

Федеральное агентство по образованию

И.В. Копытин, А.С. Корнев

Задачи по квантовой механике

Учебное пособие для вузов
Часть 1

2-е издание

Воронеж 2007

Утверждено Научно-методическим советом физического факультета
17 октября 2006 г. (протокол № 10)

Курс лекций подготовлен на кафедре теоретической физики
физического факультета
Воронежского государственного университета.

Рекомендовано Учебно-методическим объединением по классическому
университетскому образованию в качестве учебного пособия

Рекомендуется для студентов 3, 4 курсов д/о и 4 курса в/о

Для специальностей: 010700 (010400) — Физика, 010801 (013800) — Ра-
диофизика и электроника, 010803 (014100) — Микроэлектроника и по-
лупроводниковые приборы

Оглавление

Введение	4
Глава 1. Квантовые состояния. Волновые функции	5
Глава 2. Физические величины. Операторы	13
2.1. Понятие оператора	13
2.2. Алгебра операторов	14
2.3. Операторы различных физических величин	20
2.4. Эрмитово сопряжение операторов	28
Глава 3. Измеримость физических величин	34
3.1. Средние значения физических величин	34
3.2. Определенные значения физических величин	37
3.3. Совместная измеримость физических величин. Соотношение неопределенностей	43
Глава 4. Гамильтониан	46
4.1. Временное уравнение Шредингера	46
4.2. Плотность потока вероятности	48
4.3. Стационарные состояния	48
Глава 5. Интегралы движения в квантовой механике	55
5.1. Дифференцирование операторов по времени	55
5.2. Интегралы движения	57
Приложение	61
А. Интеграл вероятности	61
Б. Гамма-функция и связанные с ней интегралы	63
В. Символ Леви–Чивита	64
Г. Дельта-функция Дирака	65

Введение

Настоящее пособие предназначается для практических занятий и самостоятельной работы по курсу “Квантовая теория” для студентов всех специальностей физического факультета.

Пособие содержит пять глав, охватывающих следующие вопросы курса: квантовые состояния и их волновые функции (гл. 1), физические величины и их операторы (гл. 2), измеримость физических величин (гл. 3), гамильтониан (гл. 4) и интегралы движения (гл. 5).

В курсе механики была построена теория количественного описания механического движения, или перемещения тела в пространстве. Эта теория (так называемая *классическая механика*) применима, однако, не всегда. Если механическое действие физической системы по порядку величины совпадает с постоянной Планка \hbar , то движение принимает иные качественные формы: исчезает само понятие траектории, появляются принципиальные ограничения в точности измерений физических величин, в ряде случаев возникает дискретность значений некоторых физических величин, волновой характер движения частиц и т.д. Размеры этих систем по обыденным меркам крайне малы. Даже для такой относительно большой частицы, как атом, они порядка 10^{-10} м. Принято говорить, что данные системы образуют *микромир*. В свою очередь, системы, подчиняющиеся классической механике, образуют *макромир*. Механика микромира традиционно называется *квантовой механикой*, в отличие от классической механики, хотя такое наименование весьма условно. К объектам микромира относятся элементарные частицы (электрон, протон, нейтрон и др.), ядра, атомы, молекулы и кристаллы.

Количественная теория микромира нуждается в специфическом понятийном и математическом аппарате. Почти каждое понятие изображается при помощи некоторой математической конструкции и при этом используются многие изученные прежде разделы математики.

Приведем значения (в единицах СИ) некоторых фундаментальных констант, использованные в настоящем пособии:

$$\begin{aligned} \text{постоянная Планка } \hbar &= 1.055 \cdot 10^{-34} \text{ Дж}\cdot\text{с}; \\ \text{масса электрона } m_e &= 9.11 \cdot 10^{-31} \text{ кг}. \end{aligned}$$

Глава 1.

Квантовые состояния. Волновые функции

Одним из фундаментальных понятий квантовой теории является квантовое состояние системы (микрочастицы). В данный момент мы пока не можем сказать ничего более определенного о квантовых состояниях. В дальнейшем будем неоднократно уточнять данное понятие. Здесь лишь обратим внимание на его математический аспект: квантовое состояние изображается с помощью волновой функции — некоторой комплексной функции координат и времени¹ $\Psi(\xi, t)$ (ξ — совокупность всех обобщенных координат; для частицы в трехмерном Евклидовом пространстве $\xi \equiv \mathbf{r}$).

Волновая функция сама по себе не имеет физического смысла, т.е. является ненаблюдаемой величиной. С ненаблюдаемыми величинами читатель сталкивался и ранее. В классической механике, например, координата не будет иметь смысла до тех пор, пока не указан выбор начала координат. То же можно сказать и о времени, и о потенциальной энергии. В электродинамике ненаблюдаемыми величинами являются потенциалы электромагнитного поля.

Для описания *свободного движения частицы* с массой m и импульсом \mathbf{p} (вот первый пример квантового состояния!) Л. де Бройль предложил использовать плоскую волну:

$$\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = C \exp \left[i \frac{\mathbf{p}\mathbf{r} - Et}{\hbar} \right], \quad (1.1)$$

где $E = \mathbf{p}^2/2m$ — энергия частицы, C — некоторая ненулевая константа. В настоящее время функцию (1.1) принято называть *волной де Бройля*. Предлагаем читателю самостоятельно оценить ее длину для электрона в атоме, записав (1.1) через волновой вектор \mathbf{k} и частоту ω .

¹В качестве аргумента (динамической переменной) у волновой функции можно выбрать не только координату, но и другие физические величины: импульс, энергию и т.д. Зависимость от времени также можно выбрать по-разному в одной и той же физической ситуации. Данные вопросы исследуются в *теории представлений* — специальном разделе квантовой теории. В настоящем пособии мы не касаемся этих аспектов и всюду предполагаем волновую функцию зависящей от координаты, т.е. используем так называемое *координатное представление* волновой функции.

Постоянная Планка \hbar — новая фундаментальная физическая константа, специфическая для микромира. В частности, она является коэффициентом пропорциональности между энергией и частотой в (1.1). Соотношения квантовой теории дают классически непротиворечивые результаты при формальном переходе к пределу $\hbar \rightarrow 0$.

В общем случае волновая функция находится из решения соответствующего линейного однородного дифференциального уравнения, поэтому она определяется с точностью до произвольного постоянного множителя — *нормировочной константы*. Если волновые функции отличаются только постоянным множителем, то соответствующие им состояния *физически эквивалентны*.

М. Борн предложил следующую физическую интерпретацию волновой функции: квадрат ее модуля пропорционален плотности вероятности обнаружения частицы в точке с координатой ξ :

$$\boxed{|\Psi(\xi, t)|^2 \sim w(\xi, t).} \quad (1.2)$$

В состояниях *финитного движения* частица локализована в конечной области пространства, так что надлежащим выбором нормировочной константы соотношение (1.2) можно превратить в строгое равенство:

$$\boxed{|\Psi(\xi, t)|^2 = w(\xi, t).} \quad (1.3)$$

Согласно теории вероятностей, *условие нормировки* для волновой функции финитного движения можно сформулировать следующим образом:

$$\boxed{\int |\Psi(\xi, t)|^2 d\xi = 1,} \quad (1.4)$$

где интегрирование ведется по *всему пространству*.

Интеграл в (1.4) конечен, только если функция $|\Psi(\xi, t)|^2$ на больших расстояниях спадает достаточно быстро. В состояниях *инфинитного движения*, в частности, описываемых волной де Бройля, этот интеграл расходится, так что условие нормировки необходимо сформулировать иным образом. Там, где это не оговорено отдельно, мы будем рассматривать состояния финитного движения.

Из условия (1.4) видно, что даже нормированная волновая функция определяется не однозначно, а с точностью до произвольного постоянного *фазового множителя*: $e^{i\delta}$. В настоящем пособии данный множитель всюду выбирается так, чтобы по возможности упростить вид волновой функции.

У волновой функции *нет универсальной размерности*. Ее размерность определяется только элементом интегрирования:

$$\boxed{[\Psi(\xi, t)] = [d\xi]^{-1/2}}. \quad (1.5)$$

Легко видеть, что при выполнении (1.5) подынтегральное выражение в (1.4) будет *безразмерным*.

В качестве волновой функции может выступать не любая математическая функция, а удовлетворяющая *стандартным условиям: конечная, однозначная и непрерывная*. Первые два условия непосредственно следуют из ее вероятностной интерпретации, требование непрерывности мы поясним ниже.

Вероятностная интерпретация волновой функции отличается от вероятностной интерпретации законов классической статистической механики. Вероятностный подход в статистической механике обусловлен большим числом задействованных частиц ($\sim 10^{22}$). В микромире *даже в случае единственной частицы ее движение носит вероятностный характер*.

Ряд философов в целях популяризации квантовой теории иногда интерпретируют волновую функцию как “волну вероятности” и широко используют понятие “корпускулярно-волнового дуализма”. Следует предостеречь читателя от слишком примитивного толкования подобных определений. Реально объекты микромира являются новой для понимания формой материи, которая в некоторых *предельных* случаях может проявлять свойства как частиц, так и волн.

Укажем на существенное отличие квантового движения от распространения истинной волны (например, электромагнитной). Если имеются N источников электромагнитных волн, то результирующая волна будет по-прежнему зависеть *только от одной пространственной переменной*. В случае системы N микрочастиц *ее полная волновая функция будет зависеть от N пространственных переменных: $\Psi(\xi_1, \dots, \xi_N; t)$* . Все предыдущие выводы, а также формулы (1.1)–(1.5) легко обобщаются на этот случай. Теперь, однако, в качестве элемента интегрирования следует взять $d\xi = d\xi_1 \dots d\xi_N$ — элемент так называемого *конфигурационного пространства*.

В заключение сформулируем фундаментальный принцип квантовой теории — принцип суперпозиции, представляющий собой результат обобщения экспериментальных испытаний:

Если квантовая система может находиться в состояниях с волно-

выми функциями Ψ_1 и Ψ_2 , то она может находиться и в состоянии

$$\Psi = \alpha_1 \Psi_1 + \alpha_2 \Psi_2, \quad (1.6)$$

где α_1 и α_2 — произвольные комплексные константы.

Линейная комбинация волновых функций в правой части (1.6) задает суперпозицию состояний. Другими словами, суперпозиция состояний квантовой системы тоже будет состоянием этой системы.

Разберем несколько примеров, в которых будут вычислены нормировочные константы наиболее важных волновых функций. Полученные результаты мы будем неоднократно использовать в дальнейшем при изучении курса квантовой теории.

Пример 1.1. Частица приведена в состояние с волновой функцией

$$\Psi(x) = \begin{cases} A \sin \frac{\pi x}{a} & \text{при } 0 \leq x \leq a; \\ 0 & \text{при } x < 0 \text{ или } x > a. \end{cases}$$

Вычислить нормировочную константу A .

Решение. Частица локализована в конечной области пространства, поэтому в качестве условия нормировки следует взять (1.4), положив $d\xi = dx$. Интегрирование удобно провести, предварительно упростив подынтегральную функцию по формуле синуса половинного угла:

$$1 = |A|^2 \int_0^a \sin^2 \frac{\pi x}{a} dx = \frac{1}{2} |A|^2 \int_0^a \left[1 - \sin \frac{2\pi x}{a} \right] dx = \frac{a}{2} |A|^2. \quad (1.7)$$

Интеграл от второго слагаемого в (1.7) обращается в нуль из-за интегрирования гармонической функции по ее периоду. Таким образом, с точностью до фазового множителя $A = \sqrt{2/a}$, а нормированная функция

$$\boxed{\Psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi x}{a}.} \quad (1.8)$$

Рекомендуем самостоятельно проанализировать ее размерность. □

Пример 1.2. Частица приведена в состояние с волновой функцией

$$\Psi(x) = A \exp \left[-\frac{x^2}{2x_0^2} \right],$$

где $x_0 > 0$ — константа с размерностью длины. Вычислить нормировочную константу A .

Решение. Интеграл

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[-\frac{x^2}{x_0^2}\right] dx \quad (1.9)$$

с помощью замены переменных $x/x_0 = t$ сводится к интегралу Пуассона (см. (А.1)), так что $|A|^2 = 1/(x_0\sqrt{\pi})$. Запишем теперь нормированную функцию:

$$\boxed{\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}} \exp\left[-\frac{x^2}{2x_0^2}\right]}. \quad (1.10)$$

Рекомендуем самостоятельно проверить ее размерность. \square

Пример 1.3. Волновой пакет задается функцией

$$\Psi(x) = A \exp\left[-\frac{x^2}{2x_0^2} + ik_0x\right],$$

где $x_0 > 0$ — константа с размерностью длины, определяющая ширину пакета, k_0 — константа с размерностью волнового числа. Вычислить нормировочную константу A .

Решение. При возведении $|\Psi(x)|$ в квадрат слагаемое ik_0x под знаком экспоненты исчезает и задача сводится к вычислению интеграла (1.9) из предыдущего примера. \square

Мы рассмотрели вычисление нормировочных констант для некоторых функций, заданных в декартовых координатах. Теперь рассмотрим другие системы координат.

Пример 1.4. Волновая функция, зависящая от полярного угла φ , задается выражением

$$\Psi(\varphi) = Ae^{i\alpha\varphi}, \quad (1.11)$$

где α — некоторая константа. Используя стандартные условия, определить возможные значения α и нормировать волновую функцию.

Решение. Полярный угол φ задает некоторое направление на плоскости xOy относительно начала координат. При изменении этого угла на 2π направление остается прежним, так что для выполнения условия однозначности функция полярного угла $\Psi(\varphi)$ должна быть периодичной с периодом 2π :

$$\Psi(\varphi) = \Psi(\varphi + 2\pi). \quad (1.12)$$

Из явного вида функции $\Psi(\varphi)$ (1.11) и условия периодичности (1.12) получаем к условие для определения константы α :

$$e^{2\pi i\alpha} = 1,$$

откуда следует, что для функции вида (1.11) константа α должна принимать только целые значения: $\alpha \equiv m_l = 0, \pm 1, \dots$

Полярный угол φ может принимать значения из интервала $0 \leq \varphi < 2\pi$; из (1.11) следует, что $|\Psi(\varphi)|^2 = |A|^2$, поэтому

$$\int_0^{2\pi} |\Psi(\varphi)|^2 d\varphi = 2\pi|A|^2 = 1.$$

Выпишем окончательный вид нормированной функции (1.11):

$$\boxed{\Psi_m(\varphi) = \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}, \quad m = 0, \pm 1, \dots} \quad (1.13)$$

□

Пример 1.5. Нормировать волновые функции

$$\Psi_1(\theta, \varphi) = A_1; \quad \Psi_2(\theta, \varphi) = A_2 \cos \theta$$

на единичной сфере.

Решение. Вначале напомним вид элемента телесного угла в сферических координатах:

$$d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi, \quad 0 \leq \theta \leq \pi; \quad 0 \leq \varphi < 2\pi. \quad (1.14)$$

Константу A_1 получаем элементарным интегрированием:

$$\int |\Psi_1(\theta, \varphi)|^2 d\Omega = |A_1|^2 \int d\Omega = 4\pi|A_1|^2 = 1, \quad \text{откуда} \quad A_1 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}.$$

При вычислении A_2 сделаем замену переменных $\cos \theta = t$ (при этом $dt = -\sin \theta d\theta$):

$$\int |\Psi_2(\theta, \varphi)|^2 d\Omega = |A_2|^2 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-1}^{+1} t^2 dt = \frac{4\pi}{3} |A_2|^2 = 1.$$

В результате $A_2 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}$.

□

Пример 1.6. Нормировать волновую функцию

$$\Psi(\mathbf{r}) = A \exp \left[-\frac{Zr}{a_0} \right],$$

заданную во всем пространстве в сферических координатах. Здесь $a_0 > 0$ — константа с размерностью длины, $Z > 0$ — безразмерная константа.

Решение. Элемент объема в сферических координатах

$$d^3r = r^2 dr d\Omega, \quad (1.15)$$

где $d\Omega$ определяется выражением (1.14).

Радиальный интеграл заменой $t = 2Zr/a_0$ приводится к виду (Б.11):

$$\begin{aligned} \int |\Psi(\mathbf{r})|^2 d^3r &= |A|^2 \int_0^\infty r^2 \exp \left[-\frac{2Zr}{a_0} \right] dr \underbrace{\int d\Omega}_{4\pi} = \\ &= 4\pi |A|^2 \frac{a_0^3}{8Z^3} \underbrace{\int_0^\infty t^2 e^{-t} dt}_2 = \frac{\pi a_0^3}{Z^3} |A|^2 = 1. \end{aligned}$$

Отсюда $A = \sqrt{Z^3/\pi a_0^3}$. Приведем окончательное выражение для нормированной волновой функции:

$$\boxed{\Psi(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi a_0^3}} \exp \left[-\frac{Zr}{a_0} \right].} \quad (1.16)$$

Обращаем внимание на ее размерность. □

Задачи для самостоятельного решения

1. Волновая функция задается на всей вещественной оси выражением

$$\Psi(x) = Ax \exp \left[-\frac{x^2}{2x_0^2} \right],$$

где x_0 — константа с размерностью длины. Вычислить нормировочную константу A .

(*Ответ:* $A = \sqrt{2/x_0^3\sqrt{\pi}}$. *Указание:* воспользоваться (А.3).)

