5.8. Показать, что матрица оператора преобразования (20.1) для поворота на бесконечно малый угол $\delta\alpha$ вокруг направления $\mathbf{n} = \{n_x, n_y, n_z\}$ имеет вид

$$\widehat{g}(\mathbf{n}, \delta\alpha) = \begin{pmatrix} 1 & n_z\delta\alpha & -n_y\delta\alpha \\ -n_z\delta\alpha & 1 & n_x\delta\alpha \\ n_y\delta\alpha & -n_x\delta\alpha & 1 \end{pmatrix}.$$

5.9. Показать, что оператор $\widehat{g}(\mathbf{n}, \delta\alpha)$ из упражнения 5.8 удовлетворяет коммутационному соотношению

$$\widehat{g}(x, \delta\varphi_x)\widehat{g}(y, \delta\varphi_y) - \widehat{g}(y, \delta\varphi_y)\widehat{g}(x, \delta\varphi_x) = \widehat{I} - \widehat{g}(z, \delta\varphi_z),$$

где $\delta\varphi_z = \delta\varphi_x\delta\varphi_y$.

ЛЕКЦИЯ 6

§ 24. Матричная формулировка квантовой механики

1. Общие положения

В § 23 было показано, что произвольному состоянию квантовой системы можно поставить в соответствие элемент гильбертова пространства l_2, т. е. некоторую бесконечную последовательность комплексных чисел. Пусть $\psi(\xi)$ — волновая функция состояния в пространстве L_2. В пространстве l_2 этому состоянию соответствует вектор $\{a_n\}_1^\infty$, компоненты которого согласно (23.3) имеют вид

$$a_n = \langle\varphi_n(\xi)|\psi(\xi)\rangle, \tag{24.1}$$

где $\{\varphi_n(\xi)\}_1^\infty$ — некоторый базис в L_2. В качестве элементов этого базиса мы взяли собственные функции некоторого эрмитова оператора $\widehat{G}$ с чисто дискретным спектром.

Теперь установим соответствие операторов, действующих в пространствах L_2 и l_2. Пусть $\widehat{F}$ есть некоторый линейный оператор, определенный в L_2, а $\psi(\xi)$ — произвольный вектор из его области определения. Образом вектора $\psi \in L_2$ в пространстве l_2 является вектор (24.1), а образом вектора $\widehat{F}\psi \in L_2$ является вектор $\{\langle\varphi_n|\widehat{F}\psi\rangle\}_1^\infty$. Используя (23.2) и (23.3), находим:

$$\langle\varphi_n|\widehat{F}\psi\rangle = \langle\varphi_n|\widehat{F}\sum_{m=1}^{\infty}\langle\varphi_m|\psi\rangle\varphi_m\rangle = \sum_{m=1}^{\infty}\langle\varphi_n|\widehat{F}|\psi_m\rangle\langle\varphi_m|\psi\rangle. \tag{24.2}$$

Следовательно, оператору $\widehat{F}$, действующему в L_2, соответствует в пространстве l_2 матрица с элементами

$$F_{nm} = \langle\varphi_n|\widehat{F}|\psi_m\rangle, \tag{24.3}$$

имеющая бесконечное количество строк и столбцов:

$$\{F_{nm}\}_{n,m=1}^{\infty} = \begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} & F_{13} & \ldots & F_{1n} & \ldots \\ F_{21} & F_{22} & F_{23} & \ldots & F_{2n} & \ldots \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ F_{n1} & F_{n2} & F_{n3} & \ldots & F_{nn} & \ldots \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \end{pmatrix}. \tag{24.4}$$

Первый индекс элемента F_{nm} мы используем для обозначения номера строки, а второй — для обозначения номера столбца, на пересечении которых находится элемент. Элементы этой матрицы называются *матричными элементами оператора* $\widehat{F}$ и полностью определяются его видом в L_2 и полным набором собственных функций $\{\varphi_n\}_1^{\infty}$ оператора $\widehat{G}$, также заданных в L_2. Поэтому говорят, что матрица (24.4) есть оператор $\widehat{F}$ в G-представлении.

Выразим среднее значение физической величины F в некотором состоянии $\psi \in L_2$ через матрицы оператора $\widehat{F}$ и вектора ψ в G-представлении:

$$\overline{F} = \langle\psi|\widehat{F}|\psi\rangle = \sum_n \langle\varphi_n|\psi\rangle^* \langle\varphi_n|\widehat{F}\psi\rangle =$$
$$= \sum_n \langle\varphi_n|\psi\rangle^* \sum_m F_{nm}\langle\varphi_m|\psi\rangle = \sum_{nm} \langle\psi|\varphi_n\rangle F_{nm}\langle\varphi_m|\psi\rangle,$$

т. е.

$$\overline{F} = \sum_{nm} a_n^* F_{nm} a_m. \tag{24.5}$$

Здесь мы последовательно воспользовались формулами (23.6), (24.1), (24.2). Вектор $\{a_n^*\}_1^{\infty}$ удобно представлять в виде однострочной матрицы с бесконечным количеством элементов:

$$\{a_n^*\}_1^{\infty} \equiv (a_1^* a_2^*, \ldots, a_n^* \ldots). \tag{24.6}$$

Представляя вектор $\{a_m\}_1^{\infty}$ в виде одностолбцовой матрицы, мы можем записать (24.5) в виде произведения трех матриц, используя обычное определение матричного произведения («строка на столбец»):

$$\overline{F}=(a_1^*a_2^*,\,\dots,\,a_n^*\dots)\begin{pmatrix}F_{11} & F_{12} & F_{13} & \dots & F_{1n} & \dots\\ F_{21} & F_{22} & F_{23} & \dots & F_{2n} & \dots\\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots\\ F_{n1} & F_{n2} & F_{n3} & \dots & F_{nn} & \dots\\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_1\\ a_2\\ \vdots\\ a_n\\ \vdots\end{pmatrix}. \tag{24.7}$$

Рассмотрим некоторые свойства матричного представления операторов.

