1 + s_2, \end{aligned}$$

а звідси,

$$\begin{aligned} R_3 &= R_2R_1, \\ \mathbf{a}_3 &= \mathbf{a}_2 + R_2\mathbf{a}_1 + \mathbf{v}_2s_1, \\ \mathbf{v}_3 &= \mathbf{v}_2 + R_2\mathbf{v}_1, \\ s_3 &= s_2 + s_1. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Фізичні закони (в нерелятивістській межі малих швидкостей) інваріантні відносно цих перетворень, тому квантовомеханічний опис систем,

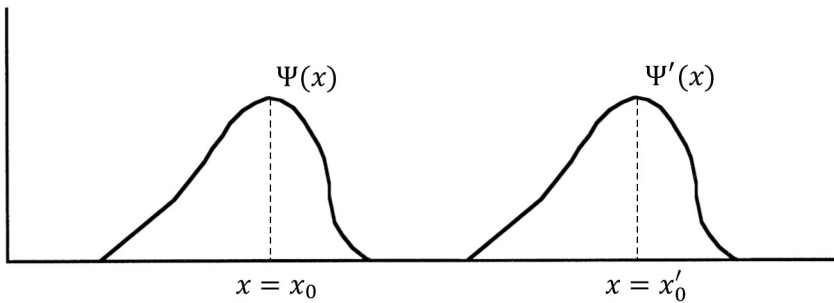
що відрізняються лише такими трансформаціями, має бути еквівалентним. Отже, для просторово-часового перетворення  $\tau$  має існувати відповідне унітарне перетворення  $U(\tau)$  векторів стану та операторів спостережних:

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &\rightarrow |\Psi'\rangle = U(\tau)|\Psi\rangle, \\ A &\rightarrow A' = U(\tau)AU^{-1}(\tau). \end{aligned}$$

Оскільки  $\tau_2\tau_1$  і  $\tau_3$  є однаковими просторово-часовими перетвореннями, то ми вимагаємо, щоб  $U(\tau_2)U(\tau_1)|\Psi\rangle$  і  $U(\tau_3)|\Psi\rangle$  описували *той самий* стан. Це не означає, що  $U(\tau_2)U(\tau_1)$  і  $U(\tau_3)$  мають давати однаковий вектор, бо два вектори, що відрізняються лише на комплексний фазовий множник, є фізично еквівалентними; і, водночас, такий множник — найбільше, чим вони можуть відрізнятись. Отже, маємо

$$U(\tau_2\tau_1) = e^{i\omega(\tau_2,\tau_1)}U(\tau_2)U(\tau_1). \quad (3.7)$$

Можна припустити, що дійсна фаза  $\omega(\tau_2, \tau_1)$  також могла б залежати від  $|\Psi\rangle$ . Але в такому разі  $U$  не був би лінійним оператором, а з теореми Вігнера (§ 3.1) ми знаємо, що  $U$  має бути лінійним для неперервних перетворень.



**Рис. 3.1.** Ілюстрація оберненої залежності між перетворенням функції та перетворенням координат [рівняння (3.8)].

Важливо знати, що коли абстрактний вектор  $|\Psi\rangle$  представлено функцією просторово-часових координат, то існує *обернена залежність між перетворенням у функціональному просторі і перетворенням координат*. Це показано на Рис. 3.1, де функція  $\Psi(x)$  перетворюється на нову функцію  $\Psi'(x) = U(\tau)\Psi(x)$ . Початкова функція розташована поблизу точки  $x = x_0$ , а нова функція розташована вже поблизу  $x = x'_0$ , же  $x'_0 = \tau x_0$ . Точне співвідношення між двома функціями є  $\Psi'(\tau x) = \Psi(x)$ ; значення нової функції в перетвореній точці таке саме, як значення початкової в

старій точці. Записавши  $tx = x'$ , маємо  $\Psi'(x') = \Psi(x) = \Psi(\tau^{-1}x')$ . Проте  $\Psi'(x') = U(\tau)\Psi(x')$  за означенням  $U(\tau)$ . Якщо відкинути непотрібний штрих у перетвореній змінній, то

$$U(\tau)\Psi(x) = \Psi(\tau^{-1}x), \quad (3.8)$$

що вказує на обернену відповідність між перетвореннями у функціональному просторі й перетвореннями координат.

Описане щойно перетворення представляє *активну* точку зору, за якою об'єкт (у цьому випадку, функція) передворюється відносно фіксованої системи координат. Є також *пасивна* точка зору, за якою фіксований об'єкт наново описується в перетвореній системі координат. Обидві точки зору еквівалентні, і вибір однієї з них є справою особистого смаку. (Єдина небезпека, якої слід старанно уникати, полягає в необережному переході від однієї точки зору до іншої при розгляді того ж самого питання!) У розвитку теорії ми переважно дотримуватимось активної точки зору і зробимо виняток лише в § 4.3, де застосуємо пасивну точку зору до конкретного прикладу, і в § 7.5, де обговоримо і активні, і пасивні обертання.

### § 3.3. Генератори групи Галілея

Як було показано в § 3.1, будь-яку однопараметричну групу унітарних операторів можна виразити через експоненту ермітового *генератора*. Набір просторово-часових симетрій, описаний у § 3.2, називається *групою Галілея* і має десять параметрів — три кути обертання, три просторові переміщення, три компоненти бусту і одну часову трансляцію. Загальніше перетворення такого типу еквівалентне послідовності десяти елементарних однопараметричних перетворень, а відповідний унітарний оператор можна виразити через добуток десяти експонент:

$$U(\tau) = \prod_{\mu=1}^{10} e^{is_{\mu}K_{\mu}}. \quad (3.9)$$

Тут  $s_{\mu}$  ( $\mu = 1, 2, \dots, 10$ ) позначає десять параметрів перетворення  $\tau$ , а  $K_{\mu} = K_{\mu}^{\dagger}$  — десять ермітових генераторів. Властивості унітарних операторів визначаються їхніми генераторами. Крім того, ці генератори, як ми з'ясуємо, тісно пов'язані з фундаментальними динамічними змінними на зразок імпульсу та енергії.

Зробивши всі параметри  $s_\mu$  інфінітезимальними, ми отримаємо загальний інфінітезимальний унітарний оператор:

$$U = I + i \sum_{\mu=1}^{10} s_\mu K_\mu. \quad (3.10)$$

Закон перемноження (3.7) для операторів  $U$  виражається через набір комутаційних співвідношень для його генераторів. Розглянемо добуток двох інфінітезимальних операторів та обернених до них:

$$\begin{aligned} e^{i\varepsilon K_\mu} e^{i\varepsilon K_\nu} e^{-i\varepsilon K_\mu} e^{-i\varepsilon K_\nu} &= I + \varepsilon^2 (K_\nu K_\mu - K_\mu K_\nu) + \mathcal{O}(\varepsilon^3) = \\ &= I + \varepsilon^2 [K_\nu, K_\mu] + \mathcal{O}(\varepsilon^3). \end{aligned} \quad (3.11)$$

Оскільки будь-яка послідовність просторово-часових перетворень еквівалентна іншому перетворенню з цієї групи, то з (3.7) випливає, що операторний добуток (3.11) має відрізнатися щонайбільше на фазовий множник від оператора вигляду (3.9). Інакше кажучи, повинен існувати набір 11 параметрів  $(\omega, s_\mu)$ , який зробить  $e^{i\omega} U$  рівним (3.11). Ясно, що всі 11 параметрів мають бути інфінітезимальними, порядку  $\varepsilon^2$ , щоб (3.11) можна було виразити, як

$$e^{i\omega} U = I + i \sum_{\mu=1}^{10} s_\mu K_\mu + i\omega I. \quad (3.12)$$

Рівняння (3.11) і (3.12) вимагають, щоб комутатор двох генераторів були певною лінійною комбінацією генераторів і одиничного оператора:

$$[K_\mu, K_\nu] = i \sum_{\lambda} c_{\mu\nu}^\lambda K_\lambda + i b_{\mu\nu} I. \quad (3.13)$$

Константи  $c_{\mu\nu}^\lambda$  визначаються з правил (3.6) для просторово-часових перетворень  $\tau(R, \mathbf{a}, \mathbf{v}, s)$ . Коефіцієнт  $b_{\mu\nu}$  при одиничному операторі виникає з фазового фактора в (3.7) і має зникати, якщо  $\omega$  дорівнює нулю. Ці загальні принципи буде застосовано до кожної пари генераторів.

Бажано запровадити наочнішу, ніж (3.9) систему позначень для унітарних операторів, що відповідають окремим просторово-часовим перетворенням:

Просторово-часове перетворення	Унітарний оператор
Обертання довкола осі $\alpha$ ( $\alpha = 1, 2, 3$ )	
$\mathbf{x} \rightarrow R_\alpha(\theta_\alpha) \mathbf{x}$	$e^{-i\theta_\alpha J_\alpha}$
Переміщення вздовж осі $\alpha$	
$x_\alpha \rightarrow x_\alpha + a_\alpha$	$e^{-ia_\alpha P_\alpha}$
Буст у напрямку $\alpha$	
$x_\alpha \rightarrow x_\alpha + v_\alpha t$	$e^{iv_\alpha G_\alpha}$
Часова трансляція	
$t \rightarrow t + s$	$e^{iHs}$

Ці десять генераторів  $\{-J_\alpha, -P_\alpha, G_\alpha, H\}$  ( $\alpha = 1, 2, 3$ ) є спеціальними формами загальних генераторів  $K_\mu$  ( $\mu = 1, 2, \dots, 10$ ). Знаки мінус запроваджено лише для узгодження із загальноприйнятою системою позначень.

### Обчислення комутаторів

Спосіб обчислення комутаційних співвідношень вигляду (3.13) полягає в наступному. Ми обираємо пари генераторів і підставляємо їх у (3.11). Далі виконуємо послідовність із чотирьох просторово-часових перетворень для отримання єдиного перетворення, яке є їх остаточним результатом. Комутатор обраної пари генераторів має відрізнятися від генератора остаточного перетворення лише на одиничний оператор, помножений на певну скалярну величину.

Деякі пари просторово-часових перетворень з очевидністю комутують. Це стосується *чистих* просторових переміщень і часових трансляцій, для яких (3.6) зводиться до вигляду, незалежного від порядку перетворень  $\tau_1$  і  $\tau_2$ :  $\mathbf{a}_3 = \mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_1$ ,  $s_3 = s_2 + s_1$ . Комутатори відповідних генераторів можуть давати лише одиничний оператор зі скалярним множником:

$$[P_\alpha, P_\beta] = 0 + (?) I, \quad (3.14)$$

$$[P_\alpha, H] = 0 + (?) I. \quad (3.15)$$

З невідомими множниками (?) перед одиничними операторами ми розберемося згодом.

Такі ж аргументи справедливі для просторових переміщень і бустів, для яких (3.6) зводиться до  $\mathbf{a}_3 = \mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_1$  і  $\mathbf{v}_3 = \mathbf{v}_2 + \mathbf{v}_1$ , а отже,

$$[P_\alpha, G_\beta] = 0 + (?) I, \quad (3.16)$$

$$[G_\alpha, G_\beta] = 0 + (?) I. \quad (3.17)$$



Також очевидно, що обертання комутовують із часовими трансляціями:

$$[J_\alpha, H] = 0 + (?) I. \quad (3.18)$$

Крім того, обертання комутують із просторовими переміщеннями і бустами вздовж осі обертання, тому

$$[J_\alpha, P_\alpha] = 0 + (?) I, \quad (3.19)$$

$$[J_\alpha, G_\alpha] = 0 + (?) I. \quad (3.20)$$

Далі розглянемо менш тривіальний випадок:

$$e^{i\varepsilon H} e^{i\varepsilon G_1} e^{-i\varepsilon H} e^{-i\varepsilon G_1} = I + \varepsilon^2 [G_1, H] + \dots,$$

що відповідає (з правого боку наліво) бусту  $-\varepsilon$  вздовж осі  $x$ , часовій трансляції на  $-\varepsilon$ , бусту  $+\varepsilon$  вздовж осі  $x$ , часовій трансляції на  $+\varepsilon$ . Наслідком таких перетворень є

$$\begin{aligned} (x_1, x_2, x_3, t) &\rightarrow (x_1 - \varepsilon t, x_2, x_3, t) \rightarrow \\ &\rightarrow (x_1 - \varepsilon t, x_2, x_3, t - \varepsilon) \rightarrow \\ &\rightarrow (x_1 - \varepsilon t + \varepsilon(t - \varepsilon), x_2, x_3, t - \varepsilon) \rightarrow \\ &\rightarrow (x_1 - \varepsilon^2, x_2, x_3, t). \end{aligned}$$

В результаті ми отримали переміщення в просторі на  $-\varepsilon^2$  уздовж осі  $x$ , тому добуток цих чотирьох унітарних операторів відрізнятиметься лише на фазовий множник від

$$e^{i\varepsilon^2 P_1} = I + i\varepsilon^2 P_1 + \dots$$

Ясно, що це справедливо й для решти двох осей, тому маємо

$$[G_\alpha, H] = iP_\alpha + (?) I. \quad (3.21)$$

Тепер надійшла черга обертань:

$$x_j \rightarrow \sum_{k=1}^3 (R)_{jk} x_k.$$

Для кожної з трьох осей матриця обертання має вигляд

$$R_1(\theta) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & -\sin \theta \\ 0 & \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix},$$

$$R_2(\theta) = \begin{bmatrix} \cos \theta & 0 & \sin \theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \theta & 0 & \cos \theta \end{bmatrix},$$

$$R_3(\theta) = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Матриці обертання можна розкласти в степеневий ряд

$$R_\alpha = I - i\theta M_\alpha + \dots,$$

де  $M_\alpha = idR_\alpha/d\theta|_{\theta=0}$ :

$$M_1 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{bmatrix}, \quad M_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad M_3 = \begin{bmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

У другому порядку за малим кутом  $\varepsilon$ , ми маємо

$$\begin{aligned} R_2(-\varepsilon)R_1(-\varepsilon)R_2(\varepsilon)R_1(\varepsilon) &= I + \varepsilon^2(M_1M_2 - M_2M_1) = \\ &= I + \varepsilon^2iM_3 = \\ &= R_3(-\varepsilon^2). \end{aligned}$$

Відповідні унітарні оператори обертання повинні задовольняти таким самим співвідношенням з точністю до фазового множника:

$$e^{i\varepsilon J_2} e^{i\varepsilon J_1} e^{-i\varepsilon J_2} e^{-i\varepsilon J_1} = e^{i\omega} e^{i\varepsilon^2 J_3},$$

а комутаційне співвідношення для їхніх генераторів, має вигляд

$$[J_1, J_2] = iJ_3 + (?)I.$$

Співвідношення для решти двох комбінацій генераторів обертань можна вивести з циклічної зміни трьох осей і з антисиметричності комутатора відносно перестановки двох аргументів. Це дозволяє записати:

$$[J_\alpha, J_\beta] = i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}J_\gamma + (?)I, \quad (3.22)$$

де  $\varepsilon_{123} = \varepsilon_{231} = \varepsilon_{312} = 1$ ,  $\varepsilon_{213} = \varepsilon_{132} = \varepsilon_{321} = -1$  і  $\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} = 0$ , коли будь-які два індекси однакові.

Далі розглянемо

$$e^{i\varepsilon G_2} e^{i\varepsilon J_1} e^{-i\varepsilon G_2} e^{-i\varepsilon J_1} = I + \varepsilon^2[J_1, G_2] + \dots,$$

що відповідає обертанню  $\varepsilon$  довкола осі  $x_1$ , бусту  $-\varepsilon$  уздовж  $x_2$ , обертанню  $-\varepsilon$  довкола осі  $x_1$ , бусту  $\varepsilon$  уздовж  $x_2$ . Наслідком таких перетворень є

$$\begin{aligned}(x_1, x_2, x_3) &\rightarrow (x_1, x_2 \cos \varepsilon - x_3 \sin \varepsilon, x_2 \sin \varepsilon + x_3 \cos \varepsilon) \rightarrow \\&\rightarrow (x_1, x_2 \cos \varepsilon - x_3 \sin \varepsilon - \varepsilon t, x_2 \sin \varepsilon + x_3 \cos \varepsilon) \rightarrow \\&\rightarrow (x_1, x_2 - \varepsilon t \cos \varepsilon, x_3 + \varepsilon t \sin \varepsilon) \rightarrow \\&\rightarrow (x_1, x_2 - \varepsilon t \cos \varepsilon + \varepsilon t, x_3 + \varepsilon t \sin \varepsilon) \sim \\&\sim (x_1, x_2, x_3 + \varepsilon^2 t),\end{aligned}$$

в останньому рядку відкинуто члени вище другого порядку за  $\varepsilon$ . Це перетворення еквівалентне бусту  $\varepsilon^2$  вздовж осі  $x_3$ , тому операторний добуток відрізнятиметься щонайбільше на фазовий множник від

$$e^{i\varepsilon^2 G_3} = I + i\varepsilon^2 G_3 + \dots$$

Отже, маємо

$$[J_1, G_2] = iG_3 + (?)I.$$

Такі ж викладки для решти компонентів дають

$$[J_\alpha, G_\beta] = i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} G_\gamma + (?)I. \quad (3.23)$$

Аналогічним чином проводяться обчислення для обертань і просторових переміщень. Їхнім результатом є комутаційне співвідношення

$$[J_\alpha, P_\beta] = i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} P_\gamma + (?)I. \quad (3.24)$$

### Множники одиничного оператора

Тепер ми мусимо розібратися з невизначеними множниками перед одиничним оператором у (3.14) — (3.24), що впливають із невідомого фазового фактора в законі перемноження (3.7). Члени вигляду  $(?)I$  бувають трьох типів:

- (а) такі, що можуть бути визначені з умов сумісності;
- (б) довільні, яких можна позбутися належним вибором фаз певних векторів;
- (с) неусувні члени, що є фізично істотними.

Передовсім займемося випадком (а). Всі комутатори *антисиметричні*,

$$[K_\mu, K_\nu] = [K_\nu, K_\mu],$$

і задовольняють *тотожності Якобі*:

$$[[K_\mu, K_\nu], K_\lambda] + [[K_\nu, K_\lambda], K_\mu] + [[K_\lambda, K_\mu], K_\nu] = 0.$$

З антисиметричності випливає, що всі оператори комутують із самими собою, тож для  $\alpha = \beta$  множники одиничного оператора у виразах (3.14), (3.17) і (3.22) повинні дорівнювати нулю.

Тотожність Якобі можна переписати в зручнішому вигляді:

$$[[K_\mu, K_\nu], K_\lambda] = [[K_\lambda, K_\nu], K_\mu] + [[K_\mu, K_\lambda], K_\nu]. \quad (3.25)$$

Як приклад її застосування, візьмемо  $K_\mu = J_2$ ,  $K_\nu = P_3$  і  $K_\lambda = H$ :

$$[[J_2, P_3], H] = [[H, P_3], J_2] + [[J_2, H], P_3].$$

Скориставшись (3.24), (3.15) і (3.18), маємо

$$[iP_1 + (?)I, H] = [(?)I, J_2] + [(?)I, P_3].$$

А оскільки будь-який оператор комутує з одиничним, то

$$i[P_1, H] = 0.$$

Зрозуміло, що цей результат поширюється й на дві інші осі координат:

$$[P_\alpha, H] = 0. \quad (3.26)$$

Підставляючи в тотожність Якобі різні трійки генераторів, відтак застосовуючи отримані нами вирази для комутаторів (3.14) — (3.24) і виходячи з факту, що кожен комутатор, де присутній одиничний оператор, дорівнює нулю, ми можемо перекоонатися, що

$$[P_\alpha, P_\beta] = 0, \quad (3.27)$$

$$[G_\alpha, G_\beta] = 0, \quad (3.28)$$

$$[J_\alpha, H] = 0. \quad (3.29)$$

Далі розглянемо тип (b), до якого належать довільні множники, які можна обнулити, перевизначивши фази певних векторів. Один з таких

випадків — співвідношення (3.22). З антисиметричності комутатора випливає, що невідомий множник можна записати таким чином:

$$[J_\alpha, J_\beta] = i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}J_\gamma + i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}b_\gamma I, \quad (3.22b)$$

де  $b_\gamma$  ( $\gamma = 1, 2, 3$ ) — дійсне число. Доданка з одиничним оператором можна позбутися шляхом підстановки  $J_\alpha + b_\alpha I \rightarrow J_\alpha$  для  $\alpha = 1, 2, 3$ . На вже розглянуті нами комутатори така підстановка не впливає, а для генераторів  $J$  дає

$$[J_\alpha, J_\beta] = i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}J_\gamma. \quad (3.30)$$

Ця підстановка замінює унітарний оператор обертання  $U(R_\alpha) = e^{-i\theta J_\alpha}$  на  $e^{i\theta b_\alpha} e^{-i\theta J_\alpha}$ , тобто, ми міняємо  $|\Psi'\rangle = U|\Psi\rangle$  на  $e^{i\theta b_\alpha}|\Psi'\rangle$ . А оскільки абсолютна фаза перетвореного вектора фізично неістотна, таке перевизначення припустиме.

Ситуація зі співвідношеннями (3.23) і (3.24) аналогічна, хоча її розгляд потребує довгих викладок. Застосування (3.25) до генераторів  $J_1, J_2$  і  $G_3$  дає

$$\begin{aligned} [[J_1, J_2], G_3] &= [[G_3, J_2], J_1] + [[J_1, G_3], J_2], \\ i[J_3, G_3] &= -i[G_1, J_1] - i[G_2, J_2], \\ [J_3, G_3] &= [J_1, G_1] + [J_2, G_2]. \end{aligned}$$

Останнє рівняння має вигляд

$$X_3 = X_1 + X_2.$$

А з циклічної перестановки трьох осей також отримуємо

$$\begin{aligned} X_1 &= X_2 + X_3, \\ X_2 &= X_3 + X_1. \end{aligned}$$

Ця система однорідних лінійних рівнянь має лише нульове рішення, тому

$$[J_\alpha, G_\alpha] = 0.$$

Застосування (3.25) до генераторів  $J_3, J_1$  і  $G_3$  дає

$$\begin{aligned} [[J_3, J_1], G_3] &= [[G_3, J_1], J_3] + [[J_3, G_3], J_1], \\ i[J_2, G_3] &= i[G_2, J_3], \\ [J_2, G_3] &= -[J_3, G_2]. \end{aligned}$$

Цей результат у поєднанні з попереднім дозволяє нам записати:

$$[J_\alpha, G_\beta] = -[J_\beta, G_\alpha].$$

Антисиметричність цього виразу за  $\alpha$  і  $\beta$  дозволяє переписати (3.23), як

$$[J_\alpha, G_\beta] = i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}G_\gamma + i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}b_\gamma I, \quad (3.23b)$$

цілком подібно до (3.22b), проте слід мати на увазі що тут множник  $b_\gamma$  інший. Підстановка  $G_\alpha + b_\alpha I \rightarrow G_\alpha$  дозволяє позбутися доданка з одиничним оператором у цьому співвідношенні:

$$[J_\alpha, G_\beta] = i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}G_\gamma. \quad (3.31)$$

Такі самі обчислення, разом із перевизначенням  $P_\alpha$ , дають

$$[J_\alpha, P_\beta] = i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}P_\gamma. \quad (3.32)$$

Останнє перевизначення, як виявляється, zarazом усуває й доданок з одиничним оператором у співвідношенні (3.21) для  $G_\alpha$  і  $H$ . Щоб перекоонатись у цьому, скористаємося (3.25) із  $J_1, G_2$  і  $H$ :

$$\begin{aligned} [[J_1, G_2], H] &= [[H, G_2], J_1] + [[J_1, H], G_2], \\ i[G_3, H] &= -i[P_2, J_1] + 0, \\ [G_3, H] &= iP_3. \end{aligned}$$

Позаяк усі три осі еквівалентні, ми робимо висновок, що

$$[G_\alpha, H] = iP_\alpha. \quad (3.33)$$

Нерозглянутим залишився комутатор  $[P_\alpha, G_\beta]$ , і саме тут ми зустрічаємося з випадком неусувного множника при одиничному операторові. Скориставшись (3.25) із  $J_1, G_2$  і  $H_1$ , отримаємо

$$\begin{aligned} [[J_1, G_2], P_1] &= [[P_1, G_2], J_1] + [[J_1, P_1], G_2], \\ i[G_3, P_1] &= 0 + 0. \end{aligned}$$

Отже  $[G_\alpha, P_\beta] = 0$  при  $\alpha \neq \beta$ . Тепер проведемо обчислення з  $P_3$  замість  $P_1$ :

$$\begin{aligned} [[J_1, G_2], P_3] &= [[P_3, G_2], J_1] + [[J_1, P_3], G_2], \\ i[G_3, P_3] &= 0 - i[P_2, G_2]. \end{aligned}$$

Отже  $[G_\alpha, P_\alpha] = [G_\beta, P_\beta]$ . Цей результат, у поєднанні з (3.16), дає

$$[G_\alpha, P_\alpha] = i\delta_{\alpha\beta}mI, \quad (3.34)$$

де  $m$  — дійсна константа. Значення  $m$  не можна обчислити з жодного рівняння, що ми маємо в нашому розпорядженні. Її не можна позбутися шляхом перевизначення генераторів. (І, власне, ми вже позбулися свободи вибору, перевизначивши всі генератори, крім  $H$ , щоб усунути решту множників.)  $m$  математично неусувна і, як ми невдовзі побачимо, має глибоке фізичне значення.

Для зручності ми звели всі комутаційні співвідношення в підсумкову таблицю:

Комутаційні співвідношення для генераторів перетворень групи Галілея		
(a) $[P_\alpha, P_\beta] = 0$	(f) $[G_\alpha, P_\alpha] = i\delta_{\alpha\beta}mI$	(3.35)
(b) $[G_\alpha, G_\beta] = 0$	(g) $[P_\alpha, H] = 0$	
(c) $[J_\alpha, J_\beta] = i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}J_\gamma$	(h) $[G_\alpha, H] = iP_\alpha$	
(d) $[J_\alpha, P_\beta] = i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}P_\gamma$	(i) $[J_\alpha, H] = 0$	
(e) $[J_\alpha, G_\beta] = i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}G_\gamma$		

### § 3.4. Ідентифікація операторів з динамічними змінними

У попередньому параграфі ми дослідили геометричні властивості операторів  $\mathbf{P}$ ,  $\mathbf{J}$ ,  $\mathbf{G}$  і  $H$ , як генераторів перетворень симетрії у векторному просторі станів. Проте ми ще не з'ясували їх динамічного змісту, як операторів спостережних величин, хоча обрана нами система позначень уже натякає на очікувані результати, що будуть отримані в поточному параграфі.

Динаміка *вільної частки* очевидно інваріантна до всієї групи просторово-часових перетворень, і цього, виявляється, досить для повного ототожнення операторів з їхніми динамічними змінними. Цей метод ґрунтується на статті Т. Ф. Джордана [100].

Ми припускаємо, що *оператор положення* частки  $\mathbf{Q} = (Q_1, Q_2, Q_3)$ ,

$$Q_\alpha = x_\alpha|\mathbf{x}\rangle \quad (\alpha = 1, 2, 3), \quad (3.36)$$

має необмежений неперервний спектр. Тут, власне, міститься аж два припущення: по-перше, про неперервність спектру, а по-друге, що три компонента оператора взаємно комутативні й мають спільний повний набір власних векторів (у сенсі узагальненої спектральної теореми). Перше припущення неминуче, якщо ми використовуємо неперервні транс-

формації. І хоча його, мабуть, доведеться переглянути в теорії, яка намагається включити до квантовомеханічного розгляду гравітацію, проте немає сенсу сумніватися в його виправданості на атомному та ядерному рівні. Друге припущення ми обговоримо згодом, у контексті композиційних систем (§ 3.5).

Тепер ми спробуємо запровадити *оператор швидкості*  $\mathbf{V}$  таким чином, щоб

$$\frac{d}{dt}\langle \mathbf{Q} \rangle = \langle \mathbf{V} \rangle \quad (3.37)$$

для всіх станів. Зокрема, для чистого стану, представленого вектором  $|\Psi(t)\rangle$ , має бути

$$\begin{aligned} \langle \Psi(t) | \mathbf{V} | \Psi(t) \rangle &= \frac{d}{dt} \langle \Psi(t) | \mathbf{Q} | \Psi(t) \rangle = \\ &= \left\{ \frac{d}{dt} \langle \Psi(t) | \right\} \mathbf{Q} | \Psi(t) \rangle + \langle \Psi(t) | \mathbf{Q} \left\{ \frac{d}{dt} | \Psi(t) \rangle \right\}. \end{aligned}$$

Для знаходження похідних застосуємо часову трансляцію. При  $t \rightarrow t' = t + s$  вектор  $|\Psi(t)\rangle$ , відповідно до правила (3.8), переходить у  $|\Psi'(t)\rangle = |\Psi(t - s)\rangle$ . З іншого боку, ми маємо унітарний оператор перетворення часу, який діє на самі вектори:  $|\Psi'(t)\rangle = e^{isH} |\Psi(t)\rangle$ . Тому

$$e^{isH} |\Psi(t)\rangle = |\Psi(t - s)\rangle.$$

Підставивши в цю рівність  $s = t$ , отримаємо  $|\Psi(t)\rangle = e^{-itH} |\Psi(0)\rangle$ , отже,

$$\frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = -iH |\Psi(t)\rangle. \quad (3.38)$$

З цього результату випливає, що

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \mathbf{V} | \Psi \rangle &= i \langle \Psi | H \mathbf{Q} | \Psi \rangle - i \langle \Psi | \mathbf{Q} H | \Psi \rangle = \\ &= i \langle \Psi | [H, \mathbf{Q}] | \Psi \rangle. \end{aligned}$$

Таким чином,

$$\mathbf{V} = i[H, \mathbf{Q}] \quad (3.39)$$

виконує роль оператора швидкості для вільної частки. Але тут він виражений через оператор  $H$ , вигляд якого ще не визначено.

Якщо через  $|\mathbf{x}\rangle$  позначити власний вектор оператора положення  $\mathbf{Q}$  з власним значенням  $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$ , то при операції *просторового переміщення*  $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}' = \mathbf{x} + \mathbf{a}$  він має перетворюватися на  $|\mathbf{x} + \mathbf{a}\rangle$ :

$$|\mathbf{x}\rangle \rightarrow |\mathbf{x}'\rangle = e^{-i\mathbf{a} \cdot \mathbf{P}} |\mathbf{x}\rangle = |\mathbf{x} + \mathbf{a}\rangle. \quad (3.40)$$



Нагадуємо, що ми дотримуємось активної точки зору, при якій стани переміщуються відносно фіксованої системи координат<sup>8</sup>. Перетворені спостережні перебувають у такому ж відношенні з перетвореними векторами, як початкові спостережні з початковими векторами, відповідно до висновків § 3.1. Зокрема,

$$\mathbf{Q} \rightarrow \mathbf{Q}' = e^{-i\mathbf{a} \cdot \mathbf{P}} \mathbf{Q} e^{i\mathbf{a} \cdot \mathbf{P}}, \quad (3.41)$$

а також

$$Q'_\alpha |\mathbf{x}\rangle' = x_\alpha |\mathbf{x}\rangle' \quad (\alpha = 1, 2, 3). \quad (3.42)$$

А оскільки  $|\mathbf{x}\rangle' = |\mathbf{x} + \mathbf{a}\rangle$ , то порівняння (3.42) і (3.36), з урахуванням припущення, що вектори  $\{|\mathbf{x}\rangle\}$  утворюють повний набір, дає

$$\mathbf{Q}' = \mathbf{Q} - \mathbf{a}I. \quad (3.43)$$

З огляду на (3.42) і (3.43), дію оператора  $\mathbf{Q}'$  можна трактувати, як вимірювання положення відносно переміщеного на відстань  $\mathbf{a}$  початку координат.

Прирівнявши праві частини (3.41) та (3.43) й розклавши еспоненти у степеневий ряд за інфінітезимальним параметром  $\mathbf{a}$ , ми відкинемо члени вище першого порядку і отримаємо рівність  $[Q_\alpha, \mathbf{a} \cdot \mathbf{P}] = i a_\alpha I$ , яка виконуватиметься для довільного напрямку вектора  $\mathbf{a}$  в тому і лише в тому випадку, коли

$$[Q_\alpha, P_\beta] = i \delta_{\alpha\beta} I. \quad (3.44)$$

*Обертання* на інфінітезимальний кут  $\theta$  довкола осі, спрямованої вздовж одиничного вектора  $\hat{\mathbf{n}}$ , дає  $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}' = \mathbf{x} + \theta \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{x}$ . Відповідне переміщення власного вектора є

$$|\mathbf{x}\rangle \rightarrow |\mathbf{x}\rangle' = e^{-i\theta \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{J}} |\mathbf{x}\rangle = |\mathbf{x} + \theta \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{x}\rangle, \quad (3.45)$$

а перетворення оператора

$$\begin{aligned} Q_\alpha \rightarrow Q'_\alpha &= e^{-i\theta \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{J}} Q_\alpha e^{i\theta \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{J}} = \\ &= Q_\alpha - i\theta [\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{J}, Q_\alpha] + \mathcal{O}(\theta^2). \end{aligned} \quad (3.46)$$

<sup>8</sup>Тут немає ніякої суперечності з тим, що трохи вище ми, розглядаючи часову трансляцію, писали  $|\Psi(t)\rangle \rightarrow |\Psi'(t)\rangle = |\Psi(t - s)\rangle$ . Тоді час  $t$  був аргументом векторної функції  $|\Psi(t)\rangle$ , і до нього застосовувалось правило (3.8), а зараз  $\mathbf{x}$  виступає власним значенням, що відповідає власному векторові  $|\mathbf{x}\rangle$ , і унітарний оператор  $U(\mathbf{a}) = e^{-i\mathbf{a} \cdot \mathbf{P}}$  переводить його в  $|\mathbf{x} + \mathbf{a}\rangle$ . Якщо  $|\mathbf{x}\rangle$  представити певною функцією  $\Psi_{\mathbf{x}}(\mathbf{y})$  у тривимірному просторі, з власним значенням  $\mathbf{x}$  і аргументом  $\mathbf{y}$ , то (3.40) можна переписати, як  $\Psi_{\mathbf{x}}(\mathbf{y}) \rightarrow \Psi'_{\mathbf{x}}(\mathbf{y}) = \Psi_{\mathbf{x}+\mathbf{a}}(\mathbf{y}) = \Psi_{\mathbf{x}}(\mathbf{y} - \mathbf{a})$ , в цілковитій відповідності з (3.8).

Як і при розгляді просторового переміщення, маємо

$$Q'_\alpha |\mathbf{x}\rangle' = x_\alpha |\mathbf{x}\rangle'.$$

Але також

$$\begin{aligned} Q_\alpha |\mathbf{x}\rangle' &= Q_\alpha |\mathbf{x}'\rangle = x'_\alpha |\mathbf{x}'\rangle = (\mathbf{x} + \theta \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{x})_\alpha |\mathbf{x}'\rangle = \\ &= (Q' + \theta \hat{\mathbf{n}} \times Q')_\alpha |\mathbf{x}'\rangle. \end{aligned}$$

А оскільки вектори  $\{|\mathbf{x}\rangle\}$  утворюють повний набір, ми маємо  $\mathbf{Q} = \mathbf{Q}' + \theta \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{Q}'$ . У першому порядку за  $\theta$  це дає

$$\mathbf{Q}' = \mathbf{Q} - \theta \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{Q}. \quad (3.47)$$

Порівнявши (3.47) і (3.46), отримуємо  $[\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{J}, \mathbf{Q}] = -i \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{Q}$ . Цей вираз ми можемо записати в зручнішому вигляді, скалярно помноживши обидві його частини на довільний одиничний вектор  $\hat{\mathbf{u}}$ :

$$[\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{J}, \hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{Q}] = -i(\hat{\mathbf{n}} \times \hat{\mathbf{u}}) \cdot \mathbf{Q}. \quad (3.48a)$$

Обираючи  $\hat{\mathbf{n}}$  і  $\hat{\mathbf{u}}$  спрямованими вздовж координатних осей, отримаємо вираз для компонентів:

$$[J_\alpha, Q_\beta] = i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} Q_\gamma. \quad (3.48b)$$

Таке співвідношення компонентів  $\mathbf{Q}$  з генератором обертань свідчить про те, що  $\mathbf{Q} \in 3$ -вектором.<sup>9</sup>

Генератор бустів  $\mathbf{G}$  породжує *переміщення у швидкісному просторі*

$$e^{iv \cdot \mathbf{G}} \mathbf{V} e^{-iv \cdot \mathbf{G}} = \mathbf{V} - \mathbf{v} \mathbf{I}, \quad (3.49)$$

так само, як  $\mathbf{P}$  породжує переміщення в звичайному просторі [пор. із (3.43)]. Наш подальший аналіз обмежимо миттєвим наслідком бусту при  $t = 0$ . (Оскільки немає нічого особливого в моменті  $t = 0$ , то ми можемо зробити такий вибір без втрати загальності. Випадок для довільних  $t$  розглянуто в Задачі 3.1 наприкінці цього розділу.) У такому разі миттєве перетворення не впливає на положення, а тому

$$[G_\alpha, Q_\beta] = 0. \quad (3.50)$$

<sup>9</sup>Будь-який об'єкт, що перетворюється при обертанні таким самим чином, як координата  $\mathbf{x}$  або оператор положення  $\mathbf{Q}$ , називається *3-вектором* (або *просто* вектором, якщо це не викликати плутанини з елементами абстрактного векторного простору станів). Будь-який оператор, що задовольняє співвідношенню (3.48b) на місці  $\mathbf{Q}$ , є *3-векторним оператором*. Таким чином, із (3.35c,d,e) випливає, що  $\mathbf{J}$ ,  $\mathbf{G}$  і  $\mathbf{P}$  є 3-векторними операторами.

Наразі ми встановили комутаційні співвідношення генераторів перетворень симетрії  $\mathbf{J}$ ,  $\mathbf{G}$  і  $\mathbf{P}$  з оператором положення  $\mathbf{Q}$  (поки єдиним оператором, ототожненим із фізичною спостережною). Тепер настав час віднайти їх конкретну форму й дати їм фізичну інтерпретацію на підставі їхнього зв'язку з  $\mathbf{Q}$ . З огляду на (3.44), ми бачимо, що комутаційне співвідношення  $[G_\alpha, P_\beta] = i\delta_{\alpha\beta}mI$  виконуватиметься при  $G_\alpha = mQ_\alpha$ . Крім того, така підстановка збереже й решту комутаційних співвідношень: для  $[J_\alpha, G_\beta]$  це тривіально випливає з (3.48b), а для перевірки  $[G_\alpha, H] = iP_\alpha$  треба розкласти праву частину (3.49) за інфінітезимальним параметром  $\mathbf{v}$ , а потім, відповідно до рівності (3.39), замінити оператор  $\mathbf{V}$  на  $i[H, \mathbf{Q}]$  і застосувати тотожність Якобі. Однак це ще не означає, що  $G_\alpha = mQ_\alpha$  є єдино можливим рішенням; різниця  $G_\alpha - mQ_\alpha$  може бути ненульовим оператором, що комує з  $\mathbf{Q}$  і  $\mathbf{P}$ . Далі ситуація залежатиме від того, має частка внутрішні степені свободи чи ні.

### Випадок (і): вільна частка без внутрішніх степенів свободи

У цьому випадку оператори  $\{\mathbf{Q}, \mathbf{P}\}$  утворюють *непривідний набір*, і, відповідно до леми Шура, будь-який оператор, що комує з ними є кратним одиничному. Точне математичне формулювання і доведення цих тверджень див. у Додатках А і Б. А кількох словах, аргументація така. Якщо оператор комує з  $Q_\alpha$ , то він не може бути функцією від  $P_\alpha$ , бо комутатор  $[P_\alpha, Q_\alpha]$  ненульовий для будь-якого ненульового вектора. Аналогічно, якщо оператор комує з  $P_\alpha$ , то він не може бути функцією від  $Q_\alpha$ . Якщо оператор не залежить ні від  $\mathbf{Q}$ , ні від  $\mathbf{P}$ , і відсутні внутрішні степені свободи, то він має бути кратний одиничному.

Оскільки  $\mathbf{G} - m\mathbf{Q}$  комує і з  $\mathbf{Q}$  і з  $\mathbf{P}$ , то він кратний одиничному, отже,  $G_\alpha = mQ_\alpha + c_\alpha I$ . Проте  $G_\alpha$  має задовольняти (3.35e), тобто перетворюватись, як компонент 3-вектора. Доданок  $mQ_\alpha$  перетворюється, як 3-вектор у силу співвідношення (3.48b), проте для другого доданка,  $c_\alpha I$ , ця вимога не виконується, бо він комує з усіма компонентами  $\mathbf{J}$ . Тому ми маємо

$$G_\alpha = mQ_\alpha \quad (3.51)$$

для частки без внутрішніх степенів свободи.

Скориставшись рівністю (3.44), можна перевірити, що підстановка  $\mathbf{J} \rightarrow \mathbf{Q} \times \mathbf{P}$  задовольняє співвідношенням (3.35c,d,e) і (3.48b); водночас, різниця  $\mathbf{J} - \mathbf{Q} \times \mathbf{P}$  комує з непривідним набором  $\{\mathbf{Q}, \mathbf{P}\}$ . Отже, з леми Шура випливає, що  $J_\alpha = (\mathbf{Q} \times \mathbf{P})_\alpha + c_\alpha I$ . Як і в попередньому випадку, константа  $c_\alpha$  має дорівнювати нулю, щоб виконувалося співвідношення

(3.35с). Таким чином,

$$\mathbf{J} = \mathbf{Q} \times \mathbf{P} \quad (3.52)$$

для частки без внутрішніх степенів свободи.

Відтак залишився тільки генератор  $H$ , чию форму можна визначити зі співвідношення (3.35h), яке, після підстановки в нього  $G_\alpha$  з (3.51), набуває вигляду

$$[Q_\alpha, H] = \frac{iP_\alpha}{m}.$$

Легко переконатися, що цьому рівнянню задовольняє  $H = \mathbf{P} \cdot \mathbf{P}/2m$ . Як і вище, застосувавши лему Шура, ми доходимо висновку, що різниця  $H - \mathbf{P} \cdot \mathbf{P}/2m$  має бути кратною одиничному операторові:

$$H = \frac{\mathbf{P} \cdot \mathbf{P}}{2m} + E_0. \quad (3.53)$$

Ми запровадили окреме позначення  $E_0$  для оператора, кратного одиничному, бо в цьому випадку його не можна позбутися, оскільки  $H$  є не 3-векторним оператором, а скалярним і комує з усіма компонентами  $\mathbf{J}$ .

Тепер ми можемо обчислити комутатор у виразі (3.39) для оператора швидкості:

$$\mathbf{V} = \frac{\mathbf{P}}{m}. \quad (3.54)$$

Належні фізичні інтерпретації генераторів  $\mathbf{P}$ ,  $H$  і  $\mathbf{J}$  впливають із цього результату. Тепер ми маємо

$$\begin{aligned} \mathbf{P} &= m\mathbf{V}, \\ H &= \frac{1}{2}m\mathbf{V} \cdot \mathbf{V} + E_0, \\ \mathbf{J} &= \mathbf{Q} \times m\mathbf{V}, \end{aligned}$$

де  $\mathbf{Q}$  і  $\mathbf{V}$  — оператори положення та швидкості. Якби  $m$  була масою вільної частки, ці вирази набули б знайомого з класичної механіки вигляду імпульсу, енергії та моменту імпульсу. Та оскільки  $m$  ще не ідентифіковано, ми можемо лише вивести пропорційні співвідношення:

$$\begin{aligned} \frac{m}{\text{маса}} &= \frac{\mathbf{P}}{\text{імпульс}} = \frac{H}{\text{енергія}} = \frac{\mathbf{J}}{\text{момент імпульсу}} = \\ &= \text{фундаментальна константа} = \\ &= \text{скажімо, } \hbar^{-1}. \end{aligned} \quad (3.55)$$

Таким чином у теорії з'являється параметр  $\hbar$ , як фундаментальна константа. Її значення можна отримати лише з експерименту, і за станом на

2010 рік її значення становить  $1.054571726(47) \times 10^{-34}$  джоуль-секунд. У Розділі 5 ми розглянемо перший приклад досліду, що дозволяє виміряти величину  $\hbar$ , це явище дифракційного розсіяння часток на кристалі (дифракція Брега). Параметр  $\hbar$  іноді називають сталою Планка, хоча, строго кажучи, це  $\hbar = 2\pi\hbar$ .

Так ми отримали повний квантовомеханічний опис вільної частки без внутрішніх степенів свободи.

### Випадок (ii): вільна частка зі спіном

Внутрішні степені свободи — це, за означенням, незалежні від центру мас степені свободи, і їх має представляти оператор, незалежний від  $\mathbf{Q}$  і  $\mathbf{P}$ . І він, і його функції, комутуватимуть з обома генераторами, а отже, цьому випадку набір  $\{\mathbf{Q}, \mathbf{P}\}$  не буде непривідним.

*Спин*, за означенням, є внутрішньою складовою моменту імпульсу, тому, замість (3.52), генератори обертань мають вигляд

$$\mathbf{J} = \mathbf{Q} \times \mathbf{P} + \mathbf{S}, \quad (3.56)$$

з умовою, що  $[\mathbf{Q}, \mathbf{S}] = [\mathbf{P}, \mathbf{S}] = 0$ . Ці оператори буде детальніше вивчено в Розділі 7.

Щоб і надалі бути генератором обертань,  $\mathbf{J}$  має задовольняти комутаційним співвідношенням (3.35с). Оскільки перший доданок у (3.56) задовольняє їм, то необхідно, щоб це виконувалось і для  $\mathbf{S}$ , а отже,

$$[S_\alpha, S_\beta] = i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}S_\gamma. \quad (3.57)$$

Співвідношення (3.35f),  $[G_\alpha, P_\beta] = i\delta_{\alpha\beta}mI$ , виконуються для  $\mathbf{G} = m\mathbf{Q}$ , і, як у випадку (i), всі три компоненти  $\mathbf{G} = m\mathbf{Q}$  комутують із  $\mathbf{Q}$  і  $\mathbf{P}$ . Але тепер існують відмінні від одиничного оператори, що також комутують із  $\mathbf{Q}$  і  $\mathbf{P}$ , а саме оператори, що описують внутрішні степені свободи. Отже,  $\mathbf{G} = m\mathbf{Q}$  може бути функцією  $\mathbf{S}$ . Лише єдина функція від  $\mathbf{S} \in 3$ -вектором — це сам  $\mathbf{S}$  із довільним дійсним множником. [Як впливає з (3.57),  $\mathbf{S} \times \mathbf{S} = i\mathbf{S}$ , а тому неможливо утворити нові вектори піднесенням  $\mathbf{S}$  до степеня.] Таким чином,  $\mathbf{G} = m\mathbf{Q} + c\mathbf{S}$ , де  $c$  — дійсна константа. Згідно з (3.35b), три компоненти  $\mathbf{G}$  комутують між собою, отже, в силу (3.57),  $c$  може бути тільки нульовим. Тож і в цьому випадку  $\mathbf{G} = m\mathbf{Q}$ .

Аргументація, що привела нас до виразу (3.53),  $H = \mathbf{P} \cdot \mathbf{P}/2m + E_0$ , годиться і в цьому випадку, за винятком того, що  $E_0$  тепер може бути функцією від  $\mathbf{S}$ . Оскільки  $[\mathbf{J}, H] = 0$ , то повинно виконуватися співвідношення  $[\mathbf{S}, E_0] = 0$ , отже,  $E_0$  може бути лише кратною  $\mathbf{S} \cdot \mathbf{S}$ . Це не впливає на

оператор швидкості  $\mathbf{V} = i[H, \mathbf{Q}]$ , бо  $[E_0, \mathbf{Q}] = 0$ , тому вираз  $\mathbf{V} = \mathbf{P}/m$  залишається справедливим. Ідентифікація операторів імпульсу та енергії проводиться, як і в попередньому випадку, але тепер  $E_0$  відповідає вкладу в енергію від внутрішніх степенів свободи.

### Випадок (iii): частка у взаємодії із зовнішнім полем

Для спрощення розглянемо лише частку без спіну. Взаємодія впливає на еволюцію стану в часі (а отже, й на розподіли ймовірності для спостережних величин). Ми розглянемо це, зберігаючи вигляд рівняння руху для вектора стану

$$\frac{d}{dt}|\Psi(t)\rangle = -iH|\Psi(t)\rangle, \quad (3.38)$$

але модифікувавши генератор  $H$  (відтепер називатимемо його *гамільтоніаном* або *гамільтоновим оператором*) з урахуванням взаємодії. Це означає, що ми мусимо відмовитися від комутаційних співвідношень (3.35g,h,i), які містять  $H$ . Оператор швидкості і далі залишається визначеним, як

$$\mathbf{V} = i[H, \mathbf{Q}], \quad (3.39)$$

оскільки його було виведено з (3.38), проте можемо очікувати, що його явний вигляд зміниться при включенні до  $H$  додаткових членів із взаємодією.

Може виникнути питання, чому лише генератор часових трансляцій  $H$  має зазнати змін через взаємодію, тоді як генератор просторового переміщення  $\mathbf{P}$  залишається незмінним. Якби ми розглядали, наприклад, самохідну машину, то могли б уявити, що вона переносить себе в просторі під дією власної сили, споживаючи паливо, позбуваючись вихлопних газів, викидаючи по дорозі відпрацьовані деталі. Якби  $\mathbf{P}$  генерував такого типу переміщення, то на його вигляд, звичайно, вплинула б взаємодія, відповідальна за ці процеси. Але це не те, що ми розуміємо під просторовими переміщеннями. Радше нам просто йдеться про суто геометричну операцію самоузгодженого переміщення системи до іншого розташування. В цьому й полягає причина, чому  $\mathbf{P}$  й решта генераторів перетворень симетрії не змінюються під впливом динамічної взаємодії. Проте  $H$  ми *перевизначили* до генератора динамічної еволюції в часі, а не просто геометричного переміщення вздовж часової осі.

Єдине обмеження, накладене на перевизначений  $H$ , полягає в його зв'язку (3.39) з оператором швидкості  $\mathbf{V}$ , вигляд якого ми повинні визначити. При перетворенні між рівномірно рухомими системами відліку  $\mathbf{V}$  перетворюється за правилом (3.49). Розкладення експонент до першого

порядку за інфінітезимальним параметром бусту  $\mathbf{v}$  дає  $[\mathbf{i}\mathbf{v} \cdot \mathbf{G}, \mathbf{V}] = -\mathbf{v}I$ , а отже,

$$[G_\alpha, V_\beta] = i\delta_{\alpha\beta}I. \quad (3.58)$$

Ідентифікація  $G_\alpha = mQ_\alpha$  залишається чинною, бо при її виведенні ми не використовували комутаторів і  $H$ .

Попередній результат,  $V_\alpha = mQ_\alpha$ , і тепер залишається можливим рішенням для  $\mathbf{V}$ , але вже не єдино припустимим. Із (3.58) і (3.35f) випливає, що  $\mathbf{V} - \mathbf{P}/m$  комутує з  $\mathbf{G}$ . Проте  $\mathbf{G} = m\mathbf{Q}$ , а оскільки ми виходимо з припущення про відсутність внутрішніх степенів свободи, то оператори  $(Q_1, Q_2, Q_3) = \mathbf{Q}$  утворюють повний комутативний набір. Позаяк  $\mathbf{V} - \mathbf{P}/m$  комутує з повним комутативним набором, то, згідно з Теоремою 6 у § 1.3, має бути функцією від  $\mathbf{Q}$ . Таким чином, у найзагальнішій формі, оператор швидкості є

$$\mathbf{V} = \frac{\mathbf{P}}{m} - \mathbf{A}(\mathbf{Q}), \quad (3.59)$$

де  $\mathbf{A}$  — певна функція оператора положення.

Тепер ми повинні розв'язати (3.39) для знаходження  $H$ . Одне з можливих рішень має вигляд

$$H_0 = \frac{(\mathbf{P} - \mathbf{A})^2}{2m},$$

як можна безпосередньо перевірити [тут для зручності  $\mathbf{A}$  перевизначено порівняно з (3.59) до  $\mathbf{A}/m$ ]. Тоді з (3.39) випливає, що  $[H - H_0, \mathbf{Q}] = 0$ . Отже,  $H - H_0$  комутує з повним набором  $(Q_1, Q_2, Q_3)$ , тому має бути функцією від  $\mathbf{Q}$ . Таким чином, найзагальніша форма генератора еволюції, або ж гамільтоніана, для безспінової частки у взаємодії із зовнішнім полем є

$$H = \frac{(\mathbf{P} - \mathbf{A})^2}{2m} + W(\mathbf{Q}). \quad (3.60)$$

Отриманий нами результат свідчить, що єдиною формою взаємодії, сумісною з інваріантністю відносно групи перетворень Галілея, є *скалярний потенціал*  $W(\mathbf{Q})$  і *векторний потенціал*  $\mathbf{A}(\mathbf{Q})$ . Обидва потенціали можуть бути залежними від часу. Як оператори, вони можуть бути функціями від  $\mathbf{Q}$ , але не повинні залежати від  $\mathbf{P}$ .