2. Волновая функция задается на всей вещественной оси выражением

$$\Psi(x) = A \left[1 + \frac{x^2}{x_0^2} \right]^{-1},$$

где x_0 — константа с размерностью длины. Вычислить нормировочную константу A .

(*Ответ:* $A = \sqrt{2/\pi x_0}$.)

3. Волновая функция задается на положительной полуоси выражением

$$\Psi(x) = Ax \exp \left[-\frac{x}{x_0} \right],$$

где x_0 — константа с размерностью длины. Вычислить нормировочную константу A .

(*Ответ:* $A = 2/\sqrt{x_0^3}$.)

4. Волновые функции задаются на единичной сфере в сферических координатах выражениями

$$\Psi_{\pm}(\theta, \varphi) = A_{\pm} \sin \theta e^{\pm i\varphi}.$$

Вычислить нормировочные константы A_{\pm} .

(*Ответ:* $A_{\pm} = \sqrt{3/8\pi}$.)

5. Волновая функция задается во всем пространстве в сферических координатах выражением

$$\Psi(\mathbf{r}) = A \exp \left[-\frac{r^2}{2r_0^2} \right],$$

где r_0 — константа с размерностью длины. Вычислить нормировочную константу A .

(*Ответ:* $A = (r_0\sqrt{\pi})^{-3/2}$.)

Глава 2.

Физические величины. Операторы

2.1. Понятие оператора

В квантовой механике для изображения физических величин служат *операторы*. С математической точки зрения оператор представляет собой некий способ перехода от одной волновой функции к другой. Для обозначения оператора используется буква со шляпкой, например, \hat{A} . Запись $\hat{A}\Psi(\xi)$ означает *действие оператора \hat{A} на функцию $\Psi(\xi)$* , которое в общем случае не сводится к обычному умножению. *Результатом действия оператора на функцию будет функция.*

Пример 2.1. *Подействовать на функцию $\Psi(\xi) = \sin \xi$ операторами:*

$$\hat{A}_1 = \xi; \quad \hat{A}_2 = \frac{d}{d\xi}.$$

Решение. В первом случае действие оператора сводится к обычному умножению функции $\Psi(\xi)$ на координату ξ :

$$\hat{A}_1\Psi(\xi) = \xi \sin \xi.$$

Во втором случае действие оператора будет эквивалентно взятию производной функции $\Psi(\xi)$:

$$\hat{A}_2\Psi(\xi) = \frac{d}{d\xi} \sin \xi = \cos \xi.$$

□

Оператор определяется на некотором множестве, или *классе*, функций. В квантовой теории — это функции, удовлетворяющие стандартным условиям (конечность, однозначность, непрерывность). *Определить оператор — значит задать правило его действия на произвольную функцию данного класса.*

2.2. Алгебра операторов

Определим важнейшие правила алгебраических действий над операторами.

1°. **Операторное равенство** $\hat{F} = \hat{G}$. Операторы \hat{F} и \hat{G} равны друг другу, если при их действии на одну и ту же произвольную функцию¹ $\Psi(\xi)$ получаются одинаковые функции.

$$\hat{F}\Psi(x) = \hat{G}\Psi(\xi).$$

В качестве предостережения рассмотрим действие операторов $\hat{F}_1 = -\xi$ и $\hat{F}_2 = \frac{d}{d\xi}$ на функцию $e^{-\xi^2/2}$. Совпадение результатов не означает равенства $\frac{d}{d\xi} = -\xi$, поскольку оно выполняется не для произвольной функции. Проверьте это самостоятельно для функции $\xi e^{-\xi^2/2}$.

2°. **Нулевой оператор** $\hat{0}$. Оператор будет нулевым, если при его действии на произвольную функцию $\Psi(\xi)$ результатом будет тождественный нуль:

$$\hat{0}\Psi(\xi) \stackrel{\text{def}}{=} 0.$$

Шляпка над нулевым оператором, как правило, не ставится. Вместо этого пишется число нуль. Здесь и далее символ “def” подчеркивает, что приведенное равенство является определением.

3°. **Единичный оператор** $\hat{1}$. Оператор будет единичным, если его действие на произвольную функцию $\Psi(\xi)$ не изменяет последнюю:

$$\hat{1}\Psi(\xi) \stackrel{\text{def}}{=} \Psi(\xi).$$

Шляпка над единичным оператором тоже, как правило, не ставится. Вместо этого пишется число единица.

4°. **Умножение оператора на константу:** $\alpha\hat{F}$. При умножении оператора на константу получается новый оператор, действие которого на произвольную функцию $\Psi(\xi)$ задается правилом:

$$(\alpha\hat{F})\Psi(\xi) \stackrel{\text{def}}{=} \alpha[\hat{F}\Psi(\xi)].$$

5°. **Сумма операторов:** $\hat{F} + \hat{G}$. Суммой операторов \hat{F} и \hat{G} называется оператор, действие которого на произвольную функцию Ψ заключается в независимом действии на нее каждого оператора по отдельности с последующим сложением результатов:

$$(\hat{F} + \hat{G})\Psi \stackrel{\text{def}}{=} (\hat{F}\Psi) + (\hat{G}\Psi).$$

¹из данного класса — здесь и далее

Поскольку сумма функций не зависит от порядка следования слагаемых, *сумма операторов тоже не зависит от порядка следования слагаемых*. Иными словами, *сумма операторов всегда коммутативна* (т.е. всегда подчиняется “переместительному закону”):

$$\boxed{\hat{F} + \hat{G} = \hat{G} + \hat{F}.} \quad (2.1)$$

6°. Произведение операторов: $\hat{F}\hat{G}$. Произведением операторов \hat{F} и \hat{G} называется оператор, действие которого на *произвольную* функцию Ψ заключается в последовательном действии на нее сначала оператора \hat{G} , а затем \hat{F} :

$$(\hat{F}\hat{G})\Psi \stackrel{\text{def}}{=} \hat{F}(\hat{G}\Psi).$$

В отличие от суммы, произведение операторов в общем случае *зависит от порядка следования сомножителей*:

$$\hat{F}\hat{G} \neq \hat{G}\hat{F},$$

т.е. *произведение операторов некоммутативно* (т.е. не подчиняется “переместительному закону”). Если все же имеет место равенство между произведениями $\hat{F}\hat{G}$ и $\hat{G}\hat{F}$, то операторы \hat{F} и \hat{G} называют *коммутирующими*.

В квантовой механике оказывается удобным ввести специальную конструкцию, построенную из произведений операторов, — *коммутатор*:

$$\boxed{[\hat{F}, \hat{G}] = \hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F}.} \quad (2.2)$$

Очевидно, что в случае коммутирующих операторов он становится нулевым оператором.

Также вводится *антикоммутатор*:

$$\boxed{\{\hat{F}, \hat{G}\} = \hat{F}\hat{G} + \hat{G}\hat{F}.} \quad (2.3)$$

Для антикоммутатора иногда используется обозначение $[\hat{F}, \hat{G}]_{\pm}$.

7°. Обратный оператор: \hat{F}^{-1} . Оператором, обратным к \hat{F} , будем называть такой оператор \hat{F}^{-1} , для которого выполняется соотношение:

$$\hat{F}^{-1}\hat{F} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{F}\hat{F}^{-1} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{1}.$$

В соответствии с некоммутативностью произведения укажем на некорректность записей типа $\frac{\hat{F}}{\hat{G}}$. Необходимо использовать обратный оператор: $\hat{F}\hat{G}^{-1}$ либо $\hat{G}^{-1}\hat{F}$ (при этом могут получиться различные результаты).

8°. **Целая положительная степень оператора:** \hat{F}^n . Это n -кратное перемножение оператора \hat{F} на себя:

$$\hat{F}^n \stackrel{\text{def}}{=} \underbrace{\hat{F} \cdot \dots \cdot \hat{F}}_{n \text{ раз}}.$$

9°. **Оператор под знаком функции:** $f(\hat{F})$. Если функция $f(z)$ допускает разложение в ряд Тейлора в окрестности нуля

$$f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n z^n,$$

то оператор \hat{F} под ее знаком определяется следующим образом:

$$f(\hat{F}) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{n=0}^{\infty} c_n z^n \Big|_{z=\hat{F}}.$$

Таким образом, для внесения оператора под знак функции необходимо знание коэффициентов тейлоровского разложения этой функции.

Определения 1°–9° широко используются при выводе различных операторных тождеств. Предлагаем читателю самостоятельно убедиться в справедливости тождеств:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}]; \quad (2.4)$$

$$[\hat{A}, \hat{A}] = 0. \quad (2.5)$$

Пример 2.2. Вывести “сочетательный закон” для операторов:

$$\hat{A}\hat{B}\hat{C} = \hat{A}(\hat{B}\hat{C}) = (\hat{A}\hat{B})\hat{C}. \quad (2.6)$$

Решение. Закон (2.6) выводится элементарно из определения произведения операторов 6° и операторного равенства 1°. \square

В квантовой механике большая роль отводится так называемым линейным операторам, которые удовлетворяют условию

$$\boxed{\hat{F}(\alpha\Psi + \beta\Phi) \stackrel{\text{def}}{=} \alpha\hat{F}\Psi + \beta\hat{F}\Phi} \quad (2.7)$$

для произвольных функций Φ , Ψ и произвольных комплексных констант α , β .

Для выполнения принципа суперпозиции состояний операторы физических величин обязаны быть линейными. В дальнейшем всюду, если не оговорено особо, операторы предполагаются линейными.

Рекомендуем самостоятельно доказать следующие свойства билинейности коммутатора:

$$\begin{aligned} [\hat{A}, \beta\hat{B} + \gamma\hat{C}] &= \beta[\hat{A}, \hat{B}] + \gamma[\hat{A}, \hat{C}], \\ [\alpha\hat{A} + \beta\hat{B}, \hat{C}] &= \alpha[\hat{A}, \hat{C}] + \beta[\hat{B}, \hat{C}]. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Пример 2.3. Вывести “распределительный закон” для операторов:

$$\begin{aligned} \hat{A}(\hat{B} + \hat{C}) &= \hat{A}\hat{B} + \hat{A}\hat{C}, \\ (\hat{A} + \hat{B})\hat{C} &= \hat{A}\hat{C} + \hat{B}\hat{C}. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Решение. Для произвольной функции Ψ выполняем последовательность преобразований:

$$\begin{aligned} \hat{A}(\hat{B} + \hat{C})\Psi &\stackrel{(6^\circ)}{=} \hat{A}[(\hat{B} + \hat{C})\Psi] \stackrel{(5^\circ)}{=} \hat{A}(\hat{B}\Psi + \hat{C}\Psi) \stackrel{(2.7)}{=} \\ &= \hat{A}(\hat{B}\Psi) + \hat{A}(\hat{C}\Psi) \stackrel{(6^\circ)}{=} (\hat{A}\hat{B})\Psi + (\hat{A}\hat{C})\Psi \stackrel{(5^\circ)}{=} (\hat{A}\hat{B} + \hat{A}\hat{C})\Psi. \end{aligned}$$

В соответствии с определением 1° приходим к первому операторному равенству (2.9). Аналогично выводится и второе тождество (2.9). \square

Тождества (2.6) и (2.9) показывают, что при алгебраических преобразованиях с линейными операторами можно поступать как с обычными числами. *Недопустимо лишь произвольно изменять порядок сомножителей в произведениях без учета правил коммутации.* В частности, за скобки можно выносить либо только крайний левый, либо только крайний правый операторы (см. (2.9)).

Если возникает необходимость изменения порядка сомножителей, то необходимо учитывать коммутационное соотношение между операторами. На основе (2.2) легко вывести следующее тождество:

$$\boxed{\hat{F}\hat{G} = \hat{G}\hat{F} + [\hat{F}, \hat{G}].} \quad (2.10)$$

Пример 2.4. Раскрыть скобки в произведениях операторов:

$$(\hat{F} - \hat{G})(\hat{F} + \hat{G}); \quad (\hat{F} + \hat{G})^2.$$

Решение. Преобразования осуществляем с использованием тождеств (2.1), (2.9):

$$\begin{aligned} (\hat{F} - \hat{G})(\hat{F} + \hat{G}) &= \hat{F}(\hat{F} + \hat{G}) - \hat{G}(\hat{F} + \hat{G}) = \\ &= \hat{F}^2 - \hat{G}^2 + \underbrace{\hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F}}_{[\hat{F}, \hat{G}]} = \hat{F}^2 - \hat{G}^2 + [\hat{F}, \hat{G}]; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (\hat{F} + \hat{G})^2 &= (\hat{F} + \hat{G})(\hat{F} + \hat{G}) = \hat{F}(\hat{F} + \hat{G}) + \hat{G}(\hat{F} + \hat{G}) = \\ &= \hat{F}^2 + \hat{G}^2 + \underbrace{\hat{F}\hat{G} + \hat{G}\hat{F}}_{\{\hat{F}, \hat{G}\}} \stackrel{(2.10)}{=} \hat{F}^2 + 2\hat{F}\hat{G} + \hat{G}^2 - [\hat{F}, \hat{G}]. \end{aligned}$$

Мы намеренно представили результаты в форме, наиболее близкой к соответствующим тождествам для обычных чисел. Отличие заключается в дополнительных слагаемых — коммутаторах. В случае обычных чисел эти коммутаторы тождественно обращаются в нуль. \square

Пример 2.5. Выразить оператор $(\hat{F}\hat{G})^{-1}$ через \hat{F}^{-1} и \hat{G}^{-1} .

Решение. Легко показать, что $\hat{F}\hat{1} = \hat{1}\hat{F} = \hat{F}$ (сделайте самостоятельно!). По определению обратного оператора $\hat{7}^\circ$,

$$(\hat{F}\hat{G})(\hat{F}\hat{G})^{-1} = \hat{1}. \quad (2.11)$$

Преобразуем левую часть (2.11) в соответствии с “сочетательным законом” (2.6) и домножим обе части (2.11) *слева* сначала на \hat{F}^{-1} , а затем на \hat{G}^{-1} . В результате получим тождество:

$$\boxed{(\hat{F}\hat{G})^{-1} = \hat{G}^{-1}\hat{F}^{-1}.} \quad (2.12)$$

Таким образом, *обращение произведения изменяет порядок следования сомножителей на противоположный*. Тождество (2.12) лишний раз демонстрирует отличие операторов от обычных чисел. Если же операторы коммутируют, мы приходим к традиционному правилу обращения произведения чисел. \square

Пример 2.6. Выразить коммутатор $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}]$ через коммутаторы $[\hat{A}, \hat{B}]$ и $[\hat{A}, \hat{C}]$.

Решение. Приведем вначале два вспомогательных тождества:

1) $\hat{F} + \hat{0} = \hat{F}$; 2) $\hat{F} - \hat{F} = \hat{0}$ (доказать самостоятельно!).

Дальнейшие выкладки мы осуществляем без подробных комментариев:

$$\begin{aligned} [\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] &\stackrel{(2.2)}{=} \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} = \hat{A}\hat{B}\hat{C} + \hat{0} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} = \\ &= \hat{A}\hat{B}\hat{C} + \underbrace{\hat{B}\hat{A}\hat{C} - \hat{B}\hat{A}\hat{C}}_{\hat{0}} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} \stackrel{(2.1)}{=} \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{B}\hat{A}\hat{C} + \hat{B}\hat{A}\hat{C} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} \stackrel{(2.9)}{=} \\ &= (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\hat{C} + \hat{B}(\hat{A}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}) = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]. \end{aligned}$$

Выпишем окончательный ответ:

$$\boxed{[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}].} \quad (2.13)$$

Полученное тождество чрезвычайно удобно при “упрощении” коммутаторов. \square

Задачи для самостоятельного решения

6. Доказать тождества:

$$[\hat{F}, \hat{G}] = -[\hat{G}, \hat{F}]; \quad \{\hat{F}, \hat{G}\} = \{\hat{G}, \hat{F}\}.$$

7. Доказать тождества (2.8).

8. Доказать тождество Якоби:

$$[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] = \hat{0}. \quad (2.14)$$

9*. Разложить оператор $(\hat{F} - \lambda\hat{G})^{-1}$ по степеням малого параметра λ .

(Ответ: $(\hat{F} - \lambda\hat{G})^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty} (\lambda\hat{F}^{-1}\hat{G})^n$.)

10*. Доказать тождество Бекера–Кэмпбела–Хаусдорфа:

$$e^{\hat{F}}\hat{G}e^{-\hat{F}} = \hat{G} + [\hat{F}, \hat{G}] + \frac{1}{2!} [\hat{F}, [\hat{F}, \hat{G}]] + \frac{1}{3!} [\hat{F}, [\hat{F}, [\hat{F}, \hat{G}]]] + \dots$$

11*. Для операторов, удовлетворяющих условиям $[\hat{F}, [\hat{F}, \hat{G}]] = 0$, $[\hat{G}, [\hat{F}, \hat{G}]] = 0$, доказать тождество Вейля:

$$e^{\hat{F}+\hat{G}} = e^{-\frac{1}{2}[\hat{F}, \hat{G}]} e^{\hat{F}} e^{\hat{G}}.$$

2.3. Операторы различных физических величин

Таблица 2.1. Операторы основных физических величин

№	Величина	Оператор	Примечание
1	координата \mathbf{r}	$\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}$	$\hat{\mathbf{r}}\Psi(\mathbf{r}) = \mathbf{r}\Psi(\mathbf{r})$
2	импульс \mathbf{p}	$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$	$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \sum_k \mathbf{e}_k \frac{\partial}{\partial x_k} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}$
3	орб. момент \mathbf{L}	$\hat{\mathbf{L}} = [\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}]$	
4	кин. энергия T	$\hat{T} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}$	$\hat{T}\Psi(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r})$
5	потенц. энергия V	$\hat{V} = V(\mathbf{r})$	$\hat{V}\Psi(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r})$
6	полная энергия E	$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$	\hat{H} — гамильтониан
7	четность P	\hat{I} — инверсия	$\hat{I}\Psi(\mathbf{r}) = \Psi(-\mathbf{r})$

В таблице 2.1 собраны операторы важнейших физических величин (здесь и далее m — масса частицы). Первые шесть из них используются как в классической, так и в квантовой механике. Четность же является чисто квантовой характеристикой микрообъектов. Предлагаем самостоятельно убедиться в линейности приведенных операторов.

