Лекция 3
Теория представлений (продолжение)

1 Оператор момента количества движения в матричном виде

До сих пор мы использовали выражение для операторов момента количества движения

$$\widehat{\vec{L}} = \frac{\hbar}{i}\vec{x} \times \nabla, \tag{1}$$

которые получались из простой аналогии с соответствующим классическим выражением. При этом было показано, что для операторов $\widehat{\vec{L}}$ справедливы следующие коммутационные соотношения

$$\left[\widehat{L}_i, \widehat{L}_j\right] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\widehat{L}_k. \tag{2}$$

Однако при описании собственного момента количества движения частицы (спина) пользоваться выражением (1) невозможно, в то время как коммутационные соотношения типа (2) остаются справедливыми. Поэтому сейчас мы постараемся развить теорию момента количества движения, основываясь только на коммутационных соотношениях и не уточняя конкретный вид операторов. С этой целью воспользуемся матричной формулировкой.

В дальнейшем, говоря о произвольном моменте количества движения, будем использовать символ $\widehat{\vec{J}}$. За символом $\widehat{\vec{L}}$ оставим обозначение орбитального момента, т.е. такого момента, который связан с пространственным движением частицы. Из коммутационных соотношений

$$\left[\widehat{J}_i, \widehat{J}_j\right] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\widehat{J}_k. \tag{3}$$

следует, что квадрат момента $\widehat{\vec{J}}^2 = \widehat{J}_1^2 + \widehat{J}_2^2 + \widehat{J}_3^2$ коммутирует с любой из его проекций

$$\left[\widehat{\vec{J}}^2, \widehat{J}_1\right] = \left[\widehat{\vec{J}}^2, \widehat{J}_2\right] = \left[\widehat{\vec{J}}^2, \widehat{J}_3\right] = 0. \tag{4}$$

Будем далее работать в представлении, где диагональны $\widehat{\vec{J}}^2$ и $\widehat{J}_3$. (Можно доказать в общем случае, что если два оператора коммутируют, то всегда можно найти такое представление, где они оба диагональны). Поэтому будем нумеровать соответствующие собственные функции этих операторов двумя числами j и m, где j характеризует квадрат момента, а собственное значение J_3 оператора $\widehat{J}_3$ задается числом m: $J_3 = \hbar m$. Собственные значения оператора $\widehat{\vec{J}}^2$ будем обозначать A_j. Для соответствующих собственных функций будем использовать обозначения Дирака $|jm\rangle$. Тогда матричные элементы операторов $\widehat{\vec{J}}^2$ и $\widehat{J}_3$ будут диагональны по j и m, а матричные элементы операторов $\widehat{J}_1$ и $\widehat{J}_2$ — диагональны по j и недиагональны по m:

$$\begin{aligned}
\langle j'm'|\widehat{\vec{J}}^2|jm\rangle &= A_j\delta_{jj'}\delta_{mm'} \\
\langle j'm'|\widehat{J}_1|jm\rangle &= (J_1)_{mm'}\delta_{jj'}, \ \langle j'm'|\widehat{J}_2|jm\rangle = (J_2)_{mm'}\delta_{jj'} \\
\langle j'm'|\widehat{J}_3|jm\rangle &= \hbar m\delta_{jj'}\delta_{mm'}.
\end{aligned} \tag{5}$$

Нашей задачей является найти спектр значений A_j и m, а также восстановить матрицы $(J_1)_{mm'}$ и $(J_2)_{mm'}$.