Як нам добре відомо, електромагнітне поле можна виразити через векторний і скалярний потенціали, тож електромагнітна взаємодія має таку форму, якої й вимагає гамільтоніан (3.60). Проте  $W(\mathbf{Q})$  і  $\mathbf{A}(\mathbf{Q})$  не конче мають бути ототожненими з електромагнітними потенціалами, бо вони є довільними функціями, які не обов'язково повинні задовольняти рівнянням Максвелла. Скажімо, ньютонів гравітаційний потенціал також можна включити до  $W(\mathbf{Q})$ .

І хоча ми розглянули лише взаємодію однієї частки із зовнішнім полем, це не обмежує загальність теорії. Взаємодію між частками можна включити в неї, розглядаючи інші частки, як джерела зовнішнього поля, що діє на кожну конкретну частку. Таким чином, кулонова взаємодія між двома електронами із зарядом  $e$  описується оператором  $W = e^2/|\mathbf{Q}^{(1)} - \mathbf{Q}^{(2)}|^2$ , де  $\mathbf{Q}^{(1)}$  і  $\mathbf{Q}^{(2)}$  — оператори положення двох електронів.

## Стандартна система позначень

Насамкінець ми приймаємо звичнішу систему позначень, змінивши масштаби величин  $m$ ,  $\mathbf{P}$ ,  $\mathbf{J}$  і  $H$  таким чином, щоб дорівнювали масі, імпульсові, моментів імпульсу та енергії системи, а не просто були пропорційними їм, як у (3.55). Це означає, що всюди, де ми раніше писали ці чотири символи, натомість писатимемо  $m/\hbar$ ,  $\mathbf{P}/\hbar$ ,  $\mathbf{J}/\hbar$  і  $H/\hbar$ . Зокрема, унітарні оператори просторового переміщення, обертання і еволюції в часі тепер матимуть вигляд  $\exp(-i\mathbf{a} \cdot \mathbf{P}/\hbar)$ ,  $\exp(-i\theta\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{J}/\hbar)$  і  $\exp(-itH/\hbar)$ . Ці змінені позначення будуть використовуватися на всіх наступних сторінках цієї книги. Застосовуючи рівняння з § 3.1 у подальшому, передовсім треба провести заміну  $m \rightarrow m/\hbar$ ,  $\mathbf{P} \rightarrow \mathbf{P}/\hbar$ ,  $\mathbf{J} \rightarrow \mathbf{J}/\hbar$  і  $H \rightarrow H/\hbar$ . Альтернативно, можна вважати, що ці вирази просто записано в системі одиниць, де  $\hbar = 1$ .

## § 3.5. Композитні системи

Отримавши оператори, що представляють динамічні змінні для однієї частки, ми тепер маємо поширити ці результати на композитні (складені, або просто складні) системи. Розглянемо систему з двох компонентів, які можна розділити. Нехай оператор  $A^{(1)}$  представляє спостережну величину компонента 1, а  $A^{(2)}$  — компонента 2. Якщо ці компоненти можна розділити так, щоб вони не впливали один на одного, тоді має існувати можливість описати їх незалежно. Крім того, опис об'єднаної системи повинен бути сумісним з окремими описами, а стани цих компонентів можна приготувати окремо. (Це, втім, не означає, що всі стани композитної системи мають такий характер; тут просто йдеться про можливість незалежного приготування станів.)

Можна приготувати стан, у якому спостережна, що відповідає операторові  $A^{(1)}$ , має єдине значення (з імовірністю 1). Як було показано в § 2.4, відповідний вектор стану є власним вектором  $A^{(1)}$ . Аналогічно, можна приготувати стан для другого компонента системи з власним вектором оператора  $B^{(2)}$ . Оскільки компонентами 1 і 2 можна маніпулювати



окремо, то має існувати об'єднаний вектор стану для комбінованої системи, що є спільним власним вектором  $A^{(1)}$  і  $B^{(2)}$ , і це має бути справедливим для всіх комбінацій власних значень двох операторів. Тобто, якщо  $A^{(1)}|a_m\rangle^{(1)} = a_m|a_m\rangle^{(1)}$  і  $B^{(2)}|b_n\rangle^{(2)} = b_n|b_n\rangle^{(2)}$ , то для кожної пари  $m$  і  $n$  мусить бути такий спільний власний вектор, що

$$\begin{aligned} A^{(1)}|a_m, b_n\rangle &= a_m|a_m, b_n\rangle, \\ B^{(2)}|a_m, b_n\rangle &= b_n|a_m, b_n\rangle. \end{aligned} \quad (3.61)$$

Ці рівняння справедливі, якщо спільний власний вектор є добутком векторів:

$$|a_m, b_n\rangle = |a_m\rangle^{(1)}|b_n\rangle^{(2)}. \quad (3.62)$$

Такий добуток відомий, як *добуток Кронекера*, і зазвичай записується  $|a_m\rangle^{(1)} \otimes |b_n\rangle^{(2)}$ . Добуток Кронекера для вектора в  $M$ -розмірному просторі і вектора в  $N$ -розмірному просторі є вектором у  $M \cdot N$ -розмірному просторі ( $M$  і  $N$  можуть бути нескінченними). Якщо набори векторів  $\{|a_m\rangle^{(1)}\}$  і  $\{|b_n\rangle^{(2)}\}$  охоплюють векторні простори станів окремих компонентів, то добуток векторів вигляду (3.62) охоплює векторний простір станів композитної системи.

Нехай  $\{A_i^{(1)}\}$  та  $\{B_j^{(2)}\}$  будуть наборами операторів, що представляють спостережні величини для компонентів 1 і 2 відповідно. Оператор з першого набору діє лише на перший множник у (3.62), тоді як оператор з другого набору діє лише на другий множник:

$$\begin{aligned} A_i^{(1)}|a_m, b_n\rangle &= (A_i^{(1)}|a_m\rangle^{(1)}) \otimes |b_n\rangle^{(2)}, \\ B_j^{(2)}|a_m, b_n\rangle &= |a_m\rangle^{(1)} \otimes (B_j^{(2)}|b_n\rangle^{(2)}). \end{aligned}$$

Також ми можемо дати означення добутку Кронекера для операторів:

$$(A_i^{(1)} \otimes B_j^{(2)})|a_m, b_n\rangle = (A_i^{(1)}|a_m\rangle^{(1)}) \otimes (B_j^{(2)}|b_n\rangle^{(2)}).$$

У таких позначеннях оператор, що має відношення винятково до компонента 1, записується, як  $A_i^{(1)} = A_i \otimes I$ , а відповідний оператор для компонента 2 — як  $B_j^{(2)} = I \otimes B_j$ . Істотно те, що таке позначення дає ясно зрозуміти, на який множник із добутку векторів діє той або інший оператор. А в якому вигляді це записувати — через верхні індекси ( $A^{(1)}$ ,  $B^{(2)}$ ) чи через положення відносно знаку добутку „ $\otimes$ “ ( $A \otimes I$ ,  $I \otimes B$ ) — питання смаку. Зазвичай ми надаватимемо перевагу першому способу. Певна річ, не всі важливі для нас оператори мають таку просту форму; зокрема, оператор взаємодії між двома компонентами нетривіально впливає на обидва множника.

Спільні вектори вигляду (3.62) утворюють повний набір, а отже, оператори  $A^{(1)}$  і  $B^{(2)}$  мають комутувати:  $[A_i^{(1)}, B_j^{(2)}] = 0$  для всіх  $i$  та  $j$ . Зокрема, оператори положення, імпульсу та спіну для частки 1 комутують з відповідними операторами для частки 2.

Ці властивості операторів, належних до окремих компонентів, також притамані й операторам, що пов'язані з *кінематично незалежними* (не плутайте з відсутністю взаємодії між ними) степенями свободи, навіть якщо вони фізично невідокремлювані. Така незалежність існує між орбітальними змінними (положенням та імпульсом) і внутрішніми степенями свободи (спін); вона виявилася природним чином при розгляді Випадку (ii) з § 3.4 і насправді є складовою самого означення внутрішніх степенів свободи. Також ця незалежність має місце для різних координатних компонентів частки; вона є наслідком нашого припущення при запровадженні оператора положення в (3.36). З фізичного погляду, це еквівалентно припущенню, що можна приготувати стан, який локалізує частку в довільно малій ділянці простору довкола певної точки. (Таке припущення неприйнятне в релятивістській квантовій теорії, але тут ми її не розглядатимемо.)

Кожному приготуванню станів для двокомпонентної системи має відповідати спільний розподіл імовірності. Якщо приготування компонентів 1 і 2 незалежні і не впливають одне на одне, то спільний розподіл імовірності для спостережних  $\mathcal{A}$  і  $\mathcal{B}$ , що описуються операторами  $A^{(1)}$  і  $B^{(2)}$ , має задовольняти умові *статистичної незалежності* (1.52). Якщо стан представлено у вигляді добутку  $|\Psi\rangle = |\psi\rangle^{(1)} \otimes |\phi\rangle^{(2)}$ , то спільний розподіл імовірності для  $\mathcal{A}$  і  $\mathcal{B}$ , отриманий з (2.28), є

$$\begin{aligned} \text{Prob}\{(\mathcal{A} = a_m) \& (\mathcal{B} = b_n) | \Psi\} &= |\langle a_m, b_n | \Psi \rangle|^2 = \\ &= |\langle a_m | \psi \rangle^{(1)}|^2 |\langle b_n | \phi \rangle|^{(2)2}, \end{aligned} \quad (3.63)$$

що задовольняє (1.52). Таке розкладення на множники утримується і в загальнішому випадку, коли стан, не обов'язково чистий, представлено у вигляді операторного добутку  $\rho = \rho^{(1)} \otimes \rho^{(2)}$ . Зазначимо, що такий факторизований, або *некорельований*, стан є дуже особливим типом стану, що відповідає незалежним приготуванням відокремлених компонентів. Повну класифікацію всіх можливих типів станів для композитних систем буде проведено в § 8.3.

### § 3.6. Квантування класичної системи

У цьому параграфі ми коротко порівняємо розглянутий вище метод отримання операторів для конкретних динамічних змінних зі старішим методом, ґрунтований на формулюванні класичної механіки через *дужки Пуасона*. Такі дужки для двох функцій  $r(q, p)$  і  $s(q, p)$  від узагальнених координат  $q_i$  та імпульсів  $p_i$  означено, як

$$\{r, s\} = \sum_j \left[ \frac{\partial r}{\partial q_j} \frac{\partial s}{\partial p_j} - \frac{\partial r}{\partial p_j} \frac{\partial s}{\partial q_j} \right].$$

З формально-алгебраїчного погляду вони мають багато спільних рис із операторними комутаторами в квантовій механіці. Зокрема, класичне співвідношення  $\{q_\alpha, p_\beta\} = \delta_{\alpha\beta}$  відповідає квантовомеханічному  $[Q_\alpha, P_\beta] = i\hbar\delta_{\alpha\beta}$ . Ця аналогія наводить на думку про існування правила, за яким кожній класичній функції  $r(q, p)$  призначається такий квантово-механічний оператор  $O(r)$ , що для нього виконується співвідношення

$$[O(r), O(s)] = i\hbar O(\{r, s\}).$$

Таке загальне правило підстановки  $r(q, p) \rightarrow O(r)$  відоме, як *квантування класичних систем*.

Є два істотні заперечення проти такого методу квантування. Перше з них епістемологічне. Якщо рівняння квантової механіки можна отримати з класичної за правилом підстановки, то квантова теорія має логічно міститися в класичній механіці, з єдиним ключем  $r(q, p) \rightarrow O(r)$  для її прочитання. А це видається неможливим, бо квантова теорія є загальнішою за своїм фізичним змістом, ніж класична теорія, результати якої можна отримати, як граничний випадок квантової — та аж ніяк не навпаки.

Зате наш метод отримання операторів для динамічних змінних не ґрунтується на „квантуванні“ класичної теорії. І хоча ми вдавалися до аналогій з класичними виразами для імпульсу та кінетичної енергії, щоб інтерпретувати окремі оператори, але саме виведення цих операторів цілком базувалося на квантовомеханічних принципах, без застосування рівнянь класичної механіки.

Друге заперечення проти квантування класичних систем має формальну природу. Рівняння в дужках Пуасона не залежать від конкретного вибору узагальнених координат, тому було б бажано, щоб правило підстановки операторів так само не залежало від вибору координат. Крім

того, якщо  $r(q, p)$  відображено на оператор  $O(r)$ , то з міркувань узгодженості хотілося б, щоб і класичну функція  $f(r(q, p))$  було відображено на таку ж функцію від оператора —  $f(O(r))$  за означенням (1.28) або (1.38). Проте низка теорем доводить неможливість загальних правил квантування, що задовольняють таким умовам. Детально про ці теореми див. у Абрагама і Марсдена [1], Аренса і Бабіта [4], Маржено і Коена [121].

Наше правило, ґрунтоване на симетрії простору-часу, не дає загального правила призначення операторів для довільних класичних функцій від координат та імпульсу. Але видається, що теорія не дуже страждає через відсутність такого правила, оскільки формула (3.60) є найзагальнішим випадком, який зустрічається на практиці.

### § 3.7. Рівняння руху

Залежність від часу було запроваджено в теорію, коли ми визначили оператор швидкості (3.39), скориставшись диференціальним рівнянням руху для вектора стану:

$$\frac{d}{dt}|\Psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar}H(t)|\Psi(t)\rangle. \quad (3.64)$$

Якщо взяти початковий вектор стану в момент часу  $t = t_0$ , то рішення цього рівняння можна формально виразити через оператор еволюції:

$$|\Psi(t)\rangle = U(t, t_0)|\Psi(t_0)\rangle. \quad (3.65)$$

Він задовольняє такому ж диференційному рівнянню, що й для  $|\Psi(t)\rangle$ ,

$$\frac{d}{dt}U(t, t_0) = -\frac{i}{\hbar}H(t)U(t, t_0), \quad (3.66)$$

з початковою умовою  $U(t, t_0) = 1$ . Із (3.66) випливає, що

$$\frac{d}{dt}(U^\dagger U) = -\frac{i}{\hbar}(U^\dagger H^\dagger U - U^\dagger H U).$$

Якщо  $H^\dagger(t) = H(t)$ , то права частина рівняння тотожно обертається на нуль, і тоді ми маємо  $U^\dagger U = 1$  для всіх моментів часу. Отже,  $U(t, t_0)$  є унітарним за умови ермітовості  $H(t)$ .

Якщо  $H$  не залежить від часу, то

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

Якщо ж  $H(t)$  є залежним від часу, то, в загальному випадку, не існує простої й компактної форми для вираження  $U(t, t_0)$ .

Далі виведемо рівняння руху для оператора стану. Оскільки будь-який чистий стан, за означенням, можна записати у вигляді  $\rho(t) = |\Psi(t)\rangle\langle\Psi(t)|$ , то з (3.65) випливає

$$\rho(t) = U(t, t_0) |\Psi(t_0)\rangle\langle\Psi(t_0)| U^\dagger(t, t_0),$$

а отже,

$$\rho(t) = U(t, t_0) \rho(t_0) U^\dagger(t, t_0). \quad (3.67)$$

Диференціювання цього виразу за допомогою (3.66), дає рівняння

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [H(t), \rho(t)]. \quad (3.68)$$

Рівняння (3.67) і (3.68) було отримано для чистих станів, але ми припустимо, що вони виконуються для всіх станів. Для такого припущення є всі підстави, оскільки будь-який загальний стан можна виразити через суміш чистих станів, а якщо рівняння (3.68) справедливе для всіх складових  $\rho(t)$ , то воно буде справедливим і для суми. Проте, як ми відзначали в § 2.3, інтерпретація такої „суміші“ неоднозначна, тому наведені аргументи хоч і вагомі, але не беззаперечні.<sup>10</sup>

Фізичний сенс квантової теорії пов'язаний не з операторами та векторами, а з розподілом імовірності для спостережних величин, зокрема, з їх середніми значеннями. Залежність від часу середнього значення спостережної  $\mathcal{R}$ , представлені оператором  $R$ , має вигляд

$$\langle\mathcal{R}\rangle_t = \text{Tr}\{\rho(t) R\}. \quad (3.69)$$

Підставляючи (3.67) у (3.69) і використовуючи інваріантність сліду добутку кількох операторів відносно циклічних перестановок множників, ми отримуємо два еквівалентні вирази:

$$\langle\mathcal{R}\rangle_t = \text{Tr}\{U(t, t_0) \rho_0 U^\dagger(t, t_0) R\} = \quad (3.70a)$$

$$= \text{Tr}\{\rho_0 U^\dagger(t, t_0) R U(t, t_0)\}. \quad (3.70b)$$

Тут оператор стану в момент  $t = t_0$  позначено, як  $\rho(t_0) = \rho_0$ . Із цих двох виразів випливають два різні формалізми для часової залежності в квантовій механіці.

<sup>10</sup>Тут перекладач не може втриматися від коментаря. Попри всю спірність і неоднозначність фізичної інтерпретації, є об'єктивний математичний факт, що будь-який оператор стану можна виразити через суму операторів чистих станів, і з цього факту суто математично виводиться справедливність рівняння (3.68) у загальному випадку.

**Картина Шродінгера.** В цьому підході, до якого ми неявно вдавалися досі, часову залежність покладено на оператор стану. Перші три множники під слідом у (3.70а) розглядаються, як залежний від часу оператор стану з виразу (3.67). Рівнянням руху в картині Шродінгера є (3.68) для оператора стану або (3.64) для вектора  $|\Psi(t)\rangle$  у випадку чистого стану.

**Картина Гайзенберга.** В цьому підході ми збираємо останні три оператори в (3.70b) разом і пишемо

$$\langle \mathcal{R} \rangle_t = \text{Tr}\{\rho_0 R_H(t)\}, \quad (3.70)$$

де  $R_H(t)$  визначено, як

$$R_H(t) = U^\dagger(t, t_0) R U(t, t_0). \quad (3.71)$$

(Він називається *гайзенберговим оператором*, відповідним шродінгеровому операторові  $R$ .) У цьому формалізмі стани не залежать від часу, а вся часова залежність покладається на динамічні змінні. Диференціюючи за  $t$  і використовуючи (3.66), отримуємо

$$\frac{dR_H}{dt} = \frac{i}{\hbar} (U^\dagger H R U - U^\dagger R H U) + U^\dagger \frac{\partial R}{\partial t} U.$$

Це можна переписати у стандартному вигляді рівняння руху Гайзенберга:

$$\frac{dR_H(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [H_H(t), R_H(t)] + \left( \frac{\partial R}{\partial t} \right)_H, \quad (3.72)$$

де ми запровадили позначення  $H_H = U^\dagger H U$  за аналогією з (3.72). Останній доданок,  $(\partial R / \partial t)_H = U^\dagger(t, t_0) (\partial R / \partial t) U(t, t_0)$ , якщо оператор  $R$  має власну часову залежність. Це може бути у випадку, якщо він представляє потенціал змінного зовнішнього поля, або тоді, коли є компонентом тензора, визначеного відносно рухомої системи координат.

У картині Гайзенберга оператори динамічних змінних розвиваються в часі, тоді як функція стану ( $\rho$  або  $\Psi$ ) описує початкові дані, забезпечені процедурою приготування стану. В картині Шродінгера функція стану має виконувати обидві ролі. Ці картини еквівалентні, бо фізично істотна величина  $\langle \mathcal{R} \rangle_t$  залежить лише від відносного руху  $\rho$  і  $R$ . І немає значення, чи то  $\rho$  рухається „вперед“ (картина Шродінгера), чи то  $R$  рухається „назад“ (картина Гайзенберга). Таку різницю в напрямках руху спричинюють протилежні знаки перед комутаторами в (3.68) і (3.73). Має бути

очевидним, що ці два рівняння взаємовиключні й ніколи не повинні застосовуватися разом. Можна користуватися картиною Шродінгера, можна — картиною Гайзенберга, але не можна працювати з обома одночасно.

Швидкість зміни середнього значення спостережної має однаковий вигляд в обох картинах. Із (3.69) картини Шродінгера ми отримуємо

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle\mathcal{R}\rangle_t &= \text{Tr}\left[\frac{\partial\rho}{\partial t}R + \rho\frac{\partial R}{\partial t}\right] = \\ &= \text{Tr}\left[-\frac{i}{\hbar}(H\rho R - \rho HR) + \rho\frac{\partial R}{\partial t}\right] = \\ &= \text{Tr}\left[-\frac{i}{\hbar}(\rho RH - \rho HR) + \rho\frac{\partial R}{\partial t}\right].\end{aligned}$$

Тому маємо

$$\frac{d}{dt}\langle\mathcal{R}\rangle_t = \text{Tr}\left[\frac{i}{\hbar}\rho(t)[H, R] + \rho(t)\frac{\partial R}{\partial t}\right] \quad (3.73)$$

у картині Шродінгера.

З іншого боку, рівняння (3.70) картини Гайзенберга дає

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle\mathcal{R}\rangle_t &= \text{Tr}\left[\rho_0\frac{dR_H}{dt}\right] = \\ &= \text{Tr}\left[\frac{i}{\hbar}\rho_0[H, R_H(t)] + \rho_0\left(\frac{\partial R}{\partial t}\right)_H\right].\end{aligned} \quad (3.74)$$

Для випадку *чистого стану* ми можемо переформулювати ці результати в термінах векторів стану. Нехай  $|\Psi_0\rangle$  буде вектором початкового стану при  $t = t_0$ . Тоді в картині Шродінгера

$$\langle\mathcal{R}\rangle_t = \langle\Psi(t)|R|\Psi(t)\rangle, \quad (3.75)$$

де  $|\Psi(t)\rangle = U(t, t_0)|\Psi_0\rangle$ . Підстановка цього виразу в (3.76) дає

$$\langle\mathcal{R}\rangle_t = \langle\Psi_0|U^\dagger(t, t_0) R U(t, t_0)|\Psi_0\rangle,$$

що можна записати в картині Гайзенберга, як

$$\langle\mathcal{R}\rangle_t = \langle\Psi_0|R_H(t)|\Psi_0\rangle, \quad (3.76)$$

де  $R_H(t)$  ми взяли з (3.72). Диференціювання (3.77) з урахуванням (3.73) дає

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle\mathcal{R}\rangle_t &= \langle\Psi_0|\left[\frac{dR_H(t)}{dt}\right]|\Psi_0\rangle = \\ &= \langle\Psi_0|\left[\frac{i}{\hbar}\rho_0[H, R_H(t)] + \rho_0\left(\frac{\partial R}{\partial t}\right)_H\right]|\Psi_0\rangle,\end{aligned}$$

що збігається з виразом (3.75) для чистого стану  $\rho_0 = |\Psi_0\rangle\langle\Psi_0|$ .

Таким чином, еквівалентність двох картин доведено.

### § 3.8. Симетрії та закони збереження

Нехай  $U(s) = e^{isK}$  — неперервне унітарне перетворення з генератором  $K = K^\dagger$ . [Цей оператор  $U(s)$  не слід плутати з оператором еволюції в часі  $U(t, t_0)$  із попереднього параграфа.] Кілька прикладів таких перетворень ми обговорили в § 3.3. Твердження, що гамільтонів оператор *інваріантний* відносно цього перетворення, означає, що

$$U(s) H U^{-1}(s) = H, \quad (3.77)$$

або, еквівалентно,  $[H, U(s)] = 0$ . Зробивши параметр  $s$  інфінітезимальним, щоб  $U(s) = 1 + isK + \mathcal{O}(s^2)$ , ми зведемо умову інваріантності до

$$[H, K] = 0. \quad (3.78)$$

Інваріантність  $H$  відносно неперервних перетворень  $U(s)$  для всіх  $s$  означає й інваріантність відносно інфінітезимальних, а отже, з неї випливає й комутаційне співвідношення (3.79). Зворотнє твердження також справдливе, бо  $U(s)$  є операторною функцією  $K$ , а отже, має комутувати з  $H$ . Таким чином, інваріантність відносно інфінітезимальних перетворень автоматично поширюється на всі скінченні значення  $s$ .

Для виведення корисних наслідків з інваріантності у випадку, коли  $H = H(t)$  залежить від часу, необхідно, щоб (3.78) і (3.79) виконувалися для всіх  $t$ . Але в практичних задачах, з якими нам доведеться мати справу, гамільтоніан зазвичай незалежний від часу.

Ермітові оператори перетворень симетрії часто відповідають динамічним змінним. Так, генератор просторових переміщень є оператором імпульсу, а генератор обертань — оператором моменту імпульсу. Генераторам симетрії не притамана часова залежність ( $\partial K / \partial t = 0$ ), тому з (3.74) й інваріантності  $H$  відносно перетворення, генерованого оператором  $K$ , випливає, що середнє значення відповідної динамічної змінної  $\mathcal{K}$  не залежить від часу:

$$\frac{d\langle \mathcal{K} \rangle_t}{dt} = 0. \quad (3.79)$$

Оскільки  $H$  комутує з  $K$ , то він комутує і з будь-якою функцією  $f(K)$ , а отже, не лише  $\langle \mathcal{K} \rangle$  не залежить від часу, а й  $\langle f(\mathcal{K}) \rangle$ . Для функції  $\theta(x - \mathcal{K})$ , що дорівнює 1 при додатніх аргументах і 0 при від'ємних, ми маємо  $\langle \theta(x - \mathcal{K}) \rangle = \text{Prob}(\mathcal{K} < x | \rho)$  [це було виведено в § 2.4]. Отже, за будь-яких початкових умов, розподіл імовірності  $\text{Prob}(\mathcal{K} < x | \rho)$  не залежить від часу. Така величина  $\mathcal{K}$  називається *інтегралом руху*.



Зокрема, з інваріантності  $H$  відносно просторових переміщень випливає, що *імпульс* є інтегралом руху. А інваріантність  $H$  відносно обертання робить інтегралом руху *момент імпульсу*. (Певна річ, це справедливо для замкнених систем, що не перебувають у взаємодії з іншими системами; лише тоді просторові переміщення та обертання не впливають на їхній стан.) Якщо  $H$  не залежить від  $t$  — іншими словами, якщо він інваріантний відносно часових трансляцій, — то (3.74) стверджує, що  $H$  сам по собі представляє збережену величину, що називається *енергією* системи.

Поняття *інтегралу руху* не слід плутати з поняттям *стаціонарного стану*. Припустімо, що гамільтонів оператор  $H$  не залежить від  $t$ , а вектор початкового стану є власним вектором  $H$ :  $|\Psi(0)\rangle = |E_n\rangle$  і  $H|E_n\rangle = E_n|E_n\rangle$ . Це описує стан, що має єдине значення енергії  $E_n$ . Рішенням рівняння руху (3.64) для цього випадку є просто

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-iE_nt/\hbar}|E_n\rangle. \quad (3.80)$$

Із цього результату випливає, що середнє значення будь-якої динамічної змінної  $\mathcal{R}$ ,

$$\langle \mathcal{R} \rangle = \langle \Psi(t) | \mathcal{R} | \Psi(t) \rangle = \langle E_n | \mathcal{R} | E_n \rangle,$$

не залежить від часу для такого стану. Розглядаючи функції від  $\mathcal{R}$ , ми можемо далі показати, що розподіл імовірності  $\text{Prob}(\mathcal{R} < x | \Psi)$  незалежний від часу. У *стаціонарному стані* середні значення та ймовірності для *всіх динамічних величин* не змінюються з часом, тоді як *інтеграл руху* має незалежні від часу розподіли ймовірності та середнє значення для *всіх станів*.

Розгляд інтегралів руху в стаціонарних станах дає дуже важливі наслідки. Якщо  $[K, H] = 0$ , то, за Теоремою 5 із § 1.3, ці два оператори мають повний набір власних векторів. Оскільки власні вектори оператора  $H$  описують стаціонарні стани, то їх можна приготувати таким чином (ідеться про вироджені, бо невироджені автоматично мають таку властивість), що в них і енергія, і динамічна змінна  $\mathcal{K}$  матимуть єдині значення без статистичної дисперсії. Власні значення таких інтегралів руху надзвичайно корисні для класифікації стаціонарних станів.

## Література до Розділу 3

Головним джерелом для цього розділу є роботи Т. Ф. Джордана [99] і [100].

## Задачі

**3.1.** Простір інваріантний відносно масштабних перетворень  $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}' = e^c \mathbf{x}$ , де  $c$  — певний параметр. Відповідний унітарний оператор можна записати, як  $e^{icD}$ , де  $D$  є генератором просторового масштабування. Визначте комутатор  $[D, \mathbf{P}]$  між генераторами масштабування та переміщення. (Не всі закони фізики інваріантні відносно масштабування простору, тож ця симетрія менш загальна, ніж ті, які ми розглядали в цьому розділі.)

**3.2.** Скориставшись тотожністю Якобі, покажіть, що комутатори  $[P_\alpha, P_\beta]$ ,  $[G_\alpha, G_\beta]$  і  $[J_\alpha, H]$  не мають доданків, кратних одиничному операторові.

**3.3.** Доведіть наступну тотожність, у якій  $A$  і  $B$  є операторами, а  $x$  — параметром:

$$e^{xA} B e^{-xA} = B + [A, B]x + \frac{[A, [A, B]]}{2} x^2 + \frac{[A, [A, [A, B]]]}{2} x^3 + \dots$$

**3.4.** Доведіть, що для операторів, які задовольняють умові  $e^{A+B} = e^A e^B e^{-\frac{1}{2}[A, B]}$ , виконується рівність  $[A, [A, B]] = [B, [A, B]] = 0$ .

**3.5.** Перевірте тотожність  $[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$ .

**3.6.** Перевірте виконання рінань (3.35с,d,e), якщо в них замість  $\mathbf{J}$  підставити  $\mathbf{Q} \times \mathbf{P}$ .

**3.7.** Унітарний оператор  $U(\mathbf{v}) = \exp(i\mathbf{v} \cdot \mathbf{G})$  описує миттєвий ( $t = 0$ ) наслідок перетворення до рухомої системи відліку з відносною швидкістю  $\mathbf{v}$ . Цим наслідком є

$$UVU^{-1} = \mathbf{V} - \mathbf{v}I, \quad U\mathbf{Q}U^{-1} = \mathbf{Q}.$$

Знайдіть такий генератор  $\mathbf{G}_t$ , що унітарний оператор  $U(\mathbf{v}, t) = \exp(i\mathbf{v} \cdot \mathbf{G}_t)$  даватиме повне перетворення Галілея:

$$UVU^{-1} = \mathbf{V} - \mathbf{v}I, \quad U\mathbf{Q}U^{-1} = \mathbf{Q} - \mathbf{v}tI.$$

Переконайтеся, що  $\mathbf{G}_t$  задовольняє таким самим комутаційним співвідношенням із  $\mathbf{P}$ ,  $\mathbf{J}$  і  $H$ , як і  $\mathbf{G}$ .

**3.8.** Знайдіть оператор положення в картині Гайзенберга  $\mathbf{Q}_H(t)$  для вільної частки.

**3.9.** Скориставшись рівнянням руху для оператора стану  $\rho(t)$ , покажіть, що чистий стан ніколи не перейде в змішаний і навпаки.

**3.10.** Якщо гамільтоніан має вигляд  $H = H_0 + H_I$ , то можна отримати так звану *картину взаємодії*, шляхом наступних перетворень станів і динамічних змінних картини Шродінгера:

$$\begin{aligned} |\Psi_I(t)\rangle &= \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(t - t_0)H_0\right\} |\Psi_s(t)\rangle, \\ \rho_I(t) &= \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(t - t_0)H_0\right\} \rho_s(t) \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}(t - t_0)H_0\right\}, \\ R_I(t) &= \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(t - t_0)H_0\right\} R_s \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}(t - t_0)H_0\right\}. \end{aligned}$$

Знайдіть рівняння руху для вектора стану  $|\Psi_I(t)\rangle$  та оператора стану  $\rho_I(t)$  і покажіть, що воно визначає часову залежність лише щодо члена „взаємодії“  $H_I$ . Далі покажіть, що середнє значення спостережної величини  $\mathcal{R}$ , представлені оператором  $R$ , у картині взаємодії має таку ж залежність від часу, як і в картинах Шродінгера й Гайзенберга.

**3.11.** Добуток Кронекера двох матриць  $M = A \otimes B$  визначається через його матричні елементи, як  $M_{\alpha\gamma, \beta\delta} = A_{\alpha\beta} B_{\gamma\delta}$ , де рядки позначено парами  $\alpha\gamma$ , а стовпці —  $\beta\delta$ . Покажіть, що слід цієї матриці задовольняє співвідношенню  $\text{Tr } M = (\text{Tr } A)(\text{Tr } B)$ .

**3.12.** Нехай гамільтоніан двокомпонентної системи має вигляд  $H = H_1 \otimes I + I \otimes H_2$  (тобто, між ними відсутня взаємодія). Покажіть, що відповідним оператором еволюції є  $U(t) = U_1(t) \otimes U_2(t)$ , де  $U_1(t) = \exp(-itH_1/\hbar)$  і  $U_2(t) = \exp(-itH_2/\hbar)$ .

## Розділ 4

# Координатне представлення та його застосування

### § 4.1. Координатне представлення

Для утворення конкретного *представлення* абстрактного векторного простору, обирається повний ортонормований базис  $\{|u_i\rangle\}$ , і довільний вектор  $|\psi\rangle$  представляється через набір коефіцієнтів  $\{c_i\}$ , для яких  $|\psi\rangle = \sum_i |u_i\rangle c_i$ . Ці коефіцієнти  $c_i = \langle u_i | \psi \rangle$  можна розглядати, як вектор-стовпець (можливо, нескінченновимірний) за умови, що ортонормований базис дискретний.

*Координатне представлення* отримують при виборі базисом набору власних векторів  $\{|\mathbf{x}\rangle\}$  оператора положення вільної частки (3.36). Оскільки це неперервний набір (елементи якого належать не до самого гільбертового простору, а до розширеного простору  $\Omega^\times$ ), то коефіцієнти розкладення утворюють не дискретну послідовність, а функцію неперервної змінної  $\psi(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | \psi \rangle$ . Відповідно до узагальненої спектральної теореми (§ 1.4), будь-який вектор  $|\psi\rangle$  з області визначення оператора  $\mathbf{Q}$  можна записати у вигляді

$$|\psi\rangle = \sum_{\mathbf{x}} |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x} | \psi \rangle = \int |\mathbf{x}\rangle \psi(\mathbf{x}) d^3\mathbf{x},$$

а отже,

$$\langle \psi | \psi \rangle = \int \psi^*(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) d^3\mathbf{x} = \int |\psi(\mathbf{x})|^2 d^3\mathbf{x}.$$

Оскільки  $|\psi\rangle$  належить до гільбертового простору, то  $\langle \psi | \psi \rangle < \infty$ , а звідси випливає, що  $\psi(\mathbf{x})$  належить до гільбертового простору квадратично інтегрованих функцій у тривимірному просторі, який у математиці позначається  $L^2(\mathbb{R}^3)$ . За великим рахунком, це лише питання смаку — говорити, що ці функції утворюють представлення лінійного простору векторів стану, чи вважати, що сам лінійний простір складається з функцій  $\psi(\mathbf{x})$ .

Дія оператора  $A$  у просторі функцій співвідноситься з його дією в абстрактному векторному просторі за правилом

$$A\psi(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | A | \psi \rangle, \quad \text{де } \psi(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | \psi \rangle. \quad (4.1)$$

Для простоти ми вживатимемо однакові символи для позначення операторів у абстрактному векторному просторі і в конкретному просторі функцій. Застосування (4.1) до *оператора положення*  $Q_\alpha$  з використанням (3.36) дає  $\langle \mathbf{x} | Q_\alpha | \psi \rangle = x_\alpha \langle \mathbf{x} | \psi \rangle$  тому його дія в просторі функцій полягає в простому множенні на координату положення:

$$Q_\alpha \psi(\mathbf{x}) = x_\alpha \psi(\mathbf{x}). \quad (4.2)$$

Вигляд *оператора імпульсу* визначається його роллю, як генератора просторових переміщень (3.40):  $\exp(-i\mathbf{a} \cdot \mathbf{P}/\hbar)|\mathbf{x}\rangle = |\mathbf{x} + \mathbf{a}\rangle$  (константу  $\hbar$  запроваджено наприкінці § 3.4). Тоді маємо

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x} + \mathbf{a} | \psi \rangle &= \langle \mathbf{x} | \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{a} \cdot \mathbf{P}\right) | \psi \rangle = \\ &= \langle \mathbf{x} | \left(1 + \frac{i}{\hbar} \mathbf{a} \cdot \mathbf{P}\right) | \psi \rangle + \mathcal{O}(a^2). \end{aligned}$$

Тому, згідно з (4.1),

$$\psi(\mathbf{x} + \mathbf{a}) = \psi(\mathbf{x}) + \left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{a} \cdot \mathbf{P}\right) \psi(\mathbf{x}) + \mathcal{O}(a^2).$$

Нехай інфінітезимальне переміщення  $\mathbf{a}$  буде спрямоване вздовж осі  $\alpha$ . Тоді

$$\frac{\psi(\mathbf{x} + \mathbf{a}) - \psi(\mathbf{x})}{|\mathbf{a}|} = \frac{i}{\hbar} P_\alpha \psi(\mathbf{x}) + \frac{\mathcal{O}(a^2)}{|\mathbf{a}|}.$$

А оскільки ліва частина цієї рівності в межі  $|\mathbf{a}| \rightarrow 0$  дає  $\partial\psi(\mathbf{x})/\partial x_\alpha$ , то

$$P_\alpha = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_\alpha}, \quad \mathbf{P} = -i\hbar \nabla \quad (4.3)$$

є формою оператора імпульсу в координатному представленні.

Треба зазначити, що перше рівняння в (4.3) справедливе лише для декартових координат. Імпульс, спряжений до довільних узагальнених координат  $q$ , загалом *не має* вигляду  $-i\hbar\partial/\partial q$ . Це можна проілюструвати, виразивши скалярний оператор  $\mathbf{P} \cdot \mathbf{P} = -\hbar^2 \nabla^2$  у сферичних координатах і записавши його, як  $\mathbf{P} \cdot \mathbf{P} = P_r^2 + L^2 r^{-2}$ , де оператор  $P_r$  включає  $\partial/\partial r$ , а оператор  $L$  —  $\partial/\partial\theta$  і  $\partial/\partial\phi$ ; і таким способом ми зможемо отримати, що  $P_r = -i\hbar r^{-1}(\partial/\partial r)r$ . Явно привілейований статус прямокутних компонентів оператора імпульсу походить з їхньої ролі генераторів перетворень просторової симетрії. Комутаційним співвідношенням  $[x, P_x] = i\hbar$  задовольняє будь-який оператор вигляду  $P_x = -i\hbar[g(x)]^{-1}(\partial/\partial x)g(x)$ . Проте простір інваріантний відносно переміщень  $x \rightarrow x + a$ , тож генератор цих перетворень  $P_x$  повинен мати інваріантну форму відносно

$x \rightarrow x + a$ . Отже, має бути  $g(x) = 1$ . Жодного такого аргументу не можна навести на користь довільної узагальненої системи координат. Зокрема, для радіальних координат перетворення  $r \rightarrow r + a$  не є просторовою симетрією, бо це утворює розрив довкола точки  $r = 0$ . Тому від самого початку не було підстав очікувати, що  $P_r$  матиме вигляд  $-i\hbar\partial/\partial r$ .

## § 4.2. Хвильове рівняння та його інтерпретація

Рівняння руху для чистого стану має вигляд  $H|\Psi(t)\rangle = i\hbar(\partial/\partial t)|\Psi(t)\rangle$ . Найзагальнішою формою гамільтоніана  $H$  для безспінової частки, відповідно до (3.60), є сума операторів потенційної та кінетичної енергії. За відсутності векторного потенціалу (отже, без магнітного поля) оператор кінетичної енергії частки з масою  $m \in \mathbf{P} \cdot \mathbf{P}/2m = (-i\hbar^2/2m)\nabla^2$ . Для частки у скалярному потенціалі  $W(\mathbf{x})$  рівняння руху в координатному представленні є *хвильовим рівнянням Шродінгера*:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + W(\mathbf{x}) \right] \Psi(\mathbf{x}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{x}, t). \quad (4.4)$$

Позаяк (4.4) має математичну форму хвильового рівняння, дуже спокливно інтерпретувати хвильову функцію, як фізичне поле або „хвилю“, що поширюється в тривимірному просторі. Крім того, може видатися дуже правдоподібним припущення, що хвильове поле безпосередньо пов'язане з часткою — і, навіть, що частку можна ототожнити з локалізованим у просторі хвильовим пакетом, утвореним із елементарних рішень цього рівняння. Для попередження такого хибного тлумачення ми негайно узагальнимо (4.4) для багаточасткових систем.

Для отримання координатного представлення системи  $N$  часток треба обрати за базис спільні власні вектори операторів положення  $\mathbf{Q}^{(1)}, \mathbf{Q}^{(2)}, \dots, \mathbf{Q}^{(N)}$ . Як було обговорено в § 3.5, ці власні вектори мають вигляд добутку  $|\mathbf{x}^{(1)}, \dots, \mathbf{x}^{(N)}\rangle = |\mathbf{x}^{(1)}\rangle \otimes \dots \otimes |\mathbf{x}^{(N)}\rangle$ . Тоді вектор стану  $|\Psi\rangle$  буде представлено у вигляді „хвильової“ функції багатьох змінних:

$$\langle \mathbf{x}^{(1)}, \dots, \mathbf{x}^{(N)} | \Psi \rangle = \Psi(\mathbf{x}^{(1)}, \dots, \mathbf{x}^{(N)}). \quad (4.5)$$

Гамільтоніан системи є сумою кінетичних та потенційних енергій окремих часток і скалярного потенціалу міжчасткової взаємодії  $V(\mathbf{x}^{(1)}, \dots, \mathbf{x}^{(N)})$ .

Таким чином, рівняння руху набуває вигляду

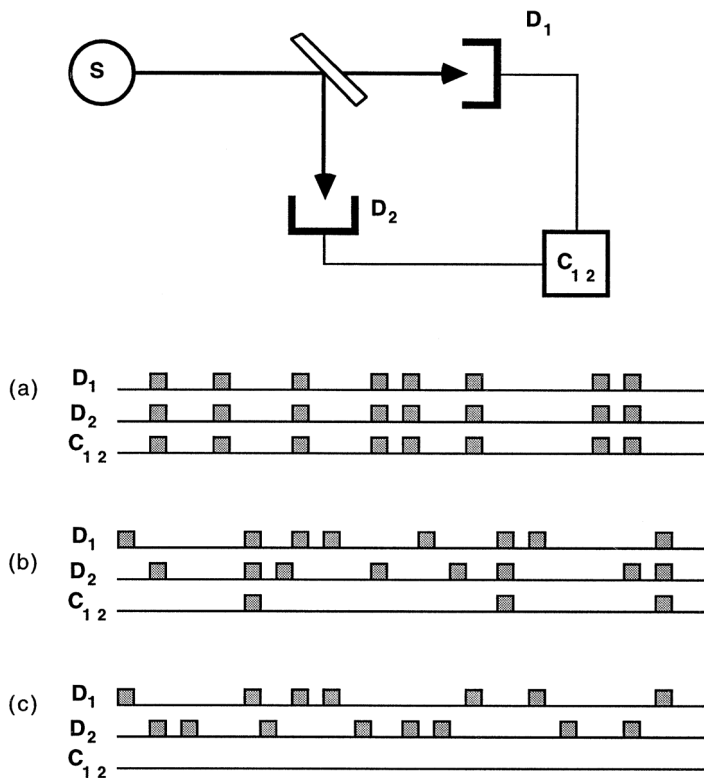
$$\left[ -\sum_{n=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_n} \nabla_n^2 + \sum_{n=1}^N W(\mathbf{x}^{(n)}) + V(\mathbf{x}^{(1)}, \dots, \mathbf{x}^{(N)}) \right] \Psi(\mathbf{x}^{(1)}, \dots, \mathbf{x}^{(N)}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{x}^{(1)}, \dots, \mathbf{x}^{(N)}, t). \quad (4.6)$$

$N$ -часткове рівняння (4.6) робить неприйнятними деякі з тлумачень, що здавалися правдоподібними для (4.4). Якби фізичне хвильове поле було пов'язане з часткою або ж частка ототожнювалася з хвильовим пакетом, то у випадку  $N$  часток ми б отримали  $N$  взаємодіючих хвиль у тривимірному просторі. Але, згідно з (4.6), це не той випадок — натомість ми маємо одну „хвильову“ функцію в абстрактному  $3N$ -вимірному конфігураційному просторі. Хибна інтерпретація  $\Psi$ , як хвилі в звичайному просторі, виявилася можливою лише тому, що більшість типових застосувань квантової механіки мають справу з одночастковими станами, для яких конфігураційний простір та звичайний простір ізоморфні.

Коректна інтерпретація  $\Psi$  полягає в її розгляді, як статистичної функції, з якої можна обчислити розподіли ймовірності для всіх спостережних величин. Зокрема, з рівняння (2.30) випливає, що  $|\Psi(\mathbf{x}^{(1)}, \dots, \mathbf{x}^{(N)})|^2$  є питомою ймовірністю в конфігураційному просторі, що частка 1 перебуває в положенні  $\mathbf{x}^{(1)}$ , частка 2 — в положенні  $\mathbf{x}^{(2)}$ , ..., а частка  $N$  — у положенні  $\mathbf{x}^{(N)}$ .

Необхідність суто статистичної інтерпретації хвильової функції можна продемонструвати в експерименті, схематично зображеному на Рис. 4.1, у якому частки спрямовуються на напівпрозорий, напівдзеркальний бар'єр. Пропущені крізь нього та відбиті ним частки потрапляють на детектори  $D_1$  і  $D_2$  відповідно. Потенціал  $W(\mathbf{x})$  бар'єра такий, що вхідний хвильовий пакет [рішення рівняння (4.4)] поділяється на два окремі хвильові пакети — відбитий і пропущений. (Такий потенціал легко створити в одному вимірі. Л. Шіф у [161], стор. 106–109, показав серії згенерованих комп'ютером зображень поширення двох хвильових пакетів.) Для простоти аналізу припустимо, що сумарні інтенсивності обох хвильових пакетів однакові.

Вважатимемо, що дію джерела  $S$  можна описати, як емісію ідентичних нормалізованих хвильових пакетів у випадкові моменти часу із середньою швидкістю  $r$  на секунду, але не більше, ніж одну, за певний малий інтервал  $\Delta t \ll 1/r$ . Тоді ймовірність емісії пакету впродовж довільного відрізка часу такої тривалості є  $p = r\Delta t$ . Впродовж кожного такого інтервалу кожен з двох детекторів може зареєструвати, а може й не зареє-



**Рис. 4.1.** Очікувані результати експерименту з виявлення синхронності подій, відповідно до інтерпретацій (a), (b) і (c), обговорених у тексті.

єструвати потрапляння хвильового пакету. Якщо обидва детектори,  $D_1$  і  $D_2$ , спрацюють за цей за цей час, то така синхронна подія також реєструється й лічильником  $C_{12}$ . Тепер ми дослідимо очікувані результати для трьох різних інтерпретацій.

- (a) Вважатимемо, що хвильовий пакет  $i \in$  часткою. Оскільки на бар'єрі пакет ділиться навпіл, то, згідно з рішенням рівняння (4.4), обидва детектори спрацюватимуть одночасно, реєструючи дві порції розділеного пакету. Отже, записи лічильників  $D_1$ ,  $D_2$  і  $C_{12}$  будуть ідентичними, як показано на графіку (a) Рис. 4.1.
- (b) Вважатимемо хвильову функцію з (4.4) фізичним полем у звичайному просторі, яке, однак, не можна спостерігати безпосередньо. Менше з тим, воно призводить до спостережних ефектів через стохастичний вплив на датчики, імовірність спрацювання яких про-



порційна інтегралові від  $|\Psi(\mathbf{x}, t)|^2$  по активному об'єму детектора. Оскільки ймовірність емісії протягом інтервалу  $\Delta t \in p = r\Delta t$  і оскільки початковий хвильовий пакет ділиться нарівно між відбитим і пропущеним компонентами, то ймовірність спрацьовування  $D_1$  впродовж відрізка часу  $\Delta t$  дорівнює  $p/2$ ; і так само це справедливо для детектора  $D_2$ . Якщо детектори розташовано досить далеко один від одного, щоб розділені хвильові пакети не перекривалися, то спрацьовування  $D_1$  і  $D_2$  мають бути незалежними подіями. Тоді ймовірність, що вони спрацюють синхронно, буде

$$c = \frac{p^2}{4}, \quad (4.7)$$

як показано на графіку (b) Рис 4.1.

- (с) Вважатимемо, нарешті, що випущений джерелом  $S$  об'єкт є окремою часткою, а  $|\Psi(\mathbf{x}, t)|^2$  — питома ймовірність того, що в момент  $t$  вона перебуватиме в точці  $\mathbf{x}$ . Оскільки частка не може перебувати в двох місцях відразу, спрацьовування  $D_1$  і  $D_2$  у той самий час є взаємовиключними подіями. Таким чином, ймовірність синхронного спрацьовування буде нульовою, як показано на графіку (с) Рис. 4.1.

Хоча цей експеримент цілком реальний і має велике значення для інтерпретації квантової механіки, його навряд чи буде проведено для електронів або інших масивних часток. А проте, аналогічний дослід для фотонів було здійснено Клаузером (1974, [39]), і отриманий ним результат виявився сумісним лише з інтерпретацією (с).

## § 4.3. Перетворення Галілея для рівняння Шродінгера

У Розділі 3 ми застосували вимогу інваріантності відносно просторово-часових перетворень симетрії для виведення базових операторів та рівнянь квантової механіки, тому нема жодних причин сумніватися в тому, що вигляд рівняння Шродінгера буде інваріантний відносно цих перетворень. А проте, буде корисно показати його інваріантність у явному вигляді й zarazом продемонструвати нетривіальне перетворення, якого зазнає хвильова функція.

Для простоти працюватимемо лише в одному просторовому вимірі (вважаючи за промовчанням, що решта два не зазнають жодних перетворень). Розглянемо дві системи відліку —  $F$  із координатами  $x$  і  $t$ , та  $F'$  із

координатами  $x'$  і  $t'$ .  $F'$  рівномірно рухається зі швидкістю  $v$  відносно  $F$ , а отже,

$$x = x' + vt', \quad t = t'. \quad (4.8)$$

Потенційна енергія,  $W(x, t)$  у системі  $F$  і  $W'(x', t')$  у системі  $F'$ , є скалярною функцією координат, а тому, як було вказано в § 3.2, має перетворюватися за правилом

$$W'(x', t') = W(x, t). \quad (4.9)$$

У системі  $F'$  рівняння Шродінгера має вигляд

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi'}{\partial x'^2} + W'(x') \Psi'(x', t') = i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} \Psi'(x', t'), \quad (4.10)$$

де  $\Psi'(x', t')$  — хвильова функція в  $F'$ . У системі  $F$  хвильова функція буде  $\Psi(x, t)$ , і рівняння, якому вона задовольняє, має бути визначене підстановкою (4.8) і (4.9) у (4.10). Якщо воно матиме такий самий вигляд, тільки без штрихів праворуч усіх змінних, то таким чином ми продемонструємо інваріантність рівняння Шродінгера відносно перетворень Галілея.