В данном параграфе мы будем вычислять коммутаторы (т.е. находить их явный вид) операторов важнейших физических величин.

Вначале рассмотрим операторы координаты и импульса. Для удобства мы будем пользоваться декартовым базисом.

Пример 2.7. Вычислить коммутатор $[x, \hat{p}_x]$.

Решение. Согласно своему определению, коммутатор является оператором. Поэтому его явный вид можно найти, подействовав им на произвольную функцию. Из таблицы 2.1 возьмем явный вид оператора проекции импульса:

$$\boxed{\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}}. \quad (2.15)$$

В соответствии с (2.15) и определением произведения \hat{b}° , имеем:

$$x\hat{p}_x\Psi = x(\hat{p}_x\Psi) = -i\hbar x \frac{\partial\Psi}{\partial x};$$

$$\hat{p}_x x \Psi = \hat{p}_x (x \Psi) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (x \Psi) = -i\hbar \Psi - i\hbar x \frac{\partial \Psi}{\partial x}.$$

На основании 4° и 5° получаем:

$$[x, \hat{p}_x] \Psi = x \hat{p}_x \Psi - \hat{p}_x x \Psi = i\hbar \Psi. \quad (2.16)$$

Поскольку равенство (2.16) должно выполняться для произвольной функции Ψ , мы, согласно 1°, приходим к операторному равенству²:

$$\boxed{[x, \hat{p}_x] = i\hbar.} \quad (2.17)$$

Операторное тождество (2.17) является одним из основных соотношений квантовой теории.

Аналогичным образом можно показать, что

$$[x, \hat{p}_x] = [y, \hat{p}_y] = [z, \hat{p}_z] = i\hbar,$$

т.е. операторы декартовой координаты и одноименной проекции импульса не коммутируют. Пары этих операторов называют также канонически сопряженными. \square

Пример 2.8. Вычислить коммутаторы: 1) $[x, \hat{p}_y]$; 2) $[x, y]$; 3) $[\hat{p}_x, \hat{p}_y]$.

Решение.

1. Коммутатор $[x, \hat{p}_y]$ вычисляем по аналогии с предыдущим примером, однако, вследствие независимости переменных x и y ,

$$\hat{p}_y x \Psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} (x \Psi) = x \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \right) \Psi = x \hat{p}_y \Psi.$$

Таким образом, $[x, \hat{p}_y] = 0$ (в смысле нулевого оператора).

Данное утверждение можно обобщить: *разноименные декартовы координаты и проекции импульсов коммутируют.*

2. Оператор координаты является обычным числовым множителем. Значение произведения чисел не зависит от порядка следования сомножителей. Поэтому $[x, y] = 0$. Вообще, *все декартовы координаты коммутируют друг с другом.*

3. Произведение $\hat{p}_x \hat{p}_y$, в соответствии с определением 6°, с точностью до постоянного множителя является смешанной производной. Смешанные производные функций, удовлетворяющих стандартным условиям, не зависят от порядка дифференцирования. Поэтому

²Строго говоря, в правой части (2.17) следовало бы, в соответствии с 1°, поставить $i\hbar \hat{1}$, но, как правило, единичный оператор здесь не указывается.

$[\hat{p}_x, \hat{p}_y] = 0$. Как и в случае с координатами, все декартовы компоненты импульса коммутируют друг с другом. \square

Обобщим теперь результаты предыдущих двух примеров, введя обозначения $x_1 \equiv x$, $x_2 \equiv y$, $x_3 \equiv z$; $\hat{p}_x \equiv \hat{p}_1, \dots$:

$$\boxed{[x_k, \hat{p}_l] = i\hbar\delta_{kl}; \quad [x_k, x_l] = 0; \quad [\hat{p}_k, \hat{p}_l] = 0.} \quad (2.18)$$

Пример 2.9. Вычислить коммутатор $[\mathbf{r}, \hat{\mathbf{p}}^2]$.

Решение. Вначале запишем коммутатор в декартовых компонентах, затем воспользуемся свойством билинейности (2.8). Упростим получившиеся коммутаторы по правилу (2.13), оставшиеся коммутаторы вычислим в соответствии с (2.18):

$$\begin{aligned} [\mathbf{r}, \hat{\mathbf{p}}^2] &= \left[\sum_k \mathbf{e}_k x_k, \sum_l \hat{p}_l \hat{p}_l \right] \stackrel{(2.8)}{=} \sum_{k,l} \mathbf{e}_k [x_k, \hat{p}_l \hat{p}_l] \stackrel{(2.13)}{=} \\ &= \sum_{k,l} \mathbf{e}_k \{ [x_k, \hat{p}_l] \hat{p}_l + \hat{p}_l [x_k, \hat{p}_l] \} \stackrel{(2.18)}{=} 2i\hbar \sum_{k,l} \mathbf{e}_k \delta_{kl} \hat{p}_l = 2i\hbar \hat{\mathbf{p}}. \end{aligned}$$

Данный пример наглядно демонстрирует использование правила “упрощения” (2.13). \square

Пример 2.10. Вычислить коммутатор $[f(x), \hat{p}_x]$, где $f(x)$ — дифференцируемая функция координат.

Решение. Решение полностью аналогично примеру 2.7, с той лишь разницей, что множитель x заменяется на $f(x)$:

$$\hat{p}_x f(x) \Psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \{ f(x) \Psi \} = -i\hbar \frac{\partial f}{\partial x} \Psi - i\hbar f \frac{\partial \Psi}{\partial x}.$$

В конечном итоге получаем соотношение

$$\boxed{[f(x), \hat{p}_x] = i\hbar \frac{\partial f(x)}{\partial x},} \quad (2.19)$$

обобщающее (2.17). \square

Пример 2.11. Вычислить коммутатор $[V(\mathbf{r}), \hat{\mathbf{p}}]$, где $V(\mathbf{r})$ — дифференцируемая скалярная функция координат.

Решение. Запишем вначале все векторные операторы в декартовом базисе:

$$[V(\mathbf{r}), \hat{\mathbf{p}}] = [V(\mathbf{r}), \sum_k \mathbf{e}_k \hat{p}_k] \stackrel{(2.8)}{=} \sum_k \mathbf{e}_k [V(\mathbf{r}), \hat{p}_k] \stackrel{(2.19)}{=} i\hbar \sum_k \mathbf{e}_k \frac{\partial V}{\partial x_k}.$$

Вспоминая вид градиента в декартовом базисе, получаем:

$$\boxed{[V(\mathbf{r}), \hat{\mathbf{p}}] = i\hbar \text{grad } V(\mathbf{r}).} \quad (2.20)$$

Очевидно, соотношение (2.19) есть частный случай (2.20). \square

Пример 2.12. Вычислить коммутаторы $[\mathbf{r}, \hat{H}]$, $[\hat{\mathbf{p}}, \hat{H}]$, предполагая известными вид потенциальной энергии $V(\mathbf{r})$ и массу частицы m .

Решение. Основываясь на данных таблицы 2.1 и результате примера 2.9, имеем:

$$[\mathbf{r}, \hat{H}] = [\mathbf{r}, \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{r})] \stackrel{(2.8)}{=} \frac{1}{2m} [\mathbf{r}, \hat{\mathbf{p}}^2] + \underbrace{[\mathbf{r}, V(\mathbf{r})]}_0 = \frac{i\hbar}{m} \hat{\mathbf{p}}.$$

Второй коммутатор вычислим из соотношения (2.20):

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{p}}, \hat{H}] \stackrel{(2.4)}{=} -[\hat{H}, \hat{\mathbf{p}}] &= -[\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{r}), \hat{\mathbf{p}}] \stackrel{(2.8)}{=} -\frac{1}{2m} \underbrace{[\hat{\mathbf{p}}^2, \hat{\mathbf{p}}]}_0 - [V(\mathbf{r}), \hat{\mathbf{p}}] \stackrel{(2.20)}{=} \\ &= -i\hbar \text{grad } V(\mathbf{r}). \end{aligned}$$

Объясните, почему $[\mathbf{r}, V(\mathbf{r})] = 0$, $[\hat{\mathbf{p}}^2, \hat{\mathbf{p}}] = 0$.

Выпишем теперь результаты:

$$\boxed{[\mathbf{r}, \hat{H}] = \frac{i\hbar}{m} \hat{\mathbf{p}};} \quad (2.21)$$

$$\boxed{[\hat{\mathbf{p}}, \hat{H}] = -i\hbar \text{grad } V(\mathbf{r}).} \quad (2.22)$$

Данные тождества используются при выводе некоторых фундаментальных соотношений квантовой теории. \square

Рассмотрим теперь оператор орбитального момента $\hat{\mathbf{L}}$, или *момента количества движения*. Его декартовы компоненты выражаются через координату и проекцию импульса с помощью следующего соотношения:

$$\boxed{\hat{L}_k = \sum_{l,m} \varepsilon_{klm} x_l \hat{p}_m.} \quad (2.23)$$

Здесь ε_{klm} — символ Леви–Чивита. Его свойства собраны в приложении В.

Пример 2.13. Вычислить коммутатор $[x_k, \hat{L}_l]$.

Решение. Представим \hat{L}_l согласно (2.23):

$$\begin{aligned} [x_k, \hat{L}_l] &\stackrel{(2.23)}{=} [x_k, \sum_{m,n} \varepsilon_{lmn} x_m \hat{p}_n] \stackrel{(2.8)}{=} \sum_{m,n} \varepsilon_{lmn} [x_k, x_m \hat{p}_n] \stackrel{(2.13)}{=} \\ &= \sum_{m,n} \varepsilon_{lmn} \left\{ \underbrace{[x_k, x_m]}_0 \hat{p}_n + x_m \underbrace{[x_k, \hat{p}_n]}_{i\hbar \delta_{kn}} \right\} = i\hbar \sum_m \varepsilon_{lmk} x_m = i\hbar \sum_m \varepsilon_{klm} x_m. \end{aligned}$$

На последнем шаге мы сделали циклическую перестановку индексов, от которой значение символа Леви–Чивита не изменяется.

Приведем ответ:

$$\boxed{[x_k, \hat{L}_l] = i\hbar \sum_m \varepsilon_{klm} x_m.} \quad (2.24)$$

Тождество (2.24) содержит в себе 9 тривиальных соотношений:

$$\begin{array}{lll} [x, \hat{L}_x] = 0; & [y, \hat{L}_y] = 0; & [z, \hat{L}_z] = 0; \\ [x, \hat{L}_y] = i\hbar z; & [y, \hat{L}_z] = i\hbar x; & [z, \hat{L}_x] = i\hbar y; \\ [y, \hat{L}_x] = -i\hbar z; & [z, \hat{L}_y] = -i\hbar x; & [x, \hat{L}_z] = -i\hbar y. \end{array}$$

Легко видеть, что использование ε -символа делает формулы более компактными.

Таким образом, в отличие от импульса с координатой коммутируют одноименные проекции орбитального момента. \square

Пример 2.14. Вычислить коммутатор $[\hat{p}_k, \hat{L}_l]$.

Решение. В отличие от предыдущей задачи мы для большей наглядности не будем здесь использовать символ Леви–Чивита. Для определенности вычислим коммутатор $[\hat{p}_x, \hat{L}_x]$:

$$\begin{aligned} [\hat{p}_x, \hat{L}_x] &\stackrel{(2.23)}{=} [\hat{p}_x, y\hat{p}_z] - [\hat{p}_x, z\hat{p}_y] \stackrel{(2.13)}{=} \\ &= -\underbrace{[y, \hat{p}_x]}_0 \hat{p}_z + y \underbrace{[\hat{p}_x, \hat{p}_z]}_0 + \underbrace{[z, \hat{p}_x]}_0 \hat{p}_y - z \underbrace{[\hat{p}_x, \hat{p}_y]}_0 = 0. \end{aligned}$$

Таким образом,

$$[\hat{p}_x, \hat{L}_x] = 0. \quad (2.25)$$

Такой же результат получается и при замене в (2.25) $x \rightarrow y, z$ (проверьте самостоятельно!), т.е. *операторы одноименных проекций импульса и орбитального момента всегда коммутируют.*

Аналогичным образом вычислим следующие коммутаторы:

$$\begin{aligned} [\hat{p}_x, \hat{L}_y] &\stackrel{(2.23)}{=} [\hat{p}_x, z\hat{p}_x] - [\hat{p}_x, x\hat{p}_z] \stackrel{(2.13)}{=} \\ &= -\underbrace{[z, \hat{p}_x]}_0 \hat{p}_x + z \underbrace{[\hat{p}_x, \hat{p}_x]}_0 + \underbrace{[x, \hat{p}_x]}_{i\hbar} \hat{p}_z - x \underbrace{[\hat{p}_x, \hat{p}_z]}_0 = i\hbar \hat{p}_z. \end{aligned}$$

и

$$\begin{aligned} [\hat{p}_y, \hat{L}_x] &\stackrel{(2.23)}{=} [\hat{p}_y, y\hat{p}_z] - [\hat{p}_y, z\hat{p}_y] \stackrel{(2.13)}{=} \\ &= -\underbrace{[y, \hat{p}_y]}_{i\hbar} \hat{p}_z + z \underbrace{[\hat{p}_y, \hat{p}_z]}_0 + \underbrace{[z, \hat{p}_y]}_0 \hat{p}_y - z \underbrace{[\hat{p}_y, \hat{p}_y]}_0 = -i\hbar \hat{p}_z. \end{aligned}$$

Таким образом,

$$\left. \begin{aligned} [\hat{p}_x, \hat{L}_y] &= i\hbar \hat{p}_z; \\ [\hat{p}_y, \hat{L}_x] &= -i\hbar \hat{p}_z. \end{aligned} \right\} \quad (2.26)$$

Непосредственной проверкой (выполнить ее самостоятельно!) можно убедиться, что структура выражений (2.26) не меняется при произвольной циклической перестановке индексов x, y и z , т.е. *операторы разноименных проекций импульса и орбитального момента не коммутируют.*

Упомянутая симметрия выражений (2.25) и (2.26) позволяет их объединить с использованием символа Леви-Чивита (проверить самостоятельно!):

$$\boxed{[\hat{p}_k, \hat{L}_l] = i\hbar \sum_m \varepsilon_{klm} \hat{p}_m.} \quad (2.27)$$

Данное соотношение полностью аналогично свойству (2.24) с заменой $x_k \rightarrow \hat{p}_k$. \square

Пример 2.15. Вычислить коммутатор $[\hat{L}_k, \hat{L}_l]$.

Решение. Предлагаем вначале самостоятельно получить следующее вспомогательное тождество:

$$[x_s \hat{p}_t, x_\sigma \hat{p}_\tau] = i\hbar \delta_{\tau s} x_\sigma \hat{p}_t - i\hbar \delta_{\sigma t} x_s \hat{p}_\tau. \quad (2.28)$$

Подставим теперь в коммутатор операторы проекций в виде (2.23):

$$\begin{aligned}
[\hat{L}_k, \hat{L}_l] &\stackrel{(2.23)}{=} \left[\sum_{st} \varepsilon_{kst} x_s \hat{p}_t, \sum_{\sigma\tau} \varepsilon_{l\sigma\tau} x_\sigma \hat{p}_\tau \right] \stackrel{(2.8)}{=} \sum_{\substack{s\sigma \\ t\tau}} \varepsilon_{kst} \varepsilon_{l\sigma\tau} [x_s \hat{p}_t, x_\sigma \hat{p}_\tau] \stackrel{(2.28)}{=} \\
&= i\hbar \sum_{\sigma t} x_\sigma \hat{p}_t \sum_s \varepsilon_{tks} \varepsilon_{l\sigma s} - i\hbar \sum_{s\tau} x_s \hat{p}_\tau \sum_\sigma \varepsilon_{ks\sigma} \varepsilon_{\tau l\sigma} \stackrel{(B.15)}{=} \\
&= i\hbar \sum_{\sigma t} x_\sigma \hat{p}_t (\delta_{tl} \delta_{k\sigma} - \delta_{t\sigma} \delta_{kl}) - i\hbar \sum_{s\tau} x_s \hat{p}_\tau (\delta_{k\tau} \delta_{sl} - \delta_{kl} \delta_{s\tau}).
\end{aligned}$$

Переобозначим в последней сумме бегущие индексы $s \rightarrow \sigma$, $\tau \rightarrow t$:

$$\begin{aligned}
[\hat{L}_k, \hat{L}_l] &= i\hbar \sum_{\sigma t} x_\sigma \hat{p}_t (\delta_{lt} \delta_{k\sigma} - \delta_{l\sigma} \delta_{kt}) \stackrel{(B.15)}{=} i\hbar \sum_{\sigma t m} \varepsilon_{lkm} \varepsilon_{t\sigma m} x_\sigma \hat{p}_t = \\
&= i\hbar \sum_m \varepsilon_{klm} \underbrace{\sum_{\sigma t} \varepsilon_{m\sigma t} x_\sigma \hat{p}_t}_{\hat{L}_m} = i\hbar \sum_m \varepsilon_{klm} \hat{L}_m.
\end{aligned}$$

При выполнении всех вычислений мы регулярно использовали перестановочные свойства символа Леви–Чивита. Выпишем теперь окончательный результат:

$$\boxed{[\hat{L}_k, \hat{L}_l] = i\hbar \sum_m \varepsilon_{klm} \hat{L}_m.} \quad (2.29)$$

Тождество (2.29) состоит из трех тривиальных соотношений:

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z; \quad [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar \hat{L}_x; \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar \hat{L}_y.$$

Их можно было бы получить и без использования символа Леви–Чивита на основе тривиальных коммутационных соотношений, найденных в предыдущих примерах. \square

Пример 2.16. Вычислить коммутатор $[\hat{L}_k, \hat{L}^2]$.