Прежде всего отметим, что при фиксированном j значения m ограничены. С этой целью рассмотрим следующие матричные элементы:

$$\langle j'm'|\hat{\vec{J}}^2 - \hat{J}_3^2|jm\rangle = \left(A_j - \hbar^2 m^2\right)\delta_{jj'}\delta_{mm'}. \tag{6}$$

С другой стороны, эти матричные элементы равны

$$\begin{aligned}\langle j'm'|\hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2|jm\rangle &= \sum_{m''}\left[(J_1)_{m'm''}(J_1)_{m''m} + (J_2)_{m'm''}(J_2)_{m''m}\right]\delta_{mm'}\delta_{jj'} = \\ &= \sum_{m''}\left[(J_1)_{m'm''}(J_1)^*_{mm''} + (J_2)_{m'm''}(J_2)^*_{mm''}\right]\delta_{mm'}\delta_{jj'} = \\ &= \sum_{m''}\left[|(J_1)_{m'm''}|^2 + |(J_2)_{m'm''}|^2\right]\delta_{mm'}\delta_{jj'} \end{aligned} \tag{7}$$

Здесь мы сначала использовали эрмитовость матричных элементов $(J_1)_{mm'}$ и $(J_2)_{mm'}$, а затем то, что, согласно (6) это выражение диагонально по m и m'. Сравнивая правые части (6) и (7), делаем вывод, что

$$A_j \geq (\hbar m)^2 \text{ или } -\sqrt{A_j} \geq (\hbar m) \geq \sqrt{A_j}. \tag{8}$$

Теперь введем операторы

$$\hat{J}_\pm = \hat{J}_1 \pm i\hat{J}_2. \tag{9}$$

Из (3) следуют коммутационные соотношения

$$\left[\hat{J}_3, \hat{J}_\pm\right] = \pm\hbar\hat{J}_\pm,\ \left[\hat{J}_+, \hat{J}_-\right] = 2\hbar\hat{J}_3. \tag{10}$$

Перепишем первое из коммутационных соотношений (10) в матричном виде. Ввиду того, что все матричные элементы диагональны по j, мы далее будем рассматривать только случай $j = j'$. Для левой части имеем:

$$\begin{aligned}&\langle jm'|\hat{J}_3\hat{J}_\pm|jm\rangle - \langle jm'|\hat{J}_\pm\hat{J}_3|jm\rangle = \\ &= \sum_{m''}\left\{\langle jm'|\hat{J}_3|jm''\rangle\langle jm''|\hat{J}_\pm|jm\rangle - \langle jm'|\hat{J}_\pm|jm''\rangle\langle jm''|\hat{J}_3|jm\rangle\right\} = \\ &= \hbar(m'-m)\langle jm'|\hat{J}_\pm|jm\rangle.\end{aligned} \tag{11}$$

Сравнивая это выражение с матричным элементом от правой части (10), получаем

$$(m'-m)\langle jm'|\hat{J}_\pm|jm\rangle = \pm\langle jm'|\hat{J}_\pm|jm\rangle \tag{12}$$

или

$$\langle jm'|\hat{J}_+|jm\rangle = (J_+)_m\delta_{m,m'-1},\ \langle jm'|\hat{J}_-|jm\rangle = (J_-)_m\delta_{m,m'+1}. \tag{13}$$

Иными словами, оператор $\hat{J}_+$ переводит состояние $|jm\rangle$ в новое, с тем же значением j и магнитным квантовым числом $m' = m+1$. Аналогично, оператор $\hat{J}_-$ переводит состояние $|jm\rangle$ в состояние с $m' = m-1$. Поэтому орепатор $\hat{J}_+$ называют повышающим, а оператор $\hat{J}_-$ — понижающим оператором. Таким образом мы заключием, что m принимает следующие значения

$$\hbar m_1,\ \hbar(m_1+1),\ \ldots,\ \hbar(m_2-1),\ \hbar m_2, \tag{14}$$

где m_1 минимальное, а m_2 максимальное значение величины m. Из (14) следует, что разность $m_2 - m_1$ должна быть целым числом. Кроме того, чтобы число m_1 было конечно, необходимо положить, что оператор $\widehat{J}_-$ переводит состояние $|j, m_1\rangle$ в ноль:

$$\widehat{J}_- |j, m_1\rangle = 0. \tag{15}$$

Точно также, для того, число m_2 было конечно, необходимо положить, что

$$\widehat{J}_+ |j, m_2\rangle = 0. \tag{16}$$

Запишем оператор $\widehat{\vec{J}}^2$ через операторы $\widehat{J}_\pm$ и $\widehat{J}_3$ и используя (10) получим

$$\widehat{\vec{J}}^2 = \frac{1}{2}\left(\widehat{J}_+\widehat{J}_- + \widehat{J}_-\widehat{J}_+\right) + \widehat{J}_3^2 = \widehat{J}_-\widehat{J}_+ + \widehat{J}_3^2 - \hbar\widehat{J}_3 = \widehat{J}_+\widehat{J}_- + \widehat{J}_3^2 + \hbar\widehat{J}_3. \tag{17}$$