Оскільки якобіан перетворення Галілея дорівнює одиниці (тобто, масштаб не змінюється), значення питомої ймовірності в кожній точці простору-часу повинно залишатись однаковим в обох системах відліку:

$$|\Psi(x, t)|^2 = |\Psi'(x', t')|^2, \quad (4.11)$$

а отже, має бути

$$\Psi(x, t) = e^{if} \Psi'(x', t'), \quad (4.12)$$

де  $f$  — дійсна функція координат. Диференційні оператори перетворюються, як

$$\frac{\partial}{\partial x'} = \frac{\partial}{\partial x}, \quad \frac{\partial}{\partial t'} = \frac{\partial}{\partial t} + v \frac{\partial}{\partial x}, \quad (4.13)$$

тому підстановка (4.9) і (4.12) у (4.10) дає

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + W\Psi + i\hbar \left[ \frac{\hbar}{m} \frac{\partial f}{\partial x} - v \right] \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \\ + \left[ \frac{i\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial f}{\partial x} \right)^2 - \hbar v \frac{\partial f}{\partial x} - \hbar \frac{\partial f}{\partial t} \right] \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Це рівняння можна звести до

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + W\Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) \quad (4.15)$$

лише за умови існування такої дійсної функції  $f(x, t)$ , що всі зайві доданки в (4.14) взаємно скорочуються. Таким чином, мають задовольнятися три умови:

$$\frac{\hbar}{m} \frac{\partial f}{\partial x} - v = 0, \quad (4.16a)$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = 0, \quad (4.16b)$$

$$\frac{\hbar}{2m} \left[ \frac{\partial f}{\partial x} \right]^2 - v \frac{\partial f}{\partial x} - \frac{\partial f}{\partial t} = 0. \quad (4.16c)$$

Першим двом умовам задовольняє  $f = mvx/\hbar + g(t)$ , де  $g(t)$  — довільна функція. Тоді третя умова дає

$$f(x, t) = \frac{mvx - \frac{1}{2}mv^2t}{\hbar}, \quad (4.17)$$

за винятком неістотного незмінного доданка. Те, що одна функція змогла задовольнити всім трьом умовам (4.16), виявилось можливим лише завдяки інваріантності рівняння Шродінгера відносно перетворень Галілея. Для диференційного рівняння загальнішого вигляду це не конче було б можливо.

Леві-Леблонд у статті [117] вказав, що цей результат розв'язує один невеликий парадокс. Якщо потенційна енергія тотожно нульова, рішенням (4.10) є

$$\Psi'(x', t') = e^{i(kx' - \omega t')}. \quad (4.18)$$

Це є узагальнена власна функція як оператора імпульсу, так і оператора енергії, з власними значеннями  $P = \hbar k$  і  $E = \hbar \omega = \hbar^2 k^2 / 2m$ . Тепер рівняння (4.18) має вигляд хвилі з довжиною  $\lambda = 2\pi/k$ , і таким чином ми отримали співвідношення Луї де Бройля між імпульсом та довжиною хвилі:

$$P = \frac{2\pi}{\lambda}. \quad (4.19)$$

При переході між взаємно рухомими системами  $F$  і  $F'$  довжина звичайної хвилі залишається незмінною, у чому можна перекоонатися, розглянувши їхні амплітуди в  $F$  і  $F'$ :

$$a(x, t) = a'(x', t') = a'(x - vt, t). \quad (4.20)$$

Проте імпульс зазнає перетворення  $P \rightarrow P + mv$ , і таким чином може скластися враження, ніби формула де Бройля (4.19) несумісна з інваріантністю Галілея.

Цей парадокс розв'язується на підставі того, що шродінгєрова хвилюва функція не є амплітудою класичної хвилі, тому на неї не поширюються звичні властивості хвильового руху. Зокрема, вона задовольняє не (4.20), а (4.12). Коли застосувати останній вираз до (4.18), то вийде

$$\begin{aligned}\Psi(x, t) &= e^{if(x,t)}\Psi'(x - vt, t) = \\ &= \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\hbar k + mv)x - \frac{i}{\hbar}\frac{(\hbar k + mv)^2}{2m}t\right],\end{aligned}$$

що цілковито узгоджується з перетворенням імпульсу при ґалілеєвих бустах:  $\hbar k \rightarrow \hbar k + mv$ . Отже, імпульс частки зазнає достоту таких змін, які й очікувалися. Довжина хвилі у  $\Psi$  перетворюється з дотриманням співвідношення (4.19) саме тому, що  $\Psi$  не є хвилею в звичайному класичному розумінні.

#### § 4.4. Струм імовірності

Для одночасткового стану ймовірність того, що частка перебуває всередині ділянки простору  $\Omega$  дорівнює  $\int_{\Omega} |\Psi(\mathbf{x}, t)|^2 d^3\mathbf{x}$ . Швидкість зміни цієї ймовірності можна обчислити через швидкість змін  $\Psi$  з рівняння Шродінґєра (4.4):

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \Psi^* \Psi d^3\mathbf{x} &= \int_{\Omega} \left( \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right) d^3\mathbf{x} = \\ &= \frac{i}{\hbar} \int_{\Omega} \left( \Psi^* \left[ \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - W(\mathbf{x}) \right] \Psi - \Psi \left[ \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - W(\mathbf{x}) \right] \Psi^* \right) d^3\mathbf{x} = \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \int_{\Omega} (\Psi^* \nabla^2 \Psi - \Psi \nabla^2 \Psi^*) d^3\mathbf{x} = \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \int_{\Omega} \text{div}(\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) d^3\mathbf{x}.\end{aligned}$$

Оскільки  $\Omega$  є довільною, то звідси впливає локальне рівняння

$$\frac{\partial}{\partial t} |\Psi(\mathbf{x}, t)|^2 + \text{div} \mathbf{J}(\mathbf{x}, t) = 0, \quad (4.21)$$

де

$$\begin{aligned}\mathbf{J}(\mathbf{x}, t) &= -\frac{i\hbar}{2m} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) = \\ &= \frac{\hbar}{m} \text{Im}(\Psi^* \nabla \Psi)\end{aligned} \quad (4.22a)$$

— вектор *струму ймовірності*.

Ми можемо записати  $\Psi(\mathbf{x}, t)$  через дійсні амплітуду та фазу:  $\Psi(\mathbf{x}, t) = A(\mathbf{x}, t) \exp[iS(\mathbf{x}, t)/\hbar]$ . І тоді отримаємо інший корисний вираз для струму:

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}, t) = \frac{A^2 \nabla S}{m}. \quad (4.22b)$$

Застосувавши теорему Гауса, яка пов'язує інтеграл по об'єму від дивергенції вектора з його інтегралом по площі поверхні, маємо

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} |\Psi(\mathbf{x}, t)|^2 d^3\mathbf{x} = - \oint_{\partial\Omega} \mathbf{J}(\mathbf{x}, t) \cdot d\mathbf{s}, \quad (4.23)$$

де  $\partial\Omega$  — площа границі ділянки  $\Omega$ . Швидкість зменшення ймовірності для частки перебувати всередині ділянки  $\Omega$  дорівнює витоку ймовірності через поверхню  $\partial\Omega$ .

Вектор струму ймовірності можна записати в зручній формі через оператор швидкості  $\mathbf{V} = \mathbf{P}/m = (-i\hbar/m)\nabla$ :

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}, t) = \text{Re}[\Psi^*(\mathbf{x}, t)\mathbf{V}\Psi(\mathbf{x}, t)]. \quad (4.24)$$

Якщо функція стану нормалізована на одиницю,  $\int |\Psi|^2 d^3\mathbf{x} \equiv \langle \Psi | \Psi \rangle = 1$ , то інтеграл від  $\mathbf{J}(\mathbf{x}, t)$  по всьому конфігураційному простору дає середню швидкість стану:

$$\int \mathbf{J}(\mathbf{x}, t) d^3\mathbf{x} = \langle \Psi | \mathbf{V} | \Psi \rangle.$$

Оскільки (4.4) не включає векторного потенціалу, то вираз (4.22) для струму ймовірності справедливий лише за відсутності магнітного поля. А проте, в Розділі 11 ми побачимо, що (4.23) залишається чинним і в магнітному полі.

**Приклад (і).** Розглянемо функцію стану  $\Psi = Ce^{ik \cdot \mathbf{x}}$ , яка є власною функцією оператора імпульсу (4.3). Вектор струму ймовірності,  $\mathbf{J} = |C|^2 \hbar \mathbf{k} / m$ , дорівнює питомій ймовірності  $|C|^2$ , помноженій на швидкість. Тут простежується пряма аналогія з гідродинамікою, в якій потік рідини дорівнює її густині, помноженій на швидкість. Проте така інтерпретація годиться лише для квантовомеханічного стану з однією визначеною швидкістю.

**Приклад (ii).** Розглянемо суперпозицію станів

$$\Psi = C_1 e^{ik_1 \cdot \mathbf{x}} + C_2 e^{ik_2 \cdot \mathbf{x}}.$$

Відповідний вектор струму ймовірності є

$$\mathbf{J} = \frac{\hbar}{m} [|C_1|^2 \mathbf{k}_1 + |C_2|^2 \mathbf{k}_2 + (\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) + \\ \times \{ \operatorname{Re}(C_1 C_2^*) \cos[(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{x}] - \operatorname{Im}(C_1 C_2^*) \sin[(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{x}] \}].$$

У загальному випадку струм не адитивний за доданками суперпозиції станів, хоча є виняток при  $\mathbf{k}_1 = -\mathbf{k}_2$ .

#### § 4.5. Умови для хвильових функцій

Рівняння неперервності (4.21) і (4.23) вимагають, щоб потік струму ймовірності крізь будь-яку поверхню був неперервним, бо інакше поверхня містила б витoki або стоки. І хоча ця умова стосується будь-якої поверхні, вимагаючи неперервності  $\mathbf{J}(\mathbf{x}, t)$  в кожній точці простору, на практиці вона передовсім важлива для поверхонь, що розділяють області, де потенціал має різну аналітичну форму.

Розглянемо обмеження, які накладає на  $\Psi$  умова неперервності  $\mathbf{J}$ . Хвильова функція  $\Psi = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x})$  пов'язана з вектором струму  $\mathbf{J} = |C|^2 \mathbf{k}/m$ . Може здатися, що неперервність  $\mathbf{J}$  дозволяє розриви в  $C$  і  $\mathbf{k}$  за умови, що  $|C|^2 \mathbf{k}$  залишатиметься незмінним. Загальніше, неперервність (4.22a), здавалося б, допускає компенсовану розривність у  $\Psi$  і  $\nabla\Psi$ . Проте розрив  $\Psi$  на величину  $\Delta$  в точці  $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0$  дає сингулярний внесок  $\Delta\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$  у  $\nabla\Psi$ , який жодним чином не можна компенсувати, а схожа розривність у  $\nabla\Psi$  залишає  $\Psi$  неперервною, тому для компенсації такої розривності необхідно виконання умови  $\Psi(\mathbf{x}_0) = 0$ . А за винятком цього окремого випадку, нам, для збереження неперервності  $\mathbf{J}(\mathbf{x}, t)$ , доводиться вимагати, щоб і  $\Psi$ , і  $\nabla\Psi$  були неперервними.

Згаданий виняток має місце, коли в певній області потенціал  $W(\mathbf{x})$  набуває нескінченного значення, і тоді ця область стає недоступною для частки. Для простоти розглянемо приклад такого потенціалу в одному вимірі:  $W(x) = 0$  для  $|x| < 1$  і  $W(x) = +\infty$  для  $|x| \geq 1$ . У недоступній області  $|x| \geq 1$  хвильова функція  $\Psi(x) = 0$ , тому рішення рівняння Шродінгера в доступній області  $x < 1$  має давати потрібний результат на границі з недоступною областю. Оскільки це диференціальне рівняння в просторових похідних другого порядку, то можна накласти дві граничні умови, які зазвичай обираються  $\Psi = 0$  при  $x = \pm 1$ . Проте неможливо так само накласти умову нульового значення  $\partial\Psi/\partial x$  при  $x = \pm 1$  — легко переконатися, що за такої умови рішення Шродінгера не матиме рішень.

Цю ситуацію можна краще зрозуміти, розглядаючи нескінченний потенціал, як граничну межу скінченного:  $W(x) = 0$  для  $|x| < 1$  і  $W(x) =$

$W_\infty$  для  $|x| \geq 1$ . Зв'язаними станами за такого потенціалу будуть стаціонарні рішення рівняння Шродінгера, що задовольнятимуть умові  $(-\hbar^2/2m)\partial^2\Psi/\partial x^2 + W(x)\Psi = E\Psi$  для  $E > 0$ . Це рівняння інваріантне відносно перестановки  $x \leftrightarrow -x$ , тому в разі, якщо  $\Psi(x)$  є його рішенням, то й  $\Psi(-x)$  також буде його рішенням з таким самим значенням  $E$ . Це стосується й будь-яких комбінацій вигляду  $a\Psi(x) + b\Psi(-x)$ , отже, всі лінійно незалежні рішення можна знайти, розглядаючи лише парні та непарні функції.

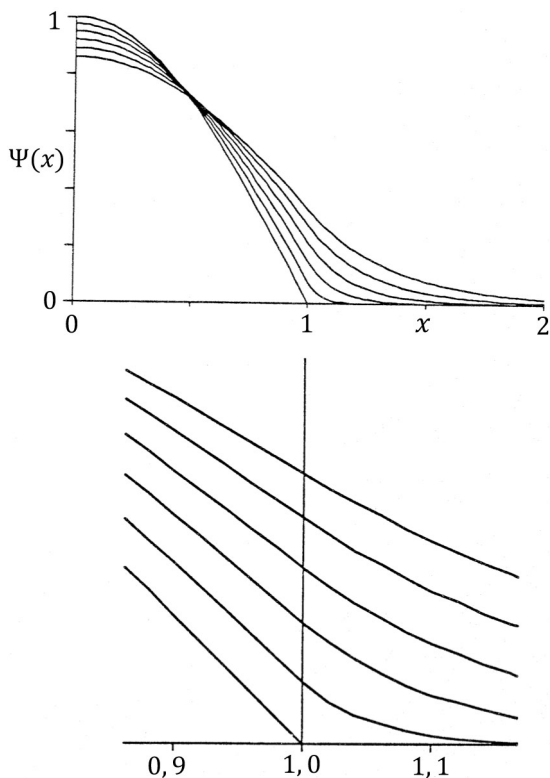
Для простоти обмежимося симетричними функціями. Для  $|x| < 1$  парне рішення має вигляд  $\Psi(x) = A \cos(kx)$ , де  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ , а для  $|x| \geq 1$  таке рішення буде  $\Psi(x) = Be^{-\alpha|x|}$ , де  $\alpha = \sqrt{2m(V_\infty - E)}/\hbar$ . Умова неперервності  $\Psi(x)$  при  $x = \pm 1$  дає  $A/B = e^{-\alpha}/\cos k$ ; а умова неперервності  $\partial\Psi/\partial x$  при  $x = \pm 1$  вимагає  $Ak \sin k = B\alpha e^{-\alpha}$ , що, з урахуванням попередньої умови, спрощується до  $k \tan k = \alpha$ . Рішення останнього рівняння дає припустимі значення  $k$ , а отже, припустимі значення енергії зв'язаного стану  $E$ . На Рис. 4.2 показано найнижчі рівні енергії для кількох значень  $V_\infty$ , які обрано так, щоб  $k$  наближалось до  $\pi/2$  через низку однакових приростів на  $\pi/40$ . Очевидно, що в межі  $V_\infty \rightarrow \infty$  у функції  $\Psi(x)$  з'являється нерегулярність при  $x = 1$ ; сама вона залишається неперервною, але її похідна зазнає розриву. Однак нульового значення  $\Psi(x)$  на нескінченному потенційному бар'єрі виявляється достатньо, щоб забезпечити неперервність (за разом і нульове значення)  $\mathbf{J}$  в цій точці. Отже, і в граничному випадку дотримується фізичний принцип неперервності струму ймовірності.

Далі розглянемо поведінку певної квантової системи в *сингулярній точці*, яку для зручності поставимо в початок координат. Нехай  $S$  — мала сфера радіуса  $r$ , що оточує цю сингулярність. Імовірність, що частка перебуває в межах  $S$ , має бути скінченною. Вважатимемо, що  $\Psi = u/r^\alpha$ , де  $u$  — гладка функція, що не дорівнює нулю при  $r = 0$ . Отже, потрібно, щоб інтеграл  $\int |\Psi|^2 d^3\mathbf{x}$  був збіжним у початку координат, звідки випливає вимога  $\alpha < 3/2$ .

Витік струму через поверхню  $S \in F = \oint_{\partial S} \mathbf{J} \cdot d\mathbf{s}$ . Він має обертатися на нуль у межі  $r \rightarrow 0$ , бо в іншому разі початок координат стане точкою стоку або витоку ймовірності. Далі, якщо  $\Psi = u/r^\alpha$ , то  $\partial\Psi/\partial r = r^{-\alpha} du/dr - \alpha u r^{-\alpha-1}$ . Другий доданок при підстановці в (4.22) скорочується, тому

$$F = r^{2-2\alpha} \left( \frac{-i\hbar}{2m} \right) \oint_{\partial S} \left( u^* \frac{\partial u}{\partial r} - u \frac{\partial u^*}{\partial r} \right) d\Omega,$$

де інтегрування проводиться за тілесним кутом. Якщо підінтегральний вираз не прагне до нуля у малій околиці точки сингулярності, то для



**Рис. 4.2.** Зв'язані стани хвильової функції в потенційній ямі  $W(x) = 0$  для  $|x| < 1$  і  $W(x) = W_\infty$  для  $|x| \geq 1$ , зі збільшеним зображенням (другий графік) в околицях точки  $x = 1$ . Криві (згори до низу) відповідають значенням  $W(x) = 9,48; 16,54; 32,7; 81,7; 361,7; \infty$ . (Одиниці виміру:  $\hbar = 2m = 1$ .)

обернення  $F$  на нуль при  $r \rightarrow 0$  потрібно, щоб  $\alpha < 1$ . Це жорсткіша умова, ніж та, яку ми отримали з аналізу питомої ймовірності. Та якщо  $u(r)$  є дійсною функцією, або інтеграл обертається на нуль з якоїсь іншої причини, то наведені міркування вже не дозволяють дійти такого висновку.

Оскільки  $|\Psi|^2$  є питомою ймовірністю, вона повинна досить швидко прагнути до нуля на нескінченності, щоб інтеграл по всьому конфігураційному простору збігався і дорівнював одиниці. Вимога, щоб  $\int |\Psi|^2 d^3\mathbf{x} \equiv \langle \Psi | \Psi \rangle = 1$  еквівалентна тому, що  $\Psi$  має належати до гільбертового простору квадратично інтегрованих функцій.

Обговорені нами умови стосуються хвильових функцій, що представляють фізично здійсненні стани, але вони не обов'язкові для власних функцій операторів спостережних величин. Такі власні функції,  $\chi(\mathbf{x})$ , відіграють роль фільтр-функцій в обчисленнях ймовірностей [див. обгово-



рення після (2.30)], і на них накладено лише умову належності до розширеного простору  $\Omega^\times$  у триплеті оснащеного гільбертового простору ( $\Omega \subset \mathcal{H} \subset \Omega^\times$ ). Як було показано в § 1.4, функція  $\chi(\mathbf{x})$  належить до  $\Omega^\times$ , якщо  $\langle \chi | \phi \rangle \equiv \int \chi^*(\mathbf{x}) \phi(\mathbf{x}) d^3\mathbf{x}$  є цілком визначеним для всіх  $\phi(\mathbf{x})$  із ядерного простору  $\Omega$ . Оскільки  $|\langle \chi | \Psi \rangle|^2$  інтерпретується, як імовірність (2.28) або питома ймовірність (2.30), то й вона має бути цілком визначеною, і це може навести на думку, що фізично здійсненні стани  $\Psi$  повинні обмежуватися не просто гільбертовим простором  $\mathcal{H}$ , а ядерним простором  $\Omega$ . Насправді така вимога надто сувора. Для функції фізичного стану  $\Psi(\mathbf{x})$  не потрібно, щоб  $\langle \chi | \Psi \rangle$  була цілком визначеною для всіх  $\chi$  із  $\Omega^\times$ , а лише для власних функцій самоспряжених операторів. Такі власні функції, як уже було показано на початку § 4.1 для оператора положення, мають відносно регулярний характер, оскільки узагальнена спектральна теорема вимагає, щоб вони утворювали повний набір, через який можна розкласти будь-який вектор з гільбертового простору. Наприклад, якщо  $\{|\chi\rangle\}$  є набором власних векторів оператора  $X$ , який представляє спостережну величину  $\mathcal{X}$ , то

$$|\Psi\rangle = \int |\chi\rangle \langle \chi | \Psi \rangle d\chi,$$

де інтегрування (або сума) проводиться по всьому спектру власних значень  $\chi$ . Таким чином,

$$\int |\langle \chi | \Psi \rangle|^2 d\chi = \langle \Psi | \Psi \rangle < \infty$$

для всіх  $|\Psi\rangle$ , що належать до області визначення оператора  $X$ . А отже,  $\langle \chi | \Psi \rangle = \int \chi^*(\mathbf{x}) \Psi(\mathbf{x}) d^3\mathbf{x}$  є цілком визначеною функцією для всіх  $\Psi(\mathbf{x})$ , які належать до області визначення  $X$ . Інша річ, що для функціонала  $\langle \chi |$  не обов'язково виконується теорема Ріса (§ 1.1), бо він може бути *необмеженим* — тобто таким, що має нескінченну норму, або, що еквівалентно, збіжність певної послідовності  $\{|\Psi_n\rangle\}$  ще не гарантує збіжності послідовності  $\{\langle \chi | \Psi_n \rangle\}$ .

## § 4.6. Власні функції оператора енергії вільних часток

Обчислення власних функцій вільного одночасткового гамільтоніана служить простою, але яскравою ілюстрацією формалізму оснащеного гільбертового простору. Рівняння на власні значення для вільної частки,  $H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$ , в координатному представленні має вигляд

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{x}) = E \Psi(\mathbf{x}). \quad (4.25)$$

Його рішення добре відомі. Розділивши змінні в декартових координатах, ми отримуємо такий набір рішень:

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}. \quad (4.26)$$

Розділення змінних у сферичних полярних координатах дає інший набір рішень (лінійно залежних від попередніх):

$$\Psi_{k\ell m} = j_{\ell}(kr) Y_{\ell}^m(\theta, \varphi), \quad (4.27)$$

де  $j_{\ell}(kr)$  — сферичні функції Беселя, а  $Y_{\ell}^m(\theta, \varphi)$  — сферичні гармоніки, з  $\ell = 0, 1, 3, \dots$ ,  $m = -\ell, -\ell + 1, \dots, \ell$ . Власні значення енергії є

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (4.28)$$

Проблема полягає в тому, що з погляду математики ці рішення справедливі для всіх комплексних значень  $k$ , а отже, і для всіх комплексних значень  $E$ . (Рішення для нецілих та комплексних значень  $\ell$  і  $m$  у полярних координатах також мають місце, але їх виключає з фізичного розгляду теорія моменту імпульсу в Розділі 6.) Крім того, неможливо вибрати прийнятні рішення, виходячи з критерію нормування  $\int |\Psi|^2 d^3\mathbf{x} = 1$ , бо інтеграл розбіжний в усіх випадках. Очевидно, що жодне рішення з цього надповного набору не належить до гільбертового простору.

Тепер розглянемо цю задачу в межах оснащеного гільбертового простору ( $\Omega \subset \mathcal{H} \subset \Omega^{\times}$ ). Ядерний простір  $\Omega$  містить такі функції  $\phi(\mathbf{x})$ , які задовольняють нескінченному набору умов  $\int |\phi(\mathbf{x})|^2 (1 + |\mathbf{x}|^2)^n d^3\mathbf{x} < \infty$  для всіх  $n = 1, 2, \dots$ . Гільбертів простір  $\mathcal{H}$  складається з ширшого класу функцій, для яких цей інтеграл має бути збіжним лише при  $n = 0$ . Розширений простір  $\Omega^{\times}$  містить такі функції  $\chi(\mathbf{x})$ , що  $\int \chi^*(\mathbf{x}) \phi(\mathbf{x}) d^3\mathbf{x}$  є збіжним для всіх  $\phi$  із  $\Omega$ . Зрозуміло, що  $\Omega$  складається з функцій, які на нескінченності прагнуть до нуля швидше за будь-який від'ємний степінь  $|\mathbf{x}|$ , тоді як  $\Omega^{\times}$  складається з функцій, що можуть бути необмеженими на нескінченності, але зростають не швидше, ніж який-небудь додатний степінь  $|\mathbf{x}|$ .

Рішення (4.26) і (4.27) з дійсними значеннями параметра  $\mathbf{k}$  задовольняють останній умові (мало того, вони взагалі обмежені на нескінченності —  $|\Psi_{\mathbf{k}}| \leq 1$  і  $|\Psi_{k\ell m}| \leq 1$ ), тому належать до  $\Omega^{\times}$ . Та якщо  $\mathbf{k}$  має уявний компонент, то  $e^{-\text{Im}(\mathbf{k})\cdot\mathbf{x}}$  зростатиме в якомусь із напрямків  $\mathbf{x}$  швидше за будь-який степінь. Аналогічно, якщо  $k$  не є дійсним, то  $j_{\ell}(kr)$  експоненційно розбігатиметься при  $r \rightarrow \infty$ . Такі функції не належать до  $\Omega^{\times}$ , отже, мають бути виключеними з розгляду. Таким чином, ми визначили, що  $\mathbf{k}$  має бути дійсним, а тому енергія вільної частки (3.28) не може набувати від'ємних значень.

Насамкінець визначимо нормування для власних функцій  $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = A e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$ . Оскільки добуток  $\langle \Psi_{\mathbf{k}} | \Psi_{\mathbf{k}} \rangle$  нескінченний, то ми обчислимо нормовочний множник  $A$  з виразу для розкладення довільного  $|\Psi\rangle$  з області визначення гамільтоніана за його власними векторами:

$$|\Psi\rangle = \int |\Psi_{\mathbf{k}}\rangle \langle \Psi_{\mathbf{k}} | \Psi \rangle d^3 \mathbf{k}.$$

У координатному представленні це буде

$$\Psi(\mathbf{x}) = |A|^2 \int e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \left( \int e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{y}} \Psi(\mathbf{y}) d^3 \mathbf{y} \right) d^3 \mathbf{k}.$$

Інтеграл у дужках є достоту перетворенням Фур'є функції  $\Psi(\mathbf{y}) \rightarrow \hat{\Psi}(\mathbf{k})$ , а наступний інтеграл  $\int e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \hat{\Psi}(\mathbf{k}) d^3 \mathbf{k}$  — зворотне перетворення Фур'є. З курсу аналізу нам відомо, що коефіцієнт такого перетворення є  $(2\pi)^{-1/2}$  для кожної окремої змінної інтегрування, тому  $A = (2\pi)^{-3/2}$ . Отже, в результаті маємо нормований вираз для власних векторів вільного гамільтоніана в координатному представленні:

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = (2\pi)^{-3/2} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}. \quad (4.26b)$$

## § 4.7. Тунельний ефект

Однією з найразючіших демонстрацій відмінності квантової механіки від класичної є явище тунелювання частки через область, де потенційна енергія перевищує загальну енергію частки. Згідно з класичною механікою, це було б неможливо.

Ми розглянемо найпростіший приклад тунельного переходу через одновимірний потенційний бар'єр прямокутної форми:

$$W(x) = \begin{cases} 0, & x < 0; \\ V_0, & 0 \leq x \leq a; \\ 0, & a < x. \end{cases} \quad (4.29)$$

За наявності потенціалу рівняння на власні значення енергії набуває вигляду

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi}{dx^2} + W(x) \Psi(x) = E \Psi(x). \quad (4.30)$$

Розглянемо лише випадок  $0 < E < V_0$ , для якого класична механіка забороняє перехід через потенційний бар'єр. Рішенням рівняння (4.30) є

$$\Psi(x) = \begin{cases} A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}, & x \leq 0; \\ Ce^{\beta x} + De^{-\beta x}, & 0 \leq x \leq a; \\ A_2 e^{ikx} + B_2 e^{-ikx}, & a \leq x. \end{cases} \quad \begin{matrix} (a) \\ (b) \\ (c) \end{matrix} \quad (4.31)$$

Тут  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ , а  $\beta = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$ . Струм імовірності (4.22) цієї хвильової функції не обертається на нуль у нескінченності, тому ми мусимо уявити, що існують віддалені витоки та стоки, відсутні в (4.30), і що це рівняння насправді описує розповсюдження частки в певній обмеженій області простору між ними.

На три пари невідомих коефіцієнтів накладається обмеження двома парами рівнянь, що вимагають неперервності  $\Psi$  і  $d\Psi/dx$  у точках  $x = 0$  і  $x = a$ . Їх зручніше записати у матричній формі. Для  $x = 0$  маємо

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ ik & -ik \end{bmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ \beta & -\beta \end{bmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix},$$

а для  $x = a$ ,

$$\begin{bmatrix} e^{\beta a} & e^{-\beta a} \\ \beta e^{\beta a} & -\beta e^{-\beta a} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} e^{ika} & e^{-ika} \\ ike^{ika} & -ike^{-ika} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix}.$$

Для стислості запишемо ці рівняння, як

$$[M_1] \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = [M_2] \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}, \quad (4.32)$$

$$[M_3] \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = [M_4] \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix}. \quad (4.33)$$

Характеристики відбиття та пропускання потенційного бар'єру містить матриця переносу  $[P]$ , що визначається з

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = [P] \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix},$$

де

$$[P] = [M_1]^{-1} [M_2] [M_3]^{-1} [M_4]. \quad (4.34)$$

Елементи матриці переносу є

$$\begin{aligned} P_{11} &= e^{ika} \left[ \cosh(\beta a) + \frac{i}{2} \sinh(\beta a) \left( \frac{\beta}{k} - \frac{k}{\beta} \right) \right], \\ P_{12} &= \frac{i}{2} e^{-ika} \sinh(\beta a) \left( \frac{\beta}{k} + \frac{k}{\beta} \right), \\ P_{21} &= -\frac{i}{2} e^{ika} \sinh(\beta a) \left( \frac{\beta}{k} + \frac{k}{\beta} \right), \\ P_{22} &= e^{-ika} \left[ \cosh(\beta a) - \frac{i}{2} \sinh(\beta a) \left( \frac{\beta}{k} - \frac{k}{\beta} \right) \right]. \end{aligned}$$

Цей метод матриці переносі можна легко узагальнити для обчислення проходження часток цілу низку потенційних ям та бар'єрів у одному вимірі.

У таких задачах завжди буде на одну пару коефіцієнтів більше, ніж кількість рівнянь, що впливають з умови неперервності струму. Решта два коефіцієнти мають визначатися з граничних умов, що описують конфігурації віддалених витоків та стоків. Доданки у  $\Psi(x)$  із множниками  $A_1$  і  $B_2$  описують вхідні потоки, що падають на потенційний бар'єр відповідно з лівого та правого боків. Якщо витік присутній лише ліворуч від бар'єра, то  $B_2$  має дорівнювати нулю. Тоді праворуч ( $x > a$ ) буде лише струм, пропущений потенційним бар'єром:

$$-\frac{\hbar}{2m}(\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) = \frac{\hbar k}{m} |A_2|^2.$$

Загальний струм лівобіч бар'єра ( $x < 0$ ) складається з двох доданків,

$$\frac{\hbar k}{m} |A_1|^2 - \frac{\hbar k}{m} |B_1|^2,$$

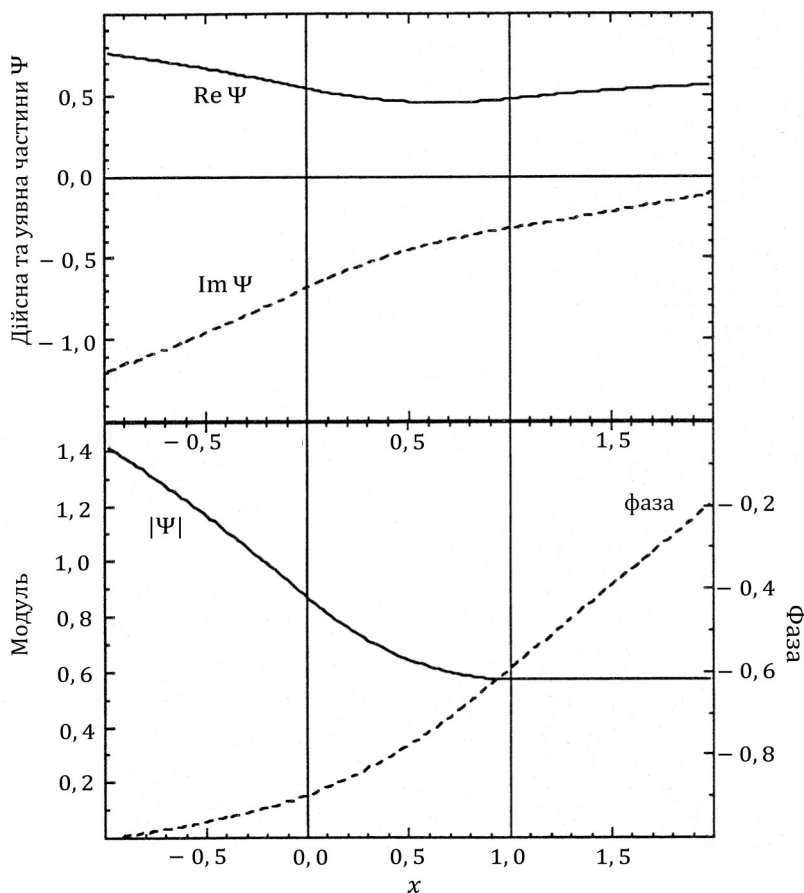
перший з яких є вхідний струм, а другий — струм, відбитий потенційним бар'єром. Ми означимо *коефіцієнт відбиття*  $R$ , як

$$R = \left| \frac{B_1}{A_1} \right|^2 = \left| \frac{P_{21}}{P_{11}} \right|^2, \quad (4.35)$$

а *коефіцієнт пропускання*  $T$ , як

$$T = \left| \frac{A_2}{A_1} \right|^2 = \left| \frac{1}{P_{11}} \right|^2. \quad (4.36)$$

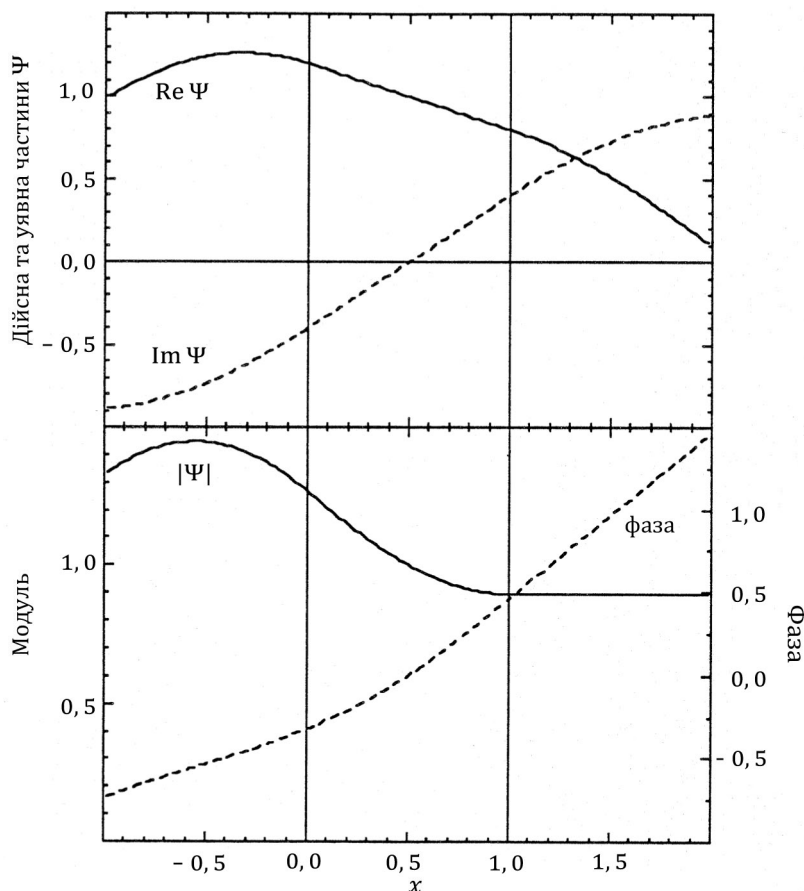
Збереження струму вимагає, щоб  $R + T = 1$ , і шляхом прямого обчислення можна переконатися, що це справді так і є.



**Рис. 4.3а.** Тунелювання хвильової функції для частки з енергією  $E = 0,16$ . Потенційний бар'єр  $V_0 = 1,0$ ;  $0 < x < 1$ . (Одиниці виміру:  $\hbar = 2m = 1$ .)

Деякі приклади тунелювання хвильових функцій показано на графіках з Рис. 4.3а і 4.3б. Усупереч поширеній думці, ґрунтованій на якісному аналізі явища, поведінка  $\Psi(x)$  всередині бар'єра не є чисто експоненціальним спаданням. На Рис. 4.3а дійсна частина  $\Psi$  спершу зменшується, потім починає зростати, а Рис. 4.3б засвідчує, що у випадку  $E = V_0$  дійсна та уявна частини  $\Psi$  змінюються строго лінійно. Однак абсолютне значення  $|\Psi|$  завжди монотонно спадає вздовж бар'єру.

Комплексна природа функції  $\Psi(x)$  і неухильне зростання її фази є визначальним факторами існування ненульового струму. Мінливість амплітуди  $|\Psi|$  при  $x < 0$  обумовлена інтерференцією між вхідним і відбитим потоками. Амплітуда при  $x > a$ , звичайно, незмінна. Оскільки  $\Psi$  і



**Рис. 4.3б.** Тунелювання хвильової функції для частки з енергією  $E = 1, 0$ . Потенційний бар'єр  $V_0 = 1, 0$ ;  $0 < x < 1$ . (Одиниці виміру:  $\hbar = 2m = 1$ .)

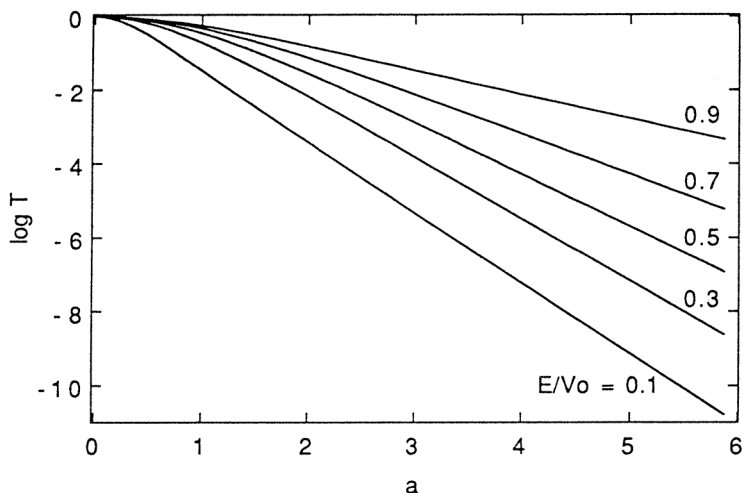
$d\Psi/dx$  неперервні, то неперервними є й  $|\Psi|$  і  $d|\Psi|/dx$ . Отже, на виході з бар'єра  $|\Psi|$  завжди має нульовий нахил, а це означає, що її спадання не може бути чисто експоненціальним.

Коефіцієнт пропускання для цього потенційного бар'єра є

$$T = \left[ 1 + \frac{V_0^2 [\sinh(\beta a)]^2}{4E(V_0 - E)} \right]^{-1}, \quad (4.37)$$

де  $\beta = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$ . Для  $\beta a \gg 1$  це зводиться до

$$T \approx \left[ \frac{4(E - V_0)}{V_0^2} \right] e^{-\beta a}. \quad (4.38)$$



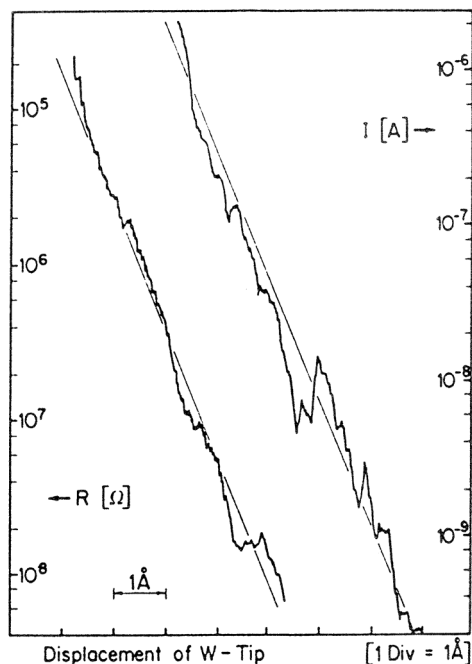
**Рис. 4.4.** Залежність натурального логарифма коефіцієнта пропускання від товщини потенційного бар'єра. (Одиниці виміру:  $\hbar = 2m = 1$ .)

Це експоненційне спадання  $T$  при збільшенні товщини бар'єра  $a$  ясно простежується на Рис. 4.4. Для різних форм потенційного бар'єра ця залежність може зазнавати певних варіацій, але експоненційна складова, як можна показати, залишається провідною, і для великих значень  $a$  на вираз для  $T$  ніяк не впливає конкретний вигляд потенціалу.

Експоненційну залежність (4.38) було експериментально підтверджено в явищі *вакуумного тунелювання* (Бінніг і співробітники, 1982). Енергія електрона в металі нижча за енергію вільного електрона у вакуумі, тому вузький проміжок між вістрям металевої голки та металевою пластиною діє, як потенційний бар'єр, крізь який електрон може тунелюватися. Різниця між вакуумним потенціалом та енергією Фермі електрона всередині металу називається *роботою виходу* і відповідає параметрові  $V_0 - E = \hbar^2 \beta^2 / 2m$  у нашій моделі. Таким чином, швидкість спадання  $\log T$  зі зростанням  $a$  дає спосіб вимірювання роботи виходу на поверхню. Рис. 4.5 ілюструє перевірку експоненційної залежності від відстані за п'ятьма порядками величини  $T$ .

Висока чутливість тунельного струму до відстані між вістрям та поверхнею використовується в *тенельному мікроскопі*, який дозволяє виміряти мікроскопічні поверхневі нерівності аж до 0,1 ангстрема ( $10^{-9}$  см) у висоту.





**Рис. 4.5.** Тунельний опір і струм у залежності від відстані металевго вістря до поверхні пластини. [Передрук із G. Binnig *et al.* (1982), *Physica* **109 110B**, 2075–7.]

## § 4.8. Функціональні інтеграли

Еволюцію вектора квантового стану в часі,  $|\Psi(t)\rangle = U(t, t_0)|\Psi(t_0)\rangle$ , можна розглядати, як поширення амплітуди в конфігураційному просторі:

$$\Psi(x, t) = \int G(x, t; y, t_0) \Psi(y, t_0) dy, \quad (4.39)$$

де

$$G(x, t; y, t_0) = \langle x | U(t, t_0) | y \rangle \quad (4.40)$$

часто називають *пропагатором*. Оскільки він дає явне рішення рівняння Шродінгера з часовою залежністю, то має пряму фізичну інтерпретацію. Якщо в момент часу  $t_0$  систему було локалізовано поблизу точки  $y$ , тоді ймовірність виявити її в пізніший час  $t$  у малій околиці точки  $x$  буде пропорційна до  $|G(x, t; y, t_0)|^2 dx$ . (У цьому параграфі ми обмежимо наш розгляд одновимірним випадком, але всі отримані результати легко узагальнюються на будь-яку розмірність конфігураційного простору.)

Р. П. Фейнман у 1948 році (див. [58]) показав, що пропагатор можна виразити через суму за всіма доступними шляхами, які поєднують поча-

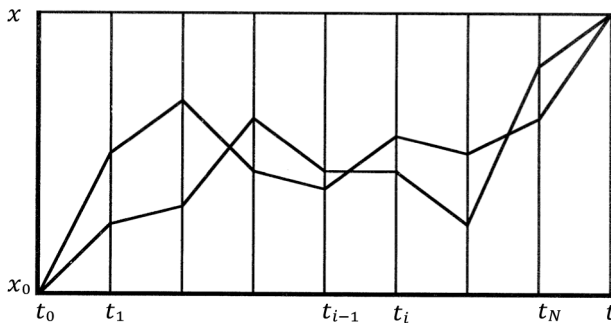
тків та кінцевий стани; але тут ми не будемо повторювати його оригінальних викладок. Натомість скористаємося мультиплікативними властивостями оператора часової еволюції:

$$U(t_N, t_1) = U(t_N, t_{N-1}) U(t_{N-1}, t_{N-2}) \cdots U(t_3, t_2) U(t_2, t_1), \quad (4.41)$$

де  $t_N > t_{N-1} > \cdots > t_2 > t_1$ . Із цього випливає, що пропагатор можна записати, як

$$G(x, t; x_0, t_0) = \int \cdots \int G(x, t; x_N, t_N) \cdots G(x_2, t_2; x_1, t_1) \times \\ \times G(x_1, t_1; x_0, t_0) dx_1 \cdots dx_N. \quad (4.42)$$

Ці  $N$  інтегрувань еквівалентні суми за всіма зигзаговидними шляхами,



**Рис. 4.6.** Два можливі шляхи, що поєднують точки  $(x_0, t_0)$  та  $(x, t)$  у конфігураційному просторі.

що поєднують початкову точку  $(x_0, t_0)$  із кінцевою  $(x, t)$ , як показано на Рис. 4.6. Якщо ми перейдемо до межі  $N \rightarrow \infty$  і  $\Delta t \rightarrow 0$  (де  $\Delta t = t_i - t_{i-1}$ ), то отримаємо пропагатор, як суму (чи, радше, інтеграл) за всіма шляхами, що поєднують початкову та кінцеву точки.

Для завершення нашого виведення ми мусимо отримати явний вираз для пропагатора в інфінітезимальному часовому інтервалі  $\Delta t = t_i - t_{i-1}$ :

$$G(x, t_i; y, t_{i-1}) = \langle x | U(t_i, t_{i-1}) | y \rangle = \\ = \langle x | e^{-iH\Delta t/\hbar} | y \rangle. \quad (4.43)$$

(Якщо  $H$  залежить від часу, треба взяти його значення в середній точці відрізка.) Гамільтоніан є сумою операторів кінетичної та потенційної енергії,  $H = T + V$ , які, за винятком тривіального випадку  $V = \text{const}$ , не комутують між собою, бо перший є функцією оператора імпульсу, а другий

— оператора положення. А проте, ми можемо записати

$$e^{\varepsilon(T+V)} = e^{\varepsilon T} e^{\varepsilon V} + \mathcal{O}(\varepsilon^2), \quad (4.44)$$

якщо  $\varepsilon = i\Delta t/\hbar$  є інфінітезимальною величиною. Залишковий доданок  $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$ , пропорційний комутаторові  $T$  і  $V$ , у межі  $\Delta t \rightarrow 0$  стає неістотним, оскільки він має другий порядок за  $\varepsilon$ . Отже, (4.43) набуває вигляду

$$\begin{aligned} \langle x | e^{-iH\Delta t/\hbar} | y \rangle &= \langle x | e^{-iT\Delta t/\hbar} e^{-iV\Delta t/\hbar} | y \rangle = \\ &= \langle x | e^{-iT\Delta t/\hbar} | y \rangle e^{-iV(y)\Delta t/\hbar}, \end{aligned} \quad (4.45)$$

з похибкою наближення<sup>11</sup>, що обертається на нуль при  $\Delta t \rightarrow 0$ .

Множник з кінетичною енергією в (4.45) можна явно обчислити, розклавши  $\langle x | e^{-iT\Delta t/\hbar} | y \rangle$  через власні вектори  $|E_k\rangle$  енергії вільної частки, для яких  $T|E_k\rangle = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} |E_k\rangle$  (§ 4.6):

$$\begin{aligned} \langle x | e^{-iT\Delta t/\hbar} | y \rangle &= \int \langle x | e^{-iT\Delta t/\hbar} | E_k \rangle \langle E_k | y \rangle dk = \\ &= \int \langle x | E_k \rangle e^{-i\hbar k^2 \Delta t/2m} \langle E_k | y \rangle dk = \\ &= (2\pi)^{-1} \int e^{-i\hbar k^2 \Delta t/2m} e^{ik(x-y)} dk. \end{aligned} \quad (4.46)$$

В останньому рядку ми скористалися виразом

$$\langle x | E_k \rangle \equiv \Psi_k(x) = (2\pi)^{-1/2} e^{ikx}, \quad (4.47)$$

що є одновимірним варіантом рівняння (4.26b), виведеного наприкінці § 4.6.

Інтеграл у (4.46) має вигляд стандартного гаусового інтеграла, для якого

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ap^2 + bp} dp = (\pi/a)^{1/2} e^{b^2/4a}. \quad (4.48)$$

Тому

$$\langle x | e^{-iT\Delta t/\hbar} | y \rangle = \left( \frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t} \right)^{1/2} \exp \left[ \frac{im(x-y)^2}{2\hbar \Delta t} \right]. \quad (4.49)$$

<sup>11</sup> Взагалі, з оцінкою цієї похибки ми обійшлися дуже вільно. Строге доведення див. у Шульмана [163], Р. 1.

Тепер ми можемо перейти до межі у виразі (4.42), коли  $N$ , кількість вершин ламаних кривих, стає нескінченною:

$$G(x, t; x_0, t_0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \cdots \int \prod_{j=0}^N G(x_{j+1}, t_{j+1}; x_j, t_j) dx_1 \cdots dx_N. \quad (4.50)$$

Тут ми позначили  $x = x_{N+1}$ ,  $t = t_{N+1}$ . Оскільки в межі  $N \rightarrow \infty$  інтерва  $\Delta t$  стає інфінітезмальним, ми можемо підставити в (4.50) вирази (4.43), (4.45) і (4.49). Замінивши добуток експонент на експоненту суми, отримуємо

$$G(x, t; x_0, t_0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \cdots \int \left( \frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t} \right)^{N/2} \times \\ \times \exp \left[ \sum_{j=0}^N \left( \frac{im(x_{j+1} - x_j)^2}{2\hbar \Delta t} - V(x_j) \right) \right] dx_1 \cdots dx_N. \quad (4.51)$$

Тепер пропагатор явно виражено через інтеграл за всіма можливими зигзаговидними шляхами, що складаються з  $N + 1$  прямих відрізків між початковою та кінцевою точкою. За допомогою невеликих перетворень, суму в аргументі експоненти можна інтерпретувати, як ріманову суму для інтеграла вздовж шляху, яка залишається цілком визначеною в межі неперервності ( $N \rightarrow \infty$ ):

$$\frac{i}{\hbar} \sum_{j=0}^N \Delta t \left[ \frac{m}{2} \left( \frac{x_{j+1} - x_j}{\Delta t} \right)^2 - V(x_j) \right] \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{dx}{d\tau} \right)^2 - V(x) \right] d\tau. \quad (4.52)$$

Інтеграл у правій частині береться вздовж шляху  $x = x(\tau)$ , що є неперервною межею ламаної кривої. Тепер підінтегральний вираз є достоту лагранжовою функцією з класичної механіки:

$$\mathcal{L}(x, \dot{x}) = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - V(x), \quad (4.53)$$

де  $\dot{x} = dx/d\tau$ . Інтеграл від  $\mathcal{L}$  по шляху  $x = x(\tau)$ ,

$$\mathcal{S}[x(\tau)] = \int_{x(\tau)} \mathcal{L}(x, \dot{x}) d\tau, \quad (4.54)$$

є дією, пов'язаною з цим шляхом. Отже, в неперервній межі квантовий пропагатор виражається, як інтеграл по всіх можливих класичних шляхах, що поєднують початкову та кінцеву точки; а внесок від кожного такого шляху дається фазовим множником  $\exp(i\mathcal{S}/\hbar)$ .

Результат часто записується в чарівливо простій формі

$$G(x, t; x_0, t_0) = \int_{(x_0, t_0)}^{(x, t)} e^{i\mathcal{S}[x(\tau)]/\hbar} \mathcal{D}x(\tau), \quad (4.55)$$

де  $\mathcal{D}x(\tau)$  позначає функціональне інтегрування за всіма шляхами  $x = x(\tau)$  між точками  $(x_0, t_0)$  і  $(x, t)$ . Такий інтеграл називається *інтегралом за шляхами* або *функціональним інтегралом*. Маємо два зауваження щодо цієї формули.

- (а) Клас шляхів, по яких проводиться інтегрування є дуже широким і має включати навіть у край нерегулярні функції. Це очевидно з того факту, що  $x_j = x(t_j)$  і  $x_{j+1} = x(t_j + \Delta t)$  розглядаються в (4.51), як незалежні змінні інтегрування, хоч би якою малою ставала величина  $\Delta t$ .
- (б) Строге математичне означення для міри  $\mathcal{D}x(\tau)$  на множині функцій, що представляють усі можливі шляхи від  $(x_0, t_0)$  до  $(x, t)$ , є надзвичайно тонким і складним питанням. Крім того, збіжність інтеграла знаходиться під питанням, оскільки підінтегральний вираз має абсолютне значення 1 для всіх шляхів. На практиці, для обчислення (4.55) треба повертатися до виразів на зразок (4.50) і (4.51), що містять дискретні наближення до шляхів.