Решение. Представим \hat{L}^2 в декартовом базисе:

$$\begin{aligned}
[\hat{L}_k, \hat{L}^2] &= [\hat{L}_k, \sum_l \hat{L}_l^2] \stackrel{(2.8)}{=} \sum_l [\hat{L}_k, \hat{L}_l \hat{L}_l] \stackrel{(2.13)}{=} \\
&= \sum_l \{ [\hat{L}_k, \hat{L}_l] \hat{L}_l + \hat{L}_l [\hat{L}_k, \hat{L}_l] \} \stackrel{(2.29)}{=} i\hbar \sum_{lm} \varepsilon_{klm} (\hat{L}_m \hat{L}_l + \hat{L}_l \hat{L}_m) =
\end{aligned}$$

$$= i\hbar \sum_{lm} \varepsilon_{klm} \hat{L}_m \hat{L}_l + i\hbar \sum_{lm} \varepsilon_{klm} \hat{L}_l \hat{L}_m.$$

В последней сумме переобозначим бегущие индексы $l \rightleftharpoons m$ и воспользуемся перестановочным свойством ε -символа:

$$[\hat{L}_k, \hat{L}^2] = i\hbar \sum_{lm} (\varepsilon_{klm} + \varepsilon_{kml}) \hat{L}_m \hat{L}_l = i\hbar \sum_{lm} (\varepsilon_{klm} - \varepsilon_{klm}) \hat{L}_m \hat{L}_l = 0.$$

Таким образом, *квадрат орбитального момента коммутирует с любой его проекцией*:

$$\boxed{[\hat{L}_k, \hat{L}^2] = 0.} \quad (2.30)$$

Тождества (2.29) и (2.30) очень важны в теории углового момента. \square

Если во всех полученных в данном разделе коммутаторах сделать предельный переход $\hbar \rightarrow 0$, то все коммутаторы обратятся в нуль. Такой результат не противоречит классической механике.

Задачи для самостоятельного решения

12. Раскрыть скобки:

$$\left(\frac{x}{x_0} - \frac{\hat{p}_x}{p_0} \right) \left(\frac{x}{x_0} + \frac{\hat{p}_x}{p_0} \right); \quad \left(\frac{x}{x_0} + \frac{\hat{p}_x}{p_0} \right)^2; \quad \left(\frac{x}{x_0} + \frac{\hat{p}_x}{p_0} \right)^3.$$

Здесь x_0, p_0 — константы с размерностью координаты и импульса соответственно.

13. Вычислить коммутаторы: $[\mathbf{r}, (\mathbf{r}\hat{\mathbf{p}})]$; $[\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}^2]$; $[\mathbf{r}^2, (\mathbf{r}\hat{\mathbf{p}})]$; $[\hat{\mathbf{p}}^2, (\mathbf{r}\hat{\mathbf{p}})]$; $[\mathbf{r}^2, \hat{H}]$; $[\hat{\mathbf{p}}^2, \hat{H}]$; $[(\mathbf{r}\hat{\mathbf{p}}), \hat{H}]$.

14. Доказать тождество:

$$[\mathbf{A}(\mathbf{r}), \hat{\mathbf{p}}] = i\hbar \operatorname{div} \mathbf{A}(\mathbf{r}),$$

где $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ — дифференцируемая векторная функция координат.

15. Доказать, что $[\hat{\mathbf{p}} \times \mathbf{r}] = -\hat{\mathbf{L}}$.

16. Доказать соотношения (2.29) без использования символа Леви-Чивита.

17. Записать операторы \hat{L}_z и \hat{L}^2 в сферических координатах.

(Ответ:

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}; \quad (2.31)$$

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \nabla_{\theta\varphi}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]. \quad (2.32)$$

18. Вычислить коммутаторы: $[\hat{\mathbf{L}}, \mathbf{r}^2]$; $[\hat{\mathbf{L}}, \hat{\mathbf{p}}^2]$; $[\hat{\mathbf{L}}, (\mathbf{r}\hat{\mathbf{p}})]$;

19. Доказать тождества:

$$[f(\mathbf{r}), \hat{\mathbf{L}}] = i\hbar [\mathbf{r} \times \text{grad} f(\mathbf{r})];$$

$$[\mathbf{A}(\mathbf{r}), \hat{\mathbf{L}}] = i\hbar \mathbf{r} \text{ rot} \mathbf{A}(\mathbf{r});$$

$$[g(r), \hat{L}^2] = 0,$$

где $f(\mathbf{r})$, $g(r)$, $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ — дифференцируемые функции координат.

2.4. Эрмитово сопряжение операторов

Оператор \hat{F}^\dagger называется *эрмитово сопряженным* по отношению к \hat{F} , если для *произвольных* функций $\Phi(\xi)$ и $\Psi(\xi)$ выполняется равенство:

$$\boxed{\int \Phi^*(\xi) \hat{F}^\dagger \Psi(\xi) d\xi \stackrel{\text{def}}{=} \int \Psi(\xi) \hat{F}^* \Phi^*(\xi) d\xi.} \quad (2.33)$$

Интегралы в (2.33) удобно записывать в *дираковских обозначениях*:

$$\langle \Psi | \hat{F}^\dagger | \Phi \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \langle \Phi | \hat{F} | \Psi \rangle^*. \quad (2.34)$$

Конструкция $\langle \Phi | \hat{F} | \Psi \rangle$ называется *матричным элементом* оператора \hat{F} между состояниями $|\Psi\rangle$ и $|\Phi\rangle$. “Обкладки” являются аналогом матричных индексов. Определение (2.34) соответствует определению эрмитово сопряженной матрицы.

Если действие оператора на функцию сводится к ее умножению на некоторую функцию $c(\xi)$: $\hat{F}\Psi(\xi) = c(\xi)\Psi(\xi)$, то, как легко видеть из определений,

$$c^\dagger(\xi) = c^*(\xi). \quad (2.35)$$

Пример 2.17. Найдти $\left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^\dagger$.

Решение. Воспользуемся определением (2.33) и преобразуем интеграл интегрированием по частям:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi^*(x) \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^\dagger \Psi(x) dx &\stackrel{(2.33)}{=} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x) \frac{\partial \Phi^*(x)}{\partial x} dx = \\ &= \Psi(x) \Phi^*(x) \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi^*(x) \left(\frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi(x) dx. \end{aligned}$$

Если предположить, что оператор $\left(\frac{\partial}{\partial x} \right)$ задается на функциях, нормированных на единицу, то разность на пределах обращается в нуль (поскольку такие функции на бесконечности обращаются в нуль). Поэтому

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Phi^*(x) \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^\dagger \Psi(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi^*(x) \left(-\frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi(x) dx.$$

Данное равенство выполняется для произвольных функций Ψ и Φ , так что имеет место операторное равенство:

$$\boxed{\left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^\dagger = -\frac{\partial}{\partial x}.} \quad (2.36)$$

Таким образом, при эрмитовом сопряжении оператор производной меняет знак. \square

Пример 2.18. Доказать, что $(\hat{F}^\dagger)^\dagger = \hat{F}$.

Решение. Воспользуемся определением эрмитова сопряжения в дираковских обозначениях (2.34) дважды, а также свойством повторного комплексного сопряжения $[(z^*)^* = z]$:

$$\langle \Phi | (\hat{F}^\dagger)^\dagger | \Psi \rangle \stackrel{(2.34)}{=} \langle \Psi | \hat{F}^\dagger | \Phi \rangle^* \stackrel{(2.34)}{=} \langle \Phi | \hat{F} | \Psi \rangle.$$

Произвольность в выборе функций в “обкладках” доказывает требуемое утверждение. \square

Пример 2.19. Выразить $(\hat{F}\hat{G})^\dagger$ через \hat{F}^\dagger и \hat{G}^\dagger .

Решение. При действии оператора на функцию получается другая функция. Поэтому, основываясь на определении (2.34), имеем:

$$\begin{aligned}
\langle \Phi | (\hat{F}\hat{G})^\dagger | \Psi \rangle &\stackrel{(2.34)}{=} \langle \Psi | (\hat{F}\hat{G}) | \Phi \rangle^* = \langle \Psi | \hat{F} | \hat{G}\Phi \rangle^* \stackrel{(2.34)}{=} \langle \hat{G}\Phi | \hat{F}^\dagger | \Psi \rangle = \\
&= \langle \hat{G}\Phi | \hat{F}^\dagger | \Psi \rangle \stackrel{(2.34)}{=} \langle \hat{F}^\dagger \Psi | \hat{G}\Phi \rangle^* = \langle \hat{F}^\dagger \Psi | \hat{G} | \Phi \rangle^* \stackrel{(2.34)}{=} \langle \Phi | \hat{G}^\dagger | \hat{F}^\dagger \Psi \rangle = \\
&= \langle \Phi | \hat{G}^\dagger \hat{F}^\dagger | \Psi \rangle.
\end{aligned}$$

Таким образом, мы получаем важное операторное соотношение:

$$\boxed{(\hat{F}\hat{G})^\dagger = \hat{G}^\dagger \hat{F}^\dagger}, \quad (2.37)$$

т.е. эрмитово сопряжение произведения операторов изменяет порядок следования сомножителей на противоположный. Ситуация полностью аналогична обращению произведения операторов (2.12). \square

Оператор называется *самосопряженным*, или *эрмитовым*, если он совпадает со своим эрмитовым сопряжением:

$$\boxed{\hat{F}^\dagger \stackrel{\text{def}}{=} \hat{F}}. \quad (2.38)$$

Дадим определение эрмитова оператора в интегральной форме на основе (2.33), (2.38):

$$\boxed{\int \Phi^*(\xi) \hat{F} \Psi(\xi) d\xi \stackrel{\text{def}}{=} \int \Psi(\xi) \hat{F}^* \Phi^*(\xi) d\xi}, \quad (2.39)$$

а также в дираковских обозначениях (2.34):

$$\langle \Psi | \hat{F} | \Phi \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \langle \Phi | \hat{F} | \Psi \rangle^*. \quad (2.40)$$

Определение (2.40) подчеркивает полную аналогию с эрмитовыми матрицами.

Введем также определение антиэрмитова оператора:

$$\hat{F}^\dagger \stackrel{\text{def}}{=} -\hat{F}.$$

Пример 2.20. Доказать самосопряженность оператора проекции импульса \hat{p}_x .

Решение.

1 способ. Задачу можно решать по полной аналогии с примером 2.17, т.е., исходя из определения (2.39), получать равенство:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Phi^*(x) \hat{p}_x \Psi(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x) \hat{p}_x^* \Phi^*(x) dx.$$

Мы рекомендуем выполнить все выкладки самостоятельно.

2 способ. Воспользуемся явным видом оператора проекции импульса (2.15), а также уже доказанными свойствами (2.35)–(2.37) и определением в форме (2.38):

$$\hat{p}_x^\dagger \stackrel{(2.15)}{=} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)^\dagger \stackrel{(2.37)}{=} \left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^\dagger (-i\hbar)^\dagger = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \stackrel{(2.15)}{=} \hat{p}_x.$$

Мы доказали самосопряженность оператора проекции импульса. \square

Самосопряженность оператора координаты практически очевидна (обоснуйте!).

Пример 2.21. Доказать самосопряженность оператора орбитального момента.

Решение.

1 способ. Докажем самосопряженность проекции орбитального момента на произвольное направление. Ориентируем ось Oz сферической системы координат вдоль этого направления. В такой системе координат вид оператора \hat{L}_z будет наиболее простым (2.31). Будем опираться на определение в форме (2.39):

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} \Phi^*(\varphi) \hat{L}_z \Psi(\varphi) d\varphi &\stackrel{(2.31)}{=} -i\hbar \int_0^{2\pi} \Phi^*(\varphi) \frac{\partial \Psi(\varphi)}{\partial \varphi} d\varphi = \\ &= -i\hbar \left[\Phi^*(\varphi) \Psi(\varphi) \Big|_0^{2\pi} - \int_0^{2\pi} \Psi(\varphi) \frac{\partial \Phi^*(\varphi)}{\partial \varphi} d\varphi \right]. \end{aligned}$$

В примере 1.4 было показано, что волновая функция, зависящая от полярного угла, для выполнения условия однозначности должна быть 2π -периодичной. Поэтому разность на пределах обращается в нуль. Из этого следует самосопряженность \hat{L}_z :

$$\int_0^{2\pi} \Phi^*(\varphi) \hat{L}_z \Psi(\varphi) d\varphi = \int_0^{2\pi} \Psi(\varphi) \hat{L}_z^* \Phi^*(\varphi) d\varphi.$$

2 способ. Воспользуемся видом $\hat{\mathbf{L}}$ в декартовых координатах (2.23), принимая во внимание правило (2.37), самосопряженность координаты и импульса, а также результат задачи 15:

$$\hat{\mathbf{L}}^\dagger = [\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}]^\dagger = -[\hat{\mathbf{p}} \times \mathbf{r}] = \hat{\mathbf{L}}.$$

Самосопряженность оператора орбитального момента доказана (объясните появление знака “минус”). \square

Пример 2.22. Доказать самосопряженность оператора инверсии.

Решение. Построим два интеграла и преобразуем их на основании определения оператора инверсии (таблица 2.1):

$$\int \Phi^*(\mathbf{r}) \hat{I} \Psi(\mathbf{r}) d^3 r = \int \Phi^*(\mathbf{r}) \Psi(-\mathbf{r}) d^3 r;$$

$$\int \Psi(\mathbf{r}) [\hat{I} \Phi(\mathbf{r})]^* d^3 r = \int \Psi(\mathbf{r}) \Phi^*(-\mathbf{r}) d^3 r = (\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}) = \int \Phi^*(\mathbf{r}) \Psi(-\mathbf{r}) d^3 r.$$

Равенство этих интегралов позволяет на основании (2.33) сделать вывод о самосопряженности оператора инверсии. \square

Легко установить самосопряженность суммы эрмитовых операторов \hat{F} и \hat{G} . С их произведением, однако может возникнуть проблема: дело в том, что в соответствии с правилом (2.37),

$$[\hat{F}\hat{G}]^\dagger = \hat{G}^\dagger \hat{F}^\dagger = \hat{G}\hat{F} \neq \hat{F}\hat{G}.$$

Таким образом, произведение эрмитовых операторов будет эрмитовым только в случае их коммутации.

Из произведений двух эрмитовых операторов можно, тем не менее, построить следующие эрмитовы комбинации: $i[\hat{F}, \hat{G}]$ и $\{\hat{F}, \hat{G}\}$ (убедиться в их самосопряженности самостоятельно!).

Оператор \hat{U} называется *унитарным*, если его эрмитово сопряжение совпадает с обратным оператором:

$$\boxed{\hat{U}^{-1} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{U}^\dagger.} \quad (2.41)$$

Пример 2.23. Оператор сдвига определяется следующим образом:

$$\boxed{\hat{T}_a \Psi(x) \stackrel{\text{def}}{=} \Psi(x - a),} \quad (2.42)$$

где $\Psi(x)$ — произвольная волновая функция. Найти аналитический вид этого оператора и показать его унитарность.

Решение. Разложим правую часть (2.42) в ряд Тейлора по степеням параметра сдвига a , предполагая $\frac{\partial^0 \Psi(x)}{\partial x^0} \equiv \Psi(x)$:

$$\Psi(x - a) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{a^n}{n!} \frac{\partial^n \Psi(x)}{\partial x^n} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-a \frac{\partial}{\partial x}\right)^n \Psi(x) \stackrel{(2.15)}{=} \hat{T}_a \Psi(x)$$

$$= \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar} a \hat{p}_x \right)^n \right] \Psi(x).$$

Если вспомнить разложение экспоненты в ряд Тейлора, то в соответствии с определением 9° для оператора под знаком функции сумму в квадратных скобках можно представить в виде $\exp \left[-\frac{i}{\hbar} a \hat{p}_x \right]$. Если теперь воспользуемся определением операторного равенства 1°, то получим окончательный ответ:

$$\boxed{\hat{T}_a = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} a \hat{p}_x \right]}. \quad (2.43)$$

Сопоставление (2.43) с (2.41) позволяет сделать вывод об унитарности оператора сдвига. \square

Задачи для самостоятельного решения

20. Доказать самосопряженность операторов физических величин из таблицы 2.1.