Вычислим теперь матричный элемент оператора (17) между состояниями с минимальным значением магнитного квантового числа $m = m_1$

$$\langle jm_1|\widehat{\vec{J}}^2|jm_1\rangle = \langle jm_1|\widehat{J}_+\widehat{J}_-|jm_1\rangle + \langle jm_1|\widehat{J}_3^2|jm_1\rangle - \langle jm_1|\hbar\widehat{J}_3|jm_1\rangle = \hbar^2 m_1(m_1 - 1). \tag{18}$$

При выводе этого равенства мы воспользовались условием (15). С другой стороны, используя (16) получим для матричного элемента этого оператора между состояниями с максимальным значением магнитного квантового числа $m = m_2$

$$\langle jm_2|\widehat{\vec{J}}^2|jm_2\rangle = \langle jm_2|\widehat{J}_-\widehat{J}_+|jm_2\rangle + \langle jm_2|\widehat{J}_3^2|jm_2\rangle + \langle jm_2|\hbar\widehat{J}_3|jm_2\rangle = \hbar^2 m_2(m_2 + 1). \tag{19}$$

Однако, ввиду того, что эти матричные элементы оператора не зависят от m (см. первое равенство в (5)), то

$$\frac{1}{\hbar^2}A_j = m_1(m_1+1) = m_2(m_2-1),\ m_1 \le m_2 \equiv m_{\text{макс.}}. \tag{20}$$

Эти два условия выполняются, если $m_1 = -m_2$. Ввиду того, что $m_2 - m_1$ должно быть целым, заключаем, что значения m могут быть либо целыми, либо полуцелыми, причем

$$A_j = \hbar^2 m_{\text{макс.}}(m_{\text{макс.}} + 1). \tag{21}$$

Полагая $j = m_{\text{макс.}}$, получим

$$A_j = \hbar^2 j(j+1) \text{ и } -j \le m \le j, \tag{22}$$

где j — целое или полуцелое число.

Таким образом часть задачи решена: найдены собственные значения квадрата момента количества движения и его третей проекции. При этом на основании (5) легко найти, что оператор $\widehat{J}_3$ описывается диагональной матрицей размерности $(2j+1)\times(2j+1)$ по диагонали которой стоят собственные значения этого оператора $\hbar m$

$$\langle jm'|\widehat{J}_3|jm\rangle = \hbar\begin{pmatrix} j & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & j-1 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & -j+1 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & -j \end{pmatrix} \tag{23}$$

Осталось найти матрицы операторов $\widehat{J}_1$ и $\widehat{J}_2$. Для этого достаточно найти ненулевые матричные элементы повышающего и понижающего операторов $\widehat{J}_{\pm}$. Прежде всего заметим, что из эрмитовости операторов $\widehat{J}_1$ и $\widehat{J}_2$ следует

$$\langle jm'|\widehat{J}_+|jm\rangle = \langle jm|\widehat{J}_-|jm'\rangle^*. \tag{24}$$

Тогда из (5) и (24) получим

$$\begin{aligned}\langle jm'|\widehat{J}_+\widehat{J}_-|jm\rangle &= \sum_{m''}\langle jm'|\widehat{J}_+|jm''\rangle\langle jm''|\widehat{J}_-|jm\rangle = \sum_{m''}\langle jm'|\widehat{J}_+|jm''\rangle\langle jm|\widehat{J}_+|jm''\rangle^* = \\ &= \left|\langle jm|\widehat{J}_+|j(m-1)\rangle\right|^2\delta_{mm'} = \langle jm'|\widehat{\vec{J}}^2 - \widehat{J}_3^2 - \hbar\widehat{J}_3|jm\rangle = \\ &= \hbar^2\left[j(j+1) - m(m+1)\right]\delta_{mm'},\end{aligned} \tag{25}$$