1) $$\widehat{F}\psi(\xi)=\sum_n\langle\varphi_n|\widehat{F}\psi\rangle\varphi_n(\xi)=\sum_{nm}F_{nm}\langle\varphi_m|\psi\rangle\varphi_n(\xi). \tag{24.8}$$

Здесь мы воспользовались формулой (24.2). В частности, при $\psi = \varphi_m$ получаем

$$\widehat{F}\varphi_m(\xi)=\sum_n F_{nm}\varphi_n(\xi). \tag{24.9}$$

2) $$\langle\varphi_n|\widehat{F}|\varphi_m\rangle=\langle\varphi_m|\widehat{F}^+|\varphi_n\rangle^*, \tag{24.10}$$

так как

$$\langle\varphi_n|\widehat{F}|\varphi_m\rangle=\langle\varphi_n|\widehat{F}\varphi_m\rangle=\langle\widehat{F}^+\varphi_n|\varphi_m\rangle = \\ =\langle\varphi_m|\widehat{F}^+\varphi_n\rangle^*=\langle\varphi_m|\widehat{F}^+|\varphi_n\rangle^*.$$

Если $\widehat{F}=\widehat{F}^+$, то отсюда получаем

$$\langle\varphi_n|\widehat{F}|\varphi_m\rangle=\langle\varphi_m|\widehat{F}|\varphi_n\rangle^*, \tag{24.11}$$

т. е.

$$F_{nm}=F_{mn}^*.$$

Следовательно, эрмитову оператору, заданному в L_2, соответствует в пространстве l_2 эрмитова матрица.

3) $$\langle\varphi_n|\widehat{F}_1\widehat{F}_2|\varphi_m\rangle=\sum_l\langle\varphi_n|\widehat{F}_1|\varphi_l\rangle\langle\varphi_l|\widehat{F}_2|\varphi_m\rangle. \tag{24.12}$$

Для доказательства этого соотношения используем формулу (24.9)

$$\langle\varphi_n|\widehat{F}_1\widehat{F}_2|\varphi_m\rangle=\langle\varphi_n|\widehat{F}_1|\widehat{F}_2\varphi_m\rangle= \\ =\langle\varphi_n|\widehat{F}_1|\sum_l\langle\varphi_l|\widehat{F}_2|\varphi_m\rangle\varphi_l(\xi)\rangle=\sum_l\langle\varphi_n|\widehat{F}_1|\varphi_l\rangle\langle\varphi_l|\widehat{F}_2|\varphi_m\rangle.$$

Таким образом, произведению двух линейных операторов в L_2 соответствует в l_2 произведение их матриц.

$$\textbf{4)}\quad \langle\varphi_n|\widehat{G}|\varphi_m\rangle = G_m\delta_{nm}, \tag{24.13}$$

если $\widehat{G}\varphi_m = G_m\varphi_m$. Следовательно, матрица оператора в представлении его собственных функций диагональна, а диагональными элементами являются собственные значения оператора.

Используя эти свойства матричных элементов, можно любое операторное выражение, заданное в L_2, записать в матричной форме, т. е. преобразовать в пространство l_2. Пусть, например, имеем в L_2

$$\widehat{C} = [\widehat{A},\, \widehat{B}].$$

Образ этого соотношения в l_2 есть

$$\langle\varphi_n|\widehat{C}|\varphi_m\rangle = \sum_l (\langle\varphi_n|\widehat{A}|\varphi_l\rangle\langle\varphi_l|\widehat{B}|\varphi_m\rangle - \langle\varphi_n|\widehat{B}|\varphi_l\rangle\langle\varphi_l|\widehat{A}|\varphi_m\rangle);$$

здесь мы воспользовались соотношением (24.12).

Теперь рассмотрим вопрос о преобразовании матриц векторов и матриц операторов при переходе от одного представления к другому.

Пусть $\widehat{B}$ и $\widehat{G}$ — два эрмитовых оператора с чисто дискретными спектрами:

$$\begin{aligned} &\widehat{B}\psi_n(\xi) = B_n\psi_n(\xi), \quad \langle\psi_n|\psi_m\rangle = \delta_{nm},\\ &\widehat{G}\varphi_n(\xi) = G_n\varphi_n(\xi), \quad \langle\varphi_n|\varphi_m\rangle = \delta_{nm}. \end{aligned} \tag{24.14}$$

Базисы $\{\psi_n\}_1^\infty$ и $\{\varphi_n\}_1^\infty$ определяют два матричных представления (B-представление и G-представление соответственно). Каждый вектор B-базиса можно разложить по векторам G-базиса:

$$\psi_n(\xi) = \sum_{m=1}^{\infty}\langle\varphi_m|\psi_n\rangle\varphi_m(\xi). \tag{24.15}$$