### Класична межа функціонального інтеграла

Класичну межу квантової теорії ми детально обговоримо в Розділі 14, проте вже зараз буде корисно розглянути її наслідки для формули (4.55). Грубо кажучи, ми можемо розраховувати, що класична механіка стає прийнятним наближенням, коли класична дія  $\mathcal{S}$  набагато більша за квант дії  $\hbar$ . За таких умов фазовий множник у (4.55) стає надзвичайно чутливим до найменших змін  $\mathcal{S}$ , викликаних незначними варіаціями шляху, що, за очікуваннями, має призводити до їхнього взаємного скорочення в інтегралі. Виняток становить лише той випадок, коли дія є стаціонарною відносно малих варіацій якогось певного шляху, і тоді всі сусідні до нього шляхи дають внесок у (4.55) з приблизно однаковою фазою. Таким чином, величина інтеграла переважно залежатиме від цього вузького пучка шляхів.

Умова стаціонарності  $\mathcal{S}[x(\tau)]$ , коли шлях зазнає інфінітезимальних варіацій  $x(\tau) \rightarrow x(\tau) + \delta x(\tau)$ , є якраз гамільтоновим принципом класичної

механіки (див., наприклад, у Голдстейна [78]), що призводить до рівняння Лагранжа для класичного шляху. Отже, в межі, коли дія велика порівняно з  $\hbar$ , головний внесок у функціональний інтеграл робить саме класичний шлях. На цьому факті ґрунтується чимало наближених методів, корисних для проведення обчислень.

### Уявний час і статистична механіка

Якщо гамільтоніан не залежить від часу, то пропагатор (4.40) можна записати, як

$$\begin{aligned} G(x, t; y, 0) &= \langle x | e^{-itH/\hbar} | y \rangle = \\ &= \sum_n e^{-itE_n/\hbar} \Psi_n(x) \Psi_n^*(y), \end{aligned} \quad (4.56)$$

де  $H\Psi_n(x) = E_n\Psi_n(x)$ . Підстановка  $t = -i\hbar\beta$  дає

$$\begin{aligned} G(x, -i\hbar\beta; y, 0) &= \sum_n e^{-\beta E_n} \Psi_n(x) \Psi_n^*(y) = \\ &= \rho_\beta(x, y). \end{aligned} \quad (4.57)$$

Це теплова матриця густини в координатному представленні, що описує *канонічний ансамбль* у рівновазі з тепловим резервуаром при температурі  $T = 1/k\beta$ . Вона є відправною точкою для більшості систематичних обчислень у квантовій статистичній механіці.

В межі  $\beta \rightarrow \infty$  (низькі температури) у сумі домінують член від основного стану, що дозволяє нам видобути з діагональної частини матриці густини енергію основного стану та відповідну питому ймовірність:

$$\rho_\beta(x, x) \approx e^{-\beta E_0} |\Psi_0(x)|^2. \quad (4.58)$$

І хоча жодне з цих цікавих співвідношень не потребує формалізму функціонального інтегрування, його методи можна застосувати для їх обчислення. Нехай  $t = -i\hbar\beta$  буде уявною змінною „часу“. В термінах цього уявного часу класичний лагранжіан набуває вигляду  $\mathcal{L} = -\frac{1}{2}m(dx/du)^2 - V(x)$ , що відповідає просто класичній енергії зі знаком мінус. Тоді рівняння (4.55) стає функціональним інтегралом за шляхами в уявному часі:

$$\rho_\beta(x, y) = \int \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \left[ \frac{m}{2} \left( \frac{dx}{du} \right)^2 + V(x) \right] du\right) \mathcal{D}x(u). \quad (4.59)$$

Цей функціональний інтеграл має істотну обчислювальну перевагу порівняно з (4.55), яка полягає в тому, що тут жоден доданок не скорочуються з іншим, оскільки всі внески дійсні та позитивні. Крім того, є всі підстави очікувати, що цей інтеграл збіжний, бо шляхи з високими енергіями дають у нього експоненційно малий внесок. Гері та Кіфер [73] застосували цей метод для визначення основного стану енергії та питомої ймовірності для кількох простих потенціалів, і їхні результати добре узгоджувалися з точнішими рішеннями, отриманими з рівняння Шродінгера.

### Обговорення функціонального методу

Функціональний інтеграл не набув поширення, як обчислювальний метод у звичайній квантовій механіці. Є певна кількість задач, що можуть бути розв'язані за допомогою функціонального інтегрування, але традиційні способи їх розв'язання, із застосуванням операторних або диференціальних рівнянь, зазвичай набагато простіші. А проте, формулювання квантової механіки через функціональний інтеграл має й деякі істотні переваги.

Передовсім, це його загальність. Хоча ми розглянули цей метод лише для одновимірної конфігураційної простору, очевидно, що для системи з  $n$  степенями свободи ми отримали б цілком аналогічні формули, що включали б суму за шляхами в  $n$ -вимірному конфігураційному просторі. Сутність виразу (4.55) полягає в сумі за всіма можливими історіями розвитку, що приводять з початкового стану системи до кінцевого. Кожна така історія супроводжується фазовим множником  $\exp(i\mathcal{S}/\hbar)$ , де  $\mathcal{S}$  — пов'язана з нею класична дія. Системі не потрібно складатися з часток і мати скінченну кількість степенів свободи. Система може бути полем  $\phi(\mathbf{x}, t)$ , і в цьому випадку історія складатиметься з неперервної послідовності функцій  $\{\phi(\mathbf{x})\}$ , упорядкованих за часом. Зрозуміло, що непрактично брати суму за всіма такими історіями, бо кожна з них має нескінченну кількість степенів свободи. Але можна просумовувати за певною репрезентативною вибіркою історій — що, з огляду на темпи зростання продуктивності комп'ютерів, стає цілком здійсненним на практиці.

Функціональний формалізм важливий не так своїми потенційними обчислювальними застосуваннями, як точкою зору, яку він пропонує. Для всіх формулювань квантової механіки є спільним те, що ймовірність процесу дається квадратом модуля комплексної амплітуди. З погляду функціонального інтегрування є очевидним, що в разі, коли процес може відбуватися кількома шляхами, то амплітуди від кожного шляху в загаль-

ному випадку інтерферуватимуть між собою. Крім того, фаза, пов'язан з кожною окремою амплітудою, простим чином співвідноситься з дією вздовж шляху. Оскільки у функціональному інтегралі часто переважають дозволені класичною механікою шляхи, то в цих випадках можна легко виявити істотні особливості експерименту, взявши суму коефіцієнтів  $\exp(iS/\hbar)$  за класичними шляхами.

Насамкінець порушимо питання про фізичний статус нескінченної кількості можливих шляхів. Чи справді система проходить їх одночасно? Чи лише перебирає їх і зупиняє вибір на одному? Чи, може, це просто зручний прийом (особливо зручний у квантовій теорії поля), а насправді він не має жодного стосунку до фізичної дійсності? У випадку уявного часу, це, без сумніву, просто обчислювальний метод. Найпевніше, така сама ситуація і з функціональними інтегралами в реальному часі — хоч, звичайно, інша думка також має право на існування.

## Література до Розділу 4

Детальні розрахунки проходження часток через потенційні ями та бар'єри наведено у Драпера [50, 51]. Можливості методу матриці переносу проілюстровано у Вокера і Гетрайта [184].

Функціональне інтегрування розглядається в чудових книжках Фейнмана і Гібса [59] та також Шульмана [163]. У першій функціональні інтеграли виводяться з квантової теорії; у другій сама квантова механіка виводиться з функціональних інтегралів. Обидві містять чимало застосувань.

## Задачі

**4.1.** Покажіть, що комутатор оператора імпульсу з функцією оператора положення дається виразом  $[f(x), P_x] = i\hbar \partial f / \partial x$ .

**4.2.** Обчисліть власні значення і власні функції енергії для частки, замкненої в нескінченній одновимірній потенційній ямі  $W(x) = 0$  для  $0 < x < a$  і  $W(x) = \infty$  для  $x < 0$  і  $x > a$ . Знайдіть матричні елементи операторів положення та імпульсу, взявши за базис власні функції енергії.

**4.3.** Найпростіша модель для потенціалу, що діє на електрон на поверхні



металу, є ступінчастою:

$$W(x) = \begin{cases} -V_0 & \text{для } x < 0 \text{ (всередині металу)} \\ 0 & \text{для } x > 0 \text{ (зовні металу)}. \end{cases}$$

Обчисліть імовірність того, що електрон, який налижається із середини металу з імпульсом  $\hbar k$ , скерованим у позитивному напрямку осі  $x$ , зможе відірватися від поверхні.

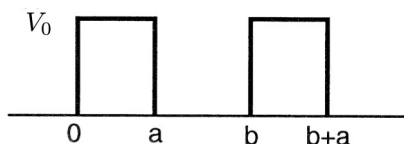
**4.4.** Отримайте для сферичного потенціалу вигляду  $W(x) = C/r^2$  асимптотичну форму сферично симетричних рішень хвильового рівняння поблизу  $r = 0$  і визначте звідси діапазон значень  $C$ , для якого вони фізично прийнятні.

**4.5.** Отримайте для сферичного потенціалу вигляду  $W(x) = C/r^n$  асимптотичну форму сферично симетричних рішень хвильового рівняння поблизу  $r = 0$ . Для якого діапазону значень  $n$  вони фізично прийнятні? Чи залежить цей результат від  $C$ ?

**4.6.** Вираз (4.22) для струму ймовірності  $\mathbf{J}(\mathbf{x}, t)$  не є єдиним рішенням рівняння неперервності (4.21). Також цьому рівнянню задовольняє  $\mathbf{J}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{f}(\mathbf{x}, t)$ , з довільною  $\mathbf{f}(\mathbf{x}, t)$ , для якої виконується умова  $\text{div } \mathbf{f}(\mathbf{x}, t) = 0$ . Покажіть, що для руху в одному вимірі така довільність у визначенні струму не дає жодних наслідків і результат (4.22) є фактично єдиним.

**4.7.** Обчисліть коефіцієнти відбиття і пропускання для одновимірної прямокутної потенційної ями:  $W(x) = -V_0 < 0$  для  $0 < x < a$  і  $W(x) = 0$  для  $x < 0$  і  $x > a$ . Дайте якісне пояснення зникненню відбиття при певних значеннях енергій.

**4.8.** Застосуйте метод матриці переносу для обчислення коефіцієнта пропускання для двох зображених нижче прямокутних бар'єрів при енергії частки в діапазоні  $0 < E < V_0$ .



**4.9.** У цій задачі розглядається сингулярний потенціал.

- (а) Визначте умови для хвильової функції  $\Psi(x)$  в одновимірному потенційному полі  $W(x) = c\delta(x)$ . [Підказка. Це можна зробити безпосередньо, виходячи з властивостей дельта-функції. Альтернативно, потенціал можна розглядати, як граничний випадок (при  $\varepsilon \rightarrow 0$ ) скінченного потенціалу:  $W_\varepsilon(x) = c/\varepsilon$  для  $|x| < 1/2\varepsilon$  і  $W_\varepsilon(x) = 0$  для  $|x| \geq 1/2\varepsilon$ .]
- (б) Знайдіть основний стан частки для одновимірного притягувального потенціалу  $W(x) = c\delta(x)$ , де  $c < 0$ .

**4.10.** Яка дія відповідає розповсюдженню вільної частки уздовж класичного шляху від  $(x_1, t_1)$  до  $(x_2, t_2)$ ? Скористайтесь результатом, щоб виразити фазовий множник у (4.55) через довжину хвилі де Бройля.

**4.11.** Виходячи з означення (4.40), покажіть, що пропагатор  $G(x, t; y, t_0)$  є функцією Гріна для рівняння Шродінгера. Тобто:

$$\left(H_x - i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\right) G(x, t; y, t_0) = -i\hbar \delta(x - y) \delta(t - t_0),$$

де  $H_x$  — гамільтоніан, виражений як диференціальний оператор у одновимірному координатному представленні. Обчисліть цим методом пропагатор для вільної частки.

**4.12.** Застосуйте метод функціонального інтеграла для отримання пропагатора вільної частки в наближенні, що включає лише класичний шлях. (Зауваження: у загальному випадку таке наближення не дає точного результату.)

## Розділ 5

### Імпульсне представлення та його застосування

#### § 5.1. Імпульсне представлення

Імпульсне представлення отримують при виборі базисом набору власних векторів  $\{|\mathbf{p}\rangle\}$  оператора імпульсу вільної частки:

$$P_\alpha |\mathbf{p}\rangle = p_\alpha |\mathbf{p}\rangle \quad (\alpha = 1, 2, 3). \quad (5.1)$$

Ці власні значення утворюють неперервний спектр і, відповідно, вектори  $|\mathbf{p}\rangle$  не належать до гільбертового простору. Згідно з узагальненою спектральною теоремою, кожен вектор з області визначення оператора імпульсу можна розкласти за його власними векторами:

$$|\Phi\rangle = \int |\mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p} | \Phi \rangle d^3 \mathbf{p}.$$

Перемноживши обидві частини цього виразу на довільний власний вектор  $|\mathbf{p}'\rangle$ , маємо

$$\langle \mathbf{p}' | \Phi \rangle = \int \langle \mathbf{p}' | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | \Phi \rangle d^3 \mathbf{p}.$$

Звідси випливає, добуток  $\langle \mathbf{p}' | \mathbf{p} \rangle$  існує в сенсі узагальненої функції (розподілу), а для виконання цієї тотожності необхідно і достатньо, щоб виконувалась умова ортонормованості для власних векторів неперервного спектру:

$$\langle \mathbf{p}' | \mathbf{p} \rangle = \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \quad (5.2)$$

Схожа умова, до речі, справедлива і для власних векторів оператора положення  $\langle \mathbf{x}' | \mathbf{x} \rangle = \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x})$ . Як і слід було чекати, норма такого власного вектора нескінченна.

Тепер визначимо співвідношення між власними векторами операторів імпульсу та положення, обчисливши добуток  $\langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle$ . Скориставшись (4.1) та (4.3) і записавши власні значення оператора імпульсу, як  $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ , ми отримуємо рівняння

$$\begin{aligned} -i\hbar \nabla \langle \mathbf{x} | \hbar \mathbf{k} \rangle &= \langle \mathbf{x} | \mathbf{P} | \hbar \mathbf{k} \rangle = \\ &= \hbar \mathbf{k} \langle \mathbf{x} | \hbar \mathbf{k} \rangle, \end{aligned}$$

яке має рішення

$$\langle \mathbf{x} | \hbar \mathbf{k} \rangle = c(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}. \quad (5.3)$$

Нормовочний множник  $c(\mathbf{k})$  визначається з (5.2):

$$\begin{aligned} \delta(\hbar \mathbf{k}' - \hbar \mathbf{k}) &= \langle \hbar \mathbf{k}' | \hbar \mathbf{k} \rangle = \int \langle \hbar \mathbf{k}' | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | \hbar \mathbf{k} \rangle d^3 \mathbf{x} = \\ &= c^*(\mathbf{k}') c(\mathbf{k}) \int \exp\{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{x}\} d^3 \mathbf{x}, \end{aligned}$$

отже,  $c(\mathbf{k}) = (2\pi\hbar)^{-3/2}$ . Тому (5.3) набуває вигляду

$$\langle \mathbf{x} | \hbar \mathbf{k} \rangle = (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}. \quad (5.4)$$

Координатне представлення вектора стану  $|\Psi\rangle$  є функцією від  $\mathbf{x}$ :  $\langle \mathbf{x} | \Psi \rangle = \Psi(\mathbf{x})$ . В імпульсному представленні той самий вектор стану записується, як

$$\begin{aligned} \langle \hbar \mathbf{k} | \Psi \rangle &= \int \langle \hbar \mathbf{k} | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | \Psi \rangle d^3 \mathbf{x} \\ &= (2\pi\hbar)^{-3/2} \int e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \Psi(\mathbf{x}) d^3 \mathbf{x} = \\ &= \hbar^{-3/2} \Phi(\mathbf{k}). \end{aligned} \quad (5.5)$$

Тут  $\Phi(\mathbf{k}) = (2\pi)^{-3/2} \int e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \Psi(\mathbf{x}) d^3 \mathbf{x}$  є перетворенням Фур'є функції  $\Psi(\mathbf{x})$ .

Оскільки в цьому представленні оператор імпульсу  $P_\alpha$  діагональний, то його дія на  $\Phi(\mathbf{k})$  зводиться до простого перемноження на власне значення  $p_\alpha = \hbar k_\alpha$ . А дія оператора положення  $Q_\alpha$  в імпульсному представленні дає

$$\begin{aligned} \langle \hbar \mathbf{k} | Q_\alpha | \Psi \rangle &= (2\pi\hbar)^{-3/2} \int e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} x_\alpha \Psi(\mathbf{x}) d^3 \mathbf{x} = \\ &= i\hbar^{-3/2} \frac{\partial \Phi(\mathbf{k})}{\partial k_\alpha}. \end{aligned}$$

Отже, в імпульсному представленні оператор положення має вигляд

$$Q_\alpha = i \frac{\partial}{\partial k_\alpha} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_\alpha}. \quad (5.6)$$

Як ми уже зазначали, власний вектор імпульсу має нескінченну норму, тому не належить до гільбертового простору. В більшості випадків це не призводить до жодних труднощів, але часом буває бажано уникнути

нескінченностей, обмеживши простір великим кубом зі стороною  $L$  і наклавши періодичні граничні умови. Якщо (5.3) має бути періодичним за координатами  $x_\alpha$  з кроком  $L$ , то дозволені такими граничними умовами значення  $k_\alpha$  повинні дорівнювати  $2\pi n/L$ , де  $n$  — ціле число. Таким чином, існує лише одне припустиме  $\mathbf{k}$  для кожної ділянки об'ємом  $(2\pi/L)^3$  в конфігураційному просторі. Позначимо власні вектори таких „комірок“, як  $|\hbar\mathbf{k}L\rangle$ . Вони можуть мати одиничну норму й задовольняти умові ортонормованості:

$$\langle \hbar\mathbf{k}L | \hbar\mathbf{k}'L \rangle = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}, \quad (5.7)$$

тому замість (5.4) маємо

$$\langle \mathbf{x} | \hbar\mathbf{k}L \rangle = L^{-2/3} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}. \quad (5.8)$$

У межі  $L \rightarrow \infty$  результати методу „комірок“ мають збігатися з результатами для неперервного конфігураційного простору. Наразі ми бачимо, що в такій межі (5.8) не переходить у (5.4), але цього й не вимагається. Насправді нам потрібно, щоб при  $L \rightarrow \infty$  ставали однаковими середні значення спостережних величин, обчислені обома способами для довільного вектора стану  $|\Psi\rangle$ . Нехай  $F$  — оператор, що представляє спостережну  $\mathcal{F}$ ; тоді в просторі без граничних умов,

$$\langle \mathcal{F} \rangle = \langle \Psi | F | \Psi \rangle = \int \int \langle \Psi | \mathbf{p}' \rangle \langle \mathbf{p}' | F | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | \Psi \rangle d^3\mathbf{p}' d^3\mathbf{p}.$$

У просторі, розбитому на „комірки“, береться сума за всіма дискретними значеннями  $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$ , що дозволені періодичними граничними умовами. Отже,

$$\langle \mathcal{F} \rangle = \langle \Psi | F | \Psi \rangle = \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{k}} \langle \Psi | \hbar\mathbf{k}'L \rangle \langle \hbar\mathbf{k}'L | F | \hbar\mathbf{k}L \rangle \langle \hbar\mathbf{k}L | \Psi \rangle.$$

Зі збільшенням величини  $L$  дозволені значення  $\mathbf{k}$  та  $\mathbf{k}'$  [по одному на  $(2\pi/L)$  конфігураційного простору] гуртуються дедалі тісніше, і для будь-яких гладких функцій така сума переходить в інтегрування:

$$\sum_{\mathbf{k}', \mathbf{k}} \rightarrow \left[ \frac{L}{2\pi} \right]^6 \int \int d^3\mathbf{k}' d^3\mathbf{k} = \left[ \frac{L}{2\pi\hbar} \right]^6 \int \int d^3\mathbf{p}' d^3\mathbf{p} \quad (5.9)$$

у межі великих  $L$ . Порівняння (5.8) з (5.4) дає

$$|\hbar\mathbf{k}L\rangle = \left( \frac{2\pi\hbar}{L} \right)^{3/2} |\mathbf{k}\rangle,$$

а, враховуючи, що в сумі присутні чотири такі множники, то вони якраз і скорочують множник перед інтегралами в (5.9). Тобто в межі  $L \rightarrow \infty$  обидва результати стають однаковими.

І хоч у нашому курсі ми не будемо послуговуватися методом „коміркової“ нормалізації, він, проте, може стати в нагоді, коли фізика задачі не вимагає вдаватися до ускладнень, пов'язаних із неперервним спектром та векторами нескінченної норми.

## § 5.2. Розподіл імпульсу в атомі

Згідно з теорією, розподіл імовірності для імпульсу в стані, представленому вектором  $|\Psi\rangle$ , є

$$|\langle \mathbf{p} | \Psi \rangle|^2 = (2p\hbar)^{-3} \left| \int e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \Psi(\mathbf{x}) d^3\mathbf{x} \right|^2, \quad (5.10)$$

де  $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$  — імпульс частки. Це теоретичне передбачення бажано перевірити на практиці.

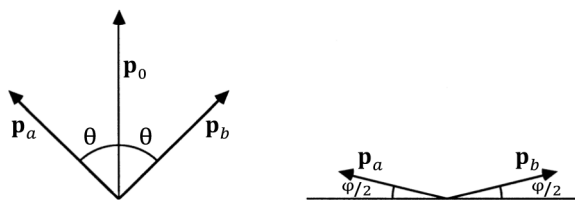
Найпростішим для аналізу в цьому випадку є атом водню, що складається з одного електрона та одного протона. Такий дослід (див. Ломан і Вайгольд [119], Вайгольд [187]) включає іонізацію атома водню високоенергетичним електронним пучком і вимірювання імпульсів вибитого з атому та розсіяного електронів. На Рис. 5.1 показано відносні напрямки імпульсу  $\mathbf{p}_0$  вхідного електрона,  $\mathbf{p}_a$  розсіяного електрона і  $\mathbf{p}_b$  вибитого електрона. Закон збереження імпульсу дає

$$\mathbf{p}_0 + \mathbf{p}_e + \mathbf{p}_n = \mathbf{p}_a + \mathbf{p}_b + \mathbf{p}'_n, \quad (5.11)$$

де  $\mathbf{p}_e$  — імпульс електрона в атомі,  $\mathbf{p}_n$  — імпульс ядра (протона) до зіткнення, а  $\mathbf{p}'_n$  — його ж імпульс після іонізації. Зіткнення високоенергетичного електрона з атомним електроном відбувається так швидко, що реакцією ядра можна знехтувати і встановити  $\mathbf{p}_n = \mathbf{p}'_n$ . Таким чином, ми можемо визначити початковий імпульс електрона в атомі з рівняння:

$$\mathbf{p}_e = \mathbf{p}_a + \mathbf{p}_b - \mathbf{p}_0. \quad (5.12)$$

З міркувань, які будуть викладені нижче, детектори було налаштовано так, щоб вони реєстрували події, в яких  $\mathbf{p}_a$  і  $\mathbf{p}_b$  мали однакову абсолютну величину і той самий кут відхилення  $\theta$  від напрямку вхідного імпульсу  $\mathbf{p}_0$ . Із цих геометричних співвідношень, проілюстрованих на Рис. 5.1,



**Рис. 5.1.** Відносні напрямки розсіяного та вибитого електронів,  $\mathbf{p}_a$  і  $\mathbf{p}_b$ , а також вхідного електрона  $\mathbf{p}_0$ . У першій діаграмі  $\mathbf{p}_0$  лежить у площині рисунка; друга діаграма дає вигляд перпендикулярно  $\mathbf{p}_0$  (горизонтальною лінією показано площину першої діаграми).

можна визначити величину імпульсу електрона в атомі:

$$p_e = \left( [2p_a \cos \theta - p_0] + \left[ 2p_a \sin \theta \sin \frac{\varphi}{2} \right]^2 \right)^{1/2}. \quad (5.13)$$

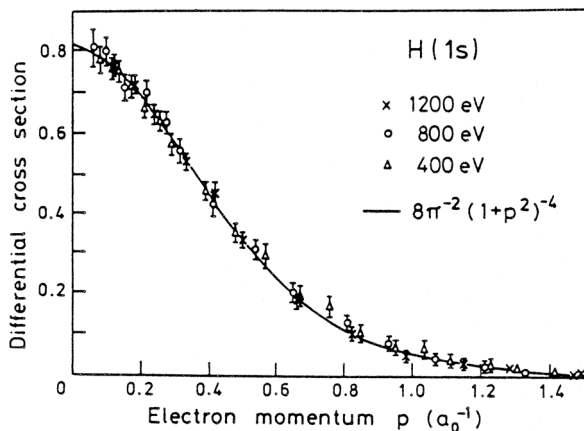
В експерименті  $p_e$  змінюється зі зміною  $\varphi$ , а кут  $\theta$  залишається постійним.

Імовірність такої події пропорційна перерізові електрон-електронного розсіяння  $\sigma_{ee}$  для зіткнення вхідного та атомного електронів, помноженому на ймовірність того, що електрон у атомі має імпульс  $\mathbf{p}_e$ . Отже, частота реєстрації цих подій буде пропорційна до

$$\sigma_{ee} |\langle \mathbf{p}_e | \Psi \rangle|^2. \quad (5.14)$$

Переріз  $\sigma_{ee}$  є функцією енергій електронів та кута  $\theta$ , але вони в цьому досліді постійні, змінюється лише  $\varphi$ . Тому частота реєстрації має бути просто пропорційною розподілові імпульсу електрона в атомі  $|\langle \mathbf{p}_e | \Psi \rangle|^2$ , що дає можливість провести пряме порівняння між теорією та експериментальними даними.

Тут доречно зробити два зауваження щодо цього експерименту. По-перше, всі електрони тотожні, а отже, неможливо з'ясувати, який із них розсіяний, а який — вибитий з атома. Проте вибір  $|\mathbf{p}_a| = |\mathbf{p}_b|$  і  $\theta_a = \theta_b = \theta$  усуває ускладнення, викликані цією невизначенністю. По-друге, ми припустили, що зіткнення електрона з атомом можна розглядати, як чисто електрон-електронне розсіяння, а протон у цьому випадку залишається стороннім спостерігачем. Зіткнення електрона з протоном також можливе, але тоді атомному електрону перепадає малої енергії через його малу, порівняно з протоном, масу. Відбір  $|\mathbf{p}_a| = |\mathbf{p}_b|$  усуває такі небажані зіткнення з розгляду.



**Рис. 5.2.** Вимірювання розподілу імпульсу для основного стану атома водню при кількох значеннях енергії вхідного електрона [передрук із E. Weigold, *AIP Conf. Proc.* No. 86 (1982), p. 4.]

Теорію атома водню ми детально розроблятимемо в Розділі 10. Проте легко перевірити, що  $\Psi(r) = ce^{-r/a_0}$  (де  $c$  — нормовочний коефіцієнт, а  $a_0 = \hbar^2/me^2$ ) є рішенням рівняння Шродінгера для стаціонарного стану частки масою  $m$  у сферично симетричному потеніалі  $W(r) = -e/r$ . Відповідно до (5.10), розподіл імовірності для імпульсу пропорційний до квадрату перетворення Фур'є для  $\Psi(r)$ , тому

$$|\langle \mathbf{p}_e | \Psi \rangle|^2 = c' (1 + a_0^2 k^2)^{-4}, \quad (5.15)$$

де  $\mathbf{p}_e = \hbar \mathbf{k}$  імпульс електрона в атомі, а  $c'$  — інший нормовочний коефіцієнт.

На Рис. 5.2 порівнюються теоретичні та експериментальні данні, отримані для трьох різних енергій вхідного електрона (всі вони набагато перевищують енергію зв'язку атома водню 13,6 еВ). Оскільки дослід не давав абсолютних значень величин, то всі три набори даних було підігнано під теоретичні розрахунки для найнижчих  $k$ . Як ми бачимо, з урахуванням цього припущення експериментальні результати цілком узгоджуються з висновками теорії.

### § 5.3. Теорема Блоха

Ця теорема описує загальний вигляд стаціонарних станів систем з періодичною просторовою структурою. Вона особливо корисна у фізиці твердого тіла та кристалографії. Як відомо, кристал залишається незмінним



при трансляціях типу

$$\mathbf{R}_n = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3, \quad (5.16)$$

де  $n_1, n_2, n_3$  — цілі числа, а вектори  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$  утворюють ребра елементарної кристалічної комірки. Таким трансляціям відповідає сім'я унітарних операторів  $U(\mathbf{R}_n) = \exp(-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{R}_n/\hbar)$ , що залишають інваріантним гамільтоніан кристалу:

$$U(\mathbf{R}_n) H U^{-1}(\mathbf{R}_n) = H. \quad (5.17)$$

Ці унітарні оператори комутують між собою (як було показано в § 3.3) та з гамільтоніаном  $H$ , тому, згідно з Теоремою 5, § 1.3, для всіх них має існувати повний набір спільних власних векторів:

$$H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle, \quad (5.18a)$$

$$U(\mathbf{R}_n) |\Psi\rangle = c(\mathbf{R}_n) |\Psi\rangle. \quad (5.18b)$$

Із композиційних співвідношень для операторів трансляцій

$$U(\mathbf{R}_n) U(\mathbf{R}_{n'}) = U(\mathbf{R}_n + \mathbf{R}_{n'})$$

впливають такі ж співвідношення для їхніх власних значень

$$c(\mathbf{R}_n) c(\mathbf{R}_{n'}) = c(\mathbf{R}_n + \mathbf{R}_{n'}).$$

Цьому рівнянню задовольняє лише експоненційна функція

$$c(\mathbf{R}_n) = \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n). \quad (5.19)$$

Оскільки  $U(\mathbf{R}_n)$  унітарний оператор, то  $|c(\mathbf{R}_n)| = 1$ , а отже,  $\mathbf{k}$  має бути дійсним вектором.

Якщо система є одиничною часткою у взаємодії з періодичним потенційним полем, то *теорему Блоха* в її стандартному вигляді можна отримати, виразивши власний вектор (5.18) в координатному представленні:  $\Psi(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | \Psi \rangle$ . За означенням,  $U(\mathbf{R}_n) \Psi(\mathbf{x}) = \Psi(\mathbf{x} - \mathbf{R}_n)$ , тому спільні власні функції з (5.18) повинні задовольняти умові

$$\Psi(\mathbf{x} - \mathbf{R}_n) = \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n) \Psi(\mathbf{x}). \quad (5.20)$$

Вектор  $\mathbf{k}$  називається *хвильовим вектором Блоха* для цього стану. Зауважимо, що теорема не стверджує, що всі власні вектори періодично симетричного оператора  $H$  повинні мати такий вигляд, вона лише дає можливість обрати їх таким чином, щоб вони були спільними з власними векторами (5.18b), і в такому випадку матимуть вигляд (5.20).

Тепер розкладемо функцію Блоха (5.20) на плоскі хвилі:

$$\Psi(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}'} a(\mathbf{k}') e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{x}}. \quad (5.21)$$

Підстановка цього розкладення в (5.20) дає

$$\sum_{\mathbf{k}'} a(\mathbf{k}') e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}_n} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{x}} = e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n} \sum_{\mathbf{k}'} a(\mathbf{k}') e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{x}},$$

що справедливо тоді і лише тоді, коли  $a(\mathbf{k}')$  обертається на нуль при тих значеннях  $\mathbf{k}'$ , які не задовольняють умові  $\exp[i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{R}_n] = 1$  для всіх  $\mathbf{R}_n$  вигляду (5.16). Вектори, для яких виконується ця умова, пов'язані між собою співвідношенням

$$\mathbf{k}' - \mathbf{k} = \mathbf{G}_m, \quad (5.22)$$

де  $\mathbf{G}_m$  є вектором *оберненої кристалічної ґратки*. Детальний виклад теорії про кристалічні ґратки та обернені до них можна знайти в багатьох книжках із фізики твердого тіла (наприклад, Ешкрофт і Мермін [5]). У найпростішому випадку, коли вектори  $\{\mathbf{R}_n\}$  утворюють звичайну кубічну ґратку з елементарними комірками у вигляді куба зі стороною  $a$ , вектори  $\{\mathbf{G}_m\}$  утворюють кристалічну ґратку з елементарними комірками у вигляді куба зі стороною  $2\pi/a$ .

У світлі отриманих результатів ми можемо переписати (5.21), як

$$\Psi(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{G}_m} a(\mathbf{k} + \mathbf{G}_m) e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{G}_m) \cdot \mathbf{x}}. \quad (5.23)$$

Оскільки розкладення на плоскі хвилі фактично є розкладенням за власними функціями імпульсу, то звідси випливає, що розподіл імпульсу в стані, який описується (5.20) або (5.23), є дискретним і дозволяє лише значення вигляду  $\hbar(\mathbf{k} + \mathbf{G}_m)$ . Цей висновок буде важливим у наступному параграфі.

## § 5.4. Дифракційне розсіяння: теорія

Явище дифракційного розсіяння часток було надзвичайно важливим у історичному розвитку квантової механіки і дотепер залишається важливим при проведенні багатьох експериментів. У поточному параграфі ми розберемося з теорією цього явища і залучимо його до інтерпретації квантової механіки.

## Дифракція на періодичній структурі

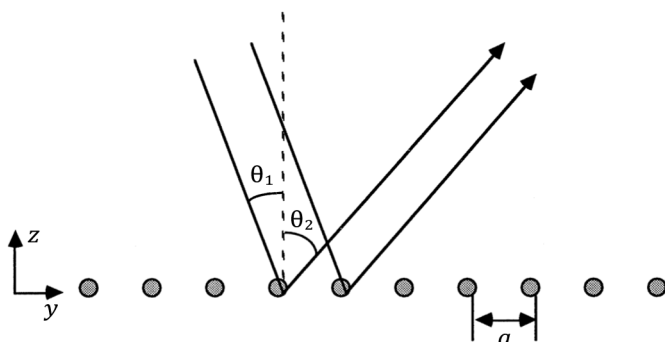
Дифракційне розсіяння на періодичній структурі, на зразок кристала або дифракційної ґратки, можна проаналізувати двома різними (хоч і математично еквівалентними) методами, які пропонують два різні тлумачення цього явища.

### (а) Питома ймовірність положення частки

Перший метод полягає в розв'язанні стаціонарного рівняння Шродінґера

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\mathbf{x}) + W(\mathbf{x})\Psi(\mathbf{x}) = E\Psi(\mathbf{x}) \quad (5.24)$$

з граничними умовами, що відповідають вхідному пучку з певного напрямку, і в подальшому визначенні питомої ймовірності  $|\Psi(\mathbf{x})|^2$  на детекторах. Точне розв'язання цього рівняння може бути надзвичайно складною задачею, проте методи фізичної оптики дозволяють дослідити найважливіші особливості його рішення. Виведення оптичної теорії дифракції зі скалярного хвильового рівняння, схожого на (5.24), можна знайти у Борна та Вульфа [33], Розділ 8. Ми застосуємо ці методи до (5.24), як суто математичний інструмент, що не вимагає давати рівнянню та його рішенням таку ж фізичну інтерпретацію, як і в оптиці.



**Рис. 3а.** Дифракційне розсіяння часток на періодичній атомній структурі.

На Рис. 5.3а зображено вхідний пучок часток, кожна з яких має імпульс  $p = \hbar k$ , що зазнають дифракції на періодичному ланцюжку атомів. Джерело та детектори розташовані досить далеко, щоб ми могли розглядати промені (траєкторії часток), як паралельні. Різниця між довжинами шляху двох сусідніх променів складає  $a(\sin \theta_2 - \sin \theta_1)$ . Якщо ці шляхи відрізняються на ціле число довжин хвиль  $\lambda = 2\pi\hbar/p = 2\pi/k$  вхідного пу-

чка, то амплітуди променів, розсіяних від окремих атомів інтерферуватимуть конструктивно, даючи найбільше значення  $|\Psi|^2$  на детекторі. Отже, дифракційні максимуми ймовірності розсіяння спостерігатимуться при кутах, що відповідають умові

$$a(\sin \theta_2 - \sin \theta_1) = n\lambda, \quad (5.25)$$

де  $n$  — ціле число.

Інтерпретація, на яку наводить цей аналіз, найвлучніше характеризується фразою *корпускулярно-хвильовий дуалізм*. Відповідно до цієї концепції, з кожною часткою пов'язана хвиля, хоча сама природа такого поєднання залишається неясною. Більше того, припускається, що „хвильова функція“ Шродінгера може бути й фізичною хвилею в звичайному просторі, проте, як було вказано в § 4.2, така інтерпретація  $\Psi$  втрачає сенс у випадку багаточасткових станів. До всього іншого, ми не повинні забувати, що насправді спостережними є лише частки, і спостерігаючи дифракційну картину, ми фактично рахуємо відносну кількість часток, розсіяних у різних напрямках.

## (b) Розподіл імовірності для імпульсу

Другий метод обчислення ґрунтується на тій обставині, що ймовірність частки отримати в результаті розсіяння імпульс  $\mathbf{p}' - \hbar\mathbf{k}'$  є також імовірністю того, що її буде виявлено в напрямку  $\mathbf{k}'$ . Не ризикуючи ускладнити нашу задачу, ми можемо перейти від ланцюжка атомів на Рис. 4.2 до двовимірної дифракційної ґратки в площині  $xu$ . Крім того, немає потреби обмежувати кристал єдиним шаром атомів, він може мати довільну товщину в напрямку  $-z$  за умови збереження періодичної структури в напрямках  $\pm x$  і  $\pm y$ .

Оскільки система періодична в площині  $xu$ , до неї можна застосувати двовимірний варіант теореми Блоха. Тоді рішення рівняння (3.24) можна підібрати таким чином, щоб вони мали вигляд

$$\Phi_{\mathbf{q}}(\mathbf{x}) = \sum_n e^{i(\mathbf{q}+\mathbf{g}_n)\cdot\mathbf{x}} b_n(\mathbf{q}, z), \quad (5.26)$$

де  $\mathbf{g}_n$  — двовимірний вектор оберненої ґратки, а  $\mathbf{q}$  — двовимірний аналог хвильового вектора Блоха  $\mathbf{k}$  з (5.23); обидва обмежені площиною  $xu$ . Оскільки структура є періодичною лише в напрямках  $x$  та  $y$ , то для кожного фіксованого  $z$  існує рішення у вигляді (5.26), але з теореми Блоха не можна нічого вивести про залежність  $\Phi$  від  $z$ .

Загальне рішення рівняння (5.24) є лінійною комбінацією функцій (5.26), яка підбирається таким чином, щоб відповідати граничним умовам. Ці умови вимагають, щоб при  $z > 0$  (над кристалом)  $\Psi(\mathbf{x})$  містила вхідну хвилю  $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$  з  $k_z < 0$ . Вхідна хвиля набуде блохівської форми, якщо ми встановимо  $\mathbf{q} = \mathbf{k}_{xy}$  (проекція  $\mathbf{k}$  на площину  $xy$ ). Тому немає потреби комбінувати функції  $\Phi_{\mathbf{q}}(\mathbf{x})$  із різними значеннями  $\mathbf{q}$ , щоб вони задовольняли граничним умовам, бо ці умови виконуються однією такою функцією. Отже, фізичне рішення  $\Psi(\mathbf{x})$  можна обрати так, щоб воно мало вигляд (5.26).

Над кристалом потенціал  $W(\mathbf{x})$  обертається на нуль, тому рішення рівняння (5.24) має бути

$$\Psi(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} + \sum_{\mathbf{k}'} r(\mathbf{k}') e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}} \quad \text{для } z > 0, \quad (5.27)$$

де  $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ , а  $|\mathbf{k}'| = |\mathbf{k}| = k$ . Для вхідної хвилі (перший доданок) маємо  $k_z < 0$ , а для розсіяної хвилі повинно бути  $k'_z > 0$ . Імовірність, що частка розсіється в напрямку  $\mathbf{k}'$ , пропорційна  $|r(\mathbf{k}')|^2$ .

Тепер (5.27) має набутися вигляду (5.26). Як уже зазначалося, це можливо, якщо ми встановимо  $\mathbf{q} = \mathbf{k}_{xy}$ , і тоді доданок з  $n = 0$  ( $\mathbf{g}_0 = 0$ ) у виразі (5.26) має бути ідентифікований із вхідною хвилею в (5.27), а решта членів, для яких  $\mathbf{g}_n \neq 0$ , — з розсіяними хвилями. Таким чином,  $\mathbf{k}'_{xy} = \mathbf{k}_{xy} + \mathbf{g}_n$ , де  $\mathbf{g}_n$  — ненульовий вектор двовимірної оберненої ґратки. Останній компонент,  $k'_z$ , визначається через величину  $k'_{xy}$  і умову збереження енергії  $|\mathbf{k}'| = |\mathbf{k}| = k$  [оскільки сама модель процесу, закладена в рівняння (5.24), передбачає, що це пружне розсіяння на нерухомій мішені]. Отже, ми бачимо, що припустимі значення  $\mathbf{k}'$  обмежені дискретним набором, і розсіяння може відбуватися лише в певних дискретних напрямках.

Причина появи дискретного набору напрямків розсіяння, згідно з нашим аналізом, полягає в тому, що компонент імпульсу в площині  $xy$  може мінятися лише на величину, кратну векторові двовимірної оберненої ґратки:

$$(\hbar\mathbf{k}' - \hbar\mathbf{k})_{xy} = \hbar\mathbf{g}_n. \quad (5.28)$$

Передача імпульсу від або до періодичного об'єкта (в нашому випадку, дифракційної ґратки) квантується в напрямках, де наявна періодичність. Тому  $z$ -компонент імпульсу не є безпосереднім учасником такого квантування, бо ґратка не періодична в цьому напрямку (але він фіксований законом збереження енергії).

Для порівняння з результатом, одержаним із застосуванням першого методу, повернемося до одновимірного ланцюжка атомів уздовж осі  $y$  і розглянемо процес лише в площині  $yz$ . Тепер вектори оберненої ґратки лежать у напрямку  $y$  і мають величини  $g_n = 2\pi n/a$ , де  $n$  — цілі числа, а  $a$  — відстань між атомами. Тоді (5.28) дає

$$\hbar k'_y - \hbar k_y = \frac{2\pi\hbar n}{a} \quad (5.29)$$

для зміни імпульсу частки в напрямку періодичності. В результат (5.25) ми могли підставити  $\lambda = 2\pi/k$  і отримати

$$\hbar k(\sin \theta_2 - \sin \theta_1) = \frac{2\pi\hbar n}{a},$$

який точно відтворює (5.29).

Як ми бачимо, обидва методи дають однаковий результат, але пропонують різні інтерпретації. Зокрема, пояснення дифракційного розсіяння через квантовану передачу імпульсу до або від періодичного об'єкта не пропонує і не вимагає буквального ототожнення частки з фізичною хвилею або хвильовим пакетом.

Гіпотезу про квантовану передачу імпульсу для пояснення дифракційного розсіяння було запропоновано В. Дуетіном у 1923 році, ще до того, як Шродінґер та Гайзенберґ сформулювали засади квантової теорії. У цій гіпотезі більше немає потреби, бо тепер вона фігурує, як одна з теорем квантової механіки. Є три загальні приклади взаємозв'язку між періодичністю та квантуванням:

(i) Просторова періодичність із кроком  $a$ , яка дає

$$p' - p = \frac{2\pi\hbar n}{a}, \quad (5.30)$$

де  $p$  і  $p'$  — компоненти початкового та кінцевого імпульсів у напрямку періодичності, а  $n$  — ціле число.

(ii) Періодичність у часі з інтервалом  $T$ , з якої випливає

$$E' - E = \frac{2\pi\hbar n}{T} = n\hbar\omega, \quad (5.31)$$

де  $\omega = 2\pi/T$ , а  $E$  та  $E'$  — початкова та кінцева енергії. Така залежність проявляється в гармонійному осциляторі (Розділ 6) і у впливі на систему гармонійного збурення (Розділ 12).

(iii) Обертальна періодичність на кут  $2\pi$ , що призводить до

$$J' - J = \frac{2\pi n \hbar}{2\pi} = n\hbar, \quad (5.32)$$

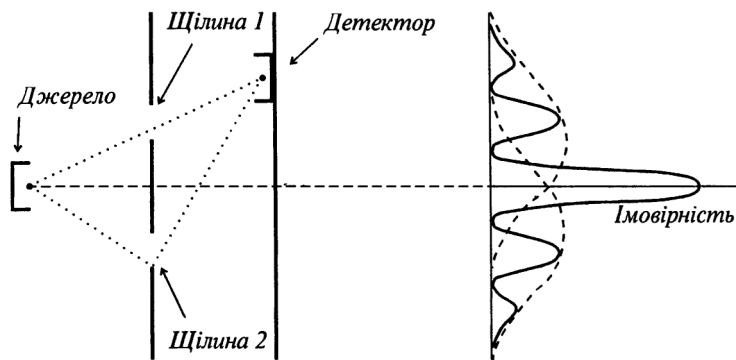
де  $J$  та  $J'$  — початковий та кінцевий моменти імпульсу в напрямку осі обертання. Це продемонстровано в Розділі 7.

Варто відзначити такі характерні властивості:

- Крок квантування завжди обернено пропорційний до періоду.
- Таке квантування не є універсальним законом, воно має місце лише за наявності відповідної періодичності [у випадку (iii) така періодичність присутня завжди].
- Періодичність призводить до квантування лише *змін* у значеннях спостережних величин, а їх абсолютних значень.

### Дифракція на двох щілинах

Дифракція часток при проходженні через екран з двома щілинами уже давно стала класичним прикладом квантової поведінки. Коли відкрито лише одну щілину, то покази детекторів з протилежного боку екрана мають монотонний розподіл, позначений на Рис. 3.5b двома пунктирними графіками для кожної зі щілин; ширина такого розподілу обумовлена розмірами та формою отворів. Та коли відкрито обидві щілини, про-



**Рис. 3b.** Дифракція часток на екрані з двома щілинами. Імовірність має максимуми в тих місцях, де амплітуди складаються у фазі одна з одною, і мінімуми — у протифазі.

сторовий розподіл зареєстрованих детектором часток перетворюється на інтерференційний узор, як показано на суцільному графіку. Положення максимумів та мінімумів можна розрахувати, визначаючи місця конструктивної та деструктивної інтерференції парціальних хвиль, що приходять від різних отворів.

Дослід з дифракції електронів на двох щілинах було проведено Тонумурою та співробітниками ([180], 1989) із застосуванням методу, що дозволяє отримати інтерференційну картину, утворену з послідовності дрібних цяток від потрапляння окремих електронів. Частота випускання електронів була дуже низька, що майже виключало можливість знаходження між джерелом та детектором кількох електронів одночасно, і це переконливо спростовувало будь-які гіпотетичні пояснення дифракції внаслідок електрон-електронної взаємодії. Так само методика досліду не дозволяла ідентифікувати електрони з хвильовими пакетами, бо положення кожного з них фіксувалося з набагато вищою точністю, ніж ширина інтерференційних смуг. Це переконливо засвідчило, що інтерференційна картина є лише статистичним розподілом розсіяних часток.

Дивовижний результат цього експерименту полягає в тому, що при двох відкритих щілинах існують місця (дифракційні мінімуми), де ймовірність майже нульова, хоча при одній відкритій щілині уди потрапляло багато часток. Це насправду вражаюче фізичне явище з надзвичайно цікавими теоретичними наслідками. На жаль, воно призвело до появи хибного твердження про те, що нібито в царині квантової механіки втрачає свою чинність „класична“ теорія ймовірності. Ця аргументація звучить приблизно так:

Якщо відкрита лише щілина 1, то ймовірність зареєструвати частку в положенні  $X \in P_1(X)$ . Аналогічно, коли відкрита лише щілина 2, ця ймовірність є  $P_2(X)$ . Нехай при двох одночасно відкритих щілинах відповідна ймовірність буде  $P_{12}(X)$ . Тепер проходження через 1 і проходження через 2 є *взаємовиключними подіями*, а отже, за правилом додавання ймовірностей таких подій (1.49а) ми робимо висновок, що  $P_{12}(X) = P_1(X) + P_2(X)$ . Але всі три ймовірності можна виміряти в експерименті й переконатися, що ця рівність не виконується. Таким чином, правило додавання ймовірностей (1.49а) не виконується в квантовій механіці.

Здавалося б, цей висновок мав стати дуже тривожним сигналом, позаяк теорія ймовірності дуже тісно пов'язана з інтерпретацією квантової механіки, тож несумісність між ними може призвести до дуже серйозних



наслідків. Та насправді наведений вище радикальний висновок є лише результатом некоректного застосування теорії ймовірності.

Треба остерігатися ймовірнісних тверджень, виражених у формі  $P(X)$  замість  $P(X|C)$ . Другий аргумент можна безпечно опустити лише в тому разі, якщо умова  $C$  є очевидною з контексту і *незмінною* впродовж розгляду всієї задачі. Проте в наведеному прикладі це зовсім не так, і насправді в аргументах мають бути присутні три цілком різні умови:

$C_1$  = (щілина 1 відкрита, щілина 2 закрита; хвильова функція =  $\Psi_1$ ),

$C_2$  = (щілина 1 закрита, щілина 2 відкрита; хвильова функція =  $\Psi_2$ ),

$C_3$  = (щілина 1 відкрита, щілина 2 відкрита; хвильова функція =  $\Psi_{12}$ ).

І в досліді ми спостерігаємо лише те, що  $P_{12}(X|C_3) \neq P_1(X|C_1) + P_2(X|C_2)$ . Проте теорія ймовірності й не вимагає, щоб у цьому виразі стояв знак рівності. Нерівність цих імовірностей (викликана інтерференцією) суперечить класичній механіці, але не самій теорії ймовірності.

Це та багато інших хибних застосувань теорії ймовірності в квантовій механіці детально розглядається в [12].

## § 5.5. Дифракційне розсіяння: експеримент

Дифракційне розсіяння на періодичних структурах (зазвичай кристалічних ґратках) спостерігалось для багатьох різних типів часток. У наступній таблиці наведено перелік найранніших досліджень цього явища.

Дослідження дифракційного розсіяння для різних часток		
Рентгенівські фотони $\gamma$	1912	М. фон Лауе
Електрони $e$	1927	К. Девісон і Л. Г. Гермер
Атоми гелію He	1930	О. Штерн
Молекули водню $H_2$	1930	О. Штерн
Нейтрони $n$	1936	Д. П. Мітчел і П. Н. Паверс

З погляду теорії, найважливішим результатом цих дослідів є висновок про універсальність дифракції. Частки можуть бути зарядженими або нейтральними, елементарними або складними. Взаємодія може бути електромагнітною або ядерною (як у випадку з нейтроном). Асоціювану з часткою довжину хвилі  $\lambda$  можна отримати з експерименту через вираз (5.25) і переконатися, що вона пов'язана з імпульсом за формулою

де Бройля  $\lambda = h/p$ , де  $h = 2\pi\hbar$  — постійна Планка. Таким чином, дифракційні досліди дозволяють виміряти універсальну константу  $\hbar$ , яку ми запровадили в теорію з рівняння (3.55).

Уявімо, що ми могли б отримати різні значення емпіричного параметра „ $h$ ” для різних часток. Тоді ми мали б можливість розрізнити  $h_e$ ,  $h_n$  і т. д. для електронів, нейтронів та інших. Також ми мали б окрему величину  $h_\gamma$  для фотона із співвідношення Бора  $h_\gamma\nu = E_2 - E_1$ , що визначає частоту випромінення при переході атома між різними енергетичними рівнями. І хоча існує можливість виміряти ці параметри безпосередньо через формули, що дають їх означення, набагато точніші результати можна отримати з комбінації непрямих вимірювань (Фішбах, Грін і Х'юз [61], 1991). У цих дослідах було встановлено, що співвідношення  $h_e/h_\gamma$  і  $h_n/h_\gamma$  відрізняються від одиниці не більше, ніж на  $10^{-8}$ .

Результати для атомів гелію та молекул водню зокрема визначні тим, що засвідчують наявність дифракції не лише для елементарних часток, а й для об'єктів зі складною внутрішньою структурою. Дифракційне розсіяння *компаративних часток* також має велике значення і для інтерпретації квантової механіки. Ефективна довжина пов'язаної з часткою хвилі є  $\lambda = h/p$ , де  $p$  — її імпульс. Отже, в дифракційному експерименті частці маси  $m_i$ , що рухається з нерелятивістською швидкістю  $v_i$ , відповідає довжина хвилі  $\lambda_i = h/m_i v_i$ . Якби це була реальна фізична хвиля, яка розповсюджується в звичайному просторі, то слід було б очікувати, що багаточастковому об'єктові має відповідати сукупність фізичних хвиль  $\{\lambda_i = h/m_i v_i\}$ , які повинні виявити себе на дифракційній картині. Однак цього не відбувається. Насправді спостерігається лише одна хвиля довжиною  $\lambda = h/\sum_i m_i v_i$ , що відповідає повному імпульсові композитної системи. Цей результат жодним чином не вписується в інтерпретацію часток, як реальних фізичних хвиль. З іншого боку, аналіз, проведений у підсекції (а) § 5.4, взагалі обходить без хвильової інтерпретації; він дає пояснення дифракції через квантовану передачу імпульсу до або від дифракційної ґратки. Крок такого квантування цілком визначається періодичністю ґратки і не залежить від природи розсіюваних часток. І експеримент з розсіяння композитних часток цілком підтверджує цей висновок.