откуда заключаем, что ненулевыми матричными элементами операторов являются:

$$\begin{aligned}\langle j(m+1)|\widehat{J}_+|jm\rangle &= e^{i\delta}\hbar\sqrt{(j-m)(j+m+1)} \\ \langle jm|\widehat{J}_-|j(m+1)\rangle &= e^{-i\delta}\hbar\sqrt{(j-m)(j+m+1)}.\end{aligned} \tag{26}$$

В дальнейшем можно положить фазу $\delta = 0$.

Из (9) (26) легко находим, что ненулевые матричные элементы операторов $\widehat{J}_1$ и $\widehat{J}_2$ следующие

$$\begin{aligned}\langle j(m+1)|\widehat{J}_1|jm\rangle &= \langle jm|\widehat{J}_1|j(m+1)\rangle = \frac{\hbar}{2}\sqrt{(j-m)(j+m+1)} \\ \langle j(m+1)|\widehat{J}_2|jm\rangle &= -\langle jm|\widehat{J}_2|j(m+1)\rangle = -i\frac{\hbar}{2}\sqrt{(j-m)(j+m+1)}.\end{aligned} \tag{27}$$

Следует при это подчеркнуть, что при выводе этих формул мы нигде не пользовались явным видом операторов моментов, а исходили только из коммутационных соотношений (3).

1.1 Матричные элементы операторов моментов для $j = 1$

На основании (27) находим явный вид матриц для операторов момента с $j = 1$:

$$\begin{aligned}\langle 1m'|\widehat{J}_1|1m\rangle &= \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 1\\ 0 & 1 & 0\end{pmatrix} \quad \langle 1m'|\widehat{J}_2|1m\rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0 & -i & 0\\ i & 0 & -i\\ 0 & i & 0\end{pmatrix} \\ \langle 1m'|\widehat{J}_3|1m\rangle &= \hbar\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix}\end{aligned} \tag{28}$$

Отсюда легко найти, что матрица оператор квадрата момента пропорциональна единичной

$$\langle 1m'|\widehat{\vec{J}}^2|1m\rangle = 2\hbar^2\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix} \tag{29}$$

причем коэффициент пропорциональности равен $j(j+1)\hbar^2 = 2\hbar^2$.

На основании результатов предыдущей лекции нормироваными собственными функциями операторов квадрата момента количества движения $\hat{\vec{J}}^2$ и его третьей проекции $\hat{J}_3$ в представлении момента количества движения будут матрицы–столбцы

$$\mathcal{C}_{+1} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{C}_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{C}_{-1} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \tag{30}$$

которые соответствуют значениям $m = 1,\ 0$ и -1.

1.2 Матричные элементы операторов моментов для $j = \frac{1}{2}$. Матрицы Паули

В этом случае для матриц моментов получаем

$$\langle \frac{1}{2} m' | \hat{\vec{J}} | \frac{1}{2} m \rangle = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}_{m'm}, \tag{31}$$

где $\vec{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ представляет собой вектор, элементы которого являются матрицами 2×2. Эти матрицы называют матрицами Паули. На основании (27) легко найти их явный вид

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{32}$$

Таким образом оператор спина $\frac{1}{2}$ выражается через матрицы Паули согласно:

$$\hat{\vec{s}} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}. \tag{33}$$

Для матриц Паули выполняются следующие правила коммутации

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\varepsilon_{ijk}\sigma_k. \tag{34}$$

Кроме того квадрат каждой из матриц Паули равен единичной матрице

$$\sigma_i^2 = 1. \tag{35}$$

При этом всегда произведение двух матриц Паули можно свести к единичной или пропорциональной одной из матриц Паули, т.е. матрицы Паули вместе с единичной матрицей образуют алгебру