Введем обозначение:

$$S_{mn} \equiv \langle\varphi_m|\psi_n\rangle. \tag{24.16}$$

Тогда (24.15) принимает вид

$$\psi_n = \sum_m S_{mn}\varphi_m, \tag{24.17}$$

т. е. $\widehat{S} = \{S_{mn}\}_{m,n=1}^{\infty}$ есть матрица линейного преобразования набора $\{\varphi_n\}_1^{\infty}$ в набор $\{\psi_n\}_1^{\infty}$. Поскольку оба этих базиса ортонормированы, матрица $\widehat{S}$ унитарна:

$$\widehat{S}\widehat{S}^{+} = \widehat{I}. \tag{24.18}$$

Пусть $\psi(\xi)$ есть вектор некоторого состояния в пространстве L_2. В B-представлении в пространстве l_2 ему соответствует вектор

$$\Psi = \{\langle\psi_n|\psi\rangle\}_1^{\infty}, \tag{24.19}$$

а в G-представлении — вектор

$$\Psi' = \{\langle\varphi_n|\psi\rangle\}_1^{\infty}. \tag{24.20}$$

Найдем связь между этими двумя векторами в l_2. Используя определение (24.16), получаем:

$$\langle\varphi_n|\psi\rangle = \langle\varphi_n|\sum_m \langle\psi_m|\psi\rangle\psi_m\rangle = \\ = \sum_m \langle\varphi_n|\psi_m\rangle\langle\psi_m|\psi\rangle = \sum_m S_{nm}\langle\psi_m|\psi\rangle,$$

т. е.

$$\langle\varphi_n|\psi\rangle = \sum_m S_{nm}\langle\psi_m|\psi\rangle, \tag{24.21}$$

или

$$\Psi' = \widehat{S}\Psi. \tag{24.22}$$

Таким образом, и в матричной формулировке квантовой механики преобразование вектора состояния при переходе от одного представления к другому является унитарным. Поэтому для получения закона преобразования операторов мы можем воспользоваться теми результатами, которые были получены в § 19, где рассматривались произвольные унитарные преобразования линейного пространства. Пусть $\widehat{F}$ есть оператор в B-представлении, а $\widehat{F}'$ — соответствующий оператор в G-представлении. Согласно (19.8) они связаны соотношением

$$\widehat{F}' = \widehat{S}\widehat{F}\widehat{S}^{+}. \tag{24.23}$$

Отсюда получаем соотношение между матрицами оператора в этих представлениях:

$$F'_{nm} = \sum_{kp} S_{nk}F_{kp}S^{+}_{pm} = \sum_{kp} S_{nk}F_{kp}S^{*}_{mp}, \tag{24.24}$$

или

$$\langle\varphi_n|\widehat{F}'|\varphi_m\rangle = \sum_{kp}\langle\varphi_n|\psi_k\rangle\langle\psi_k|\widehat{F}|\psi_p\rangle\langle\psi_p|\varphi_m\rangle. \tag{24.25}$$

Преобразования из G-представления в B-представление сразу получаются из (24.22) и (24.23):

$$\Psi = \widehat{S}^{+}\Psi', \tag{24.26}$$

$$\widehat{F} = \widehat{S}^{+}\widehat{F}'\widehat{S}. \tag{24.27}$$

Заметим, что, используя разложение (23.21) единичного оператора, можно сразу получить любую из выведенных в этом параграфе формул перехода от одного представления к другому. Получим, например, формулу (24.25):

$$\begin{aligned}\langle\varphi_n|\widehat{F}|\varphi_m\rangle &= \langle\varphi_n|\widehat{I}\cdot\widehat{F}\cdot\widehat{I}|\varphi_m\rangle = \\ &= \Big\langle\varphi_n\Big|\Big(\sum_{k=1}^{\infty}|\psi_k\rangle\langle\psi_k|\Big)\cdot\widehat{F}\cdot\Big(\sum_{p=1}^{\infty}|\psi_p\rangle\langle\psi_p|\Big)\Big|\varphi_m\Big\rangle = \\ &= \sum_{kp}\langle\varphi_n|\psi_k\rangle\langle\psi_k|\widehat{F}|\psi_p\rangle\langle\psi_p|\varphi_m\rangle.\end{aligned}$$

Отметим одну важную особенность матричного представления операторов: при изменении представления след матрицы оператора не изменяется. Действительно,

$$\operatorname{Sp}\widehat{F}' = \operatorname{Sp}(\widehat{S}\widehat{F}\widehat{S}^{+}) = \operatorname{Sp}(\widehat{S}^{+}\widehat{S}\widehat{F}) = \operatorname{Sp}\widehat{F}. \tag{24.28}$$

Мы воспользовались здесь унитарностью матрицы $\widehat{S}$ и тем, что след произведения матриц не изменяется при циклической перестановке сомножителей.

Оператор $\widehat{F}$ в представлении своих собственных функций $\{\psi_n\}_1^{\infty}$ имеет диагональный вид

$$\langle\psi_n|\widehat{F}|\psi_m\rangle = F_m\delta_{nm}, \tag{24.29}$$

где $\{F_m\}_1^{\infty}$ – множество всех собственных значений оператора $\widehat{F}$. Поэтому из (24.28) получаем

$$\operatorname{Sp}\widehat{F}' = \operatorname{Sp}\widehat{F} = \sum_n F_n. \tag{24.30}$$

2. Задача на собственные значения

В пространстве L_2 уравнение на собственные значения оператора $\widehat{F}$ имеет вид

$$\widehat{F}\psi_n(\xi) = F_n\psi_n(\xi). \tag{24.31}$$

Сведем эту задачу к задаче на собственные значения соответствующей матрицы.