Класичним прикладом дифракції є розсіяння світла на ґратці, що являє собою періодичний розподіл певної речовини. Зворотнє явище — дифракція речовини на світлі, відоме як *ефект Капіци-Дірака*. Гоулд, Раф і Прічард ([79], 1986) продемонстрували відхилення нейтральних атомів натрію в електромагнітному полі, утвореному стоячими плоскими

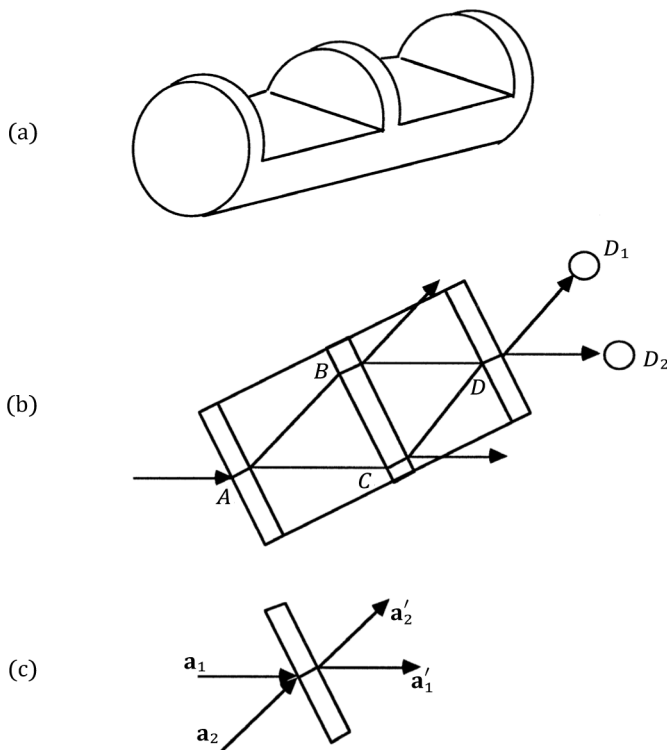
хвилями від лезера, і підтвердили факт передачі імпульсу за формулою (5.30). У їхньому досліді атоми взаємодіяли з полем через електричну поляризацію. Оскільки енергія такої взаємодії пропорційна квадратові напруженості поля, то параметр просторової періодичності  $a$  становив половину довжини хвилі лазерного променя.

У дев'яностих роках було проведено чимало експериментів з атомної інтерференції за прикладом раніших дослідів з оптичною та електронною інтерференцією. Наприклад, експеримент Царнала і Млинека ([35], 1991) з проходження атомів гелію через екран з двома щілинами завширшки 1 мікрон ( $10^{-6}$  м), розташованих на відстані 8 мікронів одна від одної. Дебройлева довжина хвилі в цих експериментах зазвичай значно менша за розмір самого атома, тоді як при електронній або нейтронній дифракції довжина хвиль набагато перевищує розмір самих часток. Це дає ще один аргумент проти буквального ототожнення часток з хвилювими пакетами.

Ми можемо розраховувати, що в майбутньому атомна інтерферометрія забезпечить нас новими фундаментальними дослідями з перевірки квантової теорії. Проте досі найкориснішими частками в таких експериментах залишаються нейтрони. Картини їх дифракції на одній або двох щілинах з точністю підтверджують усі теоретичні передбачення (див. Зайлінгер [194] та Гелер і Зайлінгер [68]).

Дуже тонкі досліді з нейтронної інтерференції стали можливі завдяки *монокристалічному інтерферометру*, вигляд якого показано на Рис. 5.4(а). Його вирізають із цілого кремнієвого кристала розміром близько 10 см, що не має зсувів у внутрішній структурі та поверхневих нерівностей (хоча може містити невеликі порожнини, якщо вони не впливають на його роботу). Різні дифракційні пучки зображено на Рис. 5.4(б). Вхідний пучок з  $A$  поділяється на пропущений пучок  $AC$  і відхилений внаслідок берегівської дифракції  $AB$ . Такий самий поділ відбувається в  $B$  і  $C$ , після чого пропущені пучки залишають пристрій і більше не беруть участі в експерименті. Обидва пучки, що зазнали дифракції,  $BD$  і  $CD$ , когерентно рекомбінують у  $D$ , де знову має місце берегівська дифракція. Інтерференція амплітуд двох пучків спостерігається за допомогою детекторів  $D_1$  і  $D_2$ . Амплітуда в  $D_1$  є сумою пропущеної частини з пучка  $CD$  та відхиленої з  $BD$ ; і, відповідно, амплітуда в  $D_2$  є сумою пропущеної частини з пучка  $BD$  та відхиленої з  $CD$ .

Для аналізу процесу в інтерферометрі ми припустимо, що коефіцієнти пропускання та відхилення однакові в усіх вершинах  $A, B, C$  і  $D$ , а також що між цими вершинами відбувається вільне поширення плоских хвиль.



**Рис. 5.4.** Вигляд і принцип дії монокристалічного інтерферометра для нейтронів.

Як видно зі схеми, тут присутні лише два напрямки розповсюдження, і в кожній вершині амплітуди розподіляються між цими двома модами. Рис. 5.4(b) показує загальну схему дифракційної вершини. Оскільки еволюцією та розповсюдженням керують унітарні оператори, то звідси випливає, що співвідношення між амплітудами вхідних та вихідних хвиль має вигляд

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}'_1 \\ \mathbf{a}'_2 \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{a}_2 \end{pmatrix}; \quad U = \begin{bmatrix} t & r \\ s & u \end{bmatrix}. \quad (5.33)$$

Тут  $U$  унітарна матриця. Елементи  $t$  і  $u$  є коефіцієнтами пропускання, а  $r$  і  $s$  — коефіцієнтами відхилення.

З унітарності матриці випливає кілька корисних співвідношень для цих коефіцієнтів. Наприклад, умова  $UU^\dagger = 1$  дає  $|t|^2 + |r|^2 = 1$  і  $|s|^2 + |u|^2 = 1$ . Детермінант унітарної матриці завжди має одиничний модуль:

$$|tu - rs| = 1. \quad (5.34)$$

Співвідношення  $U^{-1} = U^{\dagger}$  має вигляд

$$\frac{1}{tu - rs} \begin{bmatrix} u & -r \\ -s & t \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} t^* & s^* \\ r^* & u^* \end{bmatrix}. \quad (5.35)$$

З (5.34) і (5.35) випливає, що  $|u| = |t|$  і  $|s| = |r|$ . Комплексні числа можна розглядати, як двовимірні вектори, для яких справедлива нерівність трикутника (1.2). Отже, з (5.34) отримуємо  $|tu| + |rs| \geq 1$ . А оскільки  $|u| = |t|$  і  $|s| = |r|$ , то це дає, що  $|tu| + |rs| = 1$ . Це сумісно з (5.34) лише у випадку, коли  $tu$  і  $-rs$  мають однакову комплексну фазу, а отже, величина  $rs/tu$  є дійсною й від'ємною.

Якщо амплітуда в  $A$  є  $\Psi_A$ , то амплітуда в  $B$  і  $C$  має бути  $\Psi_B = r\Psi_A e^{i\phi_{AB}}$  і  $\Psi_C = t\Psi_A e^{i\phi_{AC}}$ . Тут  $\phi_{AB}$  і  $\phi_{AC}$  — фазові зсуви, що виникають при проходженні хвиль через порожній простір між  $A$  та  $B$  і  $A$  та  $C$  відповідно. Амплітуда, яка доходить до детектора  $D_1$ , є сумою амплітуд від шляхів  $ABDD_1$  і  $ACDD_1$ :

$$\begin{aligned} \Psi_{D_1} &= \Psi_A (r e^{i\phi_{AB}} s e^{i\phi_{BD}} r + t e^{i\phi_{AC}} r e^{i\phi_{CD}} u) = \\ &= \Psi_A r (r s e^{i\phi_{ABD}} + t u e^{i\phi_{ACD}}). \end{aligned} \quad (5.36)$$

Схожим чином отримуємо й амплітуду, що доходить до  $D_2$ :

$$\begin{aligned} \Psi_{D_2} &= \Psi_A (r e^{i\phi_{AB}} s e^{i\phi_{BD}} t + t e^{i\phi_{AC}} r e^{i\phi_{CD}} s) = \\ &= \Psi_A t r s (e^{i\phi_{ABD}} + e^{i\phi_{ACD}}). \end{aligned} \quad (5.37)$$

В обох виразах ми позначили  $\phi_{ABD} = \phi_{AB} + \phi_{BD}$  і  $\phi_{ACD} = \phi_{AC} + \phi_{CD}$ .

Будь-яке збурення, що по-різному впливає на фази, пов'язані з двома шляхами, призведе до зміни інтенсивності пучків, що досягають детекторів  $D_1$  і  $D_2$ . Оскільки величина  $rs/tu$  дійсна й від'ємна, то звідси випливає, що при конструктивній інтерференції у виразі (5.37) доданки в (5.36) інтерферуватимуть деструктивно — і навпаки. Назручніший спосіб виявити таку інтерференцію, це відстежувати різницю в показах лічильників у детекторах  $D_1$  і  $D_2$ .

В одному з найпримітніших дослідів такого типу Колела, Оверхаузер і Вернер ([44], 1975) виявили квантову інтерференцію, викликану гравітацією. Інтерферометр обертався довкола горизонтальної осі, скерованої паралельно вхідному пучку, що призводило до виникнення різниці гравітаційних потенціалів на шляхах  $AC$  і  $BD$ , яка проявлялась у фазовому зсуві інтерференційної картини. Різницю фаз між двома шляхами легко розрахувати, виходячи з незмінності суми кінетичної та потенційної енергії:  $\hbar^2 k^2 / 2m + mgz = E$ , де  $m$  маса нейтрона,  $g$  прискорення сили

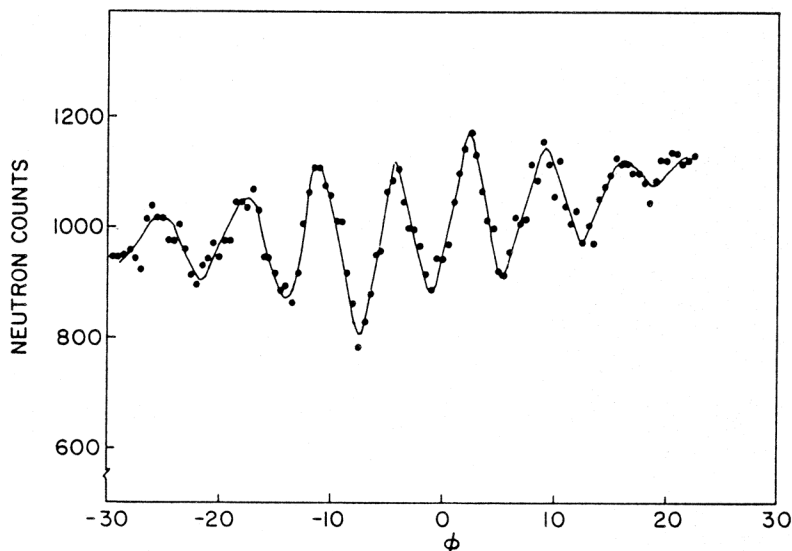
тяжіння, а  $z$  висота відносно вхідного пучка. Зміна фази вздовж кожного шляху обчислюється з  $\int k ds$ , де  $ds$  — елемент довжини цього шляху. З урахуванням того, що потенційна енергія дає малий внесок у повну енергію, ми отримуємо

$$k \approx \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} - \frac{m^2 g z}{\hbar \sqrt{2mE}}.$$

Фазова різниця між двома шляхами є  $\Phi_{ABD} - \Phi_{ACD} = \oint k ds$ , внесок до якої дає лише доданок, що містить  $z$ . Інтеграл  $\oint k ds$  по замкненому контуру  $ABDCA$  дорівнює вертикальній проекції площі, окресленої цим контуром. Отже, фазова різниця є

$$\Phi_{ABD} - \Phi_{ACD} = \frac{m^2 g}{\hbar \sqrt{2mE}} A \sin \alpha = \frac{m^2 g \lambda}{2\pi \hbar^2} A \sin \alpha, \quad (5.38)$$

де  $A$  — площа петлі  $ABDCA$ , а  $\alpha$  — кут її нахилу відносно горизонтальної площини. У другій рівності  $\lambda = 2\pi \hbar / \sqrt{2mE}$  — дебройлева довжина хвилі вхідних нейтронів.



**Рис. 5.5.** Інтерференційна картина, викликана зміною потенційної енергії нейтронів у полі земного тяжіння. Тут  $\phi$  не різниця фаз, а кут обертання інтерферометра довкола горизонтальної осі. [Передрук із Colella, Overhauser, and Werner, *Phys. Rev. Lett.* **34**, 1472 (1975).]

Інтерференційна картина на Рис. 5.5 була першим експериментальним свідченням того, що ньютонівська теорія гравітації чинна і в кванто-

вій механіці, а гравітаційний потенціал може фігурувати в рівнянні Шродінгера, як і будь-яка інша потенційна енергія.

## § 5.6. Рух в однорідному силовому полі

Щоразу, коли фізична система виявляється інваріантною відносно просторових переміщень, ми можемо очікувати, що імпульсне представлення буде зручнішим для проведення обчислень, ніж координатне. До прикладу, розглянемо одновимірний рух вільної частки з певним початковим станом  $|\Psi(0)\rangle$ . У координатному представленні ця задача вимагає розв'язання диференційного рівняння другого порядку в часткових похідних. Зате в імпульсному представленні з вектором стану, означеним, як  $\langle \hbar k | \Psi(t) \rangle = \hbar^{-1/2} \Phi(k, t)$ , рівняння Шродінгера набуває вигляду

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Phi(k, t) = i\hbar \frac{\partial \Phi(k, t)}{\partial t}, \quad (5.39)$$

яке розв'язується тривіальним чином:

$$\Phi(k, t) = e^{-i\hbar k^2/2m} \Phi(k, 0). \quad (5.40)$$

Координатне представлення функції стану можна отримати через обернене перетворення Фур'є:

$$\Psi(x, t) = (2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(ikx - \frac{i\hbar k^2}{2m} t\right) \Phi(k, 0) dk. \quad (5.41)$$

Візьмемо, як приклад, початковий стан у формі розподілу Гауса:

$$\Psi(x, 0) = (2\pi a^2)^{-1/4} e^{-x^2/4a^2}. \quad (5.42a)$$

Його перетворенням Фур'є буде

$$\Phi(k, 0) = \left(\frac{2a^2}{\pi}\right)^{-1/4} e^{-a^2 k^2}. \quad (5.42b)$$

Функції нормовано таким чином, щоб  $\int |\Psi|^2 dx = \int |\Phi|^2 dk = 1$ . Підстановка (5.42b) в (5.41) дає

$$\Psi(x, t) = \left(\frac{a^2}{2\pi^3}\right)^{-1/4} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[ikx - \left(a^2 + \frac{i\hbar t}{2m}\right) k^2\right] dk. \quad (5.43)$$

Цей інтеграл можна перетворити до стандартного вигляду, привівши аргумент експоненційної функції до повного квадрата. Після інтегрування отримаємо

$$\Psi(x, t) = (2\pi a^2)^{-1/4} \left[ 1 + \frac{i\hbar t}{2ma^2} \right]^{-1/2} \exp \left[ -\frac{x^2}{4a^2} \left( 1 + \frac{i\hbar t}{2ma^2} \right)^{-1} \right]. \quad (5.44)$$

А тепер розглянемо рух частки в однорідному силовому полі — тобто в такому, що має однакову за напрямом і абсолютною величиною напруженість у кожній точці простору. Оскільки компоненти імпульсу, перпендикулярні до вектора напруженості, залишаються незмінними, ми можемо обмежитися розглядом руху лише в напрямку дії сили, а отже, задача по суті стає одновимірною. Оберемо систему координат так, щоб сила діяла в напрямі  $+x$ , тоді потенціал має вигляд  $W = -FQ_x$ , де  $Q_x$  —  $x$ -компонент оператора положення (в координатному представленні  $Q_x = x$ ). Стаціонарні стани описуються власними векторами з рівняння

$$H|\Psi_E\rangle \equiv \left( \frac{p^2}{2m} - FQ_x \right) |\Psi_E\rangle = E|\Psi_E\rangle. \quad (5.45)$$

Навіть при тому, що напруженість поля інваріантна відносно переміщень  $x \rightarrow x + a$ , гамільтоніан такої властивості не має. Проте рівняння (5.45) інваріантне відносно комбінованих перетворень

$$x \rightarrow x + a, \quad E \rightarrow E - Fa. \quad (5.46)$$

Отже, нам потрібно обчислити власну функцію лише для одного значення енергії, а решту власних функцій можна отримати через перетворення (5.46).

В імпульсному представленні (5.45) набуває вигляду

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Phi(k) - iF \frac{\partial \Phi(k)}{\partial k} = E \Phi(k), \quad (5.47)$$

із застосування виразу (5.6) для оператора положення. Таким чином, замість диференційного рівняння другого порядку в координатному представленні, ми отримали рівняння лише першого порядку. Його рішенням є

$$\Phi(k) = A \exp \left( i \left[ k \frac{E}{F} - k^3 \frac{\hbar^2}{6mF} \right] \right), \quad (5.48)$$

де  $A$  — довільна константа. Відповідну функцію стану в координатному представленні можна отримати через перетворення Фур'є:

$$\Psi_E(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left( i \left[ k \left( x + \frac{E}{F} \right) - k^3 \frac{\hbar^2}{6mF} \right] \right) dk. \quad (5.49)$$



Оскільки нормування є довільним, ми надалі випускатимемо множник  $A$ .  $\Psi_E(x)$  дійсна функція, бо  $\Phi(-k) = \Phi^*(k)$ . Очевидно, що вираз (5.49) інваріантний відносно перетворення (5.46), тому власні функції для різних значень енергії перебувають у співвідношенні

$$\Psi_{E'}(x) = \Psi_E(x + x'), \quad (5.50)$$

де  $x' = (E' - E)/F$ . Отже, нам досить обчислити (5.49) для  $E = 0$ .

Функція  $\Psi_0(x)$  еквівалентна функції Ейрі, з точністю до масштабних множників для  $\Psi$  і  $x$ . Її не можна виразити в аналітичному вигляді через простіші функції, проте можна дослідити асимптотичну поведінку в межі  $x \rightarrow \pm\infty$  методом перевала. Запишемо

$$\Psi_0(x) = \int_C e^{i\alpha(k)} dk, \quad \alpha(k) = kx - k^3 \frac{\hbar^2}{6mF}. \quad (5.51)$$

Підінтегральний вираз є аналітичною функцією  $k$ , тому контур інтегрування  $C$ , від  $-\infty$  до  $+\infty$  вздовж дійсної осі, можна неперервно деформувати так, щоб  $\text{Im } k^3 \leq 0$  при  $k \rightarrow \pm\infty$ , а отже, про збіжність інтеграла не варто турбуватися.

При  $|x| \rightarrow \infty$  підінтегральний вираз, як функція  $k$ , дедалі швидше осцилює, тому його внесок до інтеграла близький до нуля за винятком точок, де  $\partial\alpha/\partial k = 0$ . Поблизу таких точок стаціонарної фази внески до інтеграла від сусідніх значень  $k$  додаються когерентно, не скорочуючи один одного, тому в остаточному результаті переважатимуть саме такі області. Рівняння для стаціонарної фази  $\partial\alpha/\partial k = 0$  має два рішення:

$$k_0(x) = \pm \frac{\sqrt{2mxF}}{\hbar}. \quad (5.52)$$

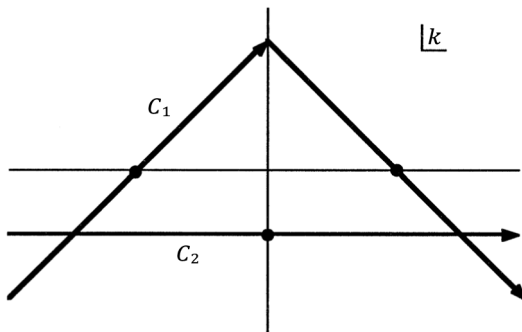
В околицях обох цих точок  $\alpha(k)$  можна апроксимувати за другим порядком ряду Тейлора:

$$\alpha(k) = \frac{2k_0x}{3} - \frac{k_0\hbar^2}{2mF}(k - k_0)^2. \quad (5.53)$$

Внесок до інтеграла від кожної з цих точок є

$$e^{2ik_0x/3} \int_C e^{-a(k-k_0)^2} dk, \quad \left(a = \frac{ik_0\hbar^2}{2mF}\right). \quad (5.54)$$

Контур інтегрування  $C$  треба деформувати так, щоб він проходив через



**Рис. 5.6.** Контури інтегрування в комплексній площині  $k$  для обчислення виразу (5.54). Контур  $C_1$  придатний для  $x \rightarrow -\infty$ , а контур  $C_2$  — для  $x \rightarrow +\infty$ . Жирними крапками позначено відповідні точки стаціонарної фази.

$k = k_0$  під кутом, для якого  $a(k - k_0)^2$  є дійсним і позитивним уздовж  $C$ , тоді величина підінтегрального виразу швидко спадатиме при віддаленні від максимуму в  $k = k_0$ . Таким чином, ми приблизно маємо

$$\int_C e^{-a(k-k_0)^2} dk \approx \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-az^2} dz = \left(\frac{\pi}{a}\right)^{1/2}. \quad (5.55)$$

Для  $x < 0$  обидві точки стаціонарної фази розташовано на уявній осі. Вказаній вище умові відповідає контур інтегрування  $C_1$  у вигляді горизонтальної прямої, проведеної через будь-яку з них; нехай це буде нижче дійсної осі, через  $k_0 = -i\sqrt{2m|x|F/\hbar}$ . Тоді маємо таку асимптотичну поведінку:

$$\Psi_0(x) \approx |x|^{-1/4} \exp\left[-\frac{2}{3} \frac{\sqrt{2mF}}{\hbar} |x|^{3/2}\right], \quad (x \rightarrow -\infty). \quad (5.56)$$

Для  $x > 0$  точки стаціонарної фази розташовано на дійсній осі, і для забезпечення швидкого спадання підінтегрального виразу контур  $C_2$  треба проводити через обидві, як показано на Рис. 5.6. Кут нахилу в обох випадках має бути  $45^\circ$ , щоб  $a(k - k_0)^2$  були дійсними та позитивними вздовж усього контуру. Внески в інтеграл від обох точок стаціонарної фази комплексно спряжені між собою [а через нахил прямих до них ще додаються множники  $\exp(\pm i\pi/4)$ ], і їх сума дає таку асимптотику:

$$\Psi_0(x) \approx 2|x|^{-1/4} \cos\left[\frac{2}{3} \frac{\sqrt{2mF}}{\hbar} |x|^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right], \quad (x \rightarrow +\infty). \quad (5.57)$$

При розв'язанні цієї задачі в імпульсному представленні ми отримали єдине рішення для фіксованого  $E$ . Та якби ми розв'язували диференціальне рівняння другого порядку в координатному представленні, то воно б дало два різні рішення: одне, яке ми щойно дослідили, і друге — яке експоненційно розбігається при  $x \rightarrow -\infty$ . В імпульсному представленні воно автоматично зникло, що прямо вказує на його нефізичність. Утім, і в координатному представленні його б негайно довелося відкинути. Така функція зростає на нескінченності швидше за будь-який степінь  $x$ , а тому не належить ні до  $\Omega$ , ні до  $\mathcal{H}$ , ні до  $\Omega^\times$  з триплета оснащеного гільбертового простору (§ 1.4) і не може бути власною функцією самоспряженого оператора в (5.45).

## Література до Розділу 5

Деякі найраніші дифракційні експерименти наведено у Тріга [181], Р. 10. Їх можна порівняти із сучасними монокристалічними інтерферометрами, описаними Стаденманом [172] і Грінбергером [82]. Переваги та потенційні можливості атомної інтерферометрії обговорюються у статті Прічарда [149].

## Задачі

**5.1.** Покажіть, що комутатор оператора положення з функцією оператора імпульсу дає  $[Q_x, f(P_x)] = i\hbar \partial f / \partial P_x$  (пор. із Задачею 4.1).

**5.2.** Який вигляд має перетворення Галілея для вектора стану  $|\Psi\rangle$  в імпульсному представленні  $\Phi(\mathbf{k}) = \langle \hbar \mathbf{k} | \Psi \rangle$ ?

**5.3.** Локальний потенціал описується оператором  $W$ , матриця якого в координатному представленні є діагональною,  $\langle \mathbf{x} | W | \mathbf{x}' \rangle = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') W(\mathbf{x})$ . Які відповідні властивості має ця матриця в імпульсному представленні?

**5.4.** Гамільтоніан електрона в кристалі є  $H = P^2/2m + W$ , де потенціал  $W$  має симетрію кристалічної ґратки. Зокрема, він залишається інваріантним при просторових переміщеннях типу (5.16). Запишіть рівняння на власні значення  $H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$  в імпульсному представленні й покажіть, що воно рішення природним чином призводять до власних векторів блохівської форми. Не застосовуйте для цього теорему Блоха, оскільки мета задачі — дати її альтернативне доведення.

**5.5.** Для функції стану  $\Psi(x) = c \exp(iqx - ax^2)$ , де  $c$  — певна нормувальна константа,  $q$  і  $a$  — дійсні параметри, обчисліть середнє значення імпульсу двома шляхами:

(а) Застосувавши координатне представлення:

$$\langle P \rangle = \int \Psi^*(x) \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi(x) dx.$$

(б) Застосувавши імпульсне представлення, щоб отримати розподіл імовірності для імпульсу, а потім обчислити середнє значення імпульсу з цього розподілу.

Тепер обчисліть  $\langle P^2 \rangle$ , скориставшись належними узагальненнями методів з (а) і (б).

**5.6.** Застосуйте імпульсне представлення для знаходження основного стану частки в одновимірному притягувальному потенціалі  $W(x) = c \delta(x)$ ,  $c < 0$ . Порівняйте це рішення з рішенням аналогічної Задачі 4.9 для координатного представлення.

**5.7.** Визначте часову еволюцію  $\Psi(x, t)$  для одновимірного гаусового початкового стану (5.42а) в постійному однорідному полі.

**5.8.** Обчисліть часову еволюцію гаусового початкового стану вільної частки з ненульовим середнім імпульсом  $\hbar q$ :

$$\Psi(x, 0) = \Psi(x, 0) = (2\pi a^2)^{-1/4} e^{-x^2/4a^2} e^{iqx}.$$

Застосуйте метод приведення до повного квадрата, як це було зроблено при оцінці інтеграла в (5.43).

Перевірте отриману відповідь, застосувавши перетворення Галілея (§ 4.3) до виразу (5.44), що є рішенням цієї задачі для  $q = 0$ .

## Розділ 6

### Гармонійний осцилятор

Гармонійним осцилятором називається система, що перебуває в притягувальному потенційному полі, енергія якого зростає пропорційно до квадрата відхилення від точки рівноваги. Гамільтоніан такого об'єкта, що рухається в одному вимірі, є

$$H = \frac{1}{2m}P^2 + \frac{m\omega^2}{2}Q^2, \quad (6.1)$$

де  $P$  оператор імпульсу,  $Q$  оператор положення, а  $m$  маса частки. Легко показати, розв'язавши класичне рівняння руху, що  $\omega$  є частотою коливань (у радіанах на одиницю часу). Гармонійний осцилятор важливий тим, що він служить моделлю для багатьох видів коливальних систем, включно з електромагнітним полем (див. Розділ 19). Крім того, методи, до яких ми вдаємося при розгляді цього питання, виявляться корисними і для інших застосувань.

#### § 6.1. Алгебраїчне рішення

Спектр власних значень гамільтоніана (6.1) можна одержати суто алгебраїчним шляхом, скориставшись лише комутаційним співвідношенням

$$[Q, P] = i\hbar \quad (6.2)$$

і самоспряженістю операторів  $P$  і  $Q$ :

$$P = P^\dagger, \quad Q = Q^\dagger. \quad (6.3)$$

Передовсім запровадимо безрозмірні оператори положення та імпульсу:

$$q = \left(\frac{n\omega}{\hbar}\right)^{1/2} Q, \quad (6.4)$$

$$p = \left(\frac{1}{m\hbar\omega}\right)^{1/2} P, \quad (6.5)$$

що задовольняють комутаційному співвідношенню

$$[q, p] = i. \quad (6.6)$$

У термінах цих нових змінних гамільтоніан набуває вигляду

$$H = \frac{1}{2}\hbar\omega(p^2 + q^2). \quad (6.7)$$

Далі запровадимо ще два оператори:

$$a = \frac{q + ip}{\sqrt{2}}, \quad (6.8)$$

$$a^\dagger = \frac{q - ip}{\sqrt{2}}. \quad (6.9)$$

Із (6.3) випливає, що знак спряження<sup>†</sup> поставлено коректно і  $a^\dagger$  справді є спряженим до  $a$ . Із причин, які стануть зрозумілі далі, оператори  $a^\dagger$  і  $a$  мають назву *сходові оператори*. Також  $a^\dagger$  називають *оператором підвищення*, а  $a$  — *оператором пониження*.

Із (6.6) маємо комутаційне співвідношення:

$$[a, a^\dagger] = 1 \quad (6.10)$$

Тепер гамільтоніан (6.7) можна переписати в еквівалентному вигляді через  $a$  та  $a^\dagger$ :

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2}\hbar\omega(aa^\dagger + a^\dagger a) = \\ &= \hbar\omega\left(aa^\dagger - \frac{1}{2}\right) = \\ &= \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right). \end{aligned} \quad (6.11)$$

Остання з цих рівностей буде для нас найкориснішою.

Задача знаходження власних значень гамільтоніана  $H$  зводиться до дослідження спектру оператора

$$N = a^\dagger a. \quad (6.12)$$

Скориставшись тотожністю  $[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$  і співвідношенням (6.10), можна переконатися, що

$$[N, a] = -a, \quad (6.13)$$

$$[N, a^\dagger] = a^\dagger. \quad (6.14)$$

Із цих співвідношень легко отримати спектр оператора  $N$ .

Нехай  $N|v\rangle = v|v\rangle$  для  $\langle v|v\rangle \neq 0$ . Тоді з (6.13) маємо

$$Na|v\rangle = a(N-1)|v\rangle = (v-1)a|v\rangle.$$

Отже,  $a|v\rangle$  є власним вектором оператора  $N$  із власним значенням  $v-1$  за умови, що  $a|v\rangle \neq 0$ . Квадрат норми цього вектора є

$$(\langle v|a^\dagger)(a|v\rangle) = \langle v|N|v\rangle = v\langle v|v\rangle.$$

Оскільки норма має бути дійсним невід'ємним числом, то  $v \geq 0$ , а отже, власні значення оператора  $N$  не можуть бути від'ємними. Шляхом багаторазового застосування оператора  $a$  можна утворити необмежену послідовність власних векторів, що мають власні значення  $v-1, v-2, v-3, \dots$  Проте це суперечитиме отриманому вище результату про невід'ємність власних значень. Ця суперечність усувається лише за умови, що послідовність обривається на значенні  $v=0$ , бо тоді норма вектора  $a|0\rangle$  дорівнює нулю, а отже, сам вектор є нульовим і подальше застосування операторів  $a$  не утворюватиме нових векторів.

Із (6.14) випливає, що

$$Na^\dagger|v\rangle = a^\dagger(N+1)|v\rangle = (v+1)a^\dagger|v\rangle.$$

Таким чином,  $a^\dagger|v\rangle$  є власним вектором оператора  $N$  з власним значенням  $v+1$ :  $a^\dagger|v\rangle = |v+1\rangle$ . Квадрат норми цього вектора дорівнює

$$(\langle v|a)(a^\dagger|v\rangle) = \langle v|(N+1)|v\rangle = (v+1)\langle v|v\rangle,$$

і ніколи не обертається на нуль, бо  $v \geq 0$ . Багаторазове застосування  $a^\dagger$  утворює необмежену послідовність, у якій кожен наступний власний вектор має власне значення на одиницю більше за попереднє. Ця послідовність починається з власного значення  $v=0$ , отже, спектр оператора  $N$  складається з усіх невід'ємних цілих чисел  $v=n$ .

Ортонормовані власні вектори оператора  $N$  будуть позначатися через  $|n\rangle$ :

$$N|n\rangle = n|n\rangle, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (6.15)$$

Оскільки вектори  $|n\rangle$  є нормованими на одиницю векторами  $|v\rangle$ , то ми можемо записати  $a^\dagger|n\rangle = C_n|n+1\rangle$ . Тоді  $\langle n|aa^\dagger|n\rangle = |C_n|^2\langle n|n\rangle$ , а з іншого боку,  $\langle n|aa^\dagger|n\rangle = \langle v|(N+1)|v\rangle = (n+1)\langle n|n\rangle$ , тому

$$|C_n| = \sqrt{n+1}.$$

Фаза вектора  $|n + 1\rangle$  довільна, бо він визначається лише з умови (6.15). Тож ми вільні в її виборі і можемо встановити, що  $C_n$  є дійсним і позитивним. У підсумку це дає

$$a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle. \quad (6.16)$$

З цього результату випливає, що

$$|n\rangle = (n!)^{-1/2} (a^\dagger)^n |0\rangle. \quad (6.17)$$

Із (6.16) та умови ортонормованості власних векторів отримуємо матричні елементи оператора  $a^\dagger$ :

$$\langle n' | a^\dagger | n \rangle = \sqrt{n} \delta_{n', n+1}. \quad (6.18)$$

Оскільки  $a$  є спряженим до  $a^\dagger$ , його матричні елементи шляхом транспонування (6.18):

$$\langle n' | a | n \rangle = \sqrt{n} \delta_{n', n-1}. \quad (6.19)$$

Записаний у вигляді матриці, вираз (6.18) має ненульові елементи лише в першій позиції нижче діагоналі, а (6.19) — у першій позиції вище діагоналі. З (6.19) випливає, що

$$\begin{aligned} a |n\rangle &= \sqrt{n} |n-1\rangle, \\ a |0\rangle &= 0. \end{aligned} \quad (6.20)$$

Насамкінець відзначимо, що, в силу (6.16), вектори  $|n\rangle$  також є власними векторами гамільтоніана  $H$ :

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

де  $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ . Це узгоджується з твердженням (5.31) про квантованість передачі енергії від або до періодичних у часі систем.

## § 6.2. Рішення в координатному представленні

Якщо записати рівняння на власні значення  $H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$  для гамільтоніана (6.1) у координатному представленні, то ми отримаємо диференціальне рівняння

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \Psi(x) = E \Psi(x). \quad (6.21)$$



Рішення цього рівняння детально розбирається в багатьох стандартних підручниках (Шіф [161], Р. 4, Мерцбахер [124], Р. 5), тому ми обмежимося лише стислим розглядом.

Запровадимо безрозмірну координату

$$q = \left( \frac{m\omega}{\hbar} \right)^{1/2} x \quad (6.22)$$

і безрозмірне власне значення

$$\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}. \quad (6.23)$$

Якщо позначити  $\Psi(x) = u(q)$ , то (6.21) набуває вигляду

$$\frac{d^2 u}{dq^2} + (\lambda - q^2) u = 0. \quad (6.24)$$

Оцінку асимптотичної поведінки  $u(q)$  для великих значень  $q$  можна отримати, знехтувавши  $\lambda$  порівняно з  $q^2$  у другому доданку (6.24). Це дає два рішення —  $e^{+\frac{1}{2}q^2}$  і  $e^{-\frac{1}{2}q^2}$ . Перше з них неприйнятне, бо має експоненційну розбіжність, а отже, не належить до оснащеного гільбертового простору і не може бути власною функцією. Тому видається доречним шукати рішення у вигляді

$$u(q) = H(q) e^{-\frac{1}{2}q^2}. \quad (6.25)$$

[Взагалі, було б доцільніше позначити функцію  $H(q)$  якимось інакше, щоб не виниало плутанини з гамільтоніаном  $H$ ; але так уже склалося історично.] Підстановка (6.25) у (6.24) дає

$$H'' - 2qH' + (\lambda - 1)H = 0, \quad (6.26)$$

де штрих позначає похідну за  $q$ .

З теорії диференціальних рівнянь відомо, що в разі, коли член з похідної найвищого порядку не має додаткових множників [як перший доданок у (6.26)], то рішення такого рівняння може мати сингулярності лише в тих точках, у яких мають сингулярності коефіцієнти при похідних нижчого порядку. Оскільки коефіцієнт  $2q$  в другому доданку (6.26) є всюди регулярним, то з цього випливає, що функція  $H(q)$  не може мати сингулярностей при скінченних  $q$ , а отже, її можна представити у вигляді степеневого ряду з необмеженим радіусом збіжності. Тому ми підставимо ряд

$$H(q) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n q^n \quad (6.27)$$

у (6.26) і прирівняємо коефіцієнти біля кожного степеня  $q$  до нуля. Це дає нам рекурсивну формулу

$$a_{n+2} = \frac{2n+1-\lambda}{(n+2)(n+1)} a_n, \quad (n \geq 0). \quad (6.28)$$

Якщо ряд (6.27) не переривається, то з (6.28) впливає таке асимптотичне співвідношення для коефіцієнтів:

$$\frac{a_{n+2}}{a_n} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \frac{2}{n}. \quad (6.29)$$

Таку саму асимптотику мають коефіцієнти розкладення в ряд функції  $q^k e^{q^2}$  для будь-якого позитивного значення  $k$ , і взагалі, співвідношення (6.29) характерне для експоненційного множника. Така поведінка  $H(q)$  дала б фізично неприйнятну розбіжність  $u(k)$  у (6.25) при великих  $q$ , і єдиний спосіб уникнути цього, полягає в тому, що ряд має перерватися на певному скінченному  $n$ . Якщо

$$\lambda = 2n + 1 \quad (6.30)$$

для цілого невід'ємного  $n$ , то  $H(q)$  стає поліномом степеня  $n$ , і  $u(q)$  прагне до нуля при великих  $q$ . Відібравши таким чином усі фізично прийнятні рішення, ми з виразів (6.30) і (6.23) отримуємо набір власних значень для гамільтоніана:

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (6.31)$$

Точно такий результат ми отримали іншим методом у попередньому параграфі.

Для подальшого представлення ми запишемо власні функції в нормованому вигляді:

$$\Psi_n(x) = \left[ \frac{\alpha}{\pi^{1/2} 2^n n!} \right]^{1/2} H_n(\alpha x) e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}, \quad (6.32)$$

де  $\alpha = (m\omega/\hbar)^{1/2}$ , а  $H_n(z)$  є поліномом Ерміта степеня  $n$ . Ці поліноми та їхні властивості можна отримати з генеруючої функції

$$\exp(-s^2 + 2sz) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(z)}{n!} s^n. \quad (6.33)$$

Виведення цього результату міститься в цитованих вище стандартних підручниках.

Методи цього параграфу та попереднього дуже різняться, а проте дають однаковий спектр власних значень. Тому буде повчально проаналізувати причини такої еквівалентності. Диференційне рівняння (6.21) є рівнянням на власні значення для гамільтоніана (6.1) з операторами  $P$  і  $Q$ , записаними в координатному представленні — відповідно, як  $-i\hbar d/dx$  і  $x$ . Певна річ, для них справедливі комутаційні співвідношення (6.2). Проте добре відомо, що диференційне рівняння вигляду (6.21) має рішення для *всіх комплексних значень* параметра  $E$ . Обмеження на власні значення виникли лише тоді, коли ми наклали умову „правильної“ поведінки  $\Psi(x)$  при  $|x| \rightarrow \infty$ . На це можна зауважити, що в § 6.1 не було жодних посилок на граничні умови для власних векторів. Проте еквівалентна інформація містилась у вимозі самоспряженості гамільтоніана  $H = H^\dagger$ , що автоматично виключало з розгляду можливі рішення, які виходили б за межі оснащеного гільбертового простору; а в поточному параграфі нам просто довелося зробити це явно, в ручному режимі. Тож, попри позірну відмінність, обидва методи тісно між собою пов'язані.

### § 6.3. Рішення в представленні гамільтоніана

У викладеному в § 6.2 методі властивості оператора положення вважалися відомими. Виразивши гамільтоніан  $H$  у координатному представленні, ми обчислювали його власні значення. Власні функції  $\Psi_n(x) = \langle x|n \rangle$  можна вважати коефіцієнтами розкладення абстрактного власного вектора гамільтоніана через набір власних векторів оператора  $Q$ .

Спектр  $H$  уже було відомо з результатів § 6.1. Далі, замість обчислювати власні значення  $H$  в координатному представленні, ми могли б виразити таким самим способом власні значення  $Q$  в особливому представленні, де гамільтоніан є діагональним. Цим незвичним шляхом ми зараз і підемо.

Скориставшись (6.4), (6.8) і (6.9), можна записати оператор положення, як

$$Q = \left( \frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{1/2} (a^\dagger + a). \quad (6.34)$$

Його матричні елементи в базисі, утвореному власними векторами  $H$

(або  $N = a^\dagger a$ ) можна отримати з (6.18) і (6.19). Отже,

$$\langle n' | Q | n \rangle = \left( \frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{1/2} \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \sqrt{4} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{4} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}. \quad (6.35)$$

Рівняння на власні значення  $Q|x\rangle = x|x\rangle$  відтак набуває вигляду

$$\sum_{n'} \langle n | Q | n' \rangle \langle n' | x \rangle = x \langle n | x \rangle,$$

яке після застосування (6.35) дає

$$\left( \frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{1/2} \left[ \sqrt{n} \langle n-1 | x \rangle + \sqrt{n+1} \langle n+1 | x \rangle \right] = x \langle n | x \rangle. \quad (6.36)$$

Це рівняння можна розв'язати рекурсивно, починаючи з довільного значення  $\langle 0 | x \rangle$ , з якого обчислити  $\langle 1 | x \rangle$ , потім  $\langle 2 | x \rangle$  і т. д., після чого привести набір  $\{\langle n | x \rangle\}$  для всіх  $n$ , але при фіксованому  $x$ , до належного нормування. Таке рекурсивне рішення рівняння (6.36) можливе для всіх значень  $x$ , тому спектр  $Q$  є неперервним і лежить на всій дійсній осі  $(-\infty, +\infty)$ . [Зрозуміло, що обмеження лише дійсними власними значеннями впливає з ермітовості  $Q$ .]

У цьому методі ми обчислюємо  $\langle n | x \rangle$  як функцію  $n$  при фіксованому  $x$ , тоді як у § 6.2 робили навпаки — обчислювали  $\Psi_n(x) = \langle n | x \rangle^*$ , як функцію від  $x$  при фіксованому  $n$ . Хоч це не є таким очевидним, але обидва підходи узгоджуються між собою. Для демонстрації такої узгодженості візьмемо результат (6.32) з попереднього параграфа і підставимо його в (6.36). Для теперішніх цілей (6.32) можна записати, як

$$\langle n | x \rangle = c(x) (2^n n!)^{-1/2} H_n(\alpha x),$$

де  $c(x)$  містить усі незалежні від  $n$  множники. Підстановка в (6.36) дає

$$n H_{n-1}(\alpha x) + \frac{1}{2} H_{n+1}(\alpha x) = \alpha x H_n(\alpha x).$$

Це стандартна тотожність, якій задовольняють поліноми Ерміта, а отже, результати, отримані обома методами, цілком сумісні.

## Задачі

**6.1.** Отримайте оператори положення та імпульсу для гармонійного осцилятора в картині Гайзенберга.

**6.2.** Обчисліть матриці для операторів положення та імпульсу,  $Q$  і  $P$ , в базисі, утвореному власними векторами енергії гармонійного осцилятора. Піднесіть обидві матриці до квадрата і переконайтеся що матрична сума  $P^2/2m + m\omega^2 Q^2/2$  діагональна.

**6.3.** Покажіть, що для *скінченновимірних* матриць  $A$  і  $B$  завжди виконується рівність  $\text{Tr}[A, B] = 0$ .

*Парадокс.* Із цього результату, здавалося б, випливає, що  $\text{Tr}[Q, P] = 0$ , а отже,  $\hbar = 0$ . Скористайтесь явним виглядом *нескінченновимірних* матриць для операторів імпульсу та положення, отриманим у попередній задачі, для обчислення  $PQ$  та  $QP$  і поясніть, чому парадоксальний висновок  $\hbar = 0$  є помилковим.

**6.4.** Виразіть  $\alpha^\dagger$ , як диференційний оператор у координатному представленні. Взявши функцію основного стану  $\Psi_0(x)$  із (6.32), скористайтесь  $\alpha^\dagger$  для отримання  $\Psi_1(x)$ ,  $\Psi_2(x)$  і  $\Psi_3(x)$ .

**6.5.** Запишіть рівняння на власні значення для гармонійного осцилятора в імпульсному представленні й обчисліть відповідні власні функції  $\langle p | \Psi_n \rangle$ .

**6.6.** Гамільтоніан тривимірного ізотропного гармонійного осцилятора є

$$H = \frac{\mathbf{P} \cdot \mathbf{P}}{2m} + \frac{m\omega^2 \mathbf{Q} \cdot \mathbf{Q}}{2}.$$

Розв'яжіть рівняння на власні значення в декартових координатах.

**6.7.** Розв'яжіть рівняння на власні значення для тривимірного ізотропного гармонійного осцилятора у сферичних координатах. Покажіть, що власні значення та їхнє виродження є такими самими, що й отримані в декартових координатах у попередній задачі.

**6.8.** Для будь-якого комплексного  $z$  вектор  $|z\rangle$  може бути означено з наступного розкладення через власні вектори енергії гармонійного осцилятора:

$$|z\rangle = \exp\left(-\frac{1}{2}|z|^2\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle.$$

Скористайтесь рівнянням (6.20), щоб показати, що  $|z\rangle$  є правим власним вектором оператора пониження  $a$  (тобто, коли  $a$  діє на нього зліва —  $a|z\rangle$ ).

Покажіть також, що оператор підвищення  $a^\dagger$  не має правих власних векторів. (*Зауваження.* Вектор  $|z\rangle$  називається *когерентним станом*. Він відіграватиме важливу роль у Розділі 19.)

## Розділ 7

### Момент імпульсу

У Розділі 3 ми показали, що генератори операцій просторово-часової симетрії співвідносяться з фундаментальними динамічними змінними. Зокрема, генератор обертання є оператором моменту імпульсу (в одиницях  $\hbar$ ). Обертальна симетрія відіграє визначну роль у багатьох фізичних задачах, зокрема в атомній і ядерній фізиці. З властивостей перетворень спостережних величин при обертаннях можна вивести чимало корисних висновків, і це підводить нас до потреби детального розгляду теорії моменту імпульсу.

#### § 7.1. Власні значення та матричні елементи

У Розділі 3 ми встановили, що комутаційні співвідношення між компонентами моменту імпульсу мають вигляд

$$[J_x, J_y] = i\hbar J_z, \quad (7.1a)$$

$$[J_y, J_z] = i\hbar J_x, \quad (7.1b)$$

$$[J_z, J_x] = i\hbar J_y. \quad (7.1c)$$

Ці три оператори самоспряжені:

$$J_x^\dagger = J_x, \quad J_y^\dagger = J_y, \quad J_z^\dagger = J_z. \quad (7.2)$$

Спектр власних значень моменту імпульсу можна отримати, використовуючи *лише* наведені вище рівняння.

Спершу запровадимо оператор  $J^2 = \mathbf{J} \cdot \mathbf{J} = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$ . Керуючись співвідношеннями (7.1), легко показати, що  $[J^2, \mathbf{J}] = 0$ . Отже, для  $J^2$  і одного довільно обраного компонента  $\mathbf{J}$  (скажімо,  $J_z$ ) існує повний набір спільних власних векторів. Далі шукатимемо рішення пари рівнянь на власні значення:

$$J^2|\beta, m\rangle = \hbar^2\beta|\beta, m\rangle, \quad (7.3a)$$

$$J_z|\beta, m\rangle = \hbar m|\beta, m\rangle. \quad (7.3b)$$

(Тут  $m$  — квантове число; не слід плутати його з масою  $m$ . Як можна помітити, їх навіть позначено трохи відмінними шрифтами —  $m$  і  $m$ .) Множник  $\hbar$  було включено для того, щоб  $\beta$  і  $m$  залишалися безрозмірними. Певна річ, спектр власних значень буде таким самим і з  $J_x$  або  $J_y$ , оскільки один компонент  $\mathbf{J}$  перетворюється на інший шляхом обертання.

З означення  $J^2$  маємо

$$\langle \beta, m | J^2 | \beta, m \rangle = \langle \beta, m | J_x^2 | \beta, m \rangle + \langle \beta, m | J_y^2 | \beta, m \rangle + \langle \beta, m | J_z^2 | \beta, m \rangle.$$

Оскільки квадрат ному вектора є дійсною й невід'ємною величиною, то  $\langle \beta, m | J_x^2 | \beta, m \rangle = (\langle \beta, m | J_x^\dagger)(J_x | \beta, m \rangle) = \|J_x | \beta, m \rangle\|^2 \geq 0$ . Зрозуміло, що це справедливо і для  $J_y^2$ . Тому  $\langle \beta, m | J^2 | \beta, m \rangle \geq \langle \beta, m | J_z^2 | \beta, m \rangle$ , а підставивши в цю нерівність вирази (7.3), отримуємо

$$\beta \geq m^2. \quad (7.4)$$

Отже, для фіксованого значення  $\beta$  величина  $m$  може набувати лише значень у діапазоні  $-\sqrt{\beta} \leq m \leq \sqrt{\beta}$  [із (7.3а) очевидно, що  $\beta$  невід'ємна].

Далі запровадимо два оператори

$$J_+ = J_x + iJ_y, \quad (7.5a)$$

$$J_- = J_x - iJ_y. \quad (7.5b)$$

Ясно, що  $J_+ = J_-^\dagger$ . Вони задовольняють комутаційним співвідношенням

$$[J_z, J_+] = \hbar J_+, \quad (7.6a)$$

$$[J_z, J_-] = -\hbar J_-, \quad (7.6b)$$

$$[J_+, J_-] = 2\hbar J_z. \quad (7.6c)$$

При цьому набори співвідношень (7.6) і (7.1) з очевидністю еквівалентні. Скориставшись (7.6а), маємо

$$\begin{aligned} J_z J_+ | \beta, m \rangle &= (J_+ J_z + \hbar J_+) | \beta, m \rangle = \\ &= \hbar(m+1) J_+ | \beta, m \rangle. \end{aligned} \quad (7.7)$$

Відтак можливі два варіанти: або  $J_+ | \beta, m \rangle$  дорівнює нулю, або є власним вектором  $J_z$  з власним значенням  $\hbar(m+1)$ . Тепер позначимо через  $j$  максимальне значення, яке може набувати  $m$  при фіксованому  $\beta$ . Для такого  $j$  має виконуватися рівність

$$J_+ | \beta, j \rangle = 0, \quad (7.8)$$



бо інакше ми отримаємо ненульовий власний вектор з власним значенням  $\hbar(j+1)$ , що суперечитиме умові максимальності значення  $m = j$ . Точне співвідношення між  $\beta$  та  $j$  можна вивести, помноживши (7.8) на  $J_-$  і скориставшись рівністю

$$\begin{aligned} J_- J_+ &= J_x^2 + J_y^2 + i(J_x J_y - J_y J_x) = \\ &= J^2 - J_z^2 - \hbar J_z. \end{aligned} \quad (7.9)$$

Рівняння (7.8) тотожно дає  $J_- J_+ |\beta, j\rangle = 0$ , а з (7.9) маємо, що  $J_- J_+ |\beta, j\rangle = \hbar^2(\beta - j^2 - j) |\beta, j\rangle$ , тому  $(\beta - j^2 - j) |\beta, j\rangle = 0$ . А оскільки вектор  $|\beta, j\rangle$  ненульовий, то повинно бути

$$\beta = j(j+1). \quad (7.10)$$

Далі скористаємося (7.6b), щоб обчислити

$$\begin{aligned} J_z J_- |\beta, m\rangle &= (J_- J_z - \hbar J_-) |\beta, m\rangle = \\ &= \hbar(m-1) J_- |\beta, m\rangle. \end{aligned} \quad (7.11)$$

Так само, як і після (7.7) маємо два варіанти: або  $J_- |\beta, m\rangle$  дорівнює нулю, або є власним вектором  $J_z$  з власним значенням  $\hbar(m-1)$ . Нехай  $k$  — мінімальне значення, яке може набувати  $m$  при фіксованому  $\beta$ . Такі самі аргументи, що привели нас від (7.9) до (7.10), тепер дають, що  $\beta = k(k-1)$ , а тому  $k = -j$ .