21. Операторы \hat{F} и \hat{G} эрмитовы. Доказать самосопряженность $i[\hat{F}, \hat{G}]$ и $\{\hat{F}, \hat{G}\}$.

22. Доказать самосопряженность операторов $\hat{A} = \hat{F}^\dagger \hat{F}$ и $\hat{B} = \hat{F} \hat{F}^\dagger$.

23. Доказать, что произвольный оператор можно однозначно представить в виде суммы эрмитова и антиэрмитова операторов.

(Указание. Провести аналогию со случаем, когда произвольная функция представляется в виде суммы четной и нечетной функций).

24. Получить аналитический вид оператора 3-мерного сдвига: $\hat{T}_a \Psi(\mathbf{r}) \stackrel{\text{def}}{=} \Psi(\mathbf{r} - \mathbf{a})$.

25. Получить аналитический вид оператора поворота на угол φ_0 вокруг оси, задаваемой единичным вектором \mathbf{n} .

(Ответ: $\hat{R}_n(\varphi_0) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \varphi_0 \mathbf{n} \hat{\mathbf{L}} \right]$.)

26. Показать, что произведение унитарных операторов само является унитарным оператором.

Глава 3.

Измеримость физических величин

3.1. Средние значения физических величин

Измерение физических величин в квантовой и классической механике существенно различается. Прежде всего квантовую систему нужно привести в то состояние, в котором величину F необходимо измерить. Пусть волновая функция этого состояния $\Psi(\xi)$ ¹. В результате того или иного измерения состояние микрообъекта, как правило, разрушается (например, для фиксации летящего электрона на его пути ставят фотопластинку; после взаимодействия с ней этот электрон поглощается и уже не может быть зафиксирован повторно тем же способом). Для повторного измерения квантовую систему необходимо вновь привести в то же самое состояние и т.д. Среднее значение величины F получается усреднением результатов таких многократных измерений. Если известна волновая функция квантовой системы, то среднее значение F вычисляется по формуле

$$\langle F \rangle = \int \Psi^*(\xi) \hat{F} \Psi(\xi) d\xi, \quad (3.1)$$

где \hat{F} — оператор величины F . Формулу (3.1) можно также понимать как определение оператора величины F . Волновая функция в (3.1) должна быть нормирована на 1 в соответствии с (1.4). Если же используется ненормированная волновая функция *финитного движения*, то формулу (3.1) необходимо обобщить следующим образом:

$$\langle F \rangle = \frac{\int \Psi^*(\xi) \hat{F} \Psi(\xi) d\xi}{\int |\Psi(\xi)|^2 d\xi}.$$

Среднее значение по своему смыслу должно быть величиной вещественной.

¹зависимость волновой функции от времени не учитываем, так как в данном разделе она не существенна

Пример 3.1. Показать, что необходимым и достаточным условием вещественности среднего значения величины F является самосопряженность ее оператора \hat{F} .

Решение. Докажем вещественность среднего значения F , предполагая \hat{F} самосопряженным:

$$\langle F \rangle^* \stackrel{(3.1)}{=} \int \Psi(\xi) \hat{F}^* \Psi^*(\xi) d\xi \stackrel{(2.39)}{=} \int \Psi^*(\xi) \hat{F} \Psi(\xi) d\xi \stackrel{(3.1)}{=} \langle F \rangle.$$

Доказать обратное утверждение несложно. \square

Таким образом, для вещественности среднего значения физической величины оператор этой физической величины должен быть самосопряженным. Помимо линейности, это второе требование, предъявляемое к оператору физической величины.

Формулу среднего значения F в состоянии с волновой функцией $\Psi(\xi)$ можно также представить в дираковских обозначениях:

$$\boxed{\langle F \rangle = \langle \Psi | \hat{F} | \Psi \rangle}. \quad (3.2)$$

Пример 3.2. Показать, что среднее значение квадрата физической величины F неотрицательно.

Решение. В соответствии со сказанным выше оператор \hat{F} должен быть самосопряженным. Поэтому \hat{F}^2 тоже будет самосопряженным [см. (2.37)], а $\langle F^2 \rangle$ — вещественным. Дальнейшее доказательство удобно проводить в дираковских обозначениях, предполагая $\hat{F} = \hat{F}^\dagger$:

$$\langle F^2 \rangle \stackrel{(3.2)}{=} \langle \Psi | \hat{F}^2 | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{F} | \hat{F} \Psi \rangle \stackrel{(2.40)}{=} \langle \hat{F} \Psi | \hat{F} \Psi \rangle = \int |\hat{F} \Psi(\xi)|^2 d\xi.$$

Последний интеграл будет величиной неотрицательной, что и доказывает наше утверждение. \square

Следует предостеречь читателя от возможной путаницы между $\langle F^2 \rangle$ и $\langle F \rangle^2$. И вообще? $\langle f(F) \rangle \neq f(\langle F \rangle)$ только за исключением случая линейной функции $f(z)$.

Описанный выше способ измерения физической величины F дает с математической точки зрения последовательность случайных чисел. Характеристикой их разброса относительно среднего значения служит *среднеквадратичное отклонение*:

$$\boxed{\langle (\Delta F)^2 \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \langle (F - \langle F \rangle)^2 \rangle}. \quad (3.3)$$

Более удобной формулой для вычисления $\langle(\Delta F)^2\rangle$ по сравнению с (3.3) является

$$\boxed{\langle(\Delta F)^2\rangle = \langle F^2\rangle - \langle F\rangle^2.} \quad (3.4)$$

Пример 3.3. Для волнового пакета из примера 1..3 вычислить $\langle x\rangle$, $\langle(\Delta x)^2\rangle$; $\langle p_x\rangle$, $\langle(\Delta p_x)^2\rangle$.

Решение. Нормировочная константа вычислена в примере 1..3, так что нормированная волновая функция имеет вид

$$\Psi(x) = \frac{1}{x_0\sqrt{\pi}} \exp\left[-\frac{x^2}{2x_0^2} + ik_0x\right], \quad (3.5)$$

а средние значения вычисляются по формуле (3.1).

Для координаты

$$\langle x\rangle = \frac{1}{x_0\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} x \exp\left[-\frac{x^2}{x_0^2}\right] dx = 0$$

вследствие нечетности подынтегральной функции. Обратите внимание на исчезновение множителя e^{ik_0x} при возведении его модуля в квадрат! Для среднеквадратичного отклонения координаты

$$\begin{aligned} \langle(\Delta x)^2\rangle &\stackrel{(3.4)}{=} \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2 = \langle x^2\rangle = \frac{1}{x_0\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \exp\left[-\frac{x^2}{x_0^2}\right] dx = \\ &= (x = x_0\xi) = \frac{x_0^2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \xi^2 e^{-\xi^2} d\xi \stackrel{(A.3)}{=} \frac{x_0^2}{2}. \end{aligned}$$

Оператор импульса — дифференциальный. Поэтому

$$\begin{aligned} \langle p_x\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x) \hat{p}_x \Psi(x) dx = -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x) \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x} dx = \\ &= -\frac{i\hbar}{x_0\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(-\frac{x}{x_0^2} + ik_0\right) \exp\left[-\frac{x^2}{x_0^2}\right] dx = \hbar k_0; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle p_x^2\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x) \hat{p}_x^2 \Psi(x) dx = -\hbar^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x) \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} dx = \\ &= \underbrace{-\hbar^2 \Psi^*(x) \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x} \Big|_{-\infty}^{+\infty}}_0 + \hbar^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \left| \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x} \right|^2 dx = \end{aligned}$$

$$= \frac{\hbar^2}{x_0 \sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{x^2}{x_0^4} + k_0^2 \right) \exp \left[-\frac{x^2}{x_0^2} \right] dx = \frac{\hbar^2}{2x_0^2} + \hbar^2 k_0^2;$$

$$\langle (\Delta p_x)^2 \rangle \stackrel{(3.4)}{=} \langle p_x^2 \rangle - \langle p_x \rangle^2 = \frac{\hbar^2}{2x_0^2}.$$

Рекомендуем самостоятельно проделать все промежуточные выкладки.
□

3.2. Определенные значения физических величин

Описанная выше методика измерения физической величины F у микрообъекта дает ненулевые значения $\langle (\Delta F)^2 \rangle$ даже в случае идеального прибора с нулевой погрешностью. Такая *неопределенность* в значении величины F есть объективное свойство движения в микромире. Поэтому возникает проблема поиска состояний с *определенными* значениями F . Определенность (измеримость) величины F в некотором состоянии квантовой системы означает, что при каждом акте ее измерения будет получаться *одно и то же значение* этой величины. Данная проблема решается, если отождествить получаемые в эксперименте значения физической величины F с *собственными значениями* ее оператора \hat{F} , а соответствующие состояния изображать соответствующими этим значениям *собственными функциями* оператора \hat{F} :

$$\boxed{\hat{F}\Psi_F(\xi) = F\Psi_F(\xi).} \quad (3.6)$$

С математической точки зрения уравнение (3.6) представляет собой задачу собственных функций и собственных значений оператора \hat{F} . Она требует отыскания *нетривиальных* [$\Psi_F(\xi) \neq 0$] решений уравнения (3.6) с заданными граничными условиями. Выбор последних диктуется физическими стандартными условиями, которым подчиняется волновая функция (конечность, однозначность, непрерывность). В общем случае \hat{F} представляет собой линейный дифференциальный оператор, так что уравнение (3.6) является *линейным однородным* дифференциальным уравнением². Однородность приводит к неоднозначности его решений: они определены с точностью до произвольного постоянного множителя, т.е. должны быть нормированы.

²как правило, не выше *второго* порядка

Пример 3.4. Показать, что функция $\Psi(x) = e^{-x^2/2}$ является собственной функцией оператора $\hat{F} = \frac{d^2}{dx^2} - x^2$ и найти соответствующее собственное значение.

Решение. Необходимо лишь показать, что действие оператора \hat{F} на функцию $\Psi(x)$ приводит к умножению последней на некоторую константу. Ее значение при этом будет получено автоматически:

$$\begin{aligned}\hat{F}\Psi(x) &= \left(\frac{d^2}{dx^2} - x^2 \right) e^{-x^2/2} = \frac{d^2}{dx^2} e^{-x^2/2} - x^2 e^{-x^2/2} = \\ &= -e^{-x^2/2} = \underbrace{-1}_F \Psi(x).\end{aligned}$$

Итак, данное в условии утверждение доказано; найдено собственное значение $F = -1$. \square

Собственные значения и собственные функции линейных эрмитовых операторов обладают рядом специфических свойств. Перечислим их:

- 1) собственные значения вещественны;
- 2) собственные функции, соответствующие различным собственным значениям, взаимно ортогональны³;
- 3) система собственных функций *полна* в классе тех функций, на которых этот оператор задается, т.е. она образует *базис* оператора.

Математические выражения важнейших свойств собраны в таблице 3.1 применительно к операторам с дискретным и непрерывным спектром.

Пример 3.4 не характерен для задачи собственных функций и собственных значений оператора \hat{F} . Обычно неизвестными бывают как собственные значения F , так и собственные функции $\Psi_F(\xi)$.

Пример 3.5. Найти наблюдаемые значения L_z и соответствующие им волновые функции.

Решение. В уравнении для собственных функций и собственных значений

$$\hat{L}_z \Psi = L_z \Psi$$

Неизвестными являются как L_z , так и Ψ . Это уравнение удобно переписать в сферической системе координат, где вид \hat{L}_z будет наиболее

³Собственные функции, соответствующие одному и тому же вырожденному собственному значению, не обязаны быть ортогональными; из них, однако, можно построить ортогональные линейные комбинации (процедура Грама–Шмидта).

простым [см. (2.31)]:

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi(\varphi)}{\partial \varphi} = L_z \Psi(\varphi); \quad 0 \leq \varphi < 2\pi. \quad (3.7)$$

Это линейное однородное дифференциальное уравнение первого порядка. Поэтому его решение ищем в виде

$$\Psi(\varphi) = A e^{i\lambda\varphi}, \quad (3.8)$$

где A — произвольная ненулевая константа, обусловленная однородностью уравнения (2.31), λ — подлежащая определению константа. Выбор решения в виде (3.8) обеспечивает *конечность* (почему?) и *непрерывность* волновой функции.

После подстановки (3.8) дифференциальное уравнение (3.7) превращается в алгебраическое:

$$\hbar\lambda = L_z. \quad (3.9)$$

В уравнении (3.8) неизвестное L_z выражается через неизвестное λ . Тем не менее, значения λ определяются требованием *однозначности*: функция полярного угла должна быть 2π -периодичной (см. пример 1.4). Поэтому λ может принимать *только целые значения*: $\lambda_{m_l} = m_l = 0, \pm 1, \dots$. Соответственно

$$\boxed{L_{z, m_l} \stackrel{(3.9)}{=} \hbar m_l; \quad m_l = 0, \pm 1, \dots} \quad (3.10)$$

В том же примере получены и нормированные собственные функции (1.11).

Таким образом, спектр оператора \hat{L}_z дискретный и невырожденный.

Рекомендуем самостоятельно проверить свойства собственных значений и собственных функций линейного эрмитова оператора \hat{L}_z . \square

Пример 3.6. *Найти наблюдаемые значения проекции импульса и соответствующие им волновые функции.*

Решение. Для удобства рассмотрим декартову компоненту импульса p_x . Вид оператора \hat{p}_x дается выражением (2.15), так что уравнение для собственных функций и собственных значений принимает вид:

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x} = p_x \Psi(x). \quad (3.11)$$

Неизвестными здесь будут как сама функция, так и собственное значение p_x . В отличие от (3.7) аргумент функции изменяется в *бесконечных* пределах.

Таблица 3.1. Свойства собственных значений и собственных функций линейного эрмитова оператора

Свойство	Дискретный спектр	Непрерывный спектр
уравнение	$\hat{F}\Psi_n(\xi) = F_n\Psi_n(\xi)$	$\hat{F}\Psi_F(\xi) = F\Psi_F(\xi)$
ортонорм.	$\int \Psi_{n'}^*(\xi)\Psi_n(\xi) d\xi = \delta_{n'n}$	$\int \Psi_{F'}^*(\xi)\Psi_F(\xi) d\xi = \delta(F' - F)$
полнота	$\sum_n \Psi_n^*(\xi)\Psi_n(\xi') = \delta(\xi' - \xi)$	$\int \Psi_F^*(\xi)\Psi_F(\xi') dF = \delta(\xi' - \xi)$
разлож.	$\Phi(\xi) = \sum_n c_n \Psi_n(\xi)$	$\Phi(\xi) = \int c(F)\Psi_F(\xi) dF$
по	$c_n = \int \Psi_n^*(\xi)\Phi(\xi) d\xi$	$c(F) = \int \Psi_F^*(\xi)\Phi(\xi) d\xi$
базису	$\sum_n c_n ^2 = 1$	$\int c(F) ^2 dF = 1$

Подобно (3.7) уравнение (3.11) является линейным однородным дифференциальным уравнением первого порядка. Поэтому его решение также ищется в виде

$$\Psi(x) = A e^{i\lambda x} \quad (3.12)$$

с неизвестной в общем случае *комплексной* константой λ .

Выражение (3.12) удовлетворяет условиям однозначности и непрерывности функции $\Psi(x)$. Подстановка (3.12) в уравнение (3.11) превращает его в алгебраическое уравнение

$$p_x = \hbar\lambda \quad (3.13)$$

с двумя неизвестными p_x и λ . Чтобы определить допустимые значения λ , представим эту константу в явном комплексном виде:

$$\lambda = \lambda_0 + i\mu_0,$$

где λ_0 и μ_0 — вещественные. При таком представлении λ легко заметить, что функция (3.12) будет конечной только при $\mu_0 = 0$, т.е. при *вещественных* λ . Поэтому, в соответствии с (3.13), собственным значением проекции импульса будет *произвольное вещественное число*, т.е. у оператора \hat{p}_x будет *непрерывный* спектр.

Вычислим теперь нормировочную константу. В соответствии с табл. 3.1, собственные функции оператора с непрерывным спектром должны быть нормированы на δ -функцию:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_{p'_x}^*(x) \Psi_{p_x}(x) dx &= |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left[\frac{i}{\hbar} x(p_x - p'_x) \right] dx \stackrel{(\Gamma.20)}{=} \\ &= 2\pi |A|^2 \delta \left(\frac{p_x - p'_x}{\hbar} \right) \stackrel{(\Gamma.19)}{=} 2\pi \hbar |A|^2 \delta(p'_x - p_x) = \delta(p'_x - p_x), \end{aligned}$$

Откуда $A = 1/\sqrt{2\pi\hbar}$.

Выпишем собственные функции оператора проекции импульса:

$$\boxed{\Psi_{p_x}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} p_x x \right]}. \quad (3.14)$$

Предлагаем самостоятельно проверить свойства собственных функций и собственных значений \hat{p}_x . Как и в случае с \hat{L}_z , спектр \hat{p}_x будет тоже невырожденным. \square

Пример 3.7. Найти собственные функции и собственные значения оператора \hat{F}^2 , зная базис и спектр оператора \hat{F} .

Решение. Непосредственной проверкой убеждаемся в том, что собственные функции не изменятся, а собственные значения возведутся в квадрат. \square

Следствие 1. Если невырожденные собственные значения оператора \hat{F} располагаются симметрично относительно нуля, то собственные значения \hat{F}^2 будут двукратно вырождены.