Выбирая в качестве базиса в L_2 множество собственных векторов $\{\varphi_m\}_1^\infty$ некоторого эрмитова оператора $\widehat{G}$, имеющего чисто дискретный спектр, получим образ этого уравнения в пространстве l_2:

$$\sum_{m=1}^{\infty} F_{km}a_m^{(n)} = F_n a_k^{(n)}, \tag{24.32}$$

где

$$a_m^{(n)} = \langle\varphi_m|\psi_n\rangle, \qquad F_{km} = \langle\varphi_k|\widehat{F}|\psi_m\rangle. \tag{24.33}$$

В этом уравнении неизвестными являются собственные значения F_n и $\{a_m^{(n)}\}_{m=1}^\infty$ — компоненты собственного вектора ψ_n в G-представлении.

Представим (24.32) в виде

$$\sum_{m=1}^{\infty}(F_{km} - F_n\delta_{km})a_m^{(n)} = 0, \quad k = 1, 2, 3, \ldots \tag{24.34}$$

Это есть бесконечная система алгебраических линейных однородных уравнений относительно величин $\{a_m^{(n)}\}_{m=1}^\infty$. Система имеет нетривиальные решения тогда и только тогда, когда определитель матрицы ее коэффициентов равен нулю:

$$\det\|F_{km} - F_n\delta_{km}\| = 0, \tag{24.35}$$

т. е.

$$\begin{vmatrix} F_{11} - F_n & F_{12} & F_{13} & \ldots \\ F_{21} & F_{22} - F_n & F_{23} & \ldots \\ F_{31} & F_{32} & F_{33} - F_n & \ldots \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \end{vmatrix} = 0. \tag{24.36}$$

Это есть алгебраическое уравнение бесконечного порядка относительно F_n. Оно называется секулярным, или вековым, уравнением (название заимствовано из астрономии).

Корни этого уравнения F_1, F_2, F_3, ... являются собственными значениями оператора $\widehat{F}$. Поскольку $\widehat{F}$ – эрмитов оператор, можно утверждать, что все эти корни вещественные. Каждому корню F_n соответствует один или (в случае вырождения) несколько собственных векторов $a^{(n)} = \{a_m^{(n)}\}_{m=1}^{\infty}$, каждый из которых является решением системы уравнений (24.34) при данном значении F_n. Если спектр оператора $\widehat{F}$ чисто дискретный, то множество всех собственных векторов $\{a^{(n)}\}$ бесконечно и образует полный набор в l_2.

Оператор $\widehat{F}$ в представлении своих собственных векторов $\{\psi_n\}_1^{\infty}$ имеет диагональный вид (24.29). Поэтому о решении системы уравнений (24.34) говорят как о приведении оператора $\widehat{F}$ к диагональному виду, или о диагонализации этого оператора. Мы видим также, что решение этой системы эквивалентно нахождению такого унитарного преобразования базиса $\{\varphi_m\}_1^{\infty}$, что в представлении векторов нового базиса $\{\psi_n\}_1^{\infty}$ оператор $\widehat{F}$ принимает диагональный вид. Таким образом, задача решения уравнения (обычно дифференциального) на собственные значения эрмитова оператора в пространстве L_2 путем использования матричной формы векторов и операторов может быть сведена к решению бесконечной системы алгебраических линейных однородных уравнений.

3. Энергетическое представление

Особое значение в квантовой механике имеет представление, задаваемое полным набором $\{\varphi_m\}_1^{\infty}$ собственных функций гамильтониана системы:

$$\widehat{H}\varphi_m(\xi) = E_m\varphi_m(\xi). \qquad (6.24.36\text{a})$$

Это представление называется энергетическим, или E-представлением. В E-представлении можно установить некоторые специфические соотношения между матричными элементами операторов, которых нет в других представлениях.

Запишем в E-представлении оператор скорости изменения некоторой физической величины F в системе, которая описывается гамильтонианом $\widehat{H}$. В соответствии с формулой (8.1) имеем

$$\widehat{\frac{dF}{dt}} = -\frac{i}{\hbar}[\widehat{F}, \widehat{H}], \qquad (24.37)$$

если оператор $\widehat{F}$ не зависит явно от времени. В E-представлении получаем

$$\left\langle \varphi_n \left| \widehat{\frac{dF}{dt}} \right| \varphi_m \right\rangle \equiv \left\langle n \left| \widehat{\frac{dF}{dt}} \right| m \right\rangle = -\frac{i}{\hbar}\langle n|\widehat{F}\widehat{H} - \widehat{H}\widehat{F}|m\rangle =$$

$$= -\frac{i}{\hbar}\Big(\sum_l \langle n|\widehat{F}|l\rangle\langle l|\widehat{H}|m\rangle - \sum_l \langle n|\widehat{H}|k\rangle\langle k|\widehat{F}|m\rangle\Big) =$$

$$= -\frac{i}{\hbar}\Big(\sum_l E_m F_{nl}\delta_{lm} - \sum_k E_k F_{km}\delta_{nk}\Big),$$

т. е.

$$\left\langle n \left| \widehat{\frac{dF}{dt}} \right| m \right\rangle = \frac{i}{\hbar}(E_n - E_m)\langle n|\widehat{F}|m\rangle. \tag{24.38}$$