Отже, підведемо підсумок. Ми встановили, що для фіксованого  $\beta = j(j+1)$  величина  $m$  може набувати значень у діапазоні  $j \geq m \geq -j$ , причому кожне з них відрізняється від сусідніх на одиницю. Таким чином, різниця між максимальним значенням  $m = j$  і мінімальним  $m = -j$  має бути цілим числом, а звідси виливає, що  $j = (\text{ціле число})/2$ . Це дає можливість встановити дозволених значення для  $j$  і  $m$ :

$$\begin{array}{ll} j = 0, & m = 0, \\ j = 1/2, & m = 1/2, -1/2, \\ j = 1, & m = 1, 0, -1, \\ j = 3/2 & m = 3/2, 1/2, -1/2, -3/2, \\ \text{і так далі.} \end{array}$$

Для кожного значення  $j$  існує  $2j+1$  значень  $m$ .

Надалі ми дотримуватимемось загальноприйнятого і зручнішого позначення власних векторів через  $j$  замість  $\beta = j(j+1)$ . Таким чином, вектор, що досі позначався  $|\beta, m\rangle$  тепер матиме вигляд  $|j, m\rangle$ .

Вище ми показали, що

$$J_+|j, m\rangle = C_{jm}|j, m+1\rangle, \quad (7.12)$$

де  $C_{jm}$  — деякий множник, що може залежати від  $j$  та  $m$ . Величину  $|C_{jm}|$  можна визначити, обчисливши норму (7.12):

$$(\langle j, m|J_-)(J_+|j, m\rangle) = |C_{jm}|^2.$$

За допомогою (7.9) це дає

$$|C_{jm}|^2 = \hbar\{j(j+1) - m(m+1)\}. \quad (7.13)$$

Зазначимо, що при  $m = j$  цей вираз стає нульовим, як і мусить бути згідно з усіма попередніми результатами.

Фаза в  $C_{jm}$  є довільною, оскільки рівняння на власні значення (7.3) від неї не залежать. Зручно обрати її так, щоб множник  $C_{jm}$  був дійсним і позитивним для всіх  $j$  та  $m$ . Тоді

$$\begin{aligned} J_+|j, m\rangle &= \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m+1)}|j, m+1\rangle = \\ &= \hbar\sqrt{(j+m+1)(j-m)}|j, m+1\rangle. \end{aligned} \quad (7.14)$$

Застосувавши  $J_-$  до (7.12) і скориставшись (7.9), отримуємо

$$C_{jm}^2|j, m\rangle = C_{jm}J_-|j, m+1\rangle.$$

Заміна в цьому виразі  $m$  на  $m-1$  дає

$$\begin{aligned} J_-|j, m\rangle &= \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}|j, m-1\rangle = \\ &= \hbar\sqrt{(j-m+1)(j+m)}|j, m-1\rangle. \end{aligned} \quad (7.15)$$

Тепер ми можемо побудувати явне матричне представлення для компонентів  $\mathbf{J}$ , взявши за базис власні вектори (7.3). Матриця для  $J_z$  є суто діагональною:  $\langle j', m'|J_z|j, m\rangle = \hbar m\delta_{j'j}\delta_{m'm}$ . Ми очікуємо, що й для інших компонентів  $\mathbf{J}$  вона буде діагональною за парами  $(j', j)$ , оскільки  $J^2$  із ними комутує. Щоб довести це, розглянемо

$$\begin{aligned} \langle j', m'|J^2\mathbf{J}|j, m\rangle &= \langle j', m'|\mathbf{J}J^2|j, m\rangle, \\ \hbar^2 j'(j'+1)\langle j', m'|\mathbf{J}|j, m\rangle &= \langle j', m'|\mathbf{J}|j, m\rangle\hbar^2 j(j+1). \end{aligned}$$

Отже,  $\langle j', m'|\mathbf{J}|j, m\rangle = 0$ , якщо  $j' \neq j$ . (Такі ж міркування годяться для будь-якого оператора, що комутує з  $J_z$ .) Матриці для  $J_x = (J_+ + J_-)/2$  і

$J_y = (J_+ - J_-)/2i$  можна легко отримати з матриць для  $J_+$  і  $J_-$ . Матриця  $\langle j', m' | J_+ | j, m \rangle$  прямо обчислюється з (7.14) і має вигляд

$$\begin{array}{l}
 j = 0; \quad \frac{1}{2}; \quad 1; \quad \frac{3}{2} \\
 m = 0; \frac{1}{2}, \quad -\frac{1}{2}; 1, \quad 0, -1; \frac{3}{2}, \quad \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}
 \end{array}
 \begin{array}{c}
 \begin{array}{|c|} \hline 0 \\ \hline \end{array} \\
 \begin{array}{|c|c|} \hline 0 & 1 \\ \hline 0 & 0 \\ \hline \end{array} \\
 \begin{array}{|c|c|c|} \hline 0 & \sqrt{2} & 0 \\ \hline 0 & 0 & \sqrt{2} \\ \hline 0 & 0 & 0 \\ \hline \end{array} \\
 \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & \sqrt{4} & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline \end{array}
 \end{array}
 \quad (7.16)$$

Всі ненульові елементи розташовані на одну позицію вище діагональних. А оскільки  $J_- = J_+^\dagger$ , то матриця для  $J_-$  є транспонованою від (7.16).

## § 7.2. Явний вигляд оператора моменту імпульсу

Векторний оператор моменту імпульсу було запроваджено в §§ 3.3 і 3.4, як генератор обертання, і фундаментальні комутаційні співвідношення (7.1) виводяться безпосередньо з його властивостей генератора. Унітарний оператор, що відповідає обертанню на кут  $\theta$  довкола осі, паралельної одиничному векторові  $\hat{n}$ , має вигляд

$$R_n(\theta) = e^{i\theta \hat{n} \cdot \mathbf{J}/\hbar}. \quad (7.17)$$

Детально дослідивши ці обертальні перетворення, можна вивести явний вираз для оператора моменту імпульсу.

### Випадок (і): система без внутрішніх степенів свободи

Така система описується в координатному представленні однокомпонентною функцією стану  $\Psi(\mathbf{x})$ . Коли  $\Psi(\mathbf{x})$  зазнає обертання, то перетворюється на

$$R\Psi(\mathbf{x}) = \Psi(R^{-1}\mathbf{x}), \quad (7.18)$$

де  $\mathbf{R}$  — оператор вигляду (7.17), а  $R$  —  $3 \times 3$ -матриця обертання в тривимірному просторі. Її конкретний вигляд для трьох осей декартових координат наведено в § 3.3. [Рівняння (7.18) є окремим випадком загального правила (3.8).]

Для обертання на кут  $\varepsilon$  довкола осі  $z$ , рівняння (7.18) дає

$$\mathbf{R}_z(\varepsilon) \Psi(x, y, z) = \Psi(x \cos \varepsilon + y \sin \varepsilon, -x \sin \varepsilon + y \cos \varepsilon, z).$$

Якщо кут  $\varepsilon$  інфінітезимальний, ми можемо розкласти  $\Psi$  в ряд Тейлора й обмежитися членом першого порядку:

$$\mathbf{R}_z(\varepsilon) \Psi(x, y, z) = \Psi(x, y, z) + \varepsilon \left( y \frac{\partial \Psi}{\partial x} - x \frac{\partial \Psi}{\partial y} \right).$$

Аналогічне розкладення для (7.17) дає

$$\mathbf{R}_z(\varepsilon) = 1 - \varepsilon \frac{iJ_z}{\hbar}.$$

Порівняння цих двох виразів дозволяє нам ідентифікувати  $J_z$ , як

$$J_z = -i\hbar \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right).$$

А це, звичайно ж, є  $z$ -компонентом оператора моменту імпульсу  $\mathbf{L} = \mathbf{Q} \times \mathbf{P}$  для частки без спіну, вираз для якого ми вивели в § 3.4, виходячи із загальних аргументів.

### Випадок (ii): система із внутрішніми степенями свободи

Система, що має внутрішні степені свободи, описується багатокомпонентною функцією стану  $(\Psi_1, \Psi_2 \dots)$ . Перетворення такої функції при обертанні може бути набагато складнішим, ніж (7.18). У найзагальнішому випадку ми маємо трансформацію типу

$$\mathbf{R} \begin{bmatrix} \Psi_1(\mathbf{x}) \\ \Psi_2(\mathbf{x}) \\ \vdots \end{bmatrix} = D \begin{bmatrix} \Psi_1(R^{-1}\mathbf{x}) \\ \Psi_2(R^{-1}\mathbf{x}) \\ \vdots \end{bmatrix}. \quad (7.19)$$

На додачу до координатного перетворення  $R^{-1}\mathbf{x}$ , є також матриця  $D$ , що діє на внутрішні степені свободи, утворюючи лінійні комбінації різних компонентів функції стану. Отже, загальний вигляд унітарного оператора (7.17) буде таким:

$$\mathbf{R}_n = e^{i\theta \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{L}/\hbar} D_n(\theta). \quad (7.20)$$

Ці два множники повинні комутувати між собою, бо перший діє лише на координати, а другий — лише на компоненти вектора-стовпця.

Матриця  $D$  має бути унітарною, тому її можна записати, як

$$D_n(\theta) = e^{i\theta \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{S}/\hbar}, \quad (7.21)$$

де  $\mathbf{S} = (S_x, S_y, S_z)$  є ермітовими матрицями. Підставляючи (7.21) у (7.20) і порівнюючи з (7.17), ми бачимо, що оператор моменту імпульсу має вигляд

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}, \quad (7.22)$$

де  $\mathbf{L} = \mathbf{Q} \times \mathbf{P}$  і  $[L_\alpha, S_\beta] = 0$  ( $\alpha, \beta = x, y, z$ ). У координатному представленні  $\mathbf{L} = -i\hbar \mathbf{x} \times \nabla$ , а компоненти  $\mathbf{S}$  є дискретними матрицями. Оператори  $\mathbf{L}$  і  $\mathbf{S}$  називаються відповідно *орбітальним* та *спіновим* моментами імпульсу. Як можна показати шляхом прямих обчислень (Задача 3.6), компоненти  $\mathbf{L}$  задовольняють таким самим комутаційним співвідношенням (7.1), як і  $\mathbf{J}$ . Звідси випливає, що й для компонентів  $\mathbf{S}$  мають виконуватися співвідношення (7.1).

Орбітальний момент імпульсу є наслідком руху центру мас системи відносно початку координат. А спін можна ідентифікувати з моментом імпульсу, який має система, коли її центр мас перебуває в стані спокою.

### § 7.3. Орбітальний момент імпульсу

Оператор орбітального моменту імпульсу є

$$\mathbf{L} = \mathbf{Q} \times \mathbf{P}, \quad (7.23)$$

де  $\mathbf{Q}$  — оператор положення, а  $\mathbf{P}$  — оператор імпульсу. В координатному представленні дія  $\mathbf{Q}$  в перемноженні функції на вектор координати, а  $\mathbf{P}$  має вигляд  $-i\hbar \nabla$ .

Часто виникає потреба виразити ці оператори в сферичній системі координат  $(r, \theta, \varphi)$ , що співвідносяться з декартовими координатами, як

$$x = r \sin \theta \cos \varphi, \quad (7.24a)$$

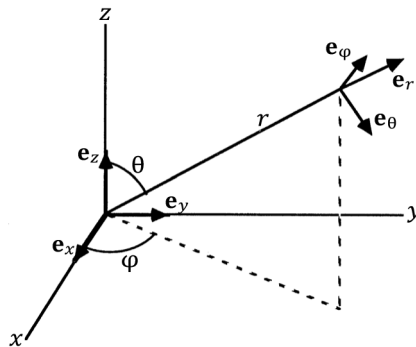
$$y = r \sin \theta \sin \varphi, \quad (7.24b)$$

$$z = r \cos \theta, \quad (7.24c)$$

як зображено на Рис. 7.1.

Гradient у сферичних координатах має вигляд

$$\nabla = \mathbf{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \mathbf{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \mathbf{e}_\varphi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad (7.25)$$



**Рис. 7.1.** Декартова та сферична системи координат. У сферичній системі  $r$  пробігає значення від 0 до  $+\infty$ ,  $\theta$  — від 0 до  $\pi$ , а  $\varphi$  — від 0 до  $2\pi$ . Також показано одиничні вектори для обох систем.

де  $(\mathbf{e}_r, \mathbf{e}_\theta, \mathbf{e}_\varphi)$  — одиничні вектори сферичної системи координат. Вони виражаються через декартові одиничні вектори, як

$$\mathbf{e}_r = \mathbf{e}_x \sin \theta \cos \varphi + \mathbf{e}_y \sin \theta \sin \varphi + \mathbf{e}_z \cos \theta, \quad (7.26a)$$

$$\mathbf{e}_\theta = \mathbf{e}_x \cos \theta \cos \varphi + \mathbf{e}_y \cos \theta \sin \varphi - \mathbf{e}_z \sin \theta, \quad (7.26b)$$

$$\mathbf{e}_\varphi = -\mathbf{e}_x \sin \varphi + \mathbf{e}_y \cos \varphi. \quad (7.26c)$$

Враховуючи, що в сферичних координатах  $\mathbf{Q} = r \mathbf{e}_r$ , ми отримуємо такий вигляд оператор орбітального моменту імпульсу:

$$\begin{aligned} \mathbf{L} &= r \mathbf{e}_r \times (-i\hbar \nabla) = \\ &= -i\hbar \left( \mathbf{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \mathbf{e}_\theta \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right). \end{aligned} \quad (7.27)$$

Виходячи з результатів § 7.1, ми маємо шукати власні вектори двох комутативних операторів:  $L^2 = \mathbf{L} \cdot \mathbf{L}$  і  $L_z$ , де

$$L_z = \mathbf{e}_z \cdot \mathbf{L} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (7.28)$$

При обчисленні  $\mathbf{L} \cdot \mathbf{L}$  маємо пам'ятати, що одиничні вектори в сферичних координатах не є постійними, тому треба враховувати дію на них диференціальних операторів. Остаточний результат можна записати, як

$$L^2 = \mathbf{L} \cdot \mathbf{L} = -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]. \quad (7.29)$$

Тепер ми маємо розв'язати два зчеплені диференціальні рівняння:

$$L_z Y(\theta, \varphi) = \hbar m Y(\theta, \varphi), \quad (7.30)$$

$$L^2 Y(\theta, \varphi) = \hbar^2 \ell(\ell + 1) Y(\theta, \varphi). \quad (7.31)$$

(Поки ми не робитимемо жодних припущень щодо величин  $\ell$  та  $m$ , які наразі не обов'язково повинні бути цілими числами.) Підстановка (7.28) у (7.30) дає  $\partial Y / \partial \varphi = imY$ , а тому

$$\frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} = -m^2 Y. \quad (7.32)$$

Це дозволяє нам спростити (7.31) до вигляду

$$\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) Y + \{ \sin^2 \theta \ell(\ell + 1) - m^2 \} Y = 0. \quad (7.33)$$

Рівняння (7.32) і (7.33) уже не зчеплені між собою; перше залежить лише від  $\varphi$ , а друге — леше від  $\theta$ . Тепер очевидно, що  $Y(\theta, \varphi)$  можна представити у вигляді добутку функції від  $\varphi$ , яка задовольняє (7.32), і функції від  $\theta$ , яка задовольняє (7.33). Рішенням (7.32) є  $e^{im\varphi}$ . Рівняння (7.33) еквівалентне рівнянню Лежандра, що має своїм рішенням *приєднані поліноми Лежандра*, що записуються, як  $P_\ell^m(\cos \theta)$ . [Стандартний вигляд рівняння Лежандра отримується заміною змінної  $\theta$  на  $u = \cos \theta$ ; а оскільки  $m$  у ньому фігурує леше в квадраті, то воно дає однакові результати для  $\pm|m|$ .] Отже, за винятком нормування, ми маємо  $Y(\theta, \varphi) = e^{im\varphi} P_\ell^{|m|}(\cos \theta)$ .

Але досі не було нічого сказано про значення  $\ell$  і  $m$ . Рівняння (7.32) та (7.33) мають рішення *для всіх* значень параметрів  $\ell$  і  $m$ , а обмеження на з'являються лише після накладення граничних умов. Коли ми припустимо, що рішення має бути однозначним при повному обертанні —  $Y(\theta, \varphi + 2\pi) = Y(\theta, \varphi)$  — тоді з множника  $e^{im\varphi}$  отримаємо умову, що  $m$  є цілим числом. Припустивши далі, що рішення повинно бути регулярним у сингулярних точках  $\theta = 0$  і  $\theta = \pi$ , то з теорії рівняння Лежандра випливає, що  $\ell$  має бути невід'ємним цілим числом у діапазоні  $\ell \geq |m|$  (для цілих  $\ell < |m|$  приєднані поліноми Лежандра тотожно обертаються на нуль). Врахувавши ці обмеження і привівши рішення до одиничної норми, отримуємо добре відомі *сферичні гармоніки*:

$$Y_\ell^m(\theta, \varphi) = (-1)^{(m+|m|)/2} \left[ \frac{(2\ell + 1)(\ell - |m|)!}{4\pi(\ell + |m|)!} \right]^{1/2} e^{im\varphi} P_\ell^{|m|}(\cos \theta). \quad (7.34)$$

Приєднані поліноми  $P_\ell^m(u)$  виводяться із загальних поліномів Лежандра

$$P_\ell(u) = (2^\ell \ell!)^{-1} \frac{d^\ell}{du^\ell} (u^2 - 1)^\ell \quad (7.35)$$

через співвідношення

$$P_\ell^m(u) = (1 - u^2)^{m/2} \frac{d^m}{du^m} P_\ell(u). \quad (7.36)$$

Довільну фазу  $Y_\ell^m(\theta, \varphi)$  обрано таким чином, щоб

$$Y_\ell^{-m}(\theta, \varphi) = (-1)^m \{Y_\ell^m(\theta, \varphi)\}^*. \quad (7.37)$$

Це дозволяє узгодити (7.34) з домовленостями про фазу в рівняннях (7.14) і (7.15). Сферичні гармоніки утворюють ортонормований набір,

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi \{Y_\ell^m(\theta, \varphi)\}^* Y_{\ell'}^{m'}(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi = \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'}, \quad (7.38)$$

у просторі функцій на поверхні одиничної сфери (інтегрування береться за тілесним кутом  $d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$ ).

Припущення про *однозначність* і *регулярність* цілком виправдані в класичній теорії поля, на зразок електромагнетизму, де поле є спостережною фізичною величиною. Квантовомеханічна хвильова функція не належить до таких величин, але в силу міркувань, викладених у § 4.5, вона та її градієнт мають бути неперервними, щоб забезпечити умову неперервності для струму ймовірності. Саме тому, розв'язуючи рівняння на власні значення для орбітального моменту імпульсу в сферичних координатах, нам довелося обмежитися лише тими рішеннями, для яких  $\ell$  і  $m$  є цілими числами. Це дуже важливий результат, і тому буде корисно отримати його в загальнішому вигляді, не вдаючись до конкретного представлення.

### Власні значення орбітального моменту імпульсу

Оператор орбітального моменту імпульсу є ермітовим і задовольняє комутаційним співвідношенням  $[L_\alpha, L_\beta] = i\hbar \epsilon_{\alpha\beta\gamma} L_\gamma$  — достоту таким самим, як і для оператора повного моменту імпульсу. Як було показано в § 7.1, з цих співвідношень випливає, що власні значення компонентів оператора моменту імпульсу можуть бути лише цілими та напівцілими в одиницях  $\hbar$ . Подальше обмеження для оператора орбітального моменту до одних лише цілих власних значень має походити з особливих властивостей цього оператора, які не є обов'язковими для оператора загального моменту імпульсу. Такі особливі властивості можуть походити лише з виразу  $\mathbf{L} = \mathbf{Q} \times \mathbf{P}$  для орбітального моменту імпульсу і, відповідно, з комутаційних співвідношень для операторів положення та імпульсу.

Шукатимемо власні значення оператора орбітального моменту

$$L_z = Q_x P_y - Q_y P_x, \quad (7.39)$$



використовуючи лише комутаційні співвідношення

$$[Q_x, Q_y] = 0, \quad [P_x, P_y] = 0, \quad [Q_\alpha, P_\beta] = i\hbar\delta_{\alpha\beta} \quad (7.40)$$

та ермітову природу операторів.

Для зручності тимчасово приймемо систему одиниць, у якій  $Q$  і  $P$  безрозмірні, а  $\hbar = 1$ . Запровадимо чотири нові оператори:

$$q_1 = \frac{Q_x + P_y}{\sqrt{2}}, \quad (7.41a)$$

$$q_2 = \frac{Q_x - P_y}{\sqrt{2}}, \quad (7.41b)$$

$$p_1 = \frac{P_x - Q_y}{\sqrt{2}}, \quad (7.41c)$$

$$p_2 = \frac{P_x + Q_y}{\sqrt{2}}. \quad (7.41d)$$

Як можна перевірити,

$$[q_1, q_2] = [p_1, p_2] = 0, \quad [q_\alpha, p_\beta] = i\delta_{\alpha\beta}. \quad (7.42)$$

Рівняння (7.39), записане через нові оператори, має вигляд

$$L_z = \frac{1}{2}(p_1^2 + q_1^2) - \frac{1}{2}(p_2^2 + q_2^2). \quad (7.43)$$

Порівнюючи цей вираз із гамільтоніаном для гармонійного осцилятора (6.1), ми бачимо, що суто математично задача зводиться до знаходження власних значень різниці гамільтоніанів двох незалежних гармонійних осциляторів з масою  $m = 1$  і частотою  $\omega = 1$  (не забуваємо, що зараз  $\hbar = 1$ ). Оскільки обидва члени в (7.43) комутують між собою, то мають спільний набір власних векторів, а їхні власні значення  $L_z$  є просто різницею їх власних значень. У § 6.1 ми вже досліджували спектр оператора вигляду  $\frac{1}{2}(p^2 + q^2)$ , застосовуючи лише комутаційні співвідношення, еквівалентні (7.42). З того результату ми робимо висновок, що власні значення (7.43) є

$$(n_1 + \frac{1}{2}) - (n_2 + \frac{1}{2}) = n_1 - n_2,$$

де  $n_1$  і  $n_2$  невід'ємні цілі числа. Таким чином, виходячи безпосередньо з властивостей операторів положення та імпульсу, ми показали, що кожен компонент орбітального моменту імпульсу може набувати значень  $m\hbar$  лише для цілих  $m$ , і ніколи — для напівцілих.

## § 7.4. Спін

Компоненти оператора спінового моменту імпульсу  $\mathbf{S}$  задовольняють загальним комутаційним співвідношенням  $[S_\alpha, S_\beta] = i\hbar\epsilon_{\alpha\beta\gamma}S_\gamma$ , тому для них залишається чинним аналіз, проведений нами в § 7.1. Рівняння на власні значення для  $S^2 = \mathbf{S} \cdot \mathbf{S}$  і  $S_z$ ,

$$S^2|s, m\rangle = \hbar^2 s(s+1)|s, m\rangle, \quad S_z|s, m\rangle = \hbar m|s, m\rangle, \quad (7.44)$$

має рішення  $m = s, s-1, \dots, -s$  для всіх цілих та напівцілих невід'ємних  $s$ . Оскільки конкретні різновиди часток характеризуються набором квантових чисел, до яких належить і спін  $s$ , то в більшості випадків виявляється достатнім виразити спінові оператори через їхню дію в  $(2s+1)$ -вимірному просторі, натягнутому на власні вектори з (7.44) при фіксованому значенні  $s$ . Далі ми детально розглянемо найпоширеніші випадки  $s = 1/2, 1, 3/2$ .

### Випадок (і): спін 1/2

У цьому випадку заведено записувати спіновий оператор, як  $\mathbf{S} = \frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma}$ , де  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$  називаються *матрицями Паулі*. Явне представлення цих матриць у базисі, утвореному власними векторами з (7.44) можна отримати з виразу (7.16) для матричних елементів оператора  $J_+$  (окреслений рамкою блок  $2 \times 2$ ):

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \quad (7.45)$$

Матриці Паулі задовольняють таким важливим співвідношенням:

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = \mathbf{1} \quad (7.46)$$

(тут  $\mathbf{1}$  позначає одиничну  $2 \times 2$ -матрицю),

$$\sigma_\alpha\sigma_\beta = -\sigma_\beta\sigma_\alpha = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\sigma_\gamma. \quad (7.47)$$

Ці співвідношення є операторними рівностями, що не залежать від конкретного матричного представлення.

Оператор, що відповідає компонентіві спінового моменту імпульсу в напрямку  $\hat{\mathbf{n}} = (\sin\theta \cos\varphi, \sin\theta \sin\varphi, \cos\theta)$ , має вигляд  $\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{S} = \frac{1}{2}\hbar\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ , де

$$\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \begin{bmatrix} \cos\theta & e^{-i\varphi} \sin\theta \\ e^{i\varphi} \sin\theta & -\cos\theta \end{bmatrix}. \quad (7.48)$$

Пряме обчислення показує, що власними значеннями цієї матриці є  $+1$  і  $-1$ , а відповідні (ненормовані) власні вектори,

$$\begin{pmatrix} e^{-i\varphi} \sin \theta \\ 1 - \cos \theta \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} -e^{-i\varphi} \sin \theta \\ 1 + \cos \theta \end{pmatrix}.$$

За допомогою тригонометричних формул для половинних кутів, ці вектори можна замінити еквівалентними виразами для нормованих власних векторів:

$$\begin{pmatrix} e^{-i\varphi/2} \cos[\theta/2] \\ e^{i\varphi/2} \sin[\theta/2] \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} -e^{-i\varphi/2} \sin[\theta/2] \\ e^{i\varphi/2} \cos[\theta/2] \end{pmatrix}. \quad (7.49)$$

Для вектора стану мають фізичне значення лише відносні величина та фази його компонентів, а його повна норма та повна фаза не важливі. Якщо розглянути перший вектор (з другим усе аналогічно), то відносна фаза двох його компонентів складає  $e^{-i\varphi}$  і при зміні  $\varphi$  від 0 до  $2\pi$  пробігає всі можливі значення фазової різниці. Співвідношення абсолютних величин (норм) цих компонентів є  $\tan[\theta/2]$  і при зміні  $\theta$  від 0 до  $\pi$  пробігає всі дійсні невід'ємні значення — інакше кажучи, всі можливі співвідношення норм. Таким чином, будь-який двокомпонентний вектор з одиничною нормою може бути однозначно виражений через перший (і так само через другий) вектор із (7.49) шляхом підбору належних  $\theta$  і  $\varphi$ . А отже, кожен чистий стан з  $s = \frac{1}{2}$  можна однозначно асоціювати з таким просторовим напрямком  $\hat{\mathbf{n}}$ , що вектор цього стану буде власним вектором оператора  $\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{S}$  із власним значенням  $+\frac{1}{2}\hbar$ , тобто описуватиме спін, зорієнтований у напрямку  $\hat{\mathbf{n}}$ .

Далі розглянемо загальний стан (який може бути й змішаним), що описується оператором стану  $\rho$ .  $2 \times 2$ -матриця має чотири параметри, тому її можна виразити через лінійну комбінацію чотирьох незалежних матриць  $\mathbf{1}$ ,  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$  і  $\sigma_z$ . Отже, ми можемо записати довільний оператор стану у вигляді

$$\rho = \frac{1}{2}(\mathbf{1} + \mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}). \quad (7.50)$$

Множник  $\frac{1}{2}$  обрано для того, щоб  $\text{Tr } \rho = 1$ . Вектор  $\mathbf{a} = (a_x, a_y, a_z)$  повинен бути дійсним, щоб забезпечити емітовість  $\rho$ . Для з'ясування його фізичного значення, обчислимо

$$\begin{aligned} \langle \sigma_x \rangle &= \text{Tr}(\rho \sigma_x) = \\ &= \frac{1}{2} \text{Tr}(\sigma_x + a_x \mathbf{1} - a_y i \sigma_z + a_z i \sigma_y) = \\ &= \frac{1}{2} a_x \text{Tr } \mathbf{1} = \\ &= a_x. \end{aligned}$$

Тут ми скористалися (7.46) і (7.47), а також тим фактом, що слід матриць Паулі дорівнює нулю. Аналогічний результат дають обчислення для  $y$  і  $z$  компонентів, тож ми маємо

$$\langle \sigma \rangle = \text{Tr}(\rho \sigma) = \mathbf{a}. \quad (7.51)$$

Цей вектор називають *вектором поляризації* стану  $\rho$ .

Оскільки оператор (7.48) має власні значення  $+1$  і  $-1$ , то з (7.50) негайно випливає, що власними значеннями  $\rho$  є  $\frac{1}{2}(1 + |\mathbf{a}|)$  і  $\frac{1}{2}(1 - |\mathbf{a}|)$ . Оператор стану не може мати від'ємних власних значень, тому довжина вектора поляризації не повинна перевищувати одиниці:  $|\mathbf{a}| \leq 1$ . Чисті стани характеризуються умовою  $|\mathbf{a}| = 1$ , що відповідає максимальній поляризації. Неполаризовані стани, що мають  $\mathbf{a} = 0$ , є ізотропними, і в таких станах середнє значення будь-якого компонента спіну дорівнює нулю. Неполаризовані стани являють собою найпростіший і напоширеніший приклад змішаних станів, які не можуть бути описані вектором стану.

### Випадок (ii): спіні одиниця

Матриці для спінових операторів можна визначити з блоку  $3 \times 3$  у виразі (7.16). Остаточний результат буде

$$S_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad S_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{bmatrix}, \quad (7.52)$$

$$S_z = \hbar \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

Матриця для компонента спіну в напрямку  $\hat{\mathbf{n}} = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta)$  має вигляд

$$\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{S} = \hbar \begin{bmatrix} \cos \theta & \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta e^{-i\varphi} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta e^{i\varphi} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta e^{-i\varphi} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta e^{i\varphi} & -\cos \theta \end{bmatrix}. \quad (7.53)$$

Вона має власні значення  $\hbar, 0$  і  $-\hbar$ , а відповідні їм власні вектори є

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{2}(1 + \cos \theta)e^{-i\varphi} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta \\ \frac{1}{2}(1 - \cos \theta)e^{i\varphi} \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta e^{-i\varphi} \\ \cos \theta \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta e^{i\varphi} \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} \frac{1}{2}(1 - \cos \theta)e^{-i\varphi} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta \\ \frac{1}{2}(1 + \cos \theta)e^{i\varphi} \end{bmatrix}. \quad (7.54)$$

На відміну від випадку  $s = \frac{1}{2}$ , для  $s = 1$  не є справедливим твердження, що кожен вектор має бути власним вектором компонента спіна в певному напрямку. Причина полягає в тому, що для визначення відносних фаз та відносних величин для компонентів 3-вектора потрібно чотири незалежні параметри, а наведені вище власні вектори мають лише два такі параметри —  $\theta$  і  $\varphi$ . Таким чином, чистий стан системи з  $s = 1$  не можна пов'язати зі спіном, орієнтованим у якомусь певному просторовому напрямку.

Загальний стан описується  $3 \times 3$ -оператором  $\rho$ , який, після застосування до нього обмежень  $\text{Tr } \rho = 1$  і  $\rho = \rho^\dagger$ , залежить від п'яти параметрів. Вектор поляризації  $\langle \mathbf{S} \rangle = \text{Tr}(\rho \mathbf{S})$  забезпечує лише три такі параметри, а отже він не може єдиним чином визначати стан, як це було для  $s = \frac{1}{2}$ . Додаткові параметри, необхідні для повного визначення стану в цьому випадку, а також їхнє фізичне значення, будуть однією з тем обговорення в Розділі 8.

### Випадок (iii): спін $3/2$

У цьому випадку спіновий оператор буде представлено матрицями  $4 \times 4$ , які ми не станемо виписувати в явному вигляді, хоча це й наважко зробити. Сума квадратів цих матриць для спінових компонентів у трьох ортогональних напрямках має задовольняти тотожності

$$S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 = \hbar^2 s(s + 1). \quad (7.55)$$

Певна річ, це справедливо для будь-якого значення  $s$ . У випадку  $s = \frac{1}{2}$  це тривіальна тотожність, бо кожен з доданків у лівій частині, як засвідчує (7.46), кратний одиничній матриці. У випадку  $s = 1$  квадрати матриць (7.52) не кратні одиниці, але вони комутативні, тому мають повний набір спільних власних векторів. А ця тотожність просто виражає взаємозв'язок між їхніми власними значеннями: для кожного такого власного вектора дві матриці повинні мати власне значення  $\hbar^2$ , а одна — нуль.

Починаючи з  $s = \frac{3}{2}$ , матриці  $S_x^2$ ,  $S_y^2$  і  $S_z^2$  уже не комутативні, тому для них не існує спільного набору власних векторів, а відтак тотожність (7.55) не зводиться до співвідношення між власними значеннями. Насправді це й неможливо, бо власне значення кожного доданка в лівій частині має бути або  $9\hbar^2/4$ , або  $\hbar^2/4$ , і жодна сума не зможе дати  $15\hbar^2/4$  у правій частині. Цей суто арифметичний факт залучається до інтерпретації квантової механіки. Може виникнути спокуса розглядати спостережні

величини в квантовій механіці, як класичні стохастичні змінні, кожна з яких випадковим чином набуває одного зі своїх дозволених значень згідно з квантовомеханічним розподілом імовірності. Проте вищенаведений приклад свідчить про некоректність такої інтерпретації, принаймні, для моменту імпульсу, бо за таким тлумаченням спостережні величини, що відповідають  $S_x^2$ ,  $S_y^2$  і  $S_z^2$ , у кожен момент часу повинні мати цілком певне значення, а отже, сума (7.55) повинна бути сумою цих значень.

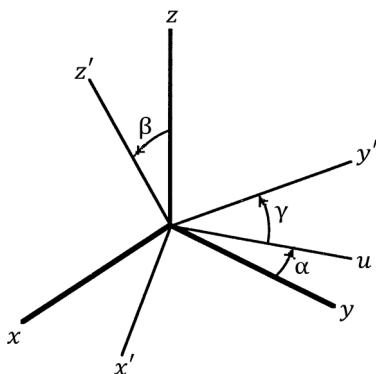
Питання інтерпретації також поставатимуть і в подальших розділах, де ми розглянемо їх детальніше.

## § 7.5. Скінченні обертання

Щоб описати довільне обертання, треба задати три параметри. Наприклад, це може бути напрям осі обертання (два параметри) і кут обертання, як у (7.17). Інша поширена параметризація задається *ейлеровими кутами*, як проілюстровано на Рис. 7.2. Перехід від фіксованої системи координат  $Oxyz$  до перетвореної  $Ox'y'z'$  відбувається за три кроки:

- (i) обертання на кут  $\alpha$  довкола  $Oz$ , що переводить  $Oy$  в  $Ou$ ;
- (ii) обертання на кут  $\beta$  довкола  $Ou$ , що переводить  $Oz$  в  $Oz'$ ;
- (iii) обертання на кут  $\gamma$  довкола  $Oz'$ , що переводить  $Ou$  в  $Oy'$ .

Наприкінці цього перетворення  $Ox$  переходить у  $Ox'$ . Цим обертанням відповідають оператори  $\mathbf{R}_z(\alpha)$ ,  $\mathbf{R}_u(\beta)$  і  $\mathbf{R}_{z'}(\gamma)$  в позначеннях (7.17). Під-



**Рис. 7.2.** Обертання системи координат  $Oxyz$  на ейлерові кути  $\alpha$ ,  $\beta$  і  $\gamma$ , що дає систему координат  $Ox'y'z'$ .

сумкове обертання описується добутком цих трьох операторів у зворотному порядку:

$$\begin{aligned} \mathbf{R}(\alpha, \beta, \gamma) &= \mathbf{R}_{z'}(\gamma) \mathbf{R}_u(\beta) \mathbf{R}_z(\alpha) = \\ &= e^{-i\gamma J_{z'}} e^{-i\beta J_u} e^{-i\alpha J_z}. \end{aligned} \quad (7.56)$$

(У цьому параграфі ми будемо послуговуватися системою одиниць, у якій  $\hbar = 1$ .)

Це вираз для оператора обертання не надто зручний, бо два з трьох обертань здійснюються довкола осей, що належать до іншої системи координат. Застосувавши формулу (3.2) до обертання, вказаного в пункті (i), ми отримуємо  $J_u = \mathbf{R}_z(\alpha) J_y \mathbf{R}_z(-\alpha)$ , отже,

$$\mathbf{R}_u(\beta) = \mathbf{R}_z(\alpha) \mathbf{R}_y(\beta) \mathbf{R}_z(-\alpha).$$

Таким самим чином, оскільки  $J_{z'}$  є результатом обертань (i) та (ii), маємо

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_{z'}(\gamma) &= \mathbf{R}_u(\beta) \mathbf{R}_z(\alpha) \mathbf{R}_z(\gamma) \mathbf{R}_z(-\alpha) \mathbf{R}_u(-\beta) = \\ &= \mathbf{R}_z(\alpha) \mathbf{R}_y(\beta) \mathbf{R}_z(\gamma) \mathbf{R}_y(-\beta) \mathbf{R}_z(-\alpha). \end{aligned}$$

У другому рядку було застосовано вираз для  $\mathbf{R}_u(\beta)$ . Підставляючи отримані результати в (7.56) ми в кінцевому підсумку знаходимо

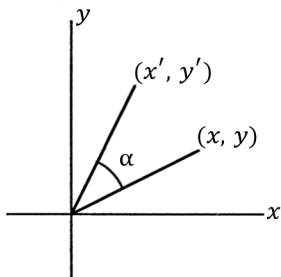
$$\begin{aligned} \mathbf{R}(\alpha, \beta, \gamma) &= \mathbf{R}_z(\alpha) \mathbf{R}_y(\beta) \mathbf{R}_z(\gamma) = \\ &= e^{-i\alpha J_z} e^{-i\beta J_y} e^{-i\gamma J_z}. \end{aligned} \quad (7.57)$$

Тепер усі оператори виражено в початковій системі координат  $\mathcal{O}xyz$ .

### Активні та пасивні обертання

Перетворення можна розглядати з двох позицій: *активна* точка зору полягає в тому, що об'єкт обертається відносно нерухомої системи координат, а *пасивна* точка зору передбачає фіксованість об'єкта і обертання відносно нього системи координат. Як уже говорилося раніше, ми переважно будемо дотримуватись активної точки зору, проте обидва методи є рівноцінними, і нам бажано зрозуміти, як вони співвідносяться між собою. Для простоти ілюстрації розглянемо лише обертання довкола осі  $z$ , а потім узагальнимо наші висновки на випадок довільних обертань.

При *активному* обертанні, показаному на Рис. 7.3, об'єкт опереміщується на кут  $\alpha$  проти годинникової стрілки (наразі це є позитивним напрямком обертання, бо вісь  $z$  скеровано перпендикулярно площині зображення, *до* читача), і тоді певна фізична точка в об'єкті, що досі була розташована за координатами  $(x, y)$ , переходить у нове положення



**Рис. 7.3.** Активне обертання — система координат фіксована, а на кут  $\alpha$  переміщується об'єкт.

$(x', y')$ . Співвідношення між координатами цих двох точок задається через матрицю активних обертань:

$$x'_i = \sum_j R_{ij}^{(a)} x_j. \quad (7.58)$$

У загальному випадку матриця  $R_{ij}^{(a)}(\alpha, \beta, \gamma)$  є функцією трьох ейлерових кутів. Для обертання довкола осі  $z$  вона має вигляд

$$R_{ij}^{(a)}(\alpha, 0, 0) = \begin{bmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha & 0 \\ \sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (7.59)$$

Нехай об'єктом обертання буде скалярне поле або функція стану безспінової частки  $\Psi(\mathbf{x})$ . Перетворена функція записується, як  $\Psi'(\mathbf{x}) = \mathbf{R}^{(a)}(\alpha, \beta, \gamma) \Psi(\mathbf{x})$ . Оскільки при активному обертанні зміщується просторовий розподіл функції, то значення  $\Psi'$  у новій точці  $\mathbf{x}' = (x', y', z')$  має дорівнювати значенню  $\Psi$  у старій точці  $\mathbf{x} = (x, y, z)$ :  $\Psi'(\mathbf{x}') = \Psi(\mathbf{x}) = \Psi([\mathbf{R}^{(a)}]^{-1}\mathbf{x}')$ . А прибравши вже непотрібні штрихи, маємо

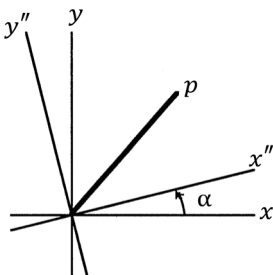
$$\mathbf{R}^{(a)}(\alpha, \beta, \gamma) \Psi(\mathbf{x}) = \Psi([\mathbf{R}^{(a)}(\alpha, \beta, \gamma)]^{-1}\mathbf{x}), \quad (7.60)$$

що є окремим випадком загальної формули (3.8).

При *пасивному* обертанні (Рис. 3.3) об'єкт  $p$  залишається нерухомим, а перетворення зазнає система координат. Отже, та сама фізична точка з координатами  $\mathbf{x} = (x, y, z)$  у старій системі, матиме координати  $\mathbf{x}'' = (x'', y'', z'')$  у новій системі. Зв'язок між ними дає матриця пасивних обертань:

$$x''_i = \sum_j R_{ij}^{(p)} x_j. \quad (7.61)$$





**Рис. 7.4.** Пасивне обертання — об'єкт фіксований, а на кут  $\alpha$  переміщується система координат.

Для обертання системи координат довкола осі  $z$  матриця  $R_{ij}^{(p)}(\alpha, \beta, \gamma)$  має вигляд

$$R_{ij}^{(p)}(\alpha, 0, 0) = \begin{bmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha & 0 \\ -\sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (7.62)$$

Величина скалярного поля або функції стану в точці  $p$  має залишатися незмінною, незалежно від обраної системи координат, хоча її функціональна форма в різних системах буде різною. Отже, ми повинні отримати  $\Psi''(\mathbf{x}'') = \Psi(\mathbf{x})$ , де  $\Psi''$  і  $\Psi$  позначають функції в нових та старих координатах. Із (7.61) маємо співвідношення  $\mathbf{x} = [R^{(p)}]^{-1}\mathbf{x}''$ , тому  $\Psi''(\mathbf{x}'') = \Psi(\mathbf{x}) = \Psi([R^{(p)}]^{-1}\mathbf{x}'')$ . А позбувшись уже непотрібних штрихів,

$$\mathbf{R}^{(p)}(\alpha, \beta, \gamma) \Psi(\mathbf{x}) = \Psi([R_{ij}^{(p)}(\alpha, \beta, \gamma)]^{-1}\mathbf{x}), \quad (7.63)$$

Зазначимо, що (7.60) і (7.63) мають однаковий вигляд, що включає обернену дію матриці на координатний аргумент. Різниця між цими двома випадками полягає лише в тому, що матриці активних та пасивних перетворень координат є обернені одна до одної. Це співвідношення також виконується і в загальному випадку:

$$\mathbf{R}^{(p)}(\alpha, \beta, \gamma) = [\mathbf{R}^{(a)}(\alpha, \beta, \gamma)]^{-1} = \mathbf{R}^{(a)}(-\gamma, -\beta, -\alpha).$$

Ця рівність виражає інтуїтивний геометричний факт, що обертання об'єкта відносно нерухомої системи координат еквівалентно обертанню в протилежний бік системи координат відносно нерухомого об'єкта.<sup>12</sup>

<sup>12</sup>Обговорення активних та пасивних обертань ґрунтується на статті М.Бутена [34], у якій зокрема вказано, що стандартні довідники Едмондса [53] і Роуза [156] містять помилки в розгляді цього питання.

## Матриці обертання

Матричне представлення оператора обертання (7.57) у базисі, утвореному власними векторами моменту імпульсу

$$\langle j', m' | \mathbf{R}(\alpha, \beta, \gamma) | j, m \rangle = \delta_{j'j} D_{m'm}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma), \quad (7.64)$$

породжує матриці обертання

$$\begin{aligned} D_{m'm}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) &= \langle j, m' | e^{-i\alpha J_z} e^{-i\beta J_y} e^{-i\gamma J_z} | j, m \rangle = \\ &= e^{-i(\alpha m' + \gamma m)} d_{m'm}^{(j)}(\beta), \end{aligned} \quad (7.65)$$

де

$$d_{m'm}^{(j)}(\beta) = \langle j, m' | e^{-i\beta J_y} | j, m \rangle. \quad (7.66)$$

Матриця (7.64) діагональна за  $(j', j)$ , бо  $\mathbf{R}$  комутує з оператором  $J^2$ . А спрощення в другому рядку виразу (7.66) відбувається завдяки тому, що базисні вектори є власними векторами  $J_z$ .

Матричний елемент (7.67) легко обчислюється для випадку  $j = \frac{1}{2}$ . Тоді  $J_y$  можна замінити на  $\frac{1}{2}\hbar\sigma_y$ , а розкладення  $e^{-i\beta\sigma_y/2}$  в ряд Тейлора, з урахуванням тотожності  $\sigma_y^2 = 1$ , дозволяє згрупувати окремо члени з парними та непарними степенями  $\beta$ , які дають відповідно  $\sin(\beta/2)$  і  $\cos(\beta/2)$ . В результаті маємо

$$e^{-i\beta\sigma_y} = \cos \frac{\beta}{2} + i\sigma_y \sin \frac{\beta}{2}. \quad (7.67)$$

Отже,

$$d^{(1/2)}(\beta) = \begin{bmatrix} \cos \frac{\beta}{2} & -\sin \frac{\beta}{2} \\ \sin \frac{\beta}{2} & \cos \frac{\beta}{2} \end{bmatrix}. \quad (7.68)$$

Зазначимо, що ця матриця періодична за  $\beta$  з періодом  $4\pi$ , а при додаванні до  $\beta$  кута  $2\pi$  змінює свій знак не протилежний. Така *двозначність* характерна для повної матриці обертання (7.65) щоразу, коли  $j$  є напівцілим числом. А в разі цілого  $j$  матриця однозначна при обертаннях на  $2\pi$ .

При  $j = 1$  ми можемо замінити  $J_y$   $3 \times 3$ -матрицею  $S_y$  із (7.52), яка задовольняє тотожності  $S_y^3 = S_y$  (згадаймо, що зараз ми працюємо в системі одиниць, де  $\hbar = 1$ ). Шляхом обчислень, аналогічних до тих, що привели нас до (7.67), отримуємо

$$e^{-i\beta S_y} = 1 - S_y^2(1 - \cos \beta) - iS_y \sin \beta.$$

Тоді маємо

$$d^{(1)}(\beta) = \begin{bmatrix} \frac{1}{2}(1 + \cos \beta) & -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta & \frac{1}{2}(1 - \cos \beta) \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta & \cos \beta & -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta \\ \frac{1}{2}(1 - \cos \beta) & \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta & \frac{1}{2}(1 + \cos \beta) \end{bmatrix}. \quad (7.69)$$

Матричні елементи для загального випадку обчислено Е. П. Вігнером. Їх стисле виведення є в підручнику Сакураї [159]. Систематично дослідити матриці обертання дозволяє *теорія груп* (див. [178]). Єдиний результат із теорії груп, який нам далі знадобиться, це *теорема ортогональності*:

$$\int \{D_{\mu\nu}^{(j)}(R)\}^* D_{\mu'\nu'}^{(j')}(R) dR = (2j+1) \delta_{j'j} \delta_{\mu'\mu} \delta_{\nu'\nu} \int dR. \quad (7.70)$$

Тут  $R$  позначає ейлерові кути обертання  $(\alpha, \beta, \gamma)$ , а  $dR = d\alpha \sin \beta d\beta d\gamma$ . Кут  $\beta$  пробігає значення від 0 до  $\pi$ . Кути  $\alpha$  і  $\gamma$  повинні покривати діапазон  $[0, 4\pi]$ , хоча для цілих  $j$  та  $j'$  вистачить і  $2\pi$ .

### Обертання власних векторів моменту імпульсу

Матриці обертання природно виникають при застосуванні оператора обертання до власних векторів моменту імпульсу:

$$\begin{aligned} \mathbf{R}(\alpha, \beta, \gamma) |j, m\rangle &= \sum_{j', m'} |j', m'\rangle \langle j', m' | \mathbf{R}(\alpha, \beta, \gamma) |j, m\rangle = \\ &= \sum_{m'} |j, m'\rangle D_{m'm}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma). \end{aligned} \quad (7.71)$$

Пропонуємо читачеві самостійно перевірити, що з цього виразу можна отримати власні вектори (7.49) і (7.54) для компонента моменту імпульсу в довільному напрямку.

$(2j+1)$ -вимірний простір, натягнений на набір векторів  $\{|j, m\rangle\}$  для фіксованого  $j$  і всіх дозволених  $-j \leq m \leq j$  є *інваріантним непривідним підпростором* відносно обертання. *Інваріантність* підпростору означає, що вектор, який належить до цього підпростору, належатиме до нього й після обертання. Це справді так, бо жодне інше значення  $j$  не входить до виразу (7.71). А термін *непривідний* указує на те, що цей підпростір не містить меншого підпростору, інваріантного відносно операції обертання. Доведення непривідності залишимо, як вправу для читача.

### Зв'язок зі сферичними гармоніками

Сферичні гармоніки (7.34) було запроваджено в (7.30) і (7.31), як координатне представлення власних векторів орбітального моменту імпульсу  $|\ell, m\rangle$  для цілих значень  $\ell$  і  $m$ . Отже, вони мають перетворюватися при

обертаннях, відповідно до (7.71). З цього рівняння можна вивести корисне співвідношення між сферичними гармоніками та матрицями обертання. Набагато зручніше буде розглядати не саме перетворення, визначене в (7.71), а інверсне до нього:

$$\begin{aligned} \mathbf{R}^{-1}(\alpha, \beta, \gamma) Y_{\ell}^m(\theta, \varphi) &= Y_{\ell}^m(\theta', \varphi') = \\ &= \sum_{m'} Y_{\ell}^{m'}(\theta, \varphi) \{D_{mm'}^{(\ell)}(\alpha, \beta, \gamma)\}^*, \end{aligned} \quad (7.72)$$

де обертання  $\mathbf{R}(\alpha, \beta, \gamma)$  переводить вектор у напрямку  $(\theta, \varphi)$  до напрямку  $(\theta', \varphi')$ .<sup>13</sup> Тут ми скористалися тією обставиною, що матриця обертання  $D$  унітарна, а тому зворотна до неї є транспонована й комплексно спряжена.

Далі ми покажемо, що цей вираз повністю визначає сферичні гармоніки, за винятком нормовочних множників. При  $\beta = \gamma = 0$  маємо

$$\begin{aligned} \mathbf{R}^{-1}(\alpha, 0, 0) Y_{\ell}^m(\theta, \varphi) &= \mathbf{R}(0, 0, -\alpha) Y_{\ell}^m(\theta, \varphi) = Y_{\ell}^m(\theta, \varphi + \alpha) = \\ &= \sum_{m'} Y_{\ell}^{m'}(\theta, \varphi) \{D_{mm'}^{(\ell)}(\alpha, 0, 0)\}^* = \\ &= e^{i\alpha m} Y_{\ell}^m(\theta, \varphi). \end{aligned}$$

Останній рядок впливає з (7.65). Якщо встановити  $\varphi = 0$ , то це дає

$$Y_{\ell}^m(\theta, \alpha) = e^{i\alpha m} Y_{\ell}^m(\theta, 0), \quad (7.73)$$

що визначає залежність сферичної гармоніки від другого аргумента. Оскільки напрямок  $\theta = 0$  є полярною віссю, неперервність сферичної гармоніки вимагає, щоб  $Y_{\ell}^m(0, \alpha)$  не залежала від  $\alpha$ . Із (7.73) випливає, що необхідна для цього умова  $Y_{\ell}^m(0, 0) = 0$  для  $m \neq 0$ , а отже, ми можемо записати

$$Y_{\ell}^m(0, 0) = c_{\ell} \delta_{m,0}, \quad (7.74)$$

де  $c_{\ell}$  — певний нормувальний параметр, залежний лише від  $\ell$ .