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} + i\varepsilon_{ijk}\sigma_k. \tag{36}$$

Отметим, что (35) приводит к

$$\hat{\vec{s}}^2 = \frac{3}{4}\hbar^2. \tag{37}$$

Нормироваными собственными функциями операторов квадрата момента количества движения $\hat{\vec{J}}^2$ и его третьей проекции $\hat{J}_3$ в представлении момента количества движения будут двурядные матрицы–столбцы

$$\chi_+ \equiv \mathcal{C}_{+\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_- \equiv \mathcal{C}_{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{38}$$

В общем случае оператор спина действует в пространстве матриц-столбцев

$$\chi = \begin{pmatrix} \chi^1 \\ \chi^2 \end{pmatrix}, \tag{39}$$

где χ^1 и χ^2 комплексные числа. Из условия нормировки получаем, что

$$\chi^\dagger \chi = |\chi^1|^2 + |\chi^2|^2 = 1. \tag{40}$$

При поворотах χ преобразуются по билинейному закону

$$\chi \to \chi' = \begin{pmatrix} a\chi^1 + b\chi^2 \\ \\ c\chi^1 + d\xi^2 \end{pmatrix}, \tag{41}$$

где комплексные числа a, b, c и d образуют унитарную матрицу 2×2

$$\widetilde{\mathcal{U}} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}, \quad \widetilde{\mathcal{U}}^\dagger \widetilde{\mathcal{U}} = 1. \tag{42}$$

Из условия унитарности получаем

$$\det\widetilde{\mathcal{U}}^\dagger \det\widetilde{\mathcal{U}} = \left|\det\widetilde{\mathcal{U}}\right|^2 = 1. \tag{43}$$

Это означает, что

$$\det\widetilde{\mathcal{U}} = e^{i\theta} \tag{44}$$

и матрицу $\widetilde{\mathcal{U}}$ всегда можно представить в виде

$$\widetilde{\mathcal{U}} = \mathcal{U} e^{i\frac{\theta}{2}}. \tag{45}$$

Однако преобразование $\chi \to \chi' = e^{i\frac{\theta}{2}}\chi$ меняет только фазу волновой функции. Поэтому его следует исключить. Окончательно получаем, что двурядная матрица-столбец преобразуется под действием 2×2 унимодулярной матрицы $\mathcal{U}$

$$\chi \to \chi' = \mathcal{U}\chi, \quad \text{где} \;\; \mathcal{U}^\dagger \mathcal{U} = 1 \;\; \text{и} \;\; \det\mathcal{U} = 1. \tag{46}$$

Величины, которые преобразуются по такому закону, являются новыми геометрическими объектами и называются *спинорами*. Матрицы $\mathcal{U}$, с помощью которых преобрвзуются спиноры при вращениях пространства, образуют группу. Эта группа называется группой SU(2).

Легко найти число независимых действительных переменных от которых зависит матрица $\mathcal{U}$. Набору четырех комплексных параметров a, b, c и d в (41) соответствует 8 действительным числам. Устовие унитарности накладывает четыре условия. Еще одно условие следует из требования $\det\mathcal{U} = 1$. В результате получаем, что в общем случае матрица $\mathcal{U}$ зависит от трех действительных параметров.

В качестве таковых параметров, в частности, можна выбрать три угла Эйлера: φ — угол повората вокруг оси z, θ — вокруг повернутой оси x' и ψ — вокруг повернутой оси z'. В этом случае матрица $\mathcal{U}$ имеет вид (см. задачи в конце лекции)

$$\mathcal{U}(\varphi,\theta,\psi) = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} e^{\frac{i}{2}(\varphi+\psi)} & i\sin\frac{\theta}{2} e^{-\frac{i}{2}(\varphi-\psi)} \\ \\ i\sin\frac{\theta}{2} e^{\frac{i}{2}(\varphi-\psi)} & \cos\frac{\theta}{2} e^{-\frac{i}{2}(\varphi+\psi)} \end{pmatrix} \tag{47}$$