Применим полученное соотношение для вычисления матрицы оператора импульса частицы, движущейся в некотором потенциальном поле $V(\mathbf{r})$. Согласно упражнению 2.2 оператор импульса частицы следующим образом связан с оператором координаты:

$$\widehat{\mathbf{p}} = \mu \widehat{\frac{d\mathbf{r}}{dt}}.$$

В E-представлении получаем

$$\langle n|\widehat{\mathbf{p}}|m\rangle = \mu\left\langle n \left| \widehat{\frac{d\mathbf{r}}{dt}} \right| m \right\rangle = \frac{i\mu}{\hbar}(E_n - E_m)\langle n|\widehat{\mathbf{r}}|m\rangle. \tag{24.39}$$

§ 25. Матрицы операторов физических величин для линейного гармонического осциллятора. Операторы рождения и уничтожения квантов колебаний

Найдем матрицы операторов координаты, импульса и энергии для линейного гармонического осциллятора. Проще всего найти эти матрицы в представлении собственных функций гамильтониана осциллятора, т. е. в энергетическом представлении.

Используя функции (11.18) и рекуррентные соотношения (Д6.6), (Д6.7) для полиномов Эрмита с учетом условия ортонормированности (11.24), непосредственно получаем:

$$\langle\psi_n|\widehat{x}|\psi_m\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}}(\sqrt{n}\delta_{m,n-1} + \sqrt{n+1}\delta_{m,n+1}), \tag{25.1}$$

$$\langle\psi_n|\widehat{p}|\psi_m\rangle = i\sqrt{\frac{\hbar\mu\omega}{2}}(\sqrt{n}\delta_{m,n-1} - \sqrt{n+1}\delta_{m,n+1}), \tag{25.2}$$

где $\{\psi_n\}$ — собственные функции гамильтониана осциллятора. Таким образом, искомые матрицы имеют следующий вид:

$$\widehat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}}\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \ldots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \ldots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & 0 & \ldots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \sqrt{4} & \ldots \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \end{pmatrix}, \tag{25.3}$$

$$\widehat{p} = \sqrt{\frac{\hbar\mu\omega}{2}}i\begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \ldots \\ \sqrt{1} & 0 & -\sqrt{2} & 0 & 0 & \ldots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{3} & 0 & \ldots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & -\sqrt{4} & \ldots \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \end{pmatrix}. \tag{25.4}$$

Замечательной особенностью этих матриц является то, что отличны от нуля только те элементы, которые соответствуют соседним стационарным состояниям осциллятора.

Матрицу оператора энергии мы можем найти без всяких вычислений, так как знаем его собственные значения (11.19):

$$\langle\psi_n|\widehat{H}|\psi_m\rangle = \hbar\omega\Big(n + \frac{1}{2}\Big)\delta_{nm}. \tag{25.5}$$

Далее рассмотрим оператор

$$\widehat{a} = \sqrt{\frac{\mu\omega}{2\hbar}}\widehat{x} + \frac{i}{\sqrt{2\mu\hbar\omega}}\widehat{p}, \tag{25.6}$$

являющийся линейной комбинацией операторов координаты и импульса. Подействуем этим оператором на собственную функцию ψ_n гамильтониана осциллятора. Согласно (24.9) имеем

$$\widehat{a}\psi_n = \sum_m \langle\psi_m|\widehat{a}|\psi_n\rangle\psi_m = \sum_m\left(\sqrt{\frac{\mu\omega}{2\hbar}}x_{mn} + \frac{i}{\sqrt{2\mu\hbar\omega}}p_{mn}\right)\psi_n.$$

Подставляя сюда (25.1) и (25.2), получаем

$$\widehat{a}\psi_n = \sqrt{n}\psi_{n-1}. \tag{25.7}$$

В § 11 мы видели, что в состоянии ψ_n имеется n квантов колебаний с энергией $\hbar\omega$. Следовательно, действие оператора $\widehat{a}$ на произвольное стационарное состояние осциллятора приводит к уменьшению энергии на один квант. Поэтому оператор и называют *оператором уничтожения* кванта колебаний.

Далее рассмотрим действие оператора $\widehat{a}^+$. Совершенно аналогично получим

$$\widehat{a}^+\psi_n = \sqrt{n+1}\psi_{n+1}. \tag{25.8}$$

Этот оператор приводит к увеличению энергии на один квант и называется *оператором рождения* кванта колебаний.

Из (25.7) и (25.8) имеем

$$\widehat{a}^+\widehat{a}\psi_n = n\psi_n. \tag{25.9}$$

Следовательно, ψ_n является собственным состоянием оператора $\widehat{a}^+\widehat{a}$, принадлежащим собственному значению n. Поэтому оператор $\widehat{a}^+\widehat{a}$ называется *оператором количества квантов* колебаний с энергией $\hbar\omega$.

Операторы $\widehat{a}$, $\widehat{a}^+$ широко используются в квантовой электродинамике для описания процессов взаимодействия фотонов с электронами.

§ 26. Когерентные состояния линейного гармонического осциллятора

В квантовой оптике, а также в некоторых других разделах физики широко используются так называемые когерентные состояния, которые можно определить как собственные состояния оператора уничтожения (25.6) кванта колебаний:

$$\widehat{a}|z\rangle = z|z\rangle, \tag{26.1}$$

где z есть соответствующее собственное значение.