Далі підставимо  $\theta = 0$  в (7.72), що встановлює напрям уздовж осі  $z$ . Рівняння зводиться до

$$\begin{aligned} Y_{\ell}^m(\theta', \varphi') &= c_{\ell} \delta_{m,0} \{D_{mm'}^{(\ell)}(\alpha, \beta, \gamma)\}^* = \\ &= c_{\ell} \{D_{m,0}^{(\ell)}(\alpha, \beta, \gamma)\}^*, \end{aligned}$$

<sup>13</sup> Ще раз наголосимо, що обертання у просторі функцій є протилежним за напрямком до обертання координат в аргументі функції, як це вказано в (7.60). Ми дотримуємося активної точки зору.

де  $\mathbf{R}(\alpha, \beta, \gamma)$  переводить вектор, паралельний осі  $z$  у напрямок  $(\theta', \varphi')$ . Ясно, що це вимагає  $\alpha = \varphi' \wedge \beta = \theta'$ , а кут  $\gamma$  може бути довільним. Оскільки  $D_{m,0}^{(\ell)}(\alpha, \beta, \gamma)$  не залежить від  $\gamma$ , то ми можемо записати

$$Y_{\ell}^m(\theta, \varphi) = c_{\ell} \{D_{m,0}^{(\ell)}(\varphi, \theta, 0)\}^*, \quad (7.75)$$

що дає нам просте співвідношення між сферичними гармоніками і матрицями обертання. Стандартне нормування ми отримаємо, встановивши

$$c_{\ell} = \sqrt{\frac{2\ell + 1}{4\pi}}. \quad (7.76)$$

## § 7.6. Повне обертання

Згідно із (7.17), оператор для обертання на кут  $2\pi$  довкола осі, паралельної одиничному вектору  $\hat{\mathbf{n}}$ , є  $\mathbf{R}_{\mathbf{n}}(2\pi) = e^{-2\pi i \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{J} / \hbar}$  (ми вже повернулися до звичайної системи одиниць). Результат його дії на типовий власний вектор моменту імпульсу дається виразом

$$\mathbf{R}_{\mathbf{n}}(2\pi) |j, m\rangle = (-1)^{2j} |j, m\rangle. \quad (7.77)$$

Таким чином, перетворення є тотожністю для цілих значень  $j$ , а в разі напівцілих призводить до перемноження на  $-1$ . Справедливість (7.71) очевидна, якщо  $\hat{\mathbf{n}}$  спрямовано вздовж осі  $z$ , бо ці вектори є власними векторами оператора  $J_z$ . А для доведення в загальному випадку треба розкласти  $|j, m\rangle$  за власними векторами оператора  $\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{J}$ , які можна отримати з  $|j, m\rangle$  шляхом перетворення (7.71). Оскільки різні значення  $j$  ніколи не перемішуються при обертаннях, то звідси випливає, що (7.77) виконується для довільного  $\hat{\mathbf{n}}$ . З цих міркувань ми можемо відкинути посилання на вісь обертання і просто записати:

$$\mathbf{R}_{\mathbf{n}}(2\pi) = \mathbf{R}(2\pi). \quad (7.78)$$

Ми навчені думати, що обертання на кут  $2\pi$  є тривіальною операцією, яка нічого не змінює. Відповідно до цієї впевненості, ми мусимо припустити, що всі динамічні змінні інваріантні відносно  $2\pi$ -обертання. Тому постулюємо:

$$\mathbf{R}(2\pi) A \mathbf{R}^{-1}(2\pi) = A, \quad \text{або} \quad [\mathbf{R}(2\pi), A] = 0, \quad (7.79)$$

де  $A$  може представляти будь-яку фізичну спостережну. Проте сам оператор  $\mathbf{R}(2\pi)$  не є тривіальним (тобто, не дорівнює одиничному), а отже,

інваріантність відносно трансформацій  $\mathbf{R}(2\pi)$  повинна мати нетривіальні наслідки.

Надзвичайно важливо розрізняти наслідки такої інваріантності для спостережних величин з наслідками, які випливають з інваріантності станів. Оскільки важко уявити стани, що не є інваріантними відносно повних обертань, ми зробимо відступ і розглянемо наслідки довільної симетрії.

Нехай  $U$  — унітарний оператор, що залишає інваріантною окрему динамічну змінну  $\mathcal{F}$ , а отже, для оператора  $F$ , що її представляє, справедливе співвідношення  $[U, F] = 0$ . Розглянемо певний стан, що не є інваріантним відносно перетворення  $U$ . Якщо це чистий стан з вектором стану  $|\Psi\rangle$ , то  $|\Psi'\rangle = U|\Psi\rangle \neq |\Psi\rangle$ . Середнє значення динамічної змінної в перетвореному стані є

$$\begin{aligned}\langle \mathcal{F} \rangle &= \langle \Psi' | F | \Psi' \rangle = \langle \Psi | U^\dagger F U | \Psi \rangle = \\ &= \langle \Psi | U^\dagger U F | \Psi \rangle = \\ &= \langle \Psi | F | \Psi \rangle.\end{aligned}$$

Тож ми бачимо, що статистичні властивості спостережної однакові для двох станів  $|\Psi\rangle$  і  $|\Psi'\rangle$ . Цілком аналогічно, для загального стану, що описується оператором  $\rho$ , для якого ми припускаємо, що  $\rho' = U\rho U^\dagger \neq \rho$ , середнє значення величини  $\mathcal{F}$  є

$$\begin{aligned}\langle \mathcal{F} \rangle &= \text{Tr}(\rho' F) = \text{Tr}(U\rho U^\dagger F) = \\ &= \text{Tr}(\rho U^\dagger F U) = \\ &= \text{Tr}(\rho F).\end{aligned}$$

Ми й тут бачимо, вже в загальнішому випадку, що статистичні властивості спостережної  $\mathcal{F}$  мають бути однаковими в пов'язаних симетрією, хоч і не тотожних станах. Певна річ, такий висновок справедливий і для операції симетрії  $\mathbf{R}(2\pi)$ , проте це нас не дуже цікавить. Нам потрібно щось особливе, характерне саме для цього перетворення.

Відповідно до (7.77), оператор  $\mathbf{R}(2\pi)$  поділяє векторний простір станів на два підпростори. Типовий вектор із першого підпростору (цілі значення моменту імпульсу) позначимо, як  $|+\rangle$ , і він має властивість  $\mathbf{R}(2\pi)|+\rangle = |+\rangle$ . У той же час, типовий вектор із другого підпростору (півцілі значення моменту імпульсу), який позначимо  $|-\rangle$ , задовольняє співвідношенню  $\mathbf{R}(2\pi)|-\rangle = -|-\rangle$ . Тепер, якщо  $A$  є оператором довільної фізичної спостережної величини, то

$$\begin{aligned}\langle + | \mathbf{R}(2\pi) A | - \rangle &= \langle + | A \mathbf{R}(2\pi) | - \rangle, \\ \langle + | A | - \rangle &= -\langle + | A | - \rangle.\end{aligned}$$

Отже, в цьому випадку повинно бути  $\langle +|A|-\rangle = 0$ . Таким чином, жодна фізична спостережна не може мати відмінних від нуля матричних елементів між станами з цілими значеннями моменту імпульсу та станами з його півцілими значеннями. На цьому факті ґрунтується *правило супервідбору*.

Це правило стверджує, що не існує жодної спостережної різниці між станами вигляду

$$|\Psi_\omega\rangle = |+\rangle + e^{i\omega}|-\rangle \quad (7.80)$$

для різних значень фази  $\omega$ . Це й справді так, бо для будь-якої фізичної спостережної  $\mathcal{A}$ , в силу  $\langle +|A|-\rangle = \langle -|A|+\rangle = 0$ , маємо  $\langle \mathcal{A} \rangle = \langle \Psi_\omega | \mathcal{A} | \Psi_\omega \rangle = \langle +|A|+\rangle + \langle -|A|-\rangle$ , що не залежить від  $\omega$ .

Цілком аналогічне твердження можна зробити для загального стану, представленого оператором  $\rho = \sum_{ij} \rho_{ij} |i\rangle\langle j|$ . Матрицю  $\rho_{ij}$  й подібну матрицю для фізичної спостережної  $\mathcal{A}$  можна розділити на чотири блоки:

$$[\rho] = \begin{bmatrix} \rho_{++} & \rho_{+-} \\ \rho_{-+} & \rho_{--} \end{bmatrix}, \quad [A] = \begin{bmatrix} A_{++} & 0 \\ 0 & A_{--} \end{bmatrix}.$$

Середнє значення динамічної змінної  $\mathcal{A}$  в цьому стані є

$$\mathcal{A} = \text{Tr}(\rho A) = \text{Tr}_+(\rho_{++} A_{++}) + \text{Tr}_-(\rho_{--} A_{--}),$$

де  $\text{Tr}_+$  і  $\text{Tr}_-$  позначають операцію сліду на підпросторах. Перехресні матричні елементи  $\rho_{+-}$  і  $\rho_{-+}$  не дають внеску в , оскільки відповідні матричні елементи оператора  $A$  є нульовими. Це можна сформулювати загальнішим чином: інтерференція між векторами типів  $|+\rangle$  і  $|-\rangle$  не дає спостережних наслідків.

На цій підставі іноді кажуть, що станів, які описуються векторами вигляду (7.80), узагалі не існує. Це еквівалентно твердженню, що матричні елементи  $\rho_{+-}$  і  $\rho_{-+}$  оператора стану мають бути нульовими. Хоча коректне формулювання правила супервідбору полягає в тому, що такі матричні елементи не мають спостережних наслідків, а тому ми вільні обрати для них будь-які зручні значення, скажімо,  $\rho_{+-} = \rho_{-+} = 0$ . Якщо такий вибір зроблено при встановленні початкової умови при  $t = 0$ , то це залишатиметься справедливим у будь-який момент часу, оскільки генератор часової еволюції  $H$  сам є фізичною спостережною, і для нього виконується умова інваріантності  $[H, \mathbf{R}(2\pi)] = 0$ . Тому рівняння руху розпадається на два окремі рівняння в кожному з цих підпросторів, між якими ніколи не виникне ненульових перехресних матричних елементів  $\rho_{+-}$  і  $\rho_{-+}$ .

## Супервідбір і звичайна симетрія

Важливо розуміти різницю між генератором правила супервідбору, на зразок  $\mathbf{R}(2\pi)$ , і генератором операції симетрії, що породжує універсальну збережену величину — як, наприклад, оператор просторового переміщення  $e^{-ia \cdot \mathbf{P}/\hbar}$ , що породжує повний імпульс  $\mathbf{P}$ . Оскільки гамільтоніан будь-якої замкненої системи має бути інваріантним відносно обох цих перетворень, то між ними існує позірنا схожість. Обоє дають квантові числа, що мають зберігатися в процесі еволюції системи: в першому випадку, це власні значення  $\pm 1$  оператора  $\mathbf{R}(2\pi)$ , а в другому — власні значення оператора повного імпульсу  $\mathbf{P}$ .

А різниця полягає в тому, що існують спостережні, які *не* комутують із  $\mathbf{P}$  (наприклад, оператор положення  $\mathbf{Q}$ ), проте не може бути спостережних, що не комутували б із  $\mathbf{R}(2\pi)$ . А отже, при вимірюванні можна розрізнити стани, перетворені внаслідок просторового переміщення; але ніяке вимірювання не дозволить знайти різницю між станами, що виникли в результаті обертання на  $2\pi$ .

[[ Правило супервідбору, що відокремлює стани з цілим моментом імпульсу від станів з напівцілим значенням цієї величини, є єдиним правилом такого типу в квантовій механіці стабільних часток. У квантовій теорії поля, де частки розглядаються, як польові збурення, що можуть народжуватись і знищуватись, оператор електричного заряду також утворює правило супервідбору, що забезпечує інваріантність усіх спостережних відносно калібрувальних перетворень (про них див. § 11.2). У цьому випадку не існує можливості виявити інтерференцію між станами з різним повним зарядом, оскільки немає жодної фізичної спостережної величини, оператор якої не комутував би з оператором повного заряду. В теорії стабільних часток заряд кожної частки, а отже, й повний заряд системи, є незмінними, тому оператор заряду просто кратний одиничному. Кожен оператор комутує з одиничним, а тому для заряду правило супервідбору постає, як тривіальне. ]]

## § 7.7. Додавання моментів імпульсу

Розглянемо двокомпонентну систему, кожен компонент якої має степені свободи з моментом імпульсу. Для зручності говоритимемо про ці компоненти, як про „частку 1“ і „частку 2“, і позначимо відповідні оператори моменту імпульсу через  $\mathbf{J}^{(1)}$  і  $\mathbf{J}^{(2)}$ , хоча з таким самим успіхом це можуть бути орбітальні та спінові степені свободи однієї й тієї ж частки.

Як уже обговорювалося в § 3.5, базисні вектори для композитної системи можна утворити з базисних векторів її компонентів, узявши всі мо-



жливі бінарні добутки векторів з обох наборів:

$$|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle = |j_1, m_1\rangle^{(1)} \otimes |j_2, m_2\rangle^{(2)}. \quad (7.81)$$

Ці вектори є спільними власними векторами чотирьох комутативних операторів  $\mathbf{J}^{(1)} \cdot \mathbf{J}^{(1)}$ ,  $\mathbf{J}^{(2)} \cdot \mathbf{J}^{(2)}$ ,  $J_z^{(1)}$  і  $J_z^{(2)}$ , з власними значеннями  $\hbar^2 j_1(j_1 + 1)$ ,  $\hbar^2 j_2(j_2 + 1)$ ,  $\hbar m_1$  і  $\hbar m_2$  відповідно.

Часто буває бажаним утворити набір власних векторів повного моменту імпульсу  $\mathbf{J} \cdot \mathbf{J}$  і  $J_z$ , де

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}^{(1)} + \mathbf{J}^{(2)}. \quad (7.82)$$

[Математично коректніше було б записати  $\mathbf{J} = \mathbf{J}^{(1)} \otimes \mathbf{I} + \mathbf{I} \otimes \mathbf{J}^{(2)}$ ; таке позначення явно вказує на те, що  $\mathbf{J}^{(1)}$  діє лише на перший множник у (7.81), а  $\mathbf{J}^{(2)}$  — лише на другий множник.] Це корисно коли система інваріантна відносно обертання, як одне ціле, але неінваріантна при обертаннях її окремих компонентів. У такому разі, її повний момент імпульсу  $\mathbf{J}$  є інтегралом руху, тоді як  $\mathbf{J}^{(1)}$  і  $\mathbf{J}^{(2)}$  окремо не зберігаються.

Власні вектори операторів  $\mathbf{J} \cdot \mathbf{J}$  і  $J_z$  можна записати, як  $|\alpha, J, M\rangle$ , де  $\hbar^2 J(J + 1)$  і  $\hbar M$  є їх власними значеннями, а  $\alpha$  позначає якийсь інший параметр, що може знадобитися для додаткової характеристики власних векторів з однаковими значеннями  $J$  і  $M$ . Ці вектори можна виразити через лінійні комбінації векторів (7.81), оскільки  $\mathbf{J}^{(1)} \cdot \mathbf{J}^{(1)}$ ,  $\mathbf{J}^{(2)} \cdot \mathbf{J}^{(2)}$ ,  $\mathbf{J} \cdot \mathbf{J}$  і  $J_z$  взаємно комутативні, а отже, породжують повний набір спільних власних векторів. У зв'язку з цим, усі доданки в кожній такій комбінації повинні мати однакові значення  $j_1$  і  $j_2$ , тому ми можемо зосередити увагу на просторі розмірності  $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ , натягнутому на вектори (7.81) з певними фіксованими значеннями  $j_1$  і  $j_2$ .

За результатами § 7.5, цей простір інваріантний відносно обертання, тому складається з одного або кількох *непривідних* інваріантних підпросторів. З очевидністю, кожен такий непривідний підпростір має утворювати набір з  $2J + 1$  векторів  $|\alpha, J, M\rangle$  при фіксованих  $\alpha$  та  $J$  і змінному значенні  $M$  у діапазоні  $-J \leq M \leq J$ . І справді: якщо вектор  $|\alpha, J, M\rangle$  для якогось окремого  $M$  належить до простору, який ми зараз розглядаємо, то в силу своєї непривідності увесь підпростір векторів  $|\alpha, J, M\rangle$  для  $-J \leq M \leq J$  має належати до нього.

Ясно, що існують такі великі значення  $J$ , при яких  $|\alpha, J, M\rangle$  не належать до простору розмірності  $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ . З іншого боку, не виключено, що для деяких  $J$  вектори  $|\alpha, J, M\rangle$  можуть утворювати більше одного непривідного підпростору. Нехай  $N(J)$  позначає кількість таких

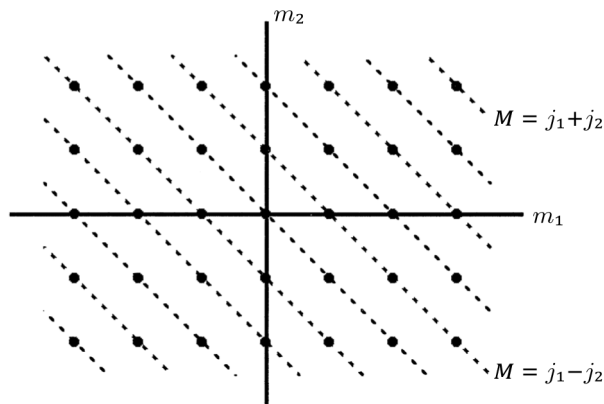


Рис. 7.5. Можливі значення  $M = m_1 + m_2$  для фіксованих  $j_1 = 3$  і  $j_2 = 2$ .

незалежних наборів власних векторів, а  $n(M)$  — ступінь виродження власного значення  $M$  у нашому просторі. Ці дві величини співвідносяться, як

$$n(M) = \sum_{J \geq |M|} N(J), \quad (7.83)$$

а отже,

$$N(J) = n(J) - n(J + 1). \quad (7.84)$$

Таким чином,  $N(J)$  можна отримати з  $n(M)$ , яке легше обчислюється.

Вектори (7.81) є власними векторами оператора  $J_z = J_z^{(1)} + J_z^{(2)}$  з власними значеннями  $\hbar M = (m_1 + m_2)$ , і ступінь виродження дорівнює кількості різних пар  $(m_1, m_2)$ , для яких  $m_1 + m_2 = M$ . Це проілюстровано на Рис. 7.58, з якого видно, що  $n(M)$  дорівнює кількості точок, що лежать на діагональній лінії  $M = m_1 + m_2$ . Тому

$$\begin{aligned} n(M) &= 0, & \text{якщо } |M| > j_1 + j_2; \\ &= j_1 + j_2 + 1 - |M|, & \text{якщо } j_1 + j_2 \geq |M| \geq |j_1 - j_2|; \\ &= 2 \min(j_1, j_2) + 1, & \text{якщо } |j_1 - j_2| \geq |M| \geq 0. \end{aligned} \quad (7.85)$$

А тоді з (7.84) випливає, що

$$\begin{aligned} N(J) &= 1 & \text{для } j_1 + j_2 \geq J \geq |j_1 - j_2|; \\ &= 0 & \text{в усіх інших випадках.} \end{aligned} \quad (7.86)$$

Як виявилося,  $N(J)$  ніколи не може бути більшим за 1, а тому вектор  $|\alpha, J, M\rangle$  єдиним чином визначається через власні значення чотирьох операторів  $\mathbf{J}^{(1)} \cdot \mathbf{J}^{(1)}$ ,  $\mathbf{J}^{(2)} \cdot \mathbf{J}^{(2)}$ ,  $\mathbf{J} \cdot \mathbf{J}$  і  $J_z$ . Надалі ми позначатимемо власні вектори повного моменту імпульсу, як  $|j_1, j_2, J, M\rangle$ .

### Коефіцієнти Клебша–Гордана

Оскільки вектори  $\{|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle\}$  утворюють повний базис, то кожен вектор з набору  $\{|j_1, j_2, J, M\rangle\}$  можна виразити через їхню лінійну комбінацію:

$$|j_1, j_2, J, M\rangle = \sum_{m_1, m_2} |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j_1, j_2, J, M\rangle. \quad (7.87)$$

Коефіцієнти такого перетворення називаються *коефіцієнтами Клебша–Гордана* і надалі будуть записуватись у вигляді

$$(j_1, j_2, m_1, m_2 | J, M) = \langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j_1, j_2, J, M\rangle. \quad (7.88)$$

Фази коефіцієнтів поки що довільні, оскільки  $|j_1, j_2, J, M\rangle$  визначено лише як власні вектори оператора повного моменту імпульсу. Для різних значень  $M$  при незмінному  $J$  ми приймаємо стандартну домовленість, яка призвела до виразу (7.14). Але вона залишає одну довільну фазу для кожного значення  $J$ , тому ми фіксуємо її додатковою вимогою:

$$(j_1, j_2, j_1, J - j_1 | J, J) \text{ є дійсним і позитивним.} \quad (7.89)$$

Така умова, хоч це й не очевидно, робить усі коефіцієнти Клебша–Гордана дійсними та позитивними.

Співвідношення (7.87) та обернене до нього тепер можна записати у вигляді

$$|j_1, j_2, J, M\rangle = \sum_{m_1, m_2} |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle (j_1, j_2, m_1, m_2 | J, M), \quad (7.90)$$

$$|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle = \sum_{J, M} |j_1, j_2, J, M\rangle (j_1, j_2, m_1, m_2 | J, M). \quad (7.91)$$

Оскільки це унітарне перетворення від одного ортонормованого базиса до іншого, то коефіцієнти мають задовольняти співвідношенням ортонормальності:

$$\sum_{m_1, m_2} (j_1, j_2, m_1, m_2 | J, M) (j_1, j_2, m_1, m_2 | J', M') = \delta_{JJ'} \delta_{MM'}, \quad (7.92)$$

$$\sum_{J, M} (j_1, j_2, m_1, m_2 | J, M) (j_1, j_2, m'_1, m'_2 | J, M) = \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2}. \quad (7.93)$$

Коефіцієнти Клебша–Гордана обертаються на нуль, якщо не виконуються такі умови:

$$(a) \quad m_1 + m_2 = M, \quad (7.94)$$

$$(b) \quad |j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2, \quad (7.95)$$

$$(c) \quad j_1 + j_2 + J = \text{ціле число}. \quad (7.96)$$

Умови (а) і (б) ми вже вивели вище. Умова (с) впливає з поведінки рівняння (7.87) при обертанні на  $2\pi$ . Відповідно до (7.77), ліва частина (7.87) після такого обертання має перемножуватися на  $(-1)^{2J}$ , тоді як права — на  $(-1)^{2(j_1+j_2)}$ . Помноживши обидві частини виразу ще на  $(-1)^{2J}$ , ми отримуємо в лівій частині  $(-1)^{4J}$ , що тотожно дорівнює одиниці, бо  $J$  може бути лише цілим або напівцілим. А тоді для множника в правій частині маємо умову  $(-1)^{2(j_1+j_2+J)} = 1$ , що еквівалентно (7.96).

### Рекурсивні співвідношення

Коефіцієнти Клебша–Гордана можна отримати шляхом послідовного застосування операторів  $J_+$  і  $J_-$ , визначених у (7.5), до рівняння

$$|j_1, j_2, J, M\rangle = \sum_{m_1, m_2} |j_1, m_1\rangle^{(1)} \otimes |j_2, m_2\rangle^{(2)} (j_1, j_2, m_1, m_2 | J, M), \quad (7.97)$$

яке є просто іншим записом (7.87).

Це легко проілюструвати для випадку  $j_1 = j_2 = \frac{1}{2}$ . Коли  $J$  і  $M$  досягають свого максимального значення  $J = M = 1$ , сума (7.97) містить лише один доданок:

$$|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, 1\rangle = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | 1, 1) |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle^{(1)} \otimes |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle^{(2)}. \quad (7.98)$$

Умова для фази (7.89) і та обставина, що вектори мають одиничну норму, дають

$$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | 1, 1) = 1.$$

Далі ми застосовуємо до (7.98) оператор  $J_- = J_-^{(1)} + J_-^{(2)}$  і використовуємо (7.15), щоб отримати

$$\sqrt{2} |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, 0\rangle = |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle^{(1)} \otimes |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle^{(2)} + |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle^{(1)} \otimes |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle^{(2)}.$$

Повторне застосування  $J_-$  до цього виразу дає

$$|1, -1\rangle = |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle^{(1)} \otimes |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle^{(2)}.$$

Порівнявши ці результати з (7.97), ми отримуємо перші два стовпці для *триплету* в таблиці:

Значення $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, m_1, m_2   J, M)$					
	$J, M =$	(триплет)			(синглет)
		1, +1	1, 0	1, -1	0, 0
$m_1, m_2 =$	$+\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$	1	0	0	0
	$+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	0	$\frac{1}{\sqrt{2}}$
	$-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	0	$-\frac{1}{\sqrt{2}}$
	$-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	0	0	1	0

(7.99)

Третій стовпець для триплету можна отримати з домовленості про фазу (7.89) і вимоги, щоб *синглетний* стан  $|0, 0\rangle$  був ортогональний до всіх трьох триплетних станів.

Застосування оператора  $J_-$  до (7.97) у загальному випадку дає

$$\begin{aligned}
 & \sqrt{(J - M + 1)(J + M)} |j_1, j_2, J, M - 1\rangle = \\
 & = \sum_{m_1, m_2} \{ \sqrt{(j_1 - m_1 + 1)(j_1 + m_1)} |j_1, m_1 - 1\rangle^{(1)} \otimes |j_2, m_2\rangle^{(2)} + \\
 & \quad + \sqrt{(j_2 - m_2 + 1)(j_2 + m_2)} |j_1, m_1\rangle^{(1)} \otimes |j_2, m_2 - 1\rangle^{(2)} \} \times \\
 & \quad \times (j_1, j_2, m_1, m_2 | J, M). \quad (7.100)
 \end{aligned}$$

Тепер перепишемо вираз (7.97), замінивши в ньому  $M$  на  $M - 1$ :

$$|j_1, j_2, J, M - 1\rangle = \sum_{m_1, m_2} |j_1, m_1\rangle^{(1)} \otimes |j_2, m_2\rangle^{(2)} (j_1, j_2, m_1, m_2 | J, M - 1),$$

і порівнюємо його доданки з доданками в (7.100) для окремих значень  $m_1$  і  $m_2$ . В результаті,

$$\begin{aligned}
 & \sqrt{(J - M + 1)(J + M)} (j_1, j_2, m_1, m_2 | J, M - 1) = \\
 & = \sqrt{(j_1 - m_1)(j_1 + m_1 + 1)} (j_1, j_2, m_1 + 1, m_2 | J, M) + \\
 & \quad + \sqrt{(j_2 - m_2)(j_2 + m_2 + 1)} (j_1, j_2, m_1, m_2 + 1 | J, M). \quad (7.101)
 \end{aligned}$$

Цілком подібні обчислення із застосуванням оператора  $J_+ = J_+^{(1)} + J_+^{(2)}$  дають

$$\begin{aligned} & \sqrt{(J+M+1)(J-M)} (j_1, j_2, m_1, m_2 | J, M+1) = \\ & = \sqrt{(j_1+m_1)(j_1-m_1+1)} (j_1, j_2, m_1-1, m_2 | J, M) + \\ & + \sqrt{(j_2+m_2)(j_2-m_2+1)} (j_1, j_2, m_1, m_2-1 | J, M). \quad (7.102) \end{aligned}$$

Ці рекурсивні співвідношення особливо корисні при розгляді *спін-орбітальної взаємодії* для електрона в атомі, коли  $j_1 = \ell$ ,  $j_2 = \frac{1}{2}$ . Якщо взяти максимальне значення  $m_2 = \frac{1}{2}$ , то другий доданок у правій частині рівняння (7.101) обертається на нуль, і тоді залишається

$$\begin{aligned} & \sqrt{(J-M+1)(J+M)} \left( \ell, \frac{1}{2}, M - \frac{3}{2}, \frac{1}{2} | J, M-1 \right) = \\ & = \sqrt{\left( \ell - M + \frac{3}{2} \right) \left( \ell + M - \frac{1}{2} \right)} \left( \ell, \frac{1}{2}, M - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | J, M \right). \end{aligned}$$

Тут ми скористались умовою (7.94), яка дає  $m_1 = M - m_2 = M - \frac{1}{2}$ .

Підстановка  $M \rightarrow M+1$  призводить до

$$\left( \ell, \frac{1}{2}, M - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | J, M \right) = \left[ \frac{\left( \ell - M + \frac{1}{2} \right) \left( \ell + M + \frac{1}{2} \right)}{(J-M)(J+M+1)} \right]^{1/2} \left( \ell, \frac{1}{2}, M + \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | J, M+1 \right).$$

Для випадку  $J = \ell + \frac{1}{2}$  ми рекурсивно застосуємо це рівняння, аж поки послідовність  $M, M+1, M+2, \dots$  набуде свого максимального значення  $\ell + \frac{1}{2}$ :

$$\begin{aligned} \left( \ell, \frac{1}{2}, M - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | J, M \right) &= \left[ \frac{\ell + M + \frac{1}{2}}{\ell + M + \frac{3}{2}} \right]^{1/2} \left( \ell, \frac{1}{2}, M + \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | \ell + \frac{1}{2}, M+1 \right) = \\ &= \left[ \frac{\ell + M + \frac{1}{2}}{\ell + M + \frac{5}{2}} \right]^{1/2} \left( \ell, \frac{1}{2}, M + \frac{3}{2}, \frac{1}{2} | \ell + \frac{1}{2}, M+2 \right) = \\ &\vdots \\ &= \left[ \frac{\ell + M + \frac{1}{2}}{2\ell + 1} \right]^{1/2} \left( \ell, \frac{1}{2}, \ell, \frac{1}{2} | \ell + \frac{1}{2}, \ell + \frac{1}{2} \right). \end{aligned}$$

Коефіцієнт Клебша–Гордана в останньому рядку має вигляд  $(j_1, j_2, j_1, j_2 | j_1 + j_2, j_1 + j_2)$ , і читачеві пропонується самостійно довести, що він дорівнює одиниці. Отже, обчислення  $\left( \ell, \frac{1}{2}, M - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | J, M \right)$  завершено, і отримане значення розміщено в лівому верхньому кутку наступної таблиці:

Значення $(\ell, \frac{1}{2}, M - m_s, m_s   J, M)$			(7.103)
	$J = \ell + \frac{1}{2}$	$J = \ell + \frac{1}{2}$	
$m_s = \frac{1}{2}$	$\left[ \frac{\ell + M + \frac{1}{2}}{2\ell + 1} \right]^{1/2}$	$-\left[ \frac{\ell - M + \frac{1}{2}}{2\ell + 1} \right]^{1/2}$	
$m_s = -\frac{1}{2}$	$\left[ \frac{\ell - M + \frac{1}{2}}{2\ell + 1} \right]^{1/2}$	$\left[ \frac{\ell + M + \frac{1}{2}}{2\ell + 1} \right]^{1/2}$	

Вираз у лівому нижньому кутку таблиці можна визначити з того ж рекурсивного співвідношення (7.102), взявши  $m_s = -\frac{1}{2}$ . Проте його легше вивести з того факту, що вектор  $|J = \ell + \frac{1}{2}, M\rangle$  є нормованим, а отже, сума квадратів обох коефіцієнтів з лівого стовпця має дорівнювати одиниці. Вирази у правому стовпці, за винятком повного знаку, визначаються з вимоги, що вектор  $|J = \ell - \frac{1}{2}, M\rangle$  нормований на одиницю і ортогональний до  $|J = \ell + \frac{1}{2}, M\rangle$ . А з домовленості про фазу (7.89) випливає, що доданок із  $m_s = -\frac{1}{2}$  має ути позитивним.

Спін-орбітальні власні функції записуються, як  $\mathcal{Y}_\ell^{JM}$ . Їхній стандартний вигляд у матричному представленні є

$$\begin{aligned} \mathcal{Y}_\ell^{\ell+\frac{1}{2},M} &= \frac{1}{\sqrt{2\ell+1}} \begin{bmatrix} \sqrt{\ell+M+\frac{1}{2}} Y_\ell^{M-\frac{1}{2}}(\theta, \varphi) \\ \sqrt{\ell-M+\frac{1}{2}} Y_\ell^{M+\frac{1}{2}}(\theta, \varphi) \end{bmatrix}, \\ \mathcal{Y}_\ell^{\ell-\frac{1}{2},M} &= \frac{1}{\sqrt{2\ell+1}} \begin{bmatrix} -\sqrt{\ell-M+\frac{1}{2}} Y_\ell^{M-\frac{1}{2}}(\theta, \varphi) \\ \sqrt{\ell+M+\frac{1}{2}} Y_\ell^{M+\frac{1}{2}}(\theta, \varphi) \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (7.104)$$

За своєю будовою вони є власними функціями операторів  $\mathbf{L} \cdot \mathbf{L}$ ,  $\mathbf{S} \cdot \mathbf{S}$ ,  $\mathbf{J} \cdot \mathbf{J}$  і  $J_z$ . Також вони є власними функціями оператора спін-орбітальної взаємодії  $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ , оскільки

$$\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} = \frac{1}{2}(\mathbf{J} \cdot \mathbf{J} - \mathbf{L} \cdot \mathbf{L} - \mathbf{S} \cdot \mathbf{S}). \quad (7.105)$$

Власні значення цього оператора є

$$\frac{1}{2}\hbar^2[j(j+1) - \ell(\ell+1) - \frac{3}{4}] = \begin{cases} \frac{1}{2}\hbar^2\ell & \text{для } j = \ell + \frac{1}{2}, \\ -\frac{1}{2}\hbar^2(\ell+1) & \text{для } j = \ell - \frac{1}{2}. \end{cases} \quad (7.106)$$

Приклад спин-орбітальної взаємодії ми розглянемо в § 16.4.

### Вігнерові $3j$ -символи

Коефіцієнти Клебша–Гордана пов'язані із симетричнішими коефіцієнтами, що мають назву вігнерових  $3j$ -символів:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{j_1-j_2-m_3}}{\sqrt{2j_3+1}} (j_1, j_2, m_1, m_2 | j_3, -m_3). \quad (7.107)$$

Ротенберг і співавтори [157] уклали вичерпні таблиці цих та ще складніших коефіцієнтів разом з переліком найважливіших співвідношень, яким вони задовольняють. У відповідності до (4.94), (4.95) і (4.96) вігнерові  $3j$ -символи мають обернутися на нуль, якщо  $m_1 + m_2 + m_3 \neq 0$ , величини  $j_1$ ,  $j_2$  і  $j_3$  не задовольняють нерівності трикутника, а  $j_1 + j_2 + j_3$  не є цілим числом.

Позначимо  $3j$ -символи (7.107) аббревіатурою  $(1, 2, 3)$ . Для них виконуються такі співвідношення симетрії:

(i) Парна перестановка:

$$(1, 2, 3) = (2, 3, 1) = (3, 1, 2).$$

(ii) Непарна перестановка:

$$(3, 2, 1) = (2, 1, 3) = (1, 3, 2) = (1, 2, 3) \times (-1)^{j_1-j_2-m_3}.$$

(iii) Обернення знаків  $m_1$ ,  $m_2$  і  $m_3$  призводить до перемноження  $3j$ -символа на  $(-1)^{j_1-j_2-m_3}$ .

Симетричність відносно перестановок 1 і 2 була очікуваною із самого означення коефіцієнтів Клебша–Гордана через додавання двох моментів імпульсу, проте потрійна симетричність аж ніяк не очевидна з цієї точки зору. У монографії Ротенберга наведено й інші симетрії, інтерпретація яких ще більш незбагненна.

## § 7.8. Непривідні тензорні оператори

Одна з причин, яка робить таким важливим набір  $2j + 1$  власних векторів моменту імпульсу  $\{|j, m\rangle : -j \leq m \leq j\}$ , полягає в тому, що при



обертаннях вони перетворюються за простим правилом (7.71), формуючи базис інваріантного непривідного підпростору. Набір  $2k + 1$  операторів  $\{T_q^{(k)} : -k \leq q \leq k\}$ , що зазнають аналогічних трансформацій:

$$\mathbf{R}(\alpha, \beta, \gamma) T_q^{(k)} \mathbf{R}^{-1}(\alpha, \beta, \gamma) = \sum_{q'} T_{q'}^{(k)} D_{q'q}^{(k)}(\alpha, \beta, \gamma), \quad (7.108)$$

утворює *непривідний тензор рангу  $k$* .

Скалярний оператор  $S$ , який (за означенням) інваріантний відносно обертання:

$$\mathbf{R}(\alpha, \beta, \gamma) S \mathbf{R}^{-1}(\alpha, \beta, \gamma) = S, \quad (7.109)$$

є непривідним тензором нульового рангу. Векторний оператор  $\mathbf{V}$  є непривідним тензором першого рангу, оскільки три його компонента перетворюються при обертаннях на свою лінійну комбінацію. *Сферичні компоненти* вектора, які задовольняють означенню (7.108), задаються виразами

$$V_{+1} = -\frac{1}{\sqrt{2}}(V_x + iV_y), \quad V_0 = V_z, \quad V_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(V_x - iV_y). \quad (7.110)$$

Хоча непривідний тензор означено через перетворення при скінченних обертаннях, йому так само можна дати означення через інфінітезимальні обертання. Згадавши вираз для матриці обертання (7.64), ми можемо переписати (7.108), як

$$\mathbf{R} T_q^{(k)} \mathbf{R}^{-1} = \sum_{q'} T_{q'}^{(k)} \langle k, q' | \mathbf{R} | k, q \rangle.$$

Для обертання на інфінітезимальний кут  $\varepsilon$  довкола осі в напрямку одиничного вектора  $\hat{\mathbf{n}}$  оператор перетворення має вигляд  $\mathbf{R} = 1 - i\varepsilon \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{J}/\hbar$ , і тоді попереднє рівняння дає

$$[\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{J}, T_q^{(k)}] = \sum_{q'} T_{q'}^{(k)} \langle k, q' | \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{J} | k, q \rangle. \quad (7.111)$$

Застосувавши цей результат до напрямків уздовж координатних осей  $x$ ,  $y$ ,  $z$  і скориставшись фундаментальними властивостями (7.14) і (7.15) сходових операторів  $J_+ = J_x + iJ_y$  та  $J_- = J_x - iJ_y$ , ми отримуємо

$$\begin{aligned} [J_+, T_q^{(k)}] &= \hbar \sqrt{(k-q)(k+q+1)} T_{q+1}^{(k)}, \\ [J_-, T_q^{(k)}] &= \hbar \sqrt{(k+q)(k-q+1)} T_{q-1}^{(k)}, \\ [J_z, T_q^{(k)}] &= \hbar q T_q^{(k)}. \end{aligned} \quad (7.112)$$

Ці комутаційні співвідношення можна розглядати, як альтернативне означення для сферичних компонентів непривідного тензора замість (7.108).

Із простих оберतालних властивостей тензорних операторів випливає кілька корисних результатів. Але для їх виведення ми мусимо спершу отримати деякі важливі співвідношення між матрицями обертання і коефіцієнтами Клебша–Гордана. Передовсім застосуємо обертання до добутку векторів вигляду (7.91):

$$\mathbf{R}|k, q\rangle \otimes |j, m\rangle = \sum_{J, M} \mathbf{R}|k, j, J, M\rangle (k, j, q, m|J, M).$$

З використанням (7.71) це дає

$$\begin{aligned} \sum_{q', m'} |k, q'\rangle \otimes |j, m'\rangle D_{qq'}^{(k)}(R) D_{mm'}^{(j)}(R) &= \\ &= \sum_{M, J, M'} |k, j, J, M'\rangle D_{M'M}^{(J)}(R) (k, j, q, m|J, M). \end{aligned}$$

Тепер підставимо в другий рядок вираз

$$|k, j, J, M'\rangle = \sum_{q', m'} |k, q'\rangle \otimes |j, m'\rangle (k, j, q', m'|J, M')$$

і прирівняємо коефіцієнти при  $|k, q'\rangle \otimes |j, m'\rangle$ . В результаті отримуємо

$$\begin{aligned} D_{qq'}^{(k)}(R) D_{mm'}^{(j)}(R) &= \\ &= \sum_{M, J, M'} (k, j, q', m'|J, M') D_{M'M}^{(J)}(R) (k, j, q, m|J, M). \end{aligned} \quad (7.113)$$

(Таке приведення добутку матриць обертання до суми окремих матриць інколи називають рядом Клебша–Гордана.) Тепер, за допомогою теореми ортогональності (7.70), ми можемо обчислити інтеграл від добутку трьох матриць обертання:

$$\begin{aligned} \int \{D_{M'M}^{(J)}(R)\}^* D_{qq'}^{(k)}(R) D_{mm'}^{(j)}(R) dR &= \\ &= (k, j, q', m'|J, M')(j_1, j_2, m_1, m_2|J, M)(2J+1)^{-1} \int dR. \end{aligned} \quad (7.114)$$

### Матричні елементи тензорних операторів

Обчислення матричних елементів можна істотно спростити, вдавшись до *теорема Вігнера–Екарта*, яку ми зараз доведемо.

Нехай  $|\tau, J, M\rangle$  буде власним вектором оператора повного моменту імпульсу, де власне значення  $\tau$  представляє якісь інші оператори, що можуть бути поєднані з  $\mathbf{J} \cdot \mathbf{J}$  і  $J_z$  для утворення повного комутативного набору. Скориставшись (7.71), (7.108) і унітарністю  $\mathbf{R}$ , отримуємо

$$\begin{aligned} \langle \tau', J', M' | T_q^{(k)} | \tau, J, M \rangle &= \langle \tau', J', M' | \mathbf{R}^\dagger \mathbf{R} T_q^{(k)} \mathbf{R}^\dagger \mathbf{R} | \tau, J, M \rangle = \\ &= \sum_{\mu', \sigma, \mu} \{ D_{\mu' M'}^{(J')} (R) \}^* D_{\sigma q}^{(k)} (R) D_{\mu M}^{(J)} (R) \times \\ &\quad \times \langle \tau', J', \mu' | T_\sigma^{(k)} | \tau, J, \mu \rangle. \end{aligned}$$

Ліва частина цього рівняння не залежить від обертання, тому ми можемо проінтегрувати її за всіма кутами  $R = (\alpha, \beta, \gamma)$  і скористатися (7.114), щоб отримати

$$\begin{aligned} \langle \tau', J', M' | T_q^{(k)} | \tau, J, M \rangle &= \sum_{\mu', \sigma, \mu} (2J' + 1)^{-1} (J, k, \mu, \sigma | J', \mu') \times \\ &\quad \times \langle \tau', J', \mu' | T_\sigma^{(k)} | \tau, J, \mu \rangle (J, k, M, q | J', M'). \end{aligned}$$

Останній коефіцієнт Клебша–Гордана можна вивести за знак суми, і там залишаться множники, залежні лише від  $\tau', \tau, J', J$  і  $k$ . Якщо позначити

$$\langle \tau', J' || T^{(k)} || \tau, J \rangle \equiv \sum_{\mu', \sigma, \mu} (2J' + 1)^{-1} (J, k, \mu, \sigma | J', \mu') \langle \tau', J', \mu' | T_\sigma^{(k)} | \tau, J, \mu \rangle,$$

то матричний елемент можна записати у вигляді

$$\langle \tau', J', M' | T_q^{(k)} | \tau, J, M \rangle = \langle \tau', J' || T^{(k)} || \tau, J \rangle (J, k, M, q | J', M'). \quad (7.115)$$

Це і є теорема Вігнера–Екарта. Величина  $\langle \tau', J' || T^{(k)} || \tau, J \rangle$  називається приведеним матричним елементом. Він не залежить від  $M', M$  і  $q$ , а вся залежність повного матричного елемента від цих змінних у явному вигляді дається коефіцієнтом Клебша–Гордана.

**Приклад (1).** Найпростішим прикладом теореми Вігнера–Екарта є скалярний оператор  $S$ , для якого  $k = q = 0$ . Із означення (7.90) і домовленості про фазу (7.89) з очевидністю виливає, що  $(J, 0, M, 0 | J', M') = \delta_{J'J} \delta_{M'M}$ , тому матричний елемент

$$\langle \tau', J', M' | S | \tau, J, M \rangle = \langle \tau', J' || S || \tau, J \rangle \delta_{J'J} \delta_{M'M} \quad (7.116)$$

діагональний за індексами моменту імпульсу і не залежить від  $M' = M$ .

**Приклад (2).** Хоча рівняння, що передує (7.115), дає явний вираз для приведенного матричного елемента, набагато зручніше отримати його шляхом прямого обчислення лівої частини (7.115) для якогось окремого випадку. Ми проілюструємо це на прикладі оператора моменту імпульсу  $J$ , для якого (7.15) набуває вигляду

$$\langle \tau', J', M' | J_q^{(1)} | \tau, J, M \rangle = \langle \tau', J' | |J| | \tau, J \rangle (J, 1, M, q | J', M'). \quad (7.117)$$

Проте нам відомо, що

$$\langle \tau', J', M' | J_0^{(1)} | \tau, J, M \rangle \equiv \langle \tau', J', M' | J_z | \tau, J, M \rangle = \hbar M \delta_{J'J} \delta_{M'M} \delta_{\tau'\tau},$$

тому досить буде обчислити (7.117) для випадку  $M = M' = J = J'$ . Відповідний коефіцієнт Клебша–Гордана можна знайти в стандартних довідниках:  $(J, 1, J, 0 | J, J) = \sqrt{J/(J+1)}$ , відтак ми маємо  $\langle \tau', J | |J| | \tau, J \rangle = \hbar \sqrt{J/(J+1)} \delta_{\tau'\tau}$ . У загальному випадку матричний елемент у лівій частині (7.117) має обертатися на нуль при  $J' \neq J$ . Оскільки коефіцієнт Клебша–Гордана не обов'язково нульовий при  $J' \neq J$ , то звідси випливає, що нульовими мають бути приведені матричні елементи:

$$\langle \tau', J' | |J| | \tau, J \rangle = \hbar \sqrt{J/(J+1)} \delta_{\tau'\tau} \delta_{J'J}. \quad (7.118)$$

**Приклад (3).** Співвідношення (7.75) між сферичним гармоніками й елементами матриці обертання дозволяє нам обчислити інтеграл від добутку трьох сферичних гармонік. Із (7.114) отримуємо

$$\begin{aligned} & \int \int \int \{D_{M,0}^{(L)}(\alpha, \beta, \gamma)\}^* D_{q,0}^{(k)}(\alpha, \beta, \gamma) D_{m,0}^{(\ell)}(\alpha, \beta, \gamma) d\alpha \sin \beta d\beta d\gamma = \\ & = (\ell, k, m, q | L, M) (\ell, k, 0, 0 | L, 0) (2L+1)^{-1} \int \int \int d\alpha \sin \beta d\beta d\gamma. \end{aligned}$$

Оскільки права частина рівняння є дійсною величиною, ми можемо формально замінити підінтегральний вираз у лівій частині на комплексно спряжений. Підстановка виразу для сферичних гармонік через матриці обертання (7.75) дає

$$\begin{aligned} & \int \int \int \{Y_L^M(\theta, \varphi)\}^* Y_k^q(\theta, \varphi) Y_\ell^m(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi = \\ & = \sqrt{\frac{(2k+1)(2\ell+1)}{4\pi(2L+1)}} (\ell, k, 0, 0 | L, 0) (\ell, k, m, q | L, M). \quad (7.119) \end{aligned}$$

Ця рівність відома, як *формула Гонта*. Також інтеграл можна розглядати, як матричний елемент непривідного тензорного оператора, до якого застосовується теорема Вігнера–Екарта:  $\langle L, M | Y_k^q | \ell, m \rangle = \langle L || Y_k || \ell \rangle (\ell, k, m, q | L, M)$ . Таким чином, формула Гонта є окремим випадком теореми Вігнера–Екарта.

### Добутки тензорів

Добуток двох непривідних тензорних операторів не конче дає непривідний тензор. Проте з такого добутку легко побудувати непривідний тензорний оператор. Нехай  $X_q^{(k)}$  і  $Z_m^{(\ell)}$  тензони оператори рангу  $k$  і  $\ell$  відповідно. Тоді

$$T_M^{(L)} = \sum_{q,m} (k, \ell, q, m | L, M) X_q^{(k)} Z_m^{(\ell)} \quad (7.120)$$

буде непривідним тензором рангу  $L$ . Це рівняння дуже подібне до (7.90). Доведення непривідності  $T_M^{(L)}$  з використанням (7.113) залишаємо, як вправу для читача.

В окремому випадку  $M = L = 0$  тензор  $T_0^{(0)}$  є скаляром:

$$\begin{aligned} T_0^{(0)} &= \sum_m (j, j, m, -m | 0, 0) X_{-m}^{(j)} Z_m^{(j)} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2j-1}} \sum_m (-1)^{j-m} X_{-m}^{(j)} Z_m^{(j)}. \end{aligned} \quad (7.121)$$

Тут коефіцієнт Клебша–Гордана обчислюється з  $(j, 0, m, 0 | j, m) = 1$  із зв'язуванням (7.107) і перестановочної симетрії  $3j$ -символів.

Якщо  $\mathbf{X}$  і  $\mathbf{Z}$  звичайні векторні оператори, то (7.121) просто дає їх скалярний добуток:  $\mathbf{X} \cdot \mathbf{Z} = -\sqrt{3} T_0^{(0)}$ .

**Приклад (4).** Як останній приклад, розглянемо матричні елементи оператора  $\mathbf{J} \cdot \mathbf{V}$ , де  $\mathbf{J}$  — момент імпульсу, а  $\mathbf{V}$  — довільний векторний оператор. Оскільки  $\mathbf{J} \cdot \mathbf{V}$  є скаляром, то (7.116) підказує нам, що матриця буде діагональною за індексами моменту імпульсу, а тому нам треба лише обчислити

$$\begin{aligned} \langle \tau', J, M | \mathbf{J} \cdot \mathbf{V} | \tau, J, M \rangle &= \sum_m \langle \tau', J, M | (-1)^m J_{-m}^{(1)} V_m^{(1)} | \tau, J, M \rangle = \\ &= \sum_{\tau'', J'', M'', m} (-1)^m \langle \tau', J, M | J_{-m}^{(1)} | \tau'', J'', M'' \rangle \times \\ &\quad \times \langle \tau'', J'', M'' | V_m^{(1)} | \tau, J, M \rangle. \end{aligned}$$

Матриці всіх компонентів  $\mathbf{J}$  діагональні за  $J$  і  $\tau$ , тому сума включає лише доданки з  $\tau' = \tau$  і  $J'' = J$ . Крім того, як ми показали у Прикладі (2), значення матричних елементів  $\mathbf{J}$  не залежить від  $\tau$ . Застосувавши теорему Вігнера–Екарта до елементів у останньому рядку, отримуємо

$$\begin{aligned} \langle \tau', J, M | \mathbf{J} \cdot \mathbf{V} | \tau, J, M \rangle &= \sum_{M'', m} (-1)^m \langle J, M | J_{-m}^{(1)} | J'', M'' \rangle \times \\ &\times (J, 1, M, m | J, M'') \langle \tau', J || \mathbf{V} || \tau, J \rangle = \\ &= C_{JM} \langle \tau', J || \mathbf{V} || \tau, J \rangle. \end{aligned} \quad (7.122)$$

Ясно, що  $C_{JM}$  не залежить від  $\tau'$  і  $\tau$ , а також від конкретної природи векторного оператора  $\mathbf{V}$ . Отже, ми можемо обчислити цей коефіцієнт, підставивши  $\mathbf{V} = \mathbf{J}$ :

$$\langle \tau, J, M | \mathbf{J} \cdot \mathbf{J} | \tau, J, M \rangle = C_{JM} \langle \tau, J || \mathbf{J} || \tau, J \rangle.$$

Скориставшись (7.118), ми бачимо, що

$$C_{JM} = \hbar \sqrt{J(J+1)}. \quad (7.123)$$

Цей вираз можна підставити в (7.122) для отримання приведенного матричного елемента  $\mathbf{V}$  (для  $J' = J$ ) через матричний елемент скаляра  $\mathbf{J} \cdot \mathbf{V}$ , який зазвичай легше обчислити.