Если теперь рассмотреть вращение на угол 2π вокруг одной из осей, то эта матрица сведется к $\mathcal{U}(2\pi) = -1$. Соответственно спинор при таком повороте меняет знак

$$\chi \to \chi' = \mathcal{U}(2\pi)\chi = -\chi. \tag{48}$$

2 Изменение состояния со временем

Теперь мы рассмотрим, как с помощью унитарных преобразований можно описать изменение системы со временем. При этом оказывается, что можно использовать различные представления для такого описания, которые принято называть *представлением Шредингера,представлением Гайзенберга и представлением взаимодействия.* Рассмотрим их более подробно.

2.1 Представление Шредингера

В представлении Шредингера развитие системы со временем описывается с помощью волновой функции. При этом такие операторы как координата $\hat{\vec{x}}$ и импульс $\hat{\vec{p}}$ считаются независимыми от времени, а зависимость волновой функции $\Psi_{\text{Ш}}(\vec{x},t)$ от времени в описывается с помощью унитарного оператора $\widehat{S}(t)$:

$$\Psi_{\text{Ш}}(\vec{x},t) = \widehat{S}(t)\psi(\vec{x}) = \widehat{S}(t)\Psi_{\text{Ш}}(\vec{x},0). \tag{49}$$

Причем необходимо потребовать, чтобы

$$\widehat{S}(0) = 1. \tag{50}$$

Условие унитарности оператора $\widehat{S}(t)$ необходимо для сохранения вероятности со временем

$$\langle\Psi_{\text{Ш}}(\vec{x},t)|\Psi_{\text{Ш}}(\vec{x},t)\rangle = \langle\Psi_{\text{Ш}}(\vec{x},0)|\widehat{S}^{\dagger}\widehat{S}|\Psi_{\text{Ш}}(\vec{x},0)\rangle = \langle\Psi_{\text{Ш}}(\vec{x},0)|\Psi_{\text{Ш}}(\vec{x},0)\rangle. \tag{51}$$

Оператор $\widehat{S}(t)$, осуществляющий такие преобразования, называют *оператором эволюции.* Подставляя (49) в уравнение Шредингера получаем уравнение для оператора эволюции

$$i\hbar\frac{\partial\widehat{S}(t)}{\partial t} = \widehat{H}\widehat{S}(t). \tag{52}$$

Это уравнение совместно с граничным условием (50) в момент времени $t = 0$ однозначно определяет его.

Ввиду того, что гамильтониан явно не зависит от времени, формальное решение операторного равенства (52) находится легко

$$\widehat{S}(t) = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\widehat{H}t\right\}, \tag{53}$$

которое следует понимать как ряд по степеням оператора $-\frac{i}{\hbar}\widehat{H}$.

Рассмотрим действие оператора $\widehat{S}(t)$ на волновую функцию $\psi(\vec{x})$. С этой целью разложим ее по собственным функциям $\varphi_m(\vec{x})$ оператора Гамильтона $\widehat{H}$, которые соответствуют собственным значениям энергии E_m. Тогда получим

$$\begin{aligned}\Psi_{\text{Ш}}(\vec{x},t) &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(-\frac{i}{\hbar}\widehat{H}t\right)^n\sum_m a_m\varphi_m(\vec{x}) = \\ &= \sum_m\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(-\frac{i}{\hbar}E_mt\right)^n a_m\varphi_m(\vec{x}) = \sum_m a_m\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}E_mt\right\}\varphi_m(\vec{x}).\end{aligned} \tag{54}$$

Ввиду того, что в представлении Шредингера операторы $\widehat{F}(\hat{\vec{x}},\hat{\vec{p}})$ не зависят от времени, то производная по времени определяется через коммутатор

$$\frac{d\widehat{F}(\hat{\vec{x}},\hat{\vec{p}})}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left[\widehat{H},\widehat{F}(\hat{\vec{x}},\hat{\vec{p}})\right]. \tag{55}$$

Вывод этой формулы уже давался в курсе Атомной физики.