Будем искать вектор $|z\rangle$ в виде разложения по векторам $|n\rangle$ стационарных состояний (11.18) линейного гармонического осциллятора:

$$|z\rangle = \sum_{n=0}^{\infty}\langle n|z\rangle\,|n\rangle. \tag{26.2}$$

Для определения коэффициентов разложения $\langle n|z\rangle$ составим скалярное произведение левой и правой частей уравнения (26.1) с вектором $|n\rangle$:

$$\langle n|\widehat{a}|z\rangle = z\langle n|z\rangle. \tag{26.3}$$

Используя (2.2) и (25.8), находим

$$\langle n|\widehat{a}|z\rangle = \sqrt{n+1}\langle n+1|z\rangle. \tag{26.4}$$

Подставляя это выражение в (26.3), получаем

$$\langle n+1|z\rangle = [z/\sqrt{n+1}]\langle n|z\rangle. \tag{26.5}$$

Это рекуррентное соотношение позволяет выразить $\langle n|z\rangle$ через $\langle 0|z\rangle$:

$$\langle n|z\rangle = \frac{z^n}{\sqrt{n!}}\langle 0|z\rangle. \tag{26.6}$$

Теперь (26.2) принимает вид

$$|z\rangle = \langle 0|z\rangle \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle. \tag{26.7}$$

Из условия нормировки

$$\langle z|z\rangle = 1 \tag{26.8}$$

находим

$$\langle 0|z\rangle = \exp(-|z|^2/2), \tag{26.9}$$

$$|z\rangle = \exp(-|z|^2/2) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle. \tag{26.10}$$

Вектор (26.10) удовлетворяет уравнению (26.1) при любом комплексном значении z. Следовательно, спектр оператора $\widehat{a}$ уничтожения кванта занимает всю комплексную плоскость. В этом нет ничего удивительного, поскольку оператор $\widehat{a}$, как это следует из его определения (25.6), не является эрмитовым. С этим же обстоятельством связано отсутствие ортогональности собственных векторов $|z\rangle$, принадлежащих различным собственным значениям. Действительно, из (26.10) получаем

$$\langle z_1|z_2\rangle = \exp\Big(-\frac{1}{2}(|z_1|^2 + |z_2|^2) + z_1^* z_2\Big), \tag{26.11}$$

$$|\langle z_1|z_2\rangle| = \exp\Big(-\frac{1}{2}|z_1 - z_2|^2\Big). \tag{26.12}$$

Отсюда видно, что только при

$$|z_1 - z_2| \gg 1 \tag{26.13}$$

векторы $|z_1\rangle$ и $|z_2\rangle$ приближенно ортогональны.

Заметим, что в отличие от собственных векторов эрмитовых операторов собственные векторы оператора $\widehat{a}$, принадлежащие непрерывному спектру, имеют конечную норму.

Далее рассмотрим вопрос о полноте набора когерентных состояний $|z\rangle$. Для этого надо проверить выполнение условия (2.19), в котором надо положить

$$df = d^2 z = d(\mathrm{Re}\, z) d(\mathrm{Im}\, z). \tag{26.14}$$

Переходя от комплексной переменной z к двум вещественным переменным ρ и φ

$$z = \rho e^{i\varphi}, \tag{26.15}$$

получаем

$$d^2 z = \rho\, d\rho\, d\varphi. \tag{26.16}$$

Подставляя (26.15) в (26.10), находим

$$\int \langle \xi | z \rangle \langle z | \xi' \rangle d^2 z = \sum_{mn} \frac{\langle \xi | n \rangle \langle m | \xi' \rangle}{\sqrt{n!\, m!}} \times$$
$$\times \int_0^{2\pi} e^{i(n-m)\varphi} d\varphi \int_0^{\infty} \rho^{n+m} e^{-\rho^2} \rho\, d\rho = \pi \sum_{n=0}^{\infty} \langle \xi | n \rangle \langle n | \xi' \rangle.$$

Принимая во внимание полноту множества стационарных состояний осциллятора, получаем

$$\int \langle \xi | z \rangle \langle z | \xi' \rangle \, \frac{d^2 z}{\pi} = \delta(\xi - \xi'). \tag{26.17}$$

Следовательно, множество когерентных состояний осциллятора является полным набором, а любой вектор пространства состояний может быть представлен в виде разложения по векторам когерентных состояний.

Рассмотрим некоторые физические свойства когерентных состояний. Как видно из (26.10), любое когерентное состояние является линейной комбинацией стационарных состояний, а поэтому энергия осциллятора в когерентном состоянии не имеет определенного значения. Из (26.10) непосредственно следует, что вероятность того, что энергия осциллятора в состоянии $|z\rangle$ имеет значение

$$E_n = \hbar\omega\Big(n + \frac{1}{2}\Big) \tag{26.18}$$

(это есть энергия стационарного состояния $|z\rangle$), дается выражением

$$\rho(E_n) = \Big(\frac{|z|^{2n}}{n!}\Big)e^{-|z|^2}. \tag{26.19}$$

Это распределение можно рассматривать также как распределение количества n квантов колебаний в данном когерентном состоянии. Легко видеть, что это есть распределение Пуассона со средним значением

$$\overline{n} = |z|^2. \tag{26.20}$$

Следовательно, среднее значение энергии согласно (26.18) и (26.20) есть

$$\overline{E} = \hbar\omega\Big(\overline{n} + \frac{1}{2}\Big) = \hbar\omega\Big(|z|^2 + \frac{1}{2}\Big). \tag{26.21}$$

Мы видим, что параметр z однозначно определяет среднюю энергию когерентного состояния $|z\rangle$.