Застосування теореми Вігнера–Екарта до операторів  $\mathbf{V}$  і  $\mathbf{J}$  дає

$$\begin{aligned} \langle \tau', J', M' | V_m^{(1)} | \tau, J, M \rangle &= \langle \tau', J' || \mathbf{V} || \tau, J \rangle (J, 1, M, m | J', M'), \\ \langle \tau, J, M' | J_m^{(1)} | \tau, J, M \rangle &= \langle \tau, J || \mathbf{J} || \tau, J \rangle (J, 1, M, m | J, M'). \end{aligned}$$

У другому рівнянні ми встановили  $\tau' = \tau$  і  $J' = J$  для уникнення тривіальної тотожності  $0 = 0$ . Таким чином, маємо

$$\langle \tau', J', M' | V_m^{(1)} | \tau, J, M \rangle = \frac{\langle \tau', J' || \mathbf{V} || \tau, J \rangle}{\langle \tau, J || \mathbf{J} || \tau, J \rangle} \langle \tau, J, M' | J_m^{(1)} | \tau, J, M \rangle. \quad (7.124)$$

Для випадку  $J' = J$  приведені матричні елементи можна отримати із (7.118) і (7.122), що в підсумку дає

$$\langle \tau', J, M' | V_m^{(1)} | \tau, J, M \rangle = \frac{\langle \tau', J, M | \mathbf{J} \cdot \mathbf{V} | \tau, J, M \rangle}{\hbar^2 J(J+1)} \langle J, M' | J_m^{(1)} | J, M \rangle. \quad (7.125)$$

А оскільки матричний елемент скалярного добутку  $\mathbf{J} \cdot \mathbf{V}$  фактично не залежить від  $M$ , то це рівняння стверджує, що для фіксованих  $\tau$ ,  $\tau'$  і  $J = J'$

матричний елемент будь-якого векторного оператора пропорційний матричному елементові оператора моменту імпульсу.

На практиці цей результат застосовують переважно для  $\tau' = \tau$ . У випадку, коли система має таку динаміку, що із задовільним ступенем наближення можна вважати, що вона весь час залишатиметься в стані з фіксованими  $\tau$  і  $J$ , то (7.125) дозволяє описати її за допомогою гамільтоніана, який містить лише оператор моменту імпульсу. Наприклад, оператор *магнітного моменту* атома має вигляд

$$\boldsymbol{\mu} = -\frac{e}{2m_e c} (g_L \mathbf{L} + g_S \mathbf{S}), \quad (7.126)$$

де оператори  $\mathbf{L}$  і  $\mathbf{S}$  відповідають орбітальному та спіновому моментам імпульсу атома,  $e$  — величина заряду електрона (позитивна, знак мінус враховано у формулі),  $m_e$  — маса електрона, а  $c$  — швидкість світла. Параметри  $g_L$  і  $g_S$  мають приблизне значення 1 і 2 відповідно. Скориставшись (7.125), ми можемо записати вираз для середнього значення магнітного моменту атома через середнє значення його повного моменту імпульсу:

$$\langle \tau, J, M' | \boldsymbol{\mu} | \tau, J, M \rangle = -\frac{e}{2m_e c} g_{\text{eff}} \langle J, M' | \mathbf{J} | J, M \rangle, \quad (7.127)$$

де  $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$  є оператором повного моменту імпульсу атома, а

$$\begin{aligned} g_{\text{eff}} &= \frac{\langle \tau, J, M | \boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{J} | \tau, J, M \rangle}{\hbar^2 J(J+1)} = \\ &= \frac{\langle \tau, J, M | g_L \mathbf{L} \cdot \mathbf{J} + g_S \mathbf{S} \cdot \mathbf{J} | \tau, J, M \rangle}{\hbar^2 J(J+1)}. \end{aligned}$$

Проте  $\mathbf{L} \cdot \mathbf{J} = \frac{1}{2}(\mathbf{J} \cdot \mathbf{J} + \mathbf{L} \cdot \mathbf{L} - \mathbf{S} \cdot \mathbf{S})$  і  $\mathbf{S} \cdot \mathbf{J} = \frac{1}{2}(\mathbf{J} \cdot \mathbf{J} + \mathbf{S} \cdot \mathbf{S} - \mathbf{L} \cdot \mathbf{L})$ ; тому маємо

$$g_{\text{eff}} = \frac{\langle \tau, J, M | \{(g_L + g_S)\mathbf{J} \cdot \mathbf{J} + (g_L - g_S)(\mathbf{L} \cdot \mathbf{L} - \mathbf{S} \cdot \mathbf{S})\} | \tau, J, M \rangle}{2\hbar^2 J(J+1)}. \quad (7.128)$$

У наближенні *LS-взаємодії* вектор стану атома є власним вектором  $\mathbf{L} \cdot \mathbf{L}$  і  $\mathbf{S} \cdot \mathbf{S}$  з власними значеннями  $\hbar^2 L(L+1)$  і  $\hbar^2 S(S+1)$  відповідно. Якщо встановити  $g_L = 1$  і  $g_S = 2$ , то (7.128) зводиться до

$$g_{\text{eff}} = 1 + \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)}. \quad (7.129)$$

Цей результат, відомий як *g-фактор Ланде*, дуже корисний в атомній спектроскопії та в застосуваннях явища магнітного резонансу.

### § 7.9. Обертальний рух твердого тіла

Квантова теорія багаточасткових систем, на зразок поліатомної молекули або ядра, неминуче призводить до складних і громіздких обчислень. Та якщо всі складові цієї системи жорстко зв'язані між собою, вона обертатиметься, як єдине ціле, і її обертальний рух можна розглядати незалежно від конкретної внутрішньої структури. Гамільтоніан у цьому випадку:

$$H = \frac{1}{2} \left[ \frac{J_a^2}{I_a} + \frac{J_b^2}{I_b} + \frac{J_c^2}{I_c} \right], \quad (7.130)$$

де  $I_a, I_b, I_c$  — головні моменти інерції, а  $J_a, J_b, J_c$  — оператори компонентів моменту імпульсу вздовж головних осей інерції твердого тіла.

І хоча квантова теорія моменту імпульсу в обертальній системі координат, загалом нескладна, вона містить певні несподіванки. Як нам добре відомо, комутаційне співвідношення для компонентів оператора моменту імпульсу в нерухомій у просторі системі координат мають вигляд

$$[J_x, J_y] = i\hbar J_z. \quad (7.131)$$

Просторова орієнтація осей  $x, y$  і  $z$  може бути довільною, тому в кожен момент часу існує така фіксована система координат, що її осі збігатимуться з головними осями інерції твердого тіла, а тому слід було б очікувати, що для  $J_a, J_b$  і  $J_c$  виконуватиметься таке ж саме комутаційне співвідношення. Але насправді це співвідношення має протилежний знак:

$$[J_a, J_b] = -i\hbar J_c. \quad (7.132)$$

Причина його появи полягає в тому, що момент імпульсу в системі, пов'язаній з твердим тілом, виражається через момент імпульсу в інерційній галілеєвій системі, як  $J_a = \mathbf{J} \cdot \hat{\mathbf{a}}$ , де одиничний вектор  $\hat{\mathbf{a}}$  представляє динамічну змінну тіла, аналогічну операторові положення. Для обчислення комутатора  $[J_a, J_b]$  скористаємося співвідношенням, що випливає з тотожності Якобі:

$$[AB, CD] = A[B, C]D + AC[B, D] + [A, C]BD + C[A, D]B. \quad (7.133)$$

Тепер нехай  $\mathbf{u}$  і  $\mathbf{v}$  будуть векторними операторами на зразок оператора положення. Вони комутують між собою, а їхні комутатори з компонентами моменту імпульсу матимуть типовий вигляд

$$[J_\alpha, u_\beta] = i\hbar \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} u_\gamma, \quad (7.134)$$



де  $\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}$  антисиметричний тензор, запроваджений у § 3.3. Підставивши (7.134) у (7.133) отримуємо

$$\begin{aligned} [u_\alpha J_\alpha, v_\beta J_\beta] &= u_\alpha [J_\alpha, v_\beta] J_\beta + u_\alpha v_\beta [J_\alpha, J_\beta] + \\ &\quad + [u_\alpha, u_\beta] J_\beta J_\alpha + v_\beta [u_\alpha, J_\beta] J_\alpha = \\ &= u_\alpha (i\hbar \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} v_\gamma) J_\beta + u_\alpha v_\beta (i\hbar \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} J_\gamma) + \\ &\quad + 0 + v_\beta (-i\hbar \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} u_\gamma) J_\alpha. \end{aligned} \quad (7.135)$$

Підсумувавши за  $\alpha, \beta, \gamma$  і перепризначивши німі індекси в кількох доданках, щоб їх можна було об'єднати, маємо

$$\begin{aligned} [\mathbf{u} \cdot \mathbf{J}, \mathbf{v} \cdot \mathbf{J}] &= \sum_{\alpha\beta\gamma} \{i\hbar \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} (-1 + 1 + 0 - 1) u_\alpha v_\beta J_\gamma\} = \\ &= \sum_{\alpha\beta\gamma} -i\hbar \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} u_\alpha v_\beta J_\gamma. \end{aligned} \quad (7.136)$$

Тепер, якщо ми оберемо  $\mathbf{u}$  і  $\mathbf{v}$  одиничними векторами, спрямованими вздовж головних осей інерції  $a$  і  $b$ , то отримаємо рівняння (7.132). Зазначимо, що це справедливо саме для векторних операторів; якби  $\mathbf{u}$  і  $\mathbf{v}$  були просто одиничними векторами, вони б комутували з усіма компонентами  $\mathbf{J}$ , і тоді б у правій частині (7.135) залишався б лише один ненульовий доданок  $u_\alpha v_\beta [J_\alpha, J_\beta]$ , що призвело б до рівності типу (7.131). Протилежний знак у (7.132) з'являється з тієї причини, що вектори, пов'язані із системою координат твердого тіла, є динамічними змінними з нетривіальними комутаційними властивостями.

Спектр власних значень моменту імпульсу в системі координат твердого тіла можна обчислити за методом, викладеним у § 7.1. Вони збігаються з власними значеннями моменту імпульсу в нерухомій системі, але протилежний знак у (7.132) призведе до зміне деяких знаків у матричних елементах.

Різні симетрії тензора моменту інерції дають кілька цікавих спеціальних випадків. *Сферично симетрична дзига* має однакові значення всіх трьох головних моментів інерції  $I_a = I_b = I_c \equiv I$ , і тоді гамільтоніан набуває вигляду  $H = \mathbf{J} \cdot \mathbf{J}/2I$ , а його власні значення є

$$E_j = \frac{\hbar^2 j(j+1)}{2I}. \quad (7.137)$$

Друга несподіванка полягає у додатковому виродженні цих власних значень. Її можна виявити, утворивши повний комутативний набір операторів для системи. Він складається з

- (i) абсолютної величини повного моменту імпульсу (яка є однаковою і в нерухомих у просторі координатах, і в пов'язаних із осями інерції твердого тіла)  $\mathbf{J} \cdot \mathbf{J} = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 = J_a^2 + J_b^2 + J_c^2$ ;
- (ii) одного компонента в нерухомих координатах — зазвичай  $J_z$ ;
- (iii) одного компонента вздовж осі інерції — зазвичай  $J_z$ .

Перші два оператори цілком очікувані, а от поява третього досить несподівана, бо  $J_c$  видається компонентом оператора моменту імпульсу в напрямку, відмінному від осі  $z$ , тому він не повинен комутувати з  $J_z$ . Насправді ж  $J_c = \hat{\mathbf{c}} \cdot \mathbf{J}$  є скалярним оператором, і він комутує з усіма генераторами обертань у нерухомій системі координат. Тому виродження енергетичного спектру з кратністю  $(2j + 1)^2$  замість  $2j + 1$  є наслідком сферичної симетрії складної системи.

Аксіально симетрична дзига має два однакові головні моменти інерції  $I_a = I_b \neq I_c$ . Оскільки  $J_a^2 + J_b^2 = \mathbf{J} \cdot \mathbf{J} - J_c^2$ , гамільтоніан можна записати, як

$$H = \frac{1}{2} \frac{\mathbf{J} \cdot \mathbf{J}}{I_a} + \frac{1}{2} J_c^2 \left( \frac{1}{I_c} - \frac{1}{I_a} \right). \quad (7.138)$$

Власні значення енергії є

$$E_{jk} = \frac{\hbar^2}{2} \frac{j(j+1)}{I_a} + \frac{\hbar^2 k^2}{2} \left( \frac{1}{I_c} - \frac{1}{I_a} \right), \quad (7.139)$$

де  $\hbar k$  є власними значеннями оператора  $J_c$  у проміжку  $[-j, j]$ . Ступінь виродження дорівнює  $2j + 1$ , відповідно до власних значень  $J_z$ .

Лінійну молекулу можна змодювати, як граничний випадок аксіально симетричної дзиги при  $I_c \rightarrow 0$ . У цій межі доступні лише стани з  $k = 0$ , бо при інших значеннях  $k$  енергетичні рівні стають довільно великими, а отже, фізично нереалізованими. Доступні рівні енергії мають таке саме значення, як і для сферично симетричної дзиги, проте ступінь їх виродження залишається  $2j + 1$ .

Асиметрична дзига має три різні головні моменти інерції. Для рівняння на власні значення енергії не існує загального рішення в замкненому вигляді, проте Ландау і Ліфшиц у [114] навели формули для окремих випадків з повним моментом імпульсу  $j = 1, 2$  і  $3$ .

## Література до Розділу 7

У збірці *Quantum Theory of Angular Momentum*, за редакцією Л. Л. Бідергарна і Г. Ван Дама ([28], 1965), міститься чимало цікавих репринтів та оригі-

нальних статей. Особливий інтерес становлять статті Вігнера та Швінгера, які до того не публікувалися.

## Задачі

**7.1.** Знайдіть розподіл імовірності значень динамічних змінних  $L^2$  і  $L_z$  орбітального моменту імпульсу для таких функцій стану:

- (a)  $\Psi(\mathbf{x}) = f(r) \sin \theta \cos \varphi$ ,
- (b)  $\Psi(\mathbf{x}) = f(r) \cos^2 \theta$ ,
- (c)  $\Psi(\mathbf{x}) = f(r) \sin \theta \cos \theta \sin \varphi$ .

**7.2.** Чи може існувати *внутрішній імпульс* за аналогією із внутрішнім моментом імпульсу (тобто спіном)?

*Пояснення до задачі.* Математично спін походить із властивостей обертового перетворення багатокомпонентної функції стану:

$$\mathbf{R}_n(\theta) \begin{bmatrix} \Psi_1(\mathbf{x}) \\ \Psi_2(\mathbf{x}) \\ \vdots \end{bmatrix} = D_n(\theta) \begin{bmatrix} \Psi_1(R^{-1}\mathbf{x}) \\ \Psi_2(R^{-1}\mathbf{x}) \\ \vdots \end{bmatrix}.$$

Оператор обертання має вигляд  $\mathbf{R}_n(\theta) = e^{-i\theta \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{L}/\hbar} D_n(\theta)$ . Перший множник призводить до перетворення координат в аргументі кожної окремої функції, а другий є унітарною матрицею, що переводить компоненти в їхні лінійні комбінації. Зробивши  $\theta$  інфінітезимальним параметром, ми отримаємо генератор обертань  $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ , де  $\mathbf{L} = -i\hbar \mathbf{x} \times \nabla$ , а  $\mathbf{S}$  — ермітова матриця, що виводиться, що є генератором для  $D_n(\theta)$ . Ці два доданки інтерпретується, як орбітальна та спінова частини повного моменту імпульсу.

Тепер таким самим чином розглянемо просторові переміщення. Оператором таких перетворень є  $T(\mathbf{a}) = e^{-i\mathbf{a} \cdot \mathbf{P}/\hbar}$ , і в найзагальнішому випадку його дія на багатокомпонентну функцію стану має давати такий результат:

$$T(\mathbf{a}) \begin{bmatrix} \Psi_1(\mathbf{x}) \\ \Psi_2(\mathbf{x}) \\ \vdots \end{bmatrix} = F(\mathbf{a}) \begin{bmatrix} \Psi_1(\mathbf{x} - \mathbf{a}) \\ \Psi_2(\mathbf{x} - \mathbf{a}) \\ \vdots \end{bmatrix},$$

де  $F(\mathbf{a})$  є певною унітарною матрицею. Вдавшись до інфінітезимального переміщення, знаходимо, що генератор просторових переміщень має вигляд  $\mathbf{P} = -i\hbar \nabla + \mathbf{M}$ , де матриця  $\mathbf{M}$  є генератором для  $F(\mathbf{a}) = e^{-i\mathbf{a} \cdot \mathbf{M}/\hbar}$ . Її ми інтерпретуємо, як *внутрішній імпульс* системи.

Що ви можете про властивості матриці  $\mathbf{M}$ ? Як вона співвідноситься з  $\mathbf{S}$ ? Чи може вона бути відмінною від нуля?

**7.3.** Нехай  $\mathbf{A}$  і  $\mathbf{B}$  будуть векторними операторами. Це означає, що вони мають певні нетривіальні комутаційні співвідношення з оператором моменту імпульсу. Скористайтесь цими співвідношеннями, щоб довести комутативність  $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}$  з  $J_x$ ,  $J_y$  і  $J_z$ .

**7.4.** Доведіть, що в разі, коли оператор комує з двома компонентами  $\mathbf{J}$ , то він неодмінно має комувати і з третім компонентом.

**7.5.** Спінові матриці для  $s = 1$  задаються рівнянням (7.52). Покажіть, що їхні квадрати взаємно комутативні. Побудуйте набір їхніх спільних власних векторів. Які геометричні властивості мають ці вектори?

**7.6.** Знайдіть матричні елементи спінових матриць для  $s = 1$  у базисі, утвореному власними векторами із попередньої задачі.

**7.7.** Розгляньте систему двох часток зі спінами  $s_1$  і  $s_2$ .

(a) Якщо частки походять із двох джерел, описаних векторами стану  $|s_1, m_1\rangle$  і  $|s_2, m_2\rangle$  відповідно, то яка ймовірність того, що утворена ними двочасткова система матиме повний спін  $S$ ?

(b) Якщо обидві частки походять із неполяризований джерел, то яка ймовірність, що така система матиме спін  $S$ ?

**7.8.** Доведіть тотожність  $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}) = \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B})$ , де  $\boldsymbol{\sigma}$  — матриці Паулі, а  $\mathbf{A}$  і  $\mathbf{B}$  — векторні оператори, що комуують із  $\boldsymbol{\sigma}$ , але не обов'язково комуують між собою.

**7.9.** Розгляньте систему двох часток зі спіном  $\frac{1}{2}$ . Обчисліть власні значення і власні вектори оператора  $\boldsymbol{\sigma}^{(1)} \cdot \boldsymbol{\sigma}^{(2)}$ . Використайте, як базис, набір векторів  $|m_1\rangle \otimes |m_2\rangle$ .

**7.10.** Дві частки зі спіном  $\frac{1}{2}$  взаємодіють через залежний від спіну потенціал  $V(r) = V_1(r) + V_2(r) \boldsymbol{\sigma}^{(1)} \cdot \boldsymbol{\sigma}^{(2)}$ . Покажіть, що рівняння, яке визначає зв'язані стани, розпадається на два рівняння, одне з яких має ефективний потенціал  $V_1 + V_2$ , а інше  $V_1 - 3V_2$ .

**7.11.** Доведіть, що оператор, означений у (7.120), справді є непривідним тензорним оператором рангу  $L$ .

**7.12.** Скористайтесь рівнянням (7.120) для обчислення сферичних тензорних компонентів оператора  $\mathbf{L} = \mathbf{Q} \times \mathbf{P}$ , розглядаючи векторні оператори, як тензори першого рангу, а їхній добуток, як непривідний тензорний добуток.

**7.13.** Які непривідні тензори можна утворити з дев'яти компонентів бівектора  $A_\alpha B_\beta$  ( $\alpha, \beta = x, y, z$ )?

**7.14.** Доведіть, що ядро зі спіном 0 або  $\frac{1}{2}$  не може мати електричного квадрупольного моменту. („Спін“ ядра насправді є поєднанням спінів та відносних орбітальних моментів імпульсів нуклонів, з яких воно складається.)

**7.15.** Електричний квадрупольний момент взаємодіє з електричним полем через градієнт — або, що еквівалентно, через другу похідну від потенціалу  $\varphi$ . Якщо осі координат зорієнтовано в напрямку головних осей градієнта потенціалу, то квадрупольний гамільтоніан набуває вигляду

$$H_q = C \left( \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} S_x^2 + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} S_y^2 + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} S_z^2 \right),$$

де  $\varphi$  задовольняє рівнянню Лапласа  $\nabla^2 \varphi = 0$ , а друга похідна береться в точці знаходження частки.

(а) Покажіть, що гамільтоніан можна записати, як

$$H_q = A(3S_z^2 - \mathbf{S} \cdot \mathbf{S}) + B(S_+^2 + S_-^2),$$

де  $A$  і  $B$  залежать від  $C$  і похідних від  $\varphi$ .

(б) Знайдіть власні значення  $H_q$  для системи зі спіном  $\frac{3}{2}$ .

**7.16.** Розгляньте систему трьох часток зі спіном  $\frac{1}{2}$ . Базис спінових станів утворює набір восьми векторів вигляду  $|m_1\rangle \otimes |m_2\rangle \otimes |m_3\rangle$ , де кожне  $m$  набуває значень  $\pm \frac{1}{2}$ . Знайдіть у цьому базисі власні вектори для  $\mathbf{J} \cdot \mathbf{J}$  і  $J_z$ , де  $\mathbf{J} = \mathbf{S}^{(1)} + \mathbf{S}^{(2)} + \mathbf{S}^{(3)}$ .

## Бібліографія

- [1] Abraham, R. and Marsden, J. E. (1978), *Foundations of Mechanics*, 2nd edn. (Benjamin, Reading, Massachusetts).
- [2] Aharonov, Y. and Bohm, D. (1959), *Significance of Electromagnetic Potentials in the Quantum Theory*, Phys. Rev. 115, 458-491.
- [3] Alstrom, P., Hjorth, P., and Mattuck, R. (1982), *Paradox in the Classical Treatment of the Stern-Gerlach Experiment*, Am. J. Phys. 50, 697-698.
- [4] Arens, R. and Babbitt, D. (1965), *Algebraic Difficulties of Preserving Dynamical Relations when Forming Quantum-Mechanical Operators*, J. Math. Phys. 6, 1071-1075.
- [5] Ashcroft, N. W. and Mermin, N. D. (1976), *Solid State Physics* (Holt, Rinehart, and Winston, New York).
- [6] Aspect, A., Grangier, P., and Roger, G. (1981), *Experimental Tests of Realistic Local Theories via Bell's Theorem*, Phys. Rev. Lett. 47, 460-463.
- [7] Aspect, A., Grangier, P., and Roger, G. (1982), *Experimental Realization of Einstein-Podolsky-Rosen-Bohm Gedankenexperiment : A New Violation of Bell's Inequality*, Phys. Rev. Lett. 49, 91-94.
- [8] Aspect, A., Dalibard, J., and Roger, G. (1982), *Experimental Test of Bell's Inequalities Using Time-Varying Analyzers*, Phys. Rev. Lett. 49, 1804-1807.
- [9] Badurek, G., Rauch, H., and Summhammer, J. (1983), *Time-Dependent Superposition of Spinors*, Phys. Rev. Lett. 51, 1015-1018.
- [10] Ballentine, L. E. (1970), *The Statistical Interpretation of Quantum Mechanics*, Rev. Mod. Phys. 42, 358-381.
- [11] Ballentine, L. E. (1972), *Einstein's Interpretation of Quantum Mechanics*, Am. J. Phys. 40, 1763-1771.

- [12] Ballentine, L. E. (1986), *Probability in Quantum Mechanics*, Am. J. Phys. 54, 883-889.
- [13] Ballentine, L. E. and Jarrett, J. P. (1987), *Bell's Theorem: Does Quantum Mechanics Contradict Relativity?*, Am. J. Phys. 55, 696-701.
- [14] Ballentine, L. E. (1988), *What Do We Learn About Quantum Mechanics from the Theory of Measurement?*, Int. J. Theor. Phys. 27, 211-218.
- [15] Ballentine, L. E. (1990), *Limitations of the Projection Postulate*, Found. Phys. 20, 1329-1343.
- [16] Ballentine, L. E. and Huberman, M. (1977), *Theory of the Hall Effect in Simple Liquid Metals*, J. Phys. C: Solid State Phys. 10, 4991-5002.
- [17] Ballentine, L. E., Yang, Y., and Zibin, J. P. (1994), *Inadequacy of Ehrenfest's Theorem to Characterize the Classical Regime*, Phys. Rev. A50, 2854- 2859.
- [18] Band, W. and Park, J. L. (1970), *The Empirical Determination of Quantum States*, Found. Phys. 1, 133-144.
- [19] Band, W. and Park, J. L. (1971), *A General Method of Empirical State Determination in Quantum Physics*, Found. Phys. 1, 339-357.
- [20] Band, W. and Park, J. L. (1973), *Relations Among the Elements of the Density Matrix. 1. Definiteness Inequalities*, J. Math. Phys. 14, 551-553.
- [21] Band, W. and Park, J. L. (1979), *Quantum State Determination: Quorum for a Particle in One Dimension*, Am. J. Phys. 47, 188-191.
- [22] Bargmann, V. (1964), *Note on Wigner's Theorem on Symmetry Operators*, J. Math. Phys. 5, 862-868.
- [23] Bell, J. S. (1966), *On the Problem of Hidden Variables in Quantum Mechanics*, Rev. Mod. Phys. 38, 447-452.
- [24] Bell, J. S. (1987), *Speakable and Unspeakable in Quantum Mechanics* (Cambridge University Press, Cambridge).
- [25] Bell, J. S. (1990), *Against 'Measurement'* , in *Sixty-Two Years of Uncertainty*, ed. A. J. Miller (Plenum, New York), pp. 17-30.
- [26] Berry, M. V. (1984), *Quantal Phase Factor Accompanying Adiabatic Changes*, Proc. R. Soc. Lond. A392, 45-57.

- [27] Bethe, H. A. and Salpeter, E. E. (1957), *Quantum Mechanics of One-and Two- Electron Atoms* (Springer-Verlag, Berlin).
- [28] Biedenharn, L. C. and VanDam, H. (1965), *Quantum Theory of Angular Momentum* (Academic, New York).
- [29] Binnig, G., Rohrer, H., Gerber, C., and Weibel, E. (1982), *Vacuum Tunneling*, Physica 109 & 110B, 2075-2077.
- [30] Bohm, A. (1978), *The Rigged Hilbert Space and Quantum Mechanics*, Lecture Notes in Physics Vol. 78 (Springer-Verlag, Berlin).
- [31] Bohm, D. (1952), *A Suggested Interpretation of the Quantum Theory in Terms of 'Hidden' Variables*, Phys. Rev. 85, 166-193.
- [32] Born, M. (1971), *The Born-Einstein Letters* (MacMillan, London).
- [33] Born, M. and Wolf, E. (1980), *Principles of Optics*, 6th edn. (Pergamon, Oxford).
- [34] Bouten, M. (1969), *On the Rotation Operators in Quantum Mechanics*, Physica 42, 572-580.
- [35] Carnal, O. and Mlynek, J. (1991), *Young's Double-Slit Experiment with Atoms: A Simple Atom Interferometer*, Phys. Rev. Lett. 66, 2689-2692.
- [36] Casimir, H. B. G. (1948), *On the Attraction Between Two Perfectly Conducting Plates*, Proc. Kon. Ned. Akademie van Wetenschappen (Amsterdam) 51, 793-795.
- [37] Chambers, R. G. (1960), *Shift of an Interference Pattern by Enclosed Magnetic Flux*, Phys. Rev. Lett. 5, 3-5.
- [38] Cimmino, A., Opat, G. I., Klein, A. G., Kaiser, H., Werner, S. A., Arif, M., and Clothier, R. (1989), *Observation of the Topological Aharonov-Casher Phase Shift by Neutron Interferometry*, Phys. Rev. Lett. 63, 380-383.
- [39] Clauser, J. F. (1974), *Experimental Distinction Between the Quantum and Classical Field-Theoretic Predictions for the Photoelectric Effect*, Phys. Rev. D9, 853-860.
- [40] Clauser, J. F., Horne, M. A., Shimony, A., and Holt, R. A. (1969), *Proposed Experiment to Test Local Hidden-Variable Theories*, Phys. Rev. Lett. 23, 880-884.



- [41] Clauser, J. F., and Horne, M. A. (1974), *Experimental Consequences of Objective Local Theories*, Phys. Rev. D10, 526-535.
- [42] Clauser, J. F. and Shimony, A. (1978), *Bell's Theorem: Experimental Tests and Implications*, Rep. Prog. Phys. 41, 1881-1927.
- [43] Cohen, L. (1986), *Positive and Negative Joint Quantum Distributions*, pp. 97-117, in *Frontiers of Nonequilibrium Statistical Physics*, ed. G. T. Moore and M. O. Scully (Plenum, New York).
- [44] Colella, R., Overhauser, A. W., and Werner, S. A. (1975), *Observation of Gravitationally Induced Quantum Interference*, Phys. Rev. Lett. 34, 1472-1474.
- [45] Cosma, G. (1983), *Comment on 'Direct Measurement of the Longitudinal Coherence Length of a Thermal Neutron Beam'*, Phys. Rev. Lett. 51, 1105.
- [46] Cox, R. T. (1961), *The Algebra of Probable Inference* (Johns Hopkins Press, Baltimore).
- [47] Davisson, C. and Germer, L. (1927), Phys. Rev. 30, 705.
- [48] Diedrich, F. and Walther, H. (1987), *Nonclassical Radiation of a Single Stored Ion*, Phys. Rev. Lett. 58, 203-206.
- [49] Dirac, P. A. M. (1958), *The Principles of Quantum Mechanics*, 4th edn. (Clarendon, Oxford).
- [50] Draper, J. E. (1979), *Use of  $|\Psi|^2$  and Flux to Simplify Analysis of Transmission Past Rectangular Barriers or Wells*, Am. J. Phys. 47, 525-530.
- [51] Draper, J. E. (1980), *Quantal Tunneling Through a Rectangular Barrier Using  $|\Psi|^2$  and Flux*, Am. J. Phys. 48, 749-751.
- [52] Duane, W. (1923), *The Transfer in Quanta of Radiation Momentum to Matter*, Proc. Nat. Acad. Sci. (USA) 9, 158-164.
- [53] Edmonds, A. R. (1957), *Angular Momentum in Quantum Mechanics* (Princeton University Press, Princeton, New Jersey).
- [54] Einstein, A., Podolsky, B., and Rosen, N. (1935), *Can Quantum-Mechanical Description of Reality Be Considered Complete?*, Phys. Rev. 47, 777-780.

- [55] Einstein, A. (1949), in *Albert Einstein: Philosopher-Scientist*, ed. P. A. Schilpp (Harper & Row, New York).
- [56] Eisberg, R. and Resnick, R. (1985), *Quantum Physics* (Wiley, New York).
- [57] Fetter, A. L. and Walecka, J. D. (1971), *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (McGraw-Hill, New York).
- [58] Feynman, R. P. (1948), *Space-Time Approach to Non-relativistic Quantum Mechanics*, Rev. Mod. Phys. 20, 367-387.
- [59] Feynman, R. P. and Hibbs, A. R. (1965), *Quantum Mechanics and Path Integrals* (McGraw-Hill, New York).
- [60] Fine, T. L. (1973), *Theories of Probability, an Examination of Foundations* (Academic, New York).
- [61] Fischbach, E., Greene, G. L., and Hughes, R. J. (1991), *New Test of Quantum Mechanics: Is Planck's Constant Unique?*, Phys. Rev. Lett. 66, 256-259.
- [62] Fisher, G. P. (1971), *The Electric Dipole Moment of a Moving Magnetic Dipole*, Am. J. Phys. 39, 1528-1533.
- [63] Fonda, L., Ghirardi, G. C., and Rimini, A. (1978), *Decay Theory of Unstable Quantum Systems*, Rep. Prog. Phys. 41, 588-631.
- [64] Franck, J. and Hertz, G. (1914), Verhandl. deut. physik. Ges. 16, 512.
- [65] Freedman, S. J. and Clauser, J. F. (1972), *Experimental Test of Local Hidden-Variable Theories*, Phys. Rev. Lett. 28, 938-941.
- [66] Frenkel, J. (1932), *Wave Mechanics, Elementary Theory* (Clarendon, Oxford).
- [67] Friedrich, H. and Wintgen, D. (1989), *The Hydrogen Atom in a Uniform Magnetic Field — An Example of Chaos*, Phys. Rep. 183, 37-79.
- [68] Gähler, R. and Zeilinger, A. (1991), *Wave-Optical Experiments with Very Cold Neutrons*, Am. J. Phys. 59, 316-324.
- [69] Garg, A. and Mermin, N. D. (1987), *Detector Inefficiencies in the Einstein-Podolsky-Rosen Experiment*, Phys. Rev. D35, 3831-3835.
- [70] Gasiorowicz, S. (1966), *Elementary Particle Physics* (Wiley, New York).

- [71] Gel'fand, I. M. and Shilov, G. E. (1964), *Generalized Functions*, Vol. 1 (Academic, New York).
- [72] Gel'fand, I. M. and Vilenkin, N. Ya. (1964), *Generalized Functions*, Vol. 4 (Academic, New York).
- [73] Gerry, C.C., Kiefer, J. (1988) *Numerical path integration without Monte Carlo*, Am. J. Phys. 56, 1002-1013.
- [74] Ghosh, R. and Mandel, L. (1987), *Observation of Nonclassical Effects in the Inteferece of Two Photons*, Phys. Rev. Lett. 59, 1903-1905.
- [75] Glauber, R. J. (1963a), *The Quantum Theory of Optical Coherence*, Phys. Rev. 130, 2529-2539.
- [76] Glauber, R. J. (1963b), *Coherent and Incoherent States of the Radiation Field*, Phys. Rev. 131, 2766-2788.
- [77] Goldberger, M. L. and Watson, K. M. (1964), *Collision Theory* (Wiley, New York).
- [78] Goldstein, H. (1980), *Classical Mechanics* (Addison-Wesley, Reading, Massachusetts).
- [79] Gould, P. L., Rue, G. A., and Princhard, D. E. (1986), *Diffraction of Atoms by Light: The Near-Resonance Kapitza-Dirac Effect*, Phys. Rev. Lett. 56, 827-830.
- [80] Grangier, P., Roger, G., and Aspect, A. (1986), *A new Light on Single Photon Interferences, in New Techniques and Ideas in Quantum Measurement Theory*, ed. D. M. Greenberger, Ann. NY Acad. Sci. 480, 98-107.
- [81] Greenberger, D. M. and Overhauser, A. W. (1979), *Coherence Effects in Neu- tron Diffraction and Gravity Experiments*, Rev. Mod. Phys. 51, 43-78.
- [82] Greenberger, D. M. (1983), *The Neutron Interferometer as a Device for Illustrating the Strange Behaviour of Quantum Systems*, Rev. Mod. Phys. 55, 875-905.
- [83] Greenberger, D. M., Horne, M. A., Shimony, A., and Zeilinger, A. (1990), *Bell's Theorem Without Inequalities*, Am. J. Phys. 58, 1131-1143.

- [84] Greenberger, D. M., Horn, M. A., and Zeilinger, A. (1993), *Multi-particle Interferometry and the Superposition Principle*, Phys. Today 46(8), 22-29.
- [85] Hagen, C. R. (1990), *Equivalence of Spin 1 Aharonov-Bohm and Aharonov-Casher Effects*, Phys. Rev. Lett. 64, 2347-2349.
- [86] Haines, L. K. and Roberts, D. H. (1969), *One-Dimensional Hydrogen Atom*, Am. J. Phys. 37, 1145-1154.
- [87] Hardy, L. (1992), *Quantum Mechanics, Local Realistic Theories, and Lorentz-Invariant Realistic Theories*, Phys. Rev. Lett. 68, 2981-2984.
- [88] Hardy, L. (1993), *Nonlocality for Two Particles Without Inequalities for Almost All Entangled States*, Phys. Rev. Lett. 71, 1665-1668.
- [89] Herbert, N. (1975), *Cryptographic Approach to Hidden Variables*, Am. J. Phys. 43, 315-316.
- [90] Hillery, M., O'Connell, R. F., Scully, M. O., and Wigner, E. P. (1984), *Distribution Functions in Physics: Fundamentals*, Phys. Rep. 106, 121-167.
- [91] Hudson, R. L. (1974), *When Is the Wigner Quasi-probability Density Non-negative?*, Rep. Math. Phys. 6, 249-252.
- [92] Hulet, R. G., Hilfer, E. S., and Kleppner, D. (1985), *Inhibited Spontaneous Emission by a Rydberg Atom*, Phys. Rev. Lett. 55, 2137-2140.
- [93] Husimi, K. (1940), *Some Formal Properties of the Density Matrix*, Proc. Phys.-Math. Soc. Japan 22, 264-283.
- [94] Hylleraas, E. A. (1964), *The Schrödinger Two-Electron Atomic Problem*, Adv. Quantum Chem. 1, 1-33.
- [95] Jammer, M. (1996), *The Conceptual Development of Quantum Mechanics* (McGraw-Hill, New York); 2nd edn. (American Institute of Physics, New York, 1989).
- [96] Jammer, M. (1974), *The Philosophy of Quantum Mechanics* (John Wiley & Sons, New York).
- [97] Jauch, J. M. (1972), *On Bras and Kets*, in *Aspects of Quantum Theory*, ed. A. Salam and E. P. Wigner (Cambridge University Press), pp. 137-167.

- [98] Jauch, W. (1993), *Heisenberg's Uncertainty Relation and Thermal Vibrations in Crystals*, Am. J. Phys. 61, 929-932.
- [99] Jordan, T. F. (1969), *Linear Operators for Quantum Mechanics* (John Wiley & Sons, New York; and T. F. Jordan, 2249 Dunedin Ave., Duluth, Minnesota).
- [100] Jordan, T. F. (1975), *Why  $-i\hbar$  Is the Momentum*, Am. J. Phys. 43, 1089-1093.
- [101] Kac. M. (1959), *Statistical Independence in Probability, Analysis and Number Theory* (Mathematical Association of America, and John Wiley & Sons).
- [102] Kaiser, H., Werner, S. A., and George, E. A. (1983), *Direct Measurement of the Longitudinal Coherence Length of a Thermal Neutron Beam*, Phys. Rev. Lett. 50, 560-563.
- [103] Kato (1949), J. Phys. Soc. Japan 4, 334.
- [104] Keller, J. B. (1972), *Quantum Mechanical Cross Sections for Small Wavelengths*, Am. J. Phys. 40, 1035-1036.
- [105] Khalfin, L. A. (1958), *Contribution to the Decay Theory of a Quasistationary State*, Sov. Phys. JETP 6, 1053-1063.
- [106] Klauder, J. R. and Sudarshan, E. C. G. (1968), *Fundamentals of Quantum Optics* (Benjamin, New York).
- [107] Knight, P. L. and Alen, L. (1983), *Concepts of Quantum Optics* (Pergamon, Oxford).
- [108] Koba, D. H. and Smirl, A. L. (1978), *Gauge Invariant Formulation of the Interaction of Electromagnetic Radiation and Matter*, Am. J. Phys. 46, 624-633.
- [109] Koch, P. M., Galvez, E. J., van Leuwen, K. A. H., Moorman, L., Sauer, B. E., and Richards, D. (1989), *Experiments in Quantum Chaos: Microwave Ionization of Hydrogen Atoms*, Physica Scripta T26, 51-58.
- [110] Kochen, S. and Specker, E. P. (1967), *The Problem of Hidden Variables in Quantum Mechanics*, J. Math. Mech. 17, 59-87.

- [111] Kwiat, P. G., Steinberg, Chiao, R. Y., Eberhard, P. H. and Petroff, M. D. (1993), *High-Efficiency Single-Photon Detectors*, Phys. Rev. A48, R867-870.
- [112] Lam, C. S. and Varshni, Y. P. (1971), *Energies of s Eigenstates in a Static Screened Coulomb Potential*, Phys. Rev. A4, 1875-1881.
- [113] Lamb, W. E. (1969), *An Operational Interpretation of Nonrelativistic Quantum Mechanics*, Phys. Today. 22(4), 23-28.
- [114] Landau, L. D. and Lifshitz, E. M. (1958), *Quantum Mechanics, Non-relativistic Theory* (Addison-Wesley, Reading, Massachusetts).
- [115] Lee, H.-W. (1995), *Theory and Applications of the Quantum Phase-Space Distribution Functions*, Phys. Rep. 259, 147-211.
- [116] Leggett, A. J. (1987), *Reflections on the Quantum Measurement Paradox, in Quantum Implications*, ed. B. J. Hiley (Routledge & Kegan Paul, New York).
- [117] Levy-Leblond, J.-M. (1976), *Quantum Fact and Fiction: Clarifying Lande's Pseudo-paradox*, Am. J. Phys. 44, 1130-1132.
- [118] Lo, T. K. and Shimony, A. (1981), *Proposed Molecular Test of Local Hidden-Variables Theories*, Phys. Rev. A23, 3003-3012.
- [119] Lohman, B. and Weigold, E. (1981), *Direct Measurement of the Electron Momentum Probability Distribution in Atomic Hydrogen*, Phys. Lett. 86A, 139-141.
- [120] March, N. H., Young, W. H., and Sampanthar, S. (1967), *The Many-Body Problem in Quantum Mechanics* (Cambridge University Press).
- [121] Margenau, H. and Cohen, L. (1967), *Probabilities in Quantum Mechanics, in Quantum Theory and Reality*, ed. M. Bunge (Springer-Verlag, New York), pp. 71-89.
- [122] Mermin, N. D. (1993), *Hidden Variables and the Two Theorems of John Bell*, Rev. Mod. Phys. 65, 803-815.
- [123] Mermin, N. D. (1994), *What's Wrong with This Temptation?*, Phys. Today 47(6), 9-10.
- [124] Merzbacher, E. (1970), *Quantum Mechanics*, 2nd edn. (John Wiley & Sons, New York).

- [125] Messiah, A. (1966), *Quantum Mechanics* (John Wiley & Sons, New York).
- [126] Messiah, A. and Greenberg, O. W. (1964), *Symmetrization Postulate and Its Experimental Foundation*, Phys. Rev. 136, B248-267.
- [127] Milonni, P. W. (1984), *Why Spontaneous Emission?*, Am. J. Phys. 52, 340-343.
- [128] Milonni, P. W. (1994), *The Quantum Vacuum* (Academic, Boston).
- [129] Milonni, P. W., Cook, R. J., and Ackeralt, J. R. (1989), *Natural Line Shape*, Phys. Rev. A40, 3764-3768.
- [130] Misner, C. W., Thorne, K. S., and Wheeler, J. A. (1973), *Gravitation* (Freeman, San Francisco).
- [131] Mitchell, D. P. and Powers, P. N. (1936), *Bragg Reflection of Slow Neutrons*, Phys. Rev. 50, 486-487.
- [132] Morse, P. M. and Feshbach, H. (1953), *Methods of Theoretical Physics* (McGraw-Hill, New York).
- [133] Moshinsky, M. (1968), *How Good Is the Hartree-Fock Approximation?*, Am. J. Phys. 36, 52-53; erratum, p. 763.
- [134] Newton, R. G. (1982), *Scattering Theory of Waves and Particles*, 2nd edn. (Springer, New York).
- [135] Newton, R. G. and Young, B. L. (1968), *Measurability of the Spin Density Matrix*, Ann. Phys. 49, 393-402.
- [136] O'Connell, R. F. and Wigner, E. P. (1981), *Some Properties of a Non-negative Quantum-Mechanical Distribution Function*, Phys. Lett. 85A, 121-126.
- [137] O'Connell, R. F., Wang, L., and Williams, H. A. (1984), *Time Dependence of a General Class of Quantum Distribution Functions*, Phys. Rev. A30, 2187-2192.
- [138] Overhauser, A. W. (1971), *Simplified Theory of Electron Correlations in Metals*, Phys. Rev. 3, 1888-1897.
- [139] Pauling, L. and Wilson, E. B. (1935), *Introduction to Quantum Mechanics* (McGraw-Hill, New York).

- [140] Penney, R. (1965), *Bosons and Fermions*, J. Math. Phys. 6, 1031-1034.
- [141] Peres, A. (1991) *Two Simple Proofs of the Kochen-Specker Theorem*, J. Phys. A: Math. Gen. 24, L175-178.
- [142] Peres, A. (1993), *Quantum Theory: Concepts and Methods* (Kluwer, Dordrecht).
- [143] Perkins, D. H. (1982), *Introduction to High Energy Physics*, 2nd edn. (Addison-Wesley, Reading, Massachusetts).
- [144] Peshkin, M. (1981), *The Aharonov-Bohm Effect: Why It Cannot Be Eliminated from Quantum Mechanics*, Phys. Rep. 80, 375-386.
- [145] Pfeifer, P. (1995), *Generalized Time-Energy Uncertainty Relations and Bounds on Lifetimes of Resonances*, Rev. Mod. Phys. 67, 759-779.
- [146] Philippidis, C., Dewdney, C., and Hiley, B. J. (1979), *Quantum Interference and the Quantum Potential*, Nuovo Cimento 52, 15-28.
- [147] Platt, D. E. (1992), *A Modern Analysis of the Stern-Gerlach Experiment*, Am. J. Phys. 60, 306-308.
- [148] Popper, K. R. (1957), *The Propensity Interpretation of the Calculus of Probability, and the Quantum Theory, in Observation and Interpretation*, ed. S. Korner (Butterworths, London), pp. 65-70.
- [149] Pritchard, D. E. (1992), *Atom Interferometers*, in *Atomic Physics 13: Thirteenth International Conference on Atomic Physics*, Munich, Germany, 1992 (H. Walther, T. W. Hanch and B. Neizert, eds.), American Institute of Physics, New York, pp. 185-199.
- [150] Rarity, J. G. and Tapster, P. R. (1990), *Experimental Violation of Bell's Inequality Based on Phase and Momentum*, Phys. Rev. Lett. 64, 2495-2498.
- [151] Reck, M., Zeilinger, A., Bernstein, H. J., and Bertani, P. (1994), *Experimental Realization of Any Discrete Unitary Operator*, Phys. Rev. Lett. 73, 58-61.
- [152] Renyi, A. (1970), *Foundations of Probability* (Holden-Day, San Francisco).
- [153] Riesz, F. and Sz.-Nagy, B. (1955), *Functional Analysis* (Fredrick Ungar, New York).



- [154] Riisager, K. (1994), *Nuclear Halo States*, Rev. Mod. Phys. 66, 1105-1116.
- [155] Rodberg, L. S. and Thaler, R. M. (1967), *Introduction to the Quantum Theory of Scattering* (Academic, New York).
- [156] Rose, M. E. (1957), *Elementary Theory of Angular Momentum* (John Wiley & Sons, London).
- [157] Rotenberg, M., Bivins, R., Metropolis, N., and Wooten, J. K. (1959), *The 3-j and 6-j Symbols* (Technology Press, M.I.T., Cambridge, Massachusetts).
- [158] Rowe, E. G. P. (1987), *The Classical Limit of Quantum Mechanical Hydrogenic Radial Distributions*, Eur. J. Phys. 8, 81-87.
- [159] Sakuri, J. J. (1982), *Modern Quantum Mechanics* (Benjamin/Cummings, Menlo Park, California).
- [160] Sangster, K., Hinds, E. A., Barnett, S. M., and Riis, E. (1993), *Measurement of the Aharonov-Casher Phase in an Atomic System*, Phys. Rev. Lett. 71, 3641-3644.
- [161] Schiff, L. I. (1968), *Quantum Mechanics*, 3rd edn. (McGraw-Hill, New York).
- [162] Shih, Y. H. and Alley, C. O. (1988), *New Type of Einstein-Podolsky-Rosen-Bohm Experiment Using Pairs of Light Quanta Produced by Optical Parametric Down Conversion*, Phys. Rev. Lett. 26, 2921-2924.
- [163] Schulman, L. S. (1981), *Techniques and Applications of Path Integrals* (Wiley, New York).
- [164] Shapere, A. and Wilczek, F. (1989), *Geometric Phases in Physics* (World Scientific, Singapore).
- [165] Silverman, M. P. (1995), *More Than One Mystery* (Springer-Verlag, New York).
- [166] Smithey, D. T., Beck, M., Raymer, N. G., and Faridani, A. (1993), *Measurement of the Wigner Distribution and the Density Matrix of a Light Mode Using Optical Homodyne Tomography: Application to Squeezed States and the Vacuum*, Phys. Rev. Lett. 70, 1244-1247.
- [167] Sparnaay, M. J. (1958), *Measurements of Attractive Forces Between Flat Plates*, Physica 24, 751-764.

- [168] Spruch, L. (1986), *Retarded, or Casimir, Long-Range Potentials*, Phys. Today 39(11), 37-45.
- [169] Srinivas, N. D. (1982), *When Is a Hidden Variable Theory Compatible with Quantum Mechanics?*, Pramana 19, 159-173.
- [170] Stapp, H. P. (1985), *Bell's Theorem and the Foundations of Quantum Physics*, Am. J. Phys. 53, 306-317.
- [171] Stapp, H. P. (1988) *Quantum Nonlocality*, Found. Phys. 18, 427-447.
- [172] Staudenmann, J.-L., Werner, S. A., Colella, R., and Overhauser, A. W. (1980), *Gravity and Inertia in Quantum Mechanics*, Phys. Rev. A21, 1419-1438.
- [173] Stenholm, S. (1992), *Simultaneous Measurement of Conjugate Variables*, Ann. Phys. (NY) 218, 233-254.
- [174] Stern, A., Aharonov, A., and Imry, J. (1990), *Dephasing of Interference by a Back Reacting Environment*, in *Quantum Coherence*, ed. J. S. Anandan (World Scientific, Singapore), pp. 201-219; *Phase Uncertainty and Loss of Interference*, Phys. Rev. A41, 3436-3448.
- [175] Stillingner, F. H. and Herrick, D. R. (1975), *Bound States in the Continuum*, Phys. Rev. A11, 446-454.
- [176] Stoler, D. and Newman, S. (1972), *Minimum Uncertainty and Density Matrices*, Phys. Lett. 38A, 433-434.
- [177] Summhammer, J., Badurek, G., Rauch, H., and Kischko, U. (1982), *Explicit Experimental Verification of Quantum Spin-State Superposition*, Phys. Lett. 90A, 110-112.
- [178] Tinkham, M. (1964), *Group Theory and Quantum Mechanics* (McGraw-Hill, New York).
- [179] Tonomura, A., Umezaki, H., Matsuda, T., Osakabe, N., Endo, J., and Sugita, Y. (1983), *Electron Holography, Aharonov-Bohm Effect and Flux Quantization*, in *Foundations of Quantum Mechanics in the Light of New Technology*, ed. S. Kamefuchi (Physical Society of Japan, Tokyo, 1984).
- [180] Tonomura, A., Endo, T., Matsuda, T., and Kawasaki, T. (1989), *Demonstration of Single-Electron Buildup of an Interference Pattern*, Am. J. Phys. 57, 117-120.

- [181] Trigg, G. L. (1971), *Crucial Experiments in Modern Physics* (Van Nostrand Reinhold, New York).
- [182] Uffink, J. (1993), *The Rate of Evolution of a Quantum State*, Am. J. Phys. 61, 935-936.
- [183] Vogel, K. and Risken, H. (1989), *Determination of Quasiprobability Distributions in Terms of Probability Distributions for the Rotated Quadrature Phase*, Phys. Rev. A40, 2847-2849.
- [184] Walker, J. S. and Gathright, J. (1994), *Exploring One-Dimensional Quantum Mechanics with Transfer Matrices*, Am. J. Phys. 62, 408-422.
- [185] Wannier, G. H. (1966), *Statistical Physics* (Wiley, New York).
- [186] Weigert, S. (1992), *Pauli Problem for a Spin of Arbitrary Length: A Simple Method to Determine Its Wave Function*, Phys. Rev. A45, 7688-7696.
- [187] Weigold, E. (1982), *Momentum Distributions: Opening Remarks*, in AIP Conference Proceedings, No. 86, *Momentum Wave Functions - 1982*, pp. 1-4.
- [188] Wheeler, J. A. and Zurek, W. H. eds. (1983), *Quantum Theory and Measurement* (Princeton University Press, Princeton, New Jersey).
- [189] Wigner, E. P. (1932), *On the Quantum Correction for Thermodynamic Equilibrium*, Phys. Rev. 40, 749-759.
- [190] Wigner, E. P. (1971), *Quantum Mechanical Distribution Functions Revisited*, pp. 25-36 in *Perspectives in Quantum Theory*, ed. W. Yourgrau and A. van der Merwe (Dover, New York).
- [191] Winter, R. G. (1961), *Evolution of a Quasistationary State*, Phys. Rev. 123, 1503-1507.
- [192] Wolsky, A. M. (1974), *Kinetic Energy, Size, and the Uncertainty Principle*, Am. J. Phys. 42, 760-763.
- [193] Wu, T.-Y. and Ohmura, T. (1962), *Quantum Theory of Scattering* (Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey).
- [194] Zeilinger, A., Gähler, R., Shull, C. G., and Treimer, W. (1988), *Single- and Double-Slit Diffraction of Neutrons*, Rev. Mod. Phys. 60, 1067-1073.