Следствие 2. Если функция $f(z)$ допускает разложения в ряд Тейлора, а у оператора \hat{F} известны базис и спектр, то

$$f(\hat{F})\Psi_n(\xi) = f(F_n)\Psi_n(\xi). \quad (3.15)$$

Проясним теперь смысл коэффициентов разложения произвольной функции $\Phi(\xi)$ по базису оператора \hat{F} (см. таблицу 3.1). Для определенности ограничимся случаем дискретного спектра:

$$\Phi(\xi) = \sum_n c_n \Psi_n(\xi). \quad (3.16)$$

Функция $\Phi(\xi)$ задает такое состояние, в котором в общем случае величина F не имеет определенного значения. Данный факт проявляется в том, что при многократных измерениях получается некоторый разброс наблюдаемых значений F . Каждое из них появляется с вероятностью

$$w_n = |c_n|^2. \quad (3.17)$$

Если известны наблюдаемые значения величины F в состоянии $\Psi(\xi)$ и вероятности их обнаружения, то в соответствии с теоремой о математическом ожидании для вычисления среднего значения можно использовать выражение:

$$\langle F \rangle = \sum_n F_n w_n = \sum_n F_n |c_n|^2, \quad (3.18)$$

которое эквивалентно (3.1).

Пример 3.8. Плоский ротатор приведен в состояние с волновой функцией

$$\Phi(\varphi) = A[1 + \cos \varphi + \cos 2\varphi]. \quad (3.19)$$

Найти: наблюдаемые значения L_z , вероятности их обнаружения, $\langle L_z \rangle$, $\langle (\Delta L_z)^2 \rangle$.

Решение. Специфическая зависимость $\Phi(\varphi)$ позволяет решить задачу алгебраическими методами на основе формулы Эйлера и результатов примера 3.5. Вначале разложим функцию $\Phi(\varphi)$ по базису оператора \hat{L}_z [см. (1.13)]:

$$\begin{aligned} \Phi(\varphi) &= A \left[1 + \frac{e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}}{2} + \frac{e^{2i\varphi} + e^{-2i\varphi}}{2} \right] \stackrel{(1.11)}{=} \\ &= \sqrt{2\pi} A \left[\Psi_0(\varphi) + \frac{\Psi_1(\varphi)}{2} + \frac{\Psi_{-1}(\varphi)}{2} + \frac{\Psi_2(\varphi)}{2} + \frac{\Psi_{-2}(\varphi)}{2} \right]. \end{aligned} \quad (3.20)$$

Выражение (3.20) приведено к виду (3.16) с ненулевыми коэффициентами $c_0 = \sqrt{2\pi} A$, $c_{\pm 1} = c_{\pm 2} = \sqrt{\frac{\pi}{2}} A$. Нормировочную константу удобно найти из условия

$$\sum_m |c_m|^2 = 1,$$

Откуда $A = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$; $c_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}$, $c_{\pm 1} = c_{\pm 2} = \frac{1}{2\sqrt{2}}$.

Таким образом, при измерении будут наблюдаться следующие значения L_z : $L_{z,0}$ с вероятностью $\frac{1}{2}$ и $L_{z,\pm 1} = \pm \hbar$, $L_{z,\pm 2} = \pm 2\hbar$ с одинаковыми вероятностями $w_{\pm 1} = w_{\pm 2} = \frac{1}{8}$.

Средние значения вычисляются по формуле (3.18):

$$\langle L_z \rangle = \sum_m L_{z,m} w_m = 0.$$

Для вычисления среднеквадратичного отклонения воспользуемся результатом примера (3.7):

$$\langle (\Delta L_z)^2 \rangle = \langle L_z^2 \rangle - \langle L_z \rangle^2 = \langle L_z^2 \rangle = \sum_m L_{z,m}^2 w_m = \frac{5}{4} \hbar^2.$$

□

3.3. Совместная измеримость физических величин. Соотношение неопределенностей

Физические величины \hat{F} и \hat{G} называются *измеримыми совместно*, если существуют такие состояния, в каждом из которых будет измерима как величина F , так и G . Математически это выражается в наличии у операторов \hat{F} и \hat{G} *общих* собственных функций. Существование общих собственных функций проверяется с помощью следующего критерия:

необходимым и достаточным условием существования у линейных⁴ операторов общих собственных функций является коммутация данных операторов.

У операторов неизмеримых совместно величин, естественно, общих собственных функций нет. При совместном измерении таких величин в произвольном состоянии всегда наблюдается разброс наблюдаемых значений. Величина этого разброса, характеризующая среднеквадратичными отклонениями, удовлетворяет неравенству

$$\langle (\Delta F)^2 \rangle \langle (\Delta G)^2 \rangle \geq \frac{1}{4} \langle \hat{B} \rangle^2, \quad (3.21)$$

называемому *соотношением неопределенностей Гейзенберга*. Здесь \hat{B} — самосопряженный оператор (см. задачу 21), определяемый из соотношения:

$$[\hat{F}, \hat{G}] = i\hat{B}. \quad (3.22)$$

Все усреднения в (3.21) производятся в *одном и том же* состоянии.

Пример 3.9. *Записать соотношение неопределенностей для декартовой координаты и соответствующей проекции импульса.*

Решение. Соответствующее соотношение неопределенностей может быть получено с использованием выражения (2.17), которое по форме соответствует (3.22). Поэтому достаточно сделать в (3.21) замены:

⁴Самосопряженность здесь не требуется!

$F \rightarrow x, G \rightarrow p_x, B \rightarrow \hbar$:

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p_x)^2 \rangle \geq \frac{1}{4} \hbar^2. \quad (3.23)$$

Проанализируем соотношение (3.23). Зададимся целью *неограниченного* снижения неопределенности, скажем, координаты. Будем для этого подбирать соответствующие состояния. При этом в силу *ненулевой* правой части (3.23) неопределенность импульса *обязана неограниченно возрастать*.

Исследуем теперь соотношение (3.23) для макромира. Рассмотрим, например, движение тела массой 1 кг со скоростью 1 м/с . Пусть приемлемой погрешностью в определении скорости будет $0,001 \text{ м/с}$. Оценим с помощью соотношения неопределенностей (3.23) предельно достижимую точность в определении координаты. Она оказывается порядка $5 \cdot 10^{-32} \text{ м}$, что много меньше размеров атомного ядра. \square

Таким образом, *в макромире соотношение неопределенностей практически не сказывается*. Можно сказать, что физическая система будет микрообъектом, если в соотношении Гейзенберга неопределенности будут сравнимы со средними значениями физических величин. Поэтому соотношение неопределенностей удобно использовать для оценки различных физических величин в квантовых системах.

Пример 3.10. Частица массы m совершает одномерное финитное движение вдоль отрезка длиной a . Оценить наименьшую энергию частицы.

Решение. Если считать, что неопределенность координаты порядка длины отрезка, то, вспоминая нерелятивистскую связь между энергией и импульсом, получаем $E_{\min} \gtrsim \hbar^2 / (ma^2)$. \square

Задачи для самостоятельного решения

27. Частица приведена в состояние с волновой функцией

$$\Psi(x) = \begin{cases} A \sin \frac{\pi n x}{a} & \text{при } 0 \leq x \leq a; \\ 0 & \text{при } x < 0 \text{ или } x > a, \end{cases}$$

где $n = 1, 2, \dots$. Вычислить $\langle x \rangle$, $\langle (\Delta x)^2 \rangle$, $\langle p_x \rangle$, $\langle (\Delta p_x)^2 \rangle$.
(Ответ: $a/2$, $\frac{a^2}{2} \left[\frac{1}{6} - \frac{1}{\pi^2 n^2} \right]$, 0 , $\left[\frac{\pi n \hbar}{a} \right]^2$ соответственно.)

28. Показать, что функция $\Psi(x) = xe^{-x^2/2}$ является собственной функцией оператора $\hat{F} = \frac{d^2}{dx^2} - x^2$ и найти соответствующее собственное значение.

29. Показать, что функция $\Psi(\theta) = \cos \theta$ является собственной функцией оператора $\hat{F} = -\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d}{d\theta} \right)$ и найти соответствующее собственное значение.

30. Показать, что функция $\Psi(\theta, \varphi) = \sin \theta e^{\pm i\varphi}$ является собственной функцией оператора L^2 [см. (2.32)] и найти соответствующее собственное значение.

31. Показать, что функция $\Psi(\xi) = \frac{\sin \xi}{\xi}$ является собственной функцией оператора $\hat{F} = \frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{2}{\xi} \frac{d}{d\xi}$ и найти соответствующее собственное значение.

32. Показать, что функция $\Psi(\rho) = e^{-\rho/3} \rho^3$ является собственной функцией оператора $\hat{F} = \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} - \frac{6}{\rho^2}$ и найти соответствующее собственное значение.

33. Найти собственные значения и собственные функции оператора \hat{p} . (Ответ: \mathbf{p} — произвольный вещественный вектор; $\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \exp[i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar]$.)

34. Найти собственные значения и соответствующие собственные функции антиэрмитова оператора $\frac{\partial}{\partial x}$. В чем заключается принципиальное отличие ответа от случая эрмитова оператора?

35. Записать и проанализировать соотношение неопределенностей для случая совместно измеримых величин.

36. Среди величин \mathbf{r} , \mathbf{p} , \mathbf{L} , \mathbf{L}^2 найти пары совместно измеримых. Для совместно неизмеримых записать соотношения неопределенностей.

37. Проверить соотношение (3.23) для задачи 27 и волнового пакета из примера 1..3. (Указание: см. пример 3..3.)

38. Зная заряд электрона e и его массу m_e , оценить размер атома. (Ответ: $\hbar^2/(m_e e^2)$.)

Глава 4.

Гамильтониан

4.1. Временное уравнение Шредингера

Волновая функция реальной физической системы в общем случае находится из решение *временного уравнения Шредингера*:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi,} \quad (4.1)$$

где \hat{H} — гамильтониан системы. Подобно уравнениям Ньютона в классической механике, а также уравнениям Максвелла в электродинамике, уравнение Шредингера не выводится, а постулируется. Критерием правильности данного уравнения является совпадение вытекающих из него фактов с экспериментальными данными.

Для одной частицы, движущейся в поле с заданной потенциальной функцией $V(\mathbf{r}, t)$, гамильтониан

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}, t),$$

так что уравнение (4.1) принимает вид:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}, t) \right\} \Psi(\mathbf{r}, t).} \quad (4.2)$$

Граничные условия к нему вытекают из стандартных условий.

Гамильтониан многочастичной системы строится следующим образом: вначале записываются операторы кинетических и потенциальных энергий всех частиц, а также их потенциальных функций, а затем они суммируются. В частности, для системы N взаимодействующих частиц массами m_i во внешних полях $V_i(\mathbf{r}, t)$ гамильтониан имеет вид:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left[\frac{\hat{p}_i^2}{2m_i} + V_i(\mathbf{r}_i, t) \right] + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \Phi_{ij}(r_{ij}), \quad (4.3)$$

где $\Phi_{ij}(r_{ij})$ — потенциальная энергия взаимодействия i -й и j -й частиц ($r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$). Выражение (4.3) мы будем использовать при построении гамильтонианов простейших систем.

Пример 4.1. Построить гамильтониан атома водорода. Массы ядра и электрона — M и m соответственно, элементарный заряд e и зарядовое число ядра Z предполагаются известными. Ядро и электрон предполагаются точечными.

Решение. Система содержит две частицы, поэтому гамильтониан будет действовать на две векторные координаты: электронную \mathbf{r} и ядерную \mathbf{R} . Условимся обозначать переменную дифференцирования индексом u оператора “набла”. В соответствии с (4.3)

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{r}}^2 - \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{\mathbf{R}}^2 - \frac{Ze^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}|}.$$

Между электроном и ядром действует кулоновское притяжение, поэтому последнее слагаемое входит со знаком “минус”. \square

Пример 4.2. Построить гамильтониан молекулы водорода. Массы каждого протона и электрона — M и m соответственно, элементарный заряд e предполагается известным. Протоны и электроны предполагаются точечными.

Решение. Система содержит четыре частицы, поэтому гамильтониан будет действовать на четыре векторные координаты: электронные \mathbf{r}_1 , \mathbf{r}_2 и ядерные \mathbf{R}_1 , \mathbf{R}_2 . В молекуле водорода присутствуют шесть кулоновских взаимодействий: отталкивающие взаимодействия электрон–электрон и протон–протон и четыре притягивающих взаимодействия электрон–протон. Таким образом, гамильтониан содержит десять слагаемых:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{r}_1}^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{r}_2}^2 - \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{\mathbf{R}_1}^2 - \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{\mathbf{R}_2}^2 + \\ & + \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} + \frac{e^2}{|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|} - \\ & - \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_1|} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_2|} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_2|} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_1|}. \end{aligned}$$

Массы обоих электронов и протонов предполагаются одинаковыми и поэтому не нумеруются. \square

4.2. Плотность потока вероятности

На основании самосопряженности гамильтониана можно показать, что плотность вероятности (1.3) в трехмерном случае удовлетворяет уравнению непрерывности, выражающему закон сохранения количества вещества в нерелятивистской физике:

$$\frac{\partial}{\partial t} w(\mathbf{r}, t) + \operatorname{div} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = 0,$$

где величина $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ имеет смысл плотности потока вероятности и связана с волновой функцией $\Psi(\mathbf{r}, t)$ соотношением:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{2mi} [\Psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \Psi(\mathbf{r}, t) - \Psi(\mathbf{r}, t) \nabla \Psi^*(\mathbf{r}, t)], \quad (4.4)$$

m — масса частицы.

Для частицы с зарядом e локальная зарядовая плотность дается выражением $\rho_e(\mathbf{r}, t) = ew(\mathbf{r}, t)$, а плотность электрического тока, обусловленного движением частицы, — соотношением $\mathbf{j}_e(\mathbf{r}, t) = e\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$.

Стандартное условие непрерывности волновой функции необходимо для обеспечения конечности плотности потока вероятности.

Пример 4.3. *Состояние частицы массой m задается волной де Бройля (1.1). Вычислить плотность потока вероятности распределения этой частицы.*

Решение. Непосредственное использование формулы (4.4) дает

$$\mathbf{j} = |C|^2 \frac{\mathbf{p}}{m}. \quad (4.5)$$

Легко заметить, что при выборе нормировочной константы $C = 1$ выражение (4.5) будет давать классическую скорость частицы. Такая нормировка часто используется в теории рассеяния. \square

4.3. Стационарные состояния

В квантовой механике особая роль отводится системам, гамильтониан которых не зависит от времени явным образом: $\hat{H}(\xi, t) = \hat{H}(\xi)$ (так называемая *стационарная постановка задачи*). В этом случае в квантовой системе могут быть реализованы *стационарные состояния*,

в волновых функциях которых зависимость от времени *факторизована*:

$$\boxed{\Psi_E(\xi, t) = \Psi_E(\xi) \exp \left[-\frac{i}{\hbar} Et \right]}. \quad (4.6)$$

Здесь E и $\Psi_E(\xi)$ — соответственно собственное значение и собственная функция гамильтониана $\hat{H}(\xi)$, который в данном случае можно назвать оператором энергии:

$$\boxed{\hat{H}(\xi)\Psi_E(\xi) = E\Psi_E(\xi)}. \quad (4.7)$$

Уравнение (4.7) называется *стационарным уравнением Шредингера*.

На основании (4.7) *стационарные состояния определяются как состояния с определенными значениями энергии*. Поскольку энергия, как правило, является наиболее удобной для измерения величиной, стационарным состояниям отводится важная роль в квантовой теории.

Стационарные состояния обладают следующими основными свойствами:

1) их волновые функции зависят от времени по гармоническому закону (4.6);

2) средние значения плотности вероятности и плотности потока вероятности в стационарных состояниях не зависят от времени;

3) если оператор физической величины не зависит от времени явно, то ее среднее значение в стационарном состоянии тоже не будет зависеть от времени.

Энергетический спектр стационарной системы определяется характером движения: в случае финитного движения он дискретен, в случае инфинитного — непрерывен.

Среди всех возможных состояний квантовой системы обязательно имеется одно состояние с минимальной энергией — *основное состояние*. Основное состояние всегда *невырождено*.

В случае дискретного спектра состояние, ближайшее (по энергии) к основному, называется *первым возбужденным* и т.д.

Если это не приводит к недоразумениям, в записи волновой функции стационарного состояния ограничиваются одной лишь координатной зависимостью $\Psi_E(\xi)$.

В трехмерной задаче уравнение (4.7) принимает вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi_E(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\Psi_E(\mathbf{r}) = E\Psi_E(\mathbf{r}), \quad (4.8)$$

аналогичный уравнению для стоячих волн в среде с переменным показателем преломления. Таким образом, стационарные состояния можно уподобить стоячим волнам в упругой среде.