Далее найдем средние значения координаты x и импульса p в этом состоянии. Используя (26.10) и матрицы (25.1) и (25.2) операторов координаты и импульса осциллятора в энергетическом представлении, получаем

$$\overline{x} = \langle z|\widehat{x}|z\rangle = \sqrt{\frac{2\hbar}{\mu\omega}}\,\mathrm{Re}\,z, \tag{26.22}$$

$$\overline{p} = \langle z|\widehat{p}|z\rangle = \sqrt{2\hbar\mu\omega}\,\mathrm{Im}\,z, \tag{26.23}$$

т. е. средние значения координаты и импульса определяются вещественной и мнимой частями z соответственно. Подставляя (26.22) и (26.23) в (26.21), находим

$$\overline{E} = \frac{\overline{p}^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega^2\overline{x}^2 + \frac{1}{2}\hbar\omega. \tag{26.24}$$

Следовательно, в когерентном состоянии средние значения энергии, импульса и координаты связаны друг с другом так же, как при движении классического осциллятора (с точностью до энергии нулевых колебаний $\hbar\omega/2$).

Теперь рассмотрим изменение когерентного состояния со временем. Согласно (6.2) и (6.3) имеем

$$|z,\, t\rangle = \widehat{U}(t,\, t_0)|z,\, t_0\rangle, \tag{26.25}$$

где

$$\widehat{U}(t,\, t_0) = \exp\Big(-\frac{i}{\hbar}\widehat{H}\cdot(t-t_0)\Big) \tag{26.26}$$

есть оператор эволюция системы.

Полагая, что при $t_0 = 0$ вектор $|z,\, t_0\rangle \equiv |z_0\rangle$ имеет вид (26.10), и принимая во внимание, что

$$\widehat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle, \tag{26.27}$$

из (26.25) получаем

$$|z,\, t\rangle = e^{-i\omega t/2}e^{-|z_0|^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(z_0e^{-i\omega t})^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle,$$

т. е.

$$|z,\, t\rangle = e^{-i\omega t/2}|z_0e^{-i\omega t}\rangle. \tag{26.28}$$

Это есть закон эволюции когерентного состояния. Отсюда видно, что если в начальный момент времени состояние осциллятора было когерентным, т. е. описывалось собственным вектором оператора уничтожения $\widehat{a}$, то с течением времени оно продолжает оставаться когерентным, а его параметр зависит от времени по гармоническому закону

$$z(t) = z_0e^{-i\omega t}. \tag{26.29}$$

Используя (26.21), (26.22), (26.23) и (26.28), легко проследить за изменением во времени средних значений физических величин. Поскольку

$$|z(t)| = |z_0|, \tag{26.30}$$

то, как и следовало ожидать, среднее значение энергии не изменяется. Более того, из (26.19) непосредственно видно, что распределение энергии тоже не изменяется, как это и должно быть для интеграла движения. Для средних значений координаты и импульса получаем

$$\overline{x}(t) = \overline{x}_0\cos\omega t + (\overline{p}_0/\mu\omega)\sin\omega t, \tag{26.31}$$

$$\overline{p}(t) = \overline{p}_0\cos\omega t - \mu\omega\overline{x}_0\sin\omega t, \tag{26.32}$$

где

$$\overline{x}_0 = \overline{x}(t=0), \qquad \overline{p}_0 = \overline{p}(t=0). \tag{26.33}$$

В §§ 13 и 22 мы рассматривали движение осциллирующего волнового пакета вида (13.2). Сравнивая (26.31) и (26.32) с (22.23) и (22.22), видим, что законы движения средних значений координаты и импульса осциллирующего пакета и когерентного состояния одинаковы. Более того, сейчас мы покажем, что эти состояния совпадают. Для этого вычислим волновую функцию когерентного состояния (26.10) в координатном представлении, используя выражения (11.18) и (11.20) для волновой функции $\langle x|n\rangle$ стационарного состояния осциллятора. Получаем

$$\langle x|z\rangle = \exp\Big(-\frac{|z|^2}{2}\Big)\exp\Big(-\frac{1}{2}\Big(\frac{x}{b}\Big)^2\Big)\frac{1}{\sqrt{b\sqrt{\pi}}}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(z/\sqrt{2})^n}{n!}H_n\Big(\frac{x}{b}\Big),$$

где сумма легко вычисляется с помощью производящей функции (13.10) полиномов Эрмита. Окончательно имеем

$$\langle x|z\rangle = \frac{1}{\sqrt{b\sqrt{\pi}}}\exp\Big(-i\,\mathrm{Re}\,z\cdot\mathrm{Im}\,z + i\sqrt{2}\,\mathrm{Im}\,z\cdot\frac{x}{b} - \frac{1}{2}\Big(\frac{x}{b} - \sqrt{2}\,\mathrm{Re}\,z\Big)^2\Big), \tag{26.34}$$

где

$$b = \sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}}. \tag{26.35}$$

Подставляя сюда $\mathrm{Re}\,z$ и $\mathrm{Im}\,z$ из (26.22) и (26.23), получаем

$$\langle x|z\rangle = \frac{1}{\sqrt{b\sqrt{\pi}}}\exp\Big(-i\frac{\overline{x}\overline{p}}{2\hbar} + \frac{i}{\hbar}\overline{p}x - \frac{1}{2}\Big(\frac{x-\overline{x}}{b}\Big)^2\Big). \tag{26.36}$$

Это выражение с точностью до несущественного постоянного фазового множителя $\exp(-i\overline{x}\overline{p}/2\hbar)$ совпадает с волновой функцией (13.2) волнового пакета при $t=0$.