2.2 Представление Гайзенберга

В представлении Гайзенберга зависимость от времени переносится операторами физически измеримых величин, в то время как волновая функция не зависит от времени, а только от координаты. Очевидно, что волновая функция в представлении Гайзенберга $\Psi_{\Gamma}(\vec{x})$ связана с волновой функцией в представлении Шредингера $\Psi_{\text{Ш}}(\vec{x},t)$ посредством оператора $\widehat{S}^{-1}(t)$ обратному к тому, который использовался в (49):

$$\Psi_{\Gamma}(\vec{x}) = \widehat{S}^{-1}(t)\Psi_{\text{Ш}}(\vec{x},t). \tag{56}$$

Тогда, в соответствии с общими правилами операторы $\widehat{F}_{\Gamma}$ и $\widehat{F}_{\text{Ш}}$, заданные в представлениях Гайзенберга и Шредингера, соответственно, связаны согласно

$$\widehat{F}_{\Gamma} = \widehat{S}^{-1}(t)\widehat{F}_{\text{Ш}}\widehat{S}(t). \tag{57}$$

При этом оба представления совпадают в момент времени $t = 0$. Это означает, что формулу (57) можно рассматривать как формулу для эволюции оператора в представлении Гайзенберга

$$\widehat{F}(t+\Delta t) = \widehat{S}^{-1}(\Delta t)\widehat{F}(t)\widehat{S}(\Delta t), \tag{58}$$

где оба оператора относятся к представлению Гайзенберга и потому индекс представления у них опущен. Подставим в (58) явный вид оператора эволюции (53) и рассмотрим изменение оператора за бесконечно малый промежуток времени

$$\widehat{F}(t+\Delta t) = \widehat{F}(t) + \frac{i}{\hbar}\left[\widehat{H},\widehat{F}(t)\right], \tag{59}$$

откуда сразу следует, что

$$\frac{d\widehat{F}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left[\widehat{H},\widehat{F}(t)\right]. \tag{60}$$

Следовательно все операторы, коммутирующие с оператором Гамильтона $\widehat{H}$, не меняются со временем. Кроме того, так как в момент времени $t = 0$ операторы в представлении Гайзенберга и Шредингера совпадают, то операторы, коммутирующие с гамильтонианом не меняются при переходе от одного из этих представлений к другому. В частности, это утверждение относится и к самому гамильтониану.

2.3 Представление взаимодействия

В случае взаимодействующих систем удобно пользоваться представлением взаимодействия. Разобьем гамильтониан на две части

$$\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{V}, \tag{61}$$

где $\widehat{H}_0$ — оператор Гамильтона невзаимодействующих частей квантовой системы, а $\widehat{V}$ — оператор их взаимодействия. В этом представлении волновая функция $\Psi_{\text{вз.}}(\vec{x},t)$ получается из волновой функции в представлении Шредингера с помощью следующего унитарного преобразования

$$\Psi_{\text{вз.}}(\vec{x},t) = \hat{U}(t)\Psi_{\text{Ш}}(\vec{x},t), \tag{62}$$

$$\widehat{U}(t) = \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\widehat{H}_0 t\right\}. \tag{63}$$

Определим уравнение для функции $\Psi_{\text{вз.}}(\vec{x},t)$. Подставляя в уравнение Шредингера волновую функцию

$$\Psi_{\text{Ш}}(\vec{x},t) = \widehat{U}^{-1}(t)\Psi_{\text{вз.}}(\vec{x},t) \tag{64}$$

получим

$$i\hbar\frac{\partial\widehat{U}^{-1}(t)}{\partial t}\Psi_{\text{вз.}}(\vec{x},t) + i\hbar\widehat{U}^{-1}\frac{\partial\Psi_{\text{вз.}}(\vec{x},t)}{\partial t} = \widehat{H}_0\widehat{U}^{-1}(t)\Psi_{\text{вз.}}(\vec{x},t) + \widehat{V}\widehat{U}^{-1}(t)\Psi_{\text{вз.}}(\vec{x},t). \tag{65}$$