Пример 4.4. *Частица массы m совершает свободное одномерное движение. Найти энергии и волновые функции стационарных состояний.*

Решение. В случае свободного движения в уравнении Шредингера отсутствует слагаемое с потенциальной энергией и оно приводится к виду:

$$\hat{p}_x^2 \Psi(x) = 2mE\Psi(x).$$

Дальнейшее рассмотрение проводится в соответствии с примерами 3..6 и 3..7. Ненормированные волновые функции стационарных состояний

$$\Psi_E^{(\pm)}(x) = A_E^{(\pm)} \exp\left[\pm \frac{i}{\hbar} px\right],$$

где

$$p = \sqrt{2mE}, \quad E \geq 0.$$

Свободное движение является инфинитным, поэтому его спектр непрерывен. При $E > 0$ стационарные состояния будут двукратно вырождены в соответствии с тем, что движение с импульсом p возможно как в положительном, так и в отрицательном направлении оси Ox . Таким образом, вырождение здесь идет по знаку проекции импульса. \square

Пример 4.5. *Решить задачу предыдущего примера для свободного трехмерного движения.*

Решение. По аналогии с решением предыдущей задачи, получаем:

$$\Psi_E^{(\mathbf{p})}(\mathbf{r}) = A_E^{(\mathbf{p})} \exp\left[\pm \frac{i}{\hbar} \mathbf{p}\mathbf{r}\right],$$

где

$$\mathbf{p}^2 = \sqrt{2mE}, \quad E \geq 0,$$

направление импульса \mathbf{p} произвольно. Все возбужденные состояния будут здесь вырождены с бесконечной кратностью в соответствии с бесконечным числом способов ориентации вектора с заданным абсолютным значением. \square

Пример 4.6. *Найти энергии стационарных состояний плоского ротатора с моментом инерции I .*

Решение. Гамильтониан вращательного движения ротатора можно получить по аналогии с гамильтонианом поступательного движения материальной точки. Для этого в классической функции Гамильтона для плоского ротатора $\mathcal{H} = \frac{L_z^2}{2I}$ заменим $L_z \rightarrow \hat{L}_z$. Теперь можно записать стационарное уравнение Шредингера для ротатора и привести его к виду:

$$\hat{L}_z^2 \Psi(\varphi) = 2IE\Psi(\varphi).$$

На основании примеров 3..5 и 3..7 получаем решение:

$$E_m = \frac{\hbar^2 m^2}{2I}; \quad \Psi_m(\varphi) = \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}, \quad m = 0, \pm 1, \dots$$

Все стационарные состояния, за исключением основного, двукратно вырождены. Это связано с двумя возможными направлениями вращения ротатора вокруг закрепленной оси. \square

Пример 4.7. Система с не зависящим от времени гамильтонианом в начальный момент времени находилась в состоянии с волновой функцией $\Psi(\xi, 0)$. Найти волновую функцию этой системы в последующие моменты времени $\Psi(\xi, t > 0)$. Энергетический спектр и базис системы предполагаются известными.

Решение. Разложим $\Psi(\xi, 0)$ по базису стационарных состояний системы и используем их зависимость от времени (4.6):

$$\Psi(\xi, t > 0) = \sum_n c_n \Psi_n(\xi) \exp \left[-\frac{i}{\hbar} E_n t \right]. \quad (4.9)$$

Здесь

$$\hat{H}\Psi_n(\xi) = E_n \Psi_n(\xi); \quad c_n = \int \Psi_n^*(\xi) \Psi(\xi, 0) d\xi.$$

\square

Пример 4.8. Состояние свободной частицы массы m в начальный момент времени задается волновым пакетом из примера 1..3. Показать, что с течением времени пакет “расплывается”. Найти закон “расплывания”.

Решение. В момент $t = 0$ плотность вероятности местоположения будет гауссовой с шириной x_0 . Ее максимум будет двигаться со скоростью $\hbar k_0/m$, совпадающей со средней классической скоростью частицы (в волновой оптике такая скорость называется групповой).

Задачу решаем на основе предыдущего примера. Вначале найдем эволюцию волнового пакета во времени. Энергетический спектр здесь будет непрерывным, а в качестве базисных функций удобно использовать (3.14):

$$\begin{aligned} \Psi(x, t > 0) &\stackrel{(4.9)}{=} \int_{-\infty}^{+\infty} c(p) \Psi_p(x) \exp \left[-\frac{i}{\hbar} Et \right] dp \stackrel{(3.14)}{=} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} c(p) \exp \left[\frac{i}{\hbar} px - \frac{i\hbar t}{2m} p^2 \right] dp, \end{aligned} \quad (4.10)$$

т.е. пакет представляется в виде суперпозиции плоских волн де Бройля. Коэффициенты

$$\begin{aligned} c(p) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_p^*(x) \Psi(x, 0) dx = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi x_0} \sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left[-\frac{x^2}{2x_0^2} + ik_0 x - \frac{i}{\hbar} px \right] dx. \end{aligned}$$

После выделения полного квадрата в показателе экспоненты последний интеграл приводится к виду (A.4), так что

$$c(p) = \sqrt{\frac{\hbar}{x_0 \sqrt{\pi}}} \exp \left[-\frac{x_0^2}{2} \left(\frac{p}{\hbar} - k_0 \right)^2 \right]. \quad (4.11)$$

Постановка (4.11) в (4.10) и интегрирование в соответствии с (A.4), (A.5) приводят к явному виду волновой функции частицы:

$$\Psi(x, t > 0) = \frac{1}{\sqrt{x_0 \sqrt{\pi} f(t)}} \exp \left[-\frac{x^2 - 2ix_0^2 k_0 x + i\frac{\hbar t}{m} k_0^2 x_0^2}{2x_0^2 f(t)} \right],$$

где

$$f(t) = 1 + i\frac{\hbar t}{mx_0^2}.$$

Получим теперь закон изменения плотности вероятности с течением времени:

$$\begin{aligned} w(x, t) &= |\Psi(x, t)|^2 = \\ &= \frac{1}{x_0 \sqrt{\pi} \left[1 + \left(\frac{\hbar t}{mx_0^2} \right)^2 \right]^{1/2}} \exp \left[-\frac{\left(x - \frac{\hbar k_0}{m} t \right)^2}{\left[1 + \left(\frac{\hbar t}{mx_0^2} \right)^2 \right]} \right]. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Легко заметить, что плотность вероятности (4.12) по-прежнему имеет форму гауссовой кривой с той же скоростью движения максимума. Однако ее ширина теперь *увеличивается* с течением времени по закону

$$x_0(t) = x_0 \sqrt{1 + [\hbar t / (m x_0^2)]^2}.$$

В начальные моменты времени скорость такого “расплывания” можно считать постоянной и равной $\hbar / (m x_0)$.

Соотношение неопределенностей для такого пакета будет выполняться в *любой* момент времени. \square

Пример 4.9. Доказать теорему Гельмана–Фейнмана: если гамильтониан стационарной системы зависит от параметра λ , то в произвольном стационарном состоянии с энергией E

$$\left\langle \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} \right\rangle = \frac{\partial E}{\partial \lambda}. \quad (4.13)$$

Решение. Вначале формально продифференцируем стационарное уравнение Шредингера (4.7) по параметру λ , затем домножим его слева на $\Psi^*(\xi)$ и проинтегрируем по ξ с учетом нормировки $\Psi(\xi)$ на 1:

$$\langle \Psi | \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} | \Psi \rangle + \langle \Psi | \hat{H} \left| \frac{\partial \Psi}{\partial \lambda} \right\rangle = \frac{\partial E}{\partial \lambda} + E \langle \Psi \left| \frac{\partial \Psi}{\partial \lambda} \right\rangle. \quad (4.14)$$

Воспользуемся теперь самосопряженностью гамильтониана:

$$\langle \Psi | \hat{H} \left| \frac{\partial \Psi}{\partial \lambda} \right\rangle \stackrel{(2.34)}{=} \left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial \lambda} \left| \hat{H} | \Psi \right\rangle^* \stackrel{(4.7)}{=} E \left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial \lambda} \left| \Psi \right\rangle^* \stackrel{(2.34)}{=} E \langle \Psi \left| \frac{\partial \Psi}{\partial \lambda} \right\rangle.$$

Теперь вторые слагаемые в обеих частях равенства (4.14) уничтожаются и мы приходим к (4.13). \square

Пример 4.10. У частицы с массой m имеются стационарные состояния $\Psi_i(\mathbf{r})$ и $\Psi_f(\mathbf{r})$ с энергиями E_i и E_f соответственно. Доказать соотношение:

$$\langle \Psi_f | \hat{\mathbf{p}} | \Psi_i \rangle = i m \omega_{fi} \langle \Psi_f | \mathbf{r} | \Psi_i \rangle, \quad (4.15)$$

где $\omega_{fi} = (E_f - E_i) / \hbar$.

Решение. Из условия задачи следует, что

$$\hat{H} \Psi_i(\mathbf{r}) = E_i \Psi_i(\mathbf{r}); \quad \hat{H} \Psi_f(\mathbf{r}) = E_f \Psi_f(\mathbf{r}), \quad (4.16)$$

где \hat{H} — гамильтониан частицы.

Из доказанного ранее тождества (2.21) получаем соотношение:

$$\langle \Psi_f | [\mathbf{r}, \hat{H}] | \Psi_i \rangle = \frac{i\hbar}{m} \langle \Psi_f | \mathbf{p} | \Psi_i \rangle.$$

Преобразуем его левую сторону на основании стационарных уравнений Шредингера (4.16) и самосопряженности гамильтониана:

$$\begin{aligned} \langle \Psi_f | \mathbf{r} \hat{H} | \Psi_i \rangle &\stackrel{(4.16)}{=} E_i \langle \Psi_f | \mathbf{r} | \Psi_i \rangle; \\ \langle \Psi_f | \hat{H} \mathbf{r} | \Psi_i \rangle &= \langle \Psi_f | \hat{H} | \mathbf{r} \Psi_i \rangle \stackrel{(2.34)}{=} \langle \mathbf{r} \Psi_i | \hat{H} | \Psi_f \rangle^* \stackrel{(4.16)}{=} E_f \langle \Psi_f | \mathbf{r} | \Psi_i \rangle. \end{aligned}$$

Мы приходим к важному соотношению (4.15). Оно используется в аналитических преобразованиях, а также при проверке точности приближенных решений уравнения Шредингера. \square

Задачи для самостоятельного решения

39. Плоский ротатор с моментом инерции J в момент времени $t = 0$ приведен в состояние с волновой функцией (3.19). Найти волновую функцию в последующие моменты $t > 0$.

(*Ответ:* $\Psi(\varphi, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \left[1 + \cos \varphi \exp\left(-\frac{i\hbar t}{2J}\right) + \cos 2\varphi \exp\left(-\frac{2i\hbar t}{J}\right) \right].$)

40. Могут ли состояния с нижеприведенными волновыми функциями быть стационарными?

$$\begin{aligned} \Psi(\xi, t) &= \Phi(\xi) e^{-i(\varepsilon - i\gamma)t}; & \Psi(\xi, t) &= \Phi(\xi) e^{-i\varepsilon t} - \Phi^*(\xi) e^{i\varepsilon t}; \\ \Psi(\varphi, t) &= \frac{A}{2} \left(1 - \cos 2\varphi e^{2i\hbar t/\alpha} \right); & \Psi(\xi, t) &= \Phi_1(\xi) e^{-i\varepsilon t} + \Phi_2(\xi) e^{-2i\varepsilon t}; \\ \Psi(\xi, t) &= \Phi(\xi, t) e^{-iEt/\hbar}; & \Psi(\xi, t) &= \Phi(\xi, t) e^{b-i\varepsilon t}. \end{aligned}$$

Все константы предполагать вещественными.

41*. Показать, что в волновом пакете из примера 1..3 уравнение непрерывности выполняется в любой момент времени.

42. Показать, что в стационарных состояниях финитного движения среднее значение импульса равно нулю.

43*. Обобщить задачу примера 4..10 на нестационарный случай.

Глава 5.

Интегралы движения в квантовой механике

5.1. Дифференцирование операторов по времени

Частная производная оператора физической величины F по времени $\frac{\partial \hat{F}}{\partial t}$ получается обычным дифференцированием явной аналитической формы оператора.

Полная производная по времени $\frac{d\hat{F}}{dt}$ требует специального определения: полной производной будем называть такой *оператор*, для которого при усреднении в *произвольном* состоянии выполняется соотношение:

$$\left\langle \frac{d\hat{F}}{dt} \right\rangle \stackrel{\text{def}}{=} \frac{d}{dt} \langle \hat{F} \rangle. \quad (5.1)$$

В квантовой системе с гамильтонианом \hat{H} полная производная оператора физической величины F связана с частной производной *уравнением движения в форме Гейзенберга*:

$$\frac{d\hat{F}}{dt} = \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [\hat{F}, \hat{H}]. \quad (5.2)$$

Таким образом, полная производная оператора по времени существенно зависит от типа взаимодействия в системе. *Она может оказаться ненулевой даже в том случае, когда оператор не зависит от времени явно, т.е. при нулевой частной производной.*

Уравнение (5.2) формально получается из известного классического соотношения заменой физических величин их операторами, а также скобок Пуассона коммутатором $\frac{1}{i\hbar} [\dots, \dots]$.

На основании (5.2) можно показать, что для полной производной оператора по времени справедливы те же свойства, что и для производной функции, *если учитывать строгий порядок следования сомножителей.*

Рассмотрим примеры использования соотношения (5.2).

Пример 5.1. Частица с массой m движется во внешнем силовом поле с потенциальной энергией $V(\mathbf{r})$. Получить явный вид операторов скорости и ускорения частицы.

Решение. Операторы координаты и импульса не зависят от времени явно, поэтому

$$\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} = 0, \quad \frac{\partial \hat{\mathbf{p}}}{\partial t} = 0. \quad (5.3)$$

В соответствии с (5.2), (5.3) имеем:

$$\hat{\mathbf{v}} = \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{r}, \hat{H}] \stackrel{(2.21)}{=} \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m}; \quad (5.4)$$

$$\hat{\mathbf{w}} = \frac{1}{m} \frac{d\hat{\mathbf{p}}}{dt} = \frac{1}{i\hbar m} [\hat{\mathbf{p}}, \hat{H}] \stackrel{(2.22)}{=} -\frac{1}{m} \nabla V(\mathbf{r}). \quad (5.5)$$

Соотношения (5.4), (5.5) имеют классические аналоги. \square

Пример 5.2. Доказать квантовую теорему о вириале: если потенциальная энергия имеет вид ямы $V(\mathbf{r}) = V_0 r^N$, то в произвольном стационарном состоянии для средних значений кинетической и потенциальной энергии выполняется соотношение:

$$\boxed{2\langle T \rangle = N\langle V \rangle}. \quad (5.6)$$

Решение. Введем вспомогательную величину $\hat{F} = \mathbf{r}\hat{\mathbf{p}}$ (вириал). Очевидно, что в произвольном стационарном состоянии

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{r}\mathbf{p} \rangle = 0. \quad (5.7)$$

С другой стороны,

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{r}\mathbf{p} \rangle \stackrel{(5.1)}{=} \left\langle \frac{d}{dt} (\mathbf{r}\mathbf{p}) \right\rangle \stackrel{(5.7)}{=} 0. \quad (5.8)$$

В соответствии со свойствами полной производной оператора по времени и результатами задачи из предыдущего примера

$$\frac{d}{dt} (\mathbf{r}\hat{\mathbf{p}}) = \frac{d\mathbf{r}}{dt} \hat{\mathbf{p}} + \mathbf{r} \frac{d\hat{\mathbf{p}}}{dt} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{m} - \mathbf{r} \nabla V(\mathbf{r}) = 2\hat{T} - NV_0 r^N = 2\hat{T} - NV,$$

где m — масса частицы.

На основании (5.8) из последнего равенства получается (5.6). \square

5.2. Интегралы движения

Интегралом движения (или сохраняющейся величиной) называется физическая величина, среднее значение которой в произвольном состоянии не зависит от времени.

В соответствии с определением (5.1) критерием сохранения физической величины является равенство нулю полной производной ее оператора по времени.

В частности, если физическая величина не зависит явно от времени, критерием ее сохранения будет коммутация ее оператора с гамильтонианом физической системы [см. (5.2)].

Таким образом, наличие интегралов движения полностью определяется типом физического взаимодействия в квантовой системе, а точнее — его пространственно-временной симметрией.

Рассмотрим типичные примеры интегралов движения.

Пример 5.3. *Показать, что если гамильтониан не зависит явно от времени, то полная энергия будет интегралом движения.*

Решение. В данной ситуации гамильтониан будет оператором полной энергии. Поэтому после замены в (5.2) $\hat{F} \rightarrow \hat{H}$ мы приходим к равенству нулю полной производной гамильтониана, т.к. в отсутствие его явной зависимости от времени его частная производная обращается в нуль. \square

Пример 5.4. *Показать, что в отсутствие силовых полей импульс сохраняется.*

Решение. В явный вид оператора импульса $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ время не входит, поэтому его частная производная по времени обращается в нуль и остается найти условие обращения в нуль его коммутатора с гамильтонианом:

$$[\hat{H}, \hat{\mathbf{p}}] = \frac{1}{2m} \underbrace{[\hat{\mathbf{p}}^2, \hat{\mathbf{p}}]}_0 + [V, \hat{\mathbf{p}}] \stackrel{(2.20)}{=} i\hbar \text{grad } V.$$

Данное равенство обращается в нуль только в отсутствие внешних силовых полей. \square

Как следствие, сохраняется проекция импульса на то направление, вдоль которого не действуют никакие силы.