Далее найдем волновую функцию когерентного состояния при $t>0$. Используя (26.28) и (26.34), находим

$$\langle x|z,\,t\rangle = \frac{\exp(-i\omega t/2)}{\sqrt{b\sqrt{\pi}}}\exp\Big(-i\,\mathrm{Re}\,z(t)\cdot\mathrm{Im}\,z(t) + \\ + i\sqrt{2}\,\mathrm{Im}\,z(t)\cdot\frac{x}{b} - \frac{1}{2}\Big(\frac{x}{b} - \sqrt{2}\,\mathrm{Re}\,z(t)\Big)^2\Big), \tag{26.37}$$

где $z(t)$ определяется формулой (26.29). Окончательно получаем

$$\langle x|z,\,t\rangle = \frac{\exp(-i\omega t/2)}{\sqrt{b\sqrt{\pi}}}\exp\Big[\frac{i}{4}\Big(\Big(\frac{\overline{x}_0}{b}\Big)^2 - \Big(\frac{\overline{p}_0 b}{\hbar}\Big)^2\Big)\sin 2\omega t - \\ - i\frac{\overline{x}_0\overline{p}_0}{2\hbar}\cos 2\omega t - i\frac{\overline{x}_0 x}{b^2}\sin\omega t + i\frac{\overline{p}_0 x}{\hbar}\cos\omega t - \\ - \frac{1}{2}\Big(\frac{x}{b} - \frac{\overline{x}_0}{b}\cos\omega t - \frac{\overline{p}_0 b}{\hbar}\sin\omega t\Big)^2\Big]. \quad (26.38)$$

Этот результат согласуется с решением (13.13) для движения осциллирующего волнового пакета при $\overline{p}_0 = 0$.

Следовательно, рассмотренный раньше осциллирующий волновой пакет представляет собой когерентное состояние. В § 13 мы показали, что замечательной особенностью этого состояния является то, что оно минимизирует соотношение неопределенностей (13.5) для координаты и импульса. В этом смысле когерентные состояния в наибольшей степени соответствуют движению классического осциллятора по траектории. При этом степень «классичности» движения тем больше, чем больше энергия осциллятора, определяемая согласно (26.21) параметром z.

Упражнения к лекции 6

6.1. В E-представлении найти матричные элементы координаты и импульса частицы, движущейся в одномерной прямоугольной яме с бесконечно высокими стенками.

6.2. Выполнить упражнение 3.7, используя выражения (25.1) и (25.2) для матричных элементов координаты и импульса.

6.3. В представлении собственных функций гамильтониана линейного гармонического осциллятора построить матрицы операторов $\widehat{a}$, $\widehat{a}^+$ и $\widehat{a}^+\widehat{a}$, где $\widehat{a}$ задается формулой 25.6.

6.4. Используя явный вид оператора $\widehat{a}$, найти в x-представлении волновую функцию $\psi_0(x)$ основного состояния линейного гармонического осциллятора.

6.5. То же для волновых функций $\psi_1(x)$ и $\psi_2(x)$ первого и второго возбужденных состояний линейного гармонического осциллятора. Сравнить результат с (11.22) и (11.23).

6.6. Указать, при каких соотношениях между n и n' обращаются в нуль матричные элементы $\langle n|\widehat{F}|n'\rangle$ оператора $\widehat{F}$ в представлении собственных функций гамильтониана линейного гармонического осциллятора:

а) $\widehat{F} = x^2$, б) $\widehat{F} = x\widehat{p}_x$, в) $\widehat{F} = x^3$, г) $\widehat{F} = \sin\alpha x$, д) $\widehat{F} = \cos\alpha x$.

6.7. Вычислить сумму

$$\sum_{n=1}^{\infty} |\langle n|2^{ikx}|0\rangle|^2,$$

где $\langle n|e^{ikx}|0\rangle$ — матричный элемент оператора e^{ikx}, связывающий основное ($n = 0$) и n-е состояния линейного гармонического осциллятора.

6.8. Вычислить сумму

$$\sum_{n=1}^{\infty} |\langle n|\widehat{x}|1\rangle|^2,$$

где $\langle n|\widehat{x}|1\rangle$ — матричный элемент оператора $\widehat{x}$, связывающий основное ($n = 1$) и n-е состояния частицы в одномерной прямоугольной яме с бесконечно высокими стенками. Здесь x — расстояние от середины ямы.

6.9. Найти собственные значения и собственные векторы следующих операторов:

$$\text{а)} \begin{pmatrix} A & a \\ a & A \end{pmatrix}, \qquad \text{б)} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \text{в)} \begin{pmatrix} A & a & a \\ a & A & a \\ a & a & A \end{pmatrix},$$

где A, a — некоторые вещественные константы.

6.10. Найти вещественные собственные функции оператора $\widehat{L}_z^2$. Построить матрицы преобразования, связывающего эти функции с собственными функциями оператора $\widehat{L}_z$ (см. упр. 1.10). Проверить унитарность этих матриц.

6.11. Показать, что следующие матрицы являются эрмитовыми и унитарными:

$$\widehat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \widehat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \widehat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$