На основании (62) заключаем, что

$$i\hbar\frac{\partial\widehat{U}^{-1}(t)}{\partial t} = \widehat{H}_0\widehat{U}^{-1}(t). \tag{66}$$

Следовательно (65) сводится к

$$i\hbar\frac{\partial\Psi_{\text{вз.}}(\vec{x},t)}{\partial t} = \widehat{U}(t)\widehat{V}\widehat{U}^{-1}(t)\Psi_{\text{вз.}}(\vec{x},t). \tag{67}$$

В соответствии с общим принципом величина $\widehat{U}(t)\widehat{F}\widehat{U}^{-1}(t)$ представляет собой оператор $\widehat{F}$ в представлении взаимодействия. Следовательно,

$$i\hbar\frac{\partial\Psi_{\text{вз.}}(\vec{x},t)}{\partial t} = \widehat{V}_{\text{вз.}}\Psi_{\text{вз.}}(\vec{x},t). \tag{68}$$

Это уравнение похоже на уравнение Шредингера, в котором гамильтониан заменен на оператор взаимодействия в представлении взаимодействия.

Дифференциальное уравнение, описывающее развитие оператора со временем в представлении взаимодействия, имеет вид:

$$\frac{d\widehat{F}_{\text{вз.}}}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left[\widehat{H}_0, \widehat{F}_{\text{вз.}}\right]. \tag{69}$$

Задача 1.

Найти матрицу вращения на угол φ вокруг осей z и x.

Решение

Рассмотрим сначала вращение вокруг оси z. В этом случае вектор составленный из матриц Паули $\vec{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ преобразуется по закону преобразования вектора

$$\begin{aligned} \sigma_1' &= \cos\varphi\sigma_1 - \sin\varphi\sigma_2 \\ \sigma_2' &= \sin\varphi\sigma_1 + \cos\varphi\sigma_2 \\ \sigma_3' &= \sigma_3 \end{aligned} \tag{70}$$

С другой стороны это преобразование осуществляется с помощью матрицы (42)

$$\vec{\sigma}' = \mathcal{U}_3 \ \vec{\sigma} \ \mathcal{U}_3^{\dagger}. \tag{71}$$

Используя свойства матриц Паули сразу заключаем, что для выполнения (70) матрица $\mathcal{U}$ должна иметь следующую структуру

$$\mathcal{U}_3 = a + ib\sigma_3, \quad \text{причем} \quad a^2 + b^2 = 1. \tag{72}$$

Тогда подставляя (72) в (71) и сравнивая с (70) получим

$$a^2 - b^2 = \cos\varphi, \quad 2ab = \sin\varphi, \tag{73}$$

откуда

$$a = \cos\frac{\varphi}{2}, \quad b = \sin\frac{\varphi}{2} \tag{74}$$

или

$$\mathcal{U}_3(\varphi) = \begin{pmatrix} e^{\frac{i}{2}\varphi} & 0 \\ 0 & e^{-\frac{i}{2}\varphi} \end{pmatrix} = \exp\left\{\frac{i}{2}\varphi\sigma_3\right\}. \tag{75}$$

Для того, чтобы получить закон вращения вокруг оси x следует повторить все эти рассуждения заменяя σ_3 на σ_1. В результате получим

$$\mathcal{U}_1(\varphi) = \exp\left\{\frac{i}{2}\varphi\sigma_1\right\}. \tag{76}$$

Задача 2.

Получать формулу (47) рассматривая последовательно три вращения: вокруг оси z, затем вокруг оси x и опять оси z.

Решение

Такое преобразование есть

$$\mathcal{U}(\varphi, \theta, \psi) = \mathcal{U}_3(\psi)\mathcal{U}_1(\theta)\mathcal{U}_3(\varphi) = (\cos\psi + i\sigma_3\sin\psi)(\cos\theta + i\sigma_1\sin\theta)(\cos\varphi + i\sigma_3\sin\varphi) \tag{77}$$

Подставляя сюда явный вид матриц Паули и вычисляя произведение полученых матриц получим (47).