Пример 5.5. *Показать, что в аксиально-симметричных силовых полях проекция орбитального момента на ось симметрии является интегралом движения.*

Решение. Задачу удобно решать в *цилиндрических координатах* (ρ, φ, z) , когда потенциальная функция не зависит от полярного угла $[V(\mathbf{r}) = V(\rho, z)]$. Рекомендуем самостоятельно получить гамильтониан частицы массой m в аксиально-симметричном поле:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \underbrace{\left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right]}_{\nabla^2} + V(\rho, z). \quad (5.9)$$

В цилиндрических координатах, подобно сферическим, \hat{L}_z определяется соотношением (2.31) (показать самостоятельно) и не содержит явной зависимости от времени, поэтому достаточно доказать коммутацию (2.31) и (5.9). Отсутствие зависимости $V(\rho, z)$ от полярного угла в цилиндрических координатах очевидным образом приводит к обращению в нуль коммутатора $[\hat{H}, \hat{L}_z]$ с гамильтонианом (5.9). \square

Пример 5.6. *Показать, что в сферически-симметричных (центральных) силовых полях квадрат орбитального момента является интегралом движения.*

Решение. Задачу удобно решать в *сферических координатах* (r, θ, φ) , когда потенциальная функция не зависит от полярного угла $[V(\mathbf{r}) = V(r)]$. Рекомендуем самостоятельно получить гамильтониан частицы массой m в центральном поле:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \underbrace{\left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{r^2} \right]}_{\nabla^2} + V(r). \quad (5.10)$$

Вид оператора \mathbf{L}^2 в сферических координатах дается выражением (2.32) и не содержит явной зависимости от времени, поэтому достаточно доказать коммутацию (2.32) и (5.10). Отсутствие зависимости $V(r)$ от сферических углов в сферических координатах очевидным образом приводит к обращению в нуль коммутатора $[\hat{H}, \hat{\mathbf{L}}^2]$ с гамильтонианом (5.10). \square

Как видим, условия сохранения рассмотренных величин такие же, как и в классической механике.

Исследуем теперь условия сохранения типично квантовой величины — *четности*.

Пример 5.7. *Показать, что если потенциальная энергия является*

четной функцией координат, то четность будет интегралом движения.

Решение. Запишем гамильтониан частицы массы m в поле $V(\mathbf{r}) = V(-\mathbf{r})$ для удобства в следующем виде:

$$\hat{H}(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} + V(\mathbf{r}). \quad (5.11)$$

В соответствии с таблицей 2.1 четность изображается оператором инверсии, который не содержит явной зависимости от времени. Поэтому достаточно доказать его коммутацию с гамильтонианом (5.11), принимая во внимание четность $V(\mathbf{r})$. Подействуем коммутатором $[\hat{H}(\mathbf{r}), \hat{I}]$ на произвольную функцию $\Psi(\mathbf{r})$:

$$\begin{aligned} [\hat{H}(\mathbf{r}), \hat{I}] \Psi(\mathbf{r}) &\equiv \hat{H}(\mathbf{r}) \hat{I} \Psi(\mathbf{r}) - \hat{I} \hat{H}(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) = \hat{H}(\mathbf{r}) \Psi(-\mathbf{r}) - \hat{H}(-\mathbf{r}) \Psi(-\mathbf{r}) = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(-\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}^2} + V(\mathbf{r}) \Psi(-\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(-\mathbf{r})}{\partial (-\mathbf{r})^2} - V(-\mathbf{r}) \Psi(-\mathbf{r}) = \\ &= [V(\mathbf{r}) - V(-\mathbf{r})] \Psi(-\mathbf{r}). \end{aligned}$$

При условии $V(\mathbf{r}) = V(-\mathbf{r})$ данное выражение тождественно обращается в нуль, что и доказывает коммутацию $\hat{H}(\mathbf{r})$ и \hat{I} . \square

Верны и обратные утверждения.

Состояния квантовой системы целесообразно выбирать так, чтобы оно характеризовалось максимальным числом *независимых совместно измеримых* интегралов движения (их *полным набором*). Число элементов в полном наборе равно числу степеней свободы квантовой системы.

Задачи для самостоятельного решения

44. Показать, что для частицы, движущейся в постоянном однородном поле действия силы \mathbf{f} , величина $\mathbf{F} = \mathbf{p} - \mathbf{f}t$ будет интегралом движения.

45. Доказать следующие свойства полной производной:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} (\alpha \hat{F}) &= \alpha \frac{d\hat{F}}{dt}; \\ \frac{d}{dt} (\hat{F} + \hat{G}) &= \frac{d\hat{F}}{dt} + \frac{d\hat{G}}{dt}; \end{aligned}$$

$$\frac{d}{dt} (\hat{F}\hat{G}) = \frac{d\hat{F}}{dt} \hat{G} + \hat{F} \frac{d\hat{G}}{dt}.$$

46. Указать физические величины (их полные наборы), сохраняющиеся при движении бесспиновых заряженных частиц в следующих полях:

- 1) при свободном движении;
- 2) в поле бесконечного однородного цилиндра с осью Oz ;
- 3) в поле бесконечной однородной плоскости (xOy);
- 4) в поле однородного шара;
- 5) в поле бесконечной однородной полуплоскости (xOz), $z > 0$.
- 6) в поле двух точечных зарядов;
- 7) в однородном переменном поле;
- 8) в поле равномерно заряженного бесконечного прямого провода с переменным зарядом;
- 9) в поле однородного трехосного эллипсоида;
- 10)* в поле бесконечной однородной цилиндрической винтовой линии с шагом a [*Ответ:* E , $L_z + ap_z/(2\pi\hbar)$].

47. Величины f_1 и f_2 являются интегралами движения. Показать, что величины, соответствующие операторам $\{\hat{f}_1, \hat{f}_2\}$ и $i[\hat{f}_1, \hat{f}_2]$, будут тоже интегралами движения.

48. В условиях примера 5..2 частица находится в стационарном состоянии с энергией E . Вычислить средние значения кинетической и потенциальной энергии частицы.

(*Ответ:* $\langle T \rangle = \frac{NE}{N+2}$; $\langle U \rangle = \frac{2E}{N+2}$.)

49*. Электрон с массой m_e и зарядом $-e$ ($e > 0$) движется в поле неподвижного притягивающего кулоновского центра с зарядом $Ze > 0$. В классическом случае одним из интегралов движения был бы вектор Рунге–Ленца:

$$\mathbf{A} = \frac{\mathbf{r}}{r} - \frac{[\mathbf{v} \times \mathbf{L}]}{Ze^2}.$$

Построить оператор, соответствующий вектору Рунге–Ленца. Показать, что эта величина сохраняется и в микромире. Вычислить коммутаторы $[\hat{L}_i, \hat{A}_k]$, $[\hat{A}_i, \hat{A}_k]$.

Математическое приложение

А. Интеграл вероятности

Вычислим вначале *интеграл Пуассона*

$$P = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} dx.$$

Возведем его в квадрат и преобразуем к двойному интегралу:

$$\begin{aligned} P^2 &= \left[\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} dx \right]^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} dx \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-y^2} dy = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2-y^2} dx dy. \end{aligned}$$

Если последний интеграл рассматривать в декартовых координатах, то заменой переменных $x = r \cos \varphi$, $y = r \sin \varphi$, $dx dy = r dr d\varphi$ его можно привести к полярным координатам:

$$P^2 = \underbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi}_{2\pi} \int_0^{\infty} e^{-r^2} r dr = \pi \underbrace{\int_0^{\infty} e^{-t} dt}_1 = \pi.$$

Таким образом,

$$\boxed{P = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi}.} \quad (\text{A.1})$$

Из (A.1) следует, что

$$P(\alpha) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}. \quad (\text{A.2})$$

n -кратное дифференцирование (A.2) по параметру α приводит к следующему результату:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^{2n} e^{-x^2} dx = \left(-\frac{\partial}{\partial \alpha} \right)^n P(\alpha) \Big|_{\alpha=1} = \frac{(2n-1)!!}{2^n} \sqrt{\pi}. \quad (\text{A.3})$$

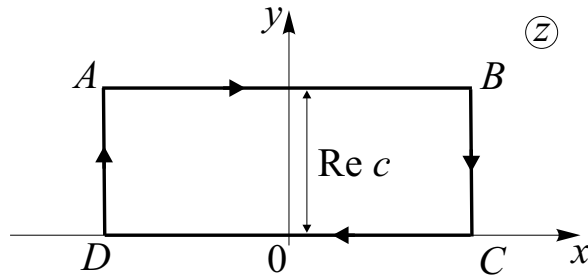


Рис. 5.1.

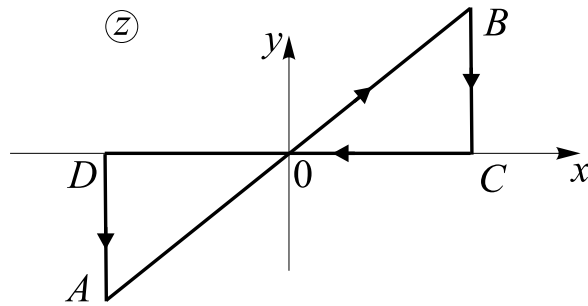


Рис. 5.2.

Приведем здесь главные свойства интеграла Пуассона (А.1).

1. При параллельном смещении пути интегрирования в комплексную плоскость его значение не изменяется:

$$\int_{-\infty+ic}^{+\infty+ic} e^{-z^2} dz = \sqrt{\pi}, \quad (\text{А.4})$$

где $c = \text{const}$.

Для доказательства (А.4) следует выбрать контур интегрирования функции e^{-z^2} в соответствии с рис. 5.1 и устремить отрезки DA и BC к бесконечности.

2. При произвольном повороте пути интегрирования в комплексной плоскости его значение не изменяется:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-[xe^{i\alpha}]^2} dx = \sqrt{\pi}, \quad (\text{А.5})$$

где $\alpha = \text{const}$, $-\frac{\pi}{4} < \alpha < \frac{\pi}{4}$.

Для доказательства (А.5) можно вновь воспользоваться контуром интегрирования из рис. 5.1, но отрезок AB должен теперь проходить через начало координат под углом α к вещественной оси (рис. 5.2).

Интеграл Пуассона (A.1) является частным случаем так называемой *функции ошибок*:

$$\boxed{\operatorname{erf} x = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-z^2} dz.} \quad (\text{A.6})$$

Ее значения табулированы. Легко показать, что $\operatorname{erf} \infty = 1$. Также используется функция

$$\operatorname{erfc} x = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^\infty e^{-z^2} dz = 1 - \operatorname{erf} x. \quad (\text{A.7})$$

Б. Гамма-функция и связанные с ней интегралы

Гамма-функция часто определяется интегралом, зависящим от параметра:

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty t^{z-1} e^{-t} dt. \quad (\text{B.8})$$

Она табулирована и обладает следующими основными свойствами:

Во-первых,

$$\Gamma(z + 1) = z\Gamma(z). \quad (\text{B.9})$$

Во-вторых, при целых отрицательных z и в нуле она имеет простые полюсы.

В-третьих, непосредственное вычисление $\Gamma(1) = 1$ вместе с использованием формулы (B.9) дает:

$$\Gamma(n) = (n - 1)! \quad (\text{B.10})$$

Некоторые важные интегралы можно свести к Γ -функции. Так, например, для интеграла Пуассона имеем:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-z^2} dz = 2\Gamma\left(\frac{1}{2}\right).$$

Другой интеграл, важный в теории атома водорода, получается из (B.10):

$$\boxed{\int_0^\infty t^n e^{-t} dt = n!} \quad (\text{B.11})$$

Данная формула также может быть получена последовательным n -кратным интегрированием по частям.

В. Символ Леви–Чивита

Символ Леви–Чивита ε_{ijk} , каждый индекс которого может пробегать значения 1, 2, 3, или соответственно x, y, z , определяется следующим образом:

1) $\varepsilon_{123} = 1$;

2) символ изменяет знак при перестановке двух любых индексов; как следствие, *при наличии одинаковых индексов символ Леви–Чивита обращается в нуль.*

Можно сформулировать следующее правило вычисления символа с тремя различными индексами: символ Леви–Чивита равен 1, если он приводится к ε_{123} *циклической* перестановкой индексов, и -1 , если *нециклической* перестановкой.

Аналогично формулируется перестановочное свойство: *при циклической перестановке индексов значение символа Леви–Чивита не изменяется, при нециклической перестановке символ меняет знак.*

Данный символ удобен для записи декартовых компонент векторных произведений:

$$[\mathbf{A} \times \mathbf{B}]_k = \sum_{l,m} \varepsilon_{klm} A_l B_m; \quad (\text{B.12})$$

$$(\text{rot } \mathbf{A})_k = \sum_{l,m} \varepsilon_{klm} \frac{\partial A_m}{\partial x_l}. \quad (\text{B.13})$$

В записи (B.13) полагается $x_1 \equiv x, x_2 \equiv y, x_3 \equiv z$.

Важнейшее свойство символа ε_{ijk} выражается тождеством:

$$\varepsilon_{klm} \varepsilon_{pqr} = \begin{vmatrix} \delta_{kp} & \delta_{lp} & \delta_{mp} \\ \delta_{kq} & \delta_{lq} & \delta_{mq} \\ \delta_{kr} & \delta_{lr} & \delta_{mr} \end{vmatrix}. \quad (\text{B.14})$$

Сворачивая (B.14) по парам соответствующих индексов, получаем:

$$\begin{aligned} \sum_m \varepsilon_{klm} \varepsilon_{pqt} &= \delta_{kp} \delta_{lq} - \delta_{kq} \delta_{lp}; \\ \sum_{l,m} \varepsilon_{klm} \varepsilon_{plm} &= 2\delta_{kp}; \\ \sum_{k,l,m} \varepsilon_{klm} \varepsilon_{klm} &= 6. \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

Тождество (В.15) использовано при выводе коммутационных соотношений для оператора орбитального момента.

Г. Дельта-функция Дирака

Дельта-функция Дирака определяется как ядро “фильтрующего” интегрального оператора, который сопоставляет произвольной регулярной функции ее значение в нуле:

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) f(x) dx \stackrel{\text{def}}{=} f(0).} \quad (\text{Г.16})$$

Определение (Г.16) обобщается на 3-мерный случай:

$$\boxed{\int \delta(\mathbf{r}) f(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \stackrel{\text{def}}{=} f(0).} \quad (\text{Г.17})$$

В декартовых координатах δ -функция векторного аргумента связана с 1-мерной δ -функцией простым соотношением:

$$\boxed{\delta(\mathbf{r}) = \delta(x)\delta(y)\delta(z).} \quad (\text{Г.18})$$

Напомним основные свойства δ -функции.

1. *Четность*: $\delta(-x) = \delta(x)$.
2. *n -я производная δ -функции* является ядром интегрального оператора, действующего согласно правилу:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta^{(n)}(x) f(x) dx = (-1)^n \left. \frac{d^n f(x)}{dx^n} \right|_{x=0}.$$

3. *Дифференцируемая функция $g(x)$ в аргументе δ -функции*:

$$\delta[g(x)] = \sum_i \frac{\delta(x - x_i)}{\left| \frac{dg(x)}{dx} \right|_{x=x_i}},$$

где x_i — i -й нуль функции $g(x)$. В частности,

$$\boxed{\delta(\alpha x) = \frac{\delta(x)}{|\alpha|}.} \quad (\text{Г.19})$$

4. Аналитические представления δ -функции. Известны многочисленные аналитические представления δ -функции. Напомним наиболее распространенные интегральное

$$\boxed{\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ixq} dq} \quad (\text{Г.20})$$

и три предельных представления:

$$\begin{aligned} \delta(x) &= \lim_{a \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{\pi a}} \exp \left[-\frac{x^2}{a} \right]; \\ \delta(x) &= \lim_{a \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \frac{a}{x^2 + a^2}; \\ \delta(x) &= \lim_{a \rightarrow \infty} \frac{1}{\pi} \frac{\sin ax}{x}. \end{aligned}$$

Соотношение (Г.20) допускает 3-мерное обобщение:

$$\boxed{\delta(\mathbf{r}) \stackrel{(\text{Г.18})}{=} \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i\mathbf{r}\mathbf{q}} d^3\mathbf{q}.} \quad (\text{Г.21})$$

Литература

Основная

1. Давыдов А.С. Квантовая механика / А.С. Давыдов. – М. : Наука, 1973. – 704 с.
2. Блохинцев Д.И. Основы квантовой механики / Д.И. Блохинцев. – М. : Наука, 1983. – 664 с.
3. Галицкий В.М. Задачи по квантовой механике / В.М. Галицкий, Б.М. Карнаков, В.И. Коган. – М. : Наука, 1992. – 880 с.
4. Сборник задач по теоретической физике / Л.Г. Гречко [и др.] – М. : Высш. шк., 1984. – 319 с.

Дополнительная

1. Ландау Л.Д. Теоретическая физика : в 10-ти т. / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – М. : Физматлит, 2001. – Т. 3. : Квантовая механика : Нерелятивистская теория. – 803 с.
2. Левич В.Г. Курс теоретической физики : в 2-х т. / В.Г. Левич, Ю.А. Вдовин, В.А. Мямлин. – М. : Наука, 1971. – Т. 2. – 936 с.
3. Флюгге З. Задачи по квантовой механике : в 2-х т. / З. Флюгге; под ред. А.А. Соколова. – Череповец : Меркурий-ПРЕСС, 2000. – Т. 1. – 341 с.

Учебное издание

Копытин Игорь Васильевич,
Корнев Алексей Станиславович

ЗАДАЧИ ПО КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

Учебное пособие для вузов

Часть 1

Редактор Воронина А.П.