

**Министерство общего и профессионального образования  
Российской Федерации**

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

Нижегородский государственный педагогический университет

Ефремов Г.Ф., Янкина А.А., Ларионова Н.В., Четнева Ю.И.

# КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА для бакалавров.

**Учебное пособие**

Издательство Нижегородского университета  
Нижний Новгород,  
2002

УДК 53  
ББКГ 62  
Я 60

**Ефремов Г.Ф., Янкина А.А., Панкратова Н.В., Четнева Ю.И.** КВАНТОВАЯ  
МЕХАНИКА для бакалавров. *Учебное пособие*. Н.Новгород: Издательство  
Нижегородского университета, 2000.

Рецензенты:

профессор, зав. кафедрой теоретической физики ННГУ **В.Я.Демиховский**,  
доцент, зав. кафедрой теоретической физики НГПУ **Ю.Г. Шондин**

Цель данного пособия дать единый аксиоматический подход к изучению квантовой теории релятивистских и нерелятивистских систем.

В основу положено минимальное число принципов – постулатов, которые не могут быть доказаны в рамках существующей теории. Основное внимание сосредоточено на физическом содержании квантовой теории.

Пособие предназначено для студентов физических специальностей университетов.

# Содержание:

## Предисловие

### Глава I Фундаментальные идеи квантовой механики

- §1 Идея о дискретности значений физических величин
  - 1.1 Классическая теория равновесного излучения
  - 1.2 Гипотеза Планка. Формула Планка. Фундаментальная постоянная Планка
- §2 Корпускулярно-волновой дуализм
  - 2.1 Квантовая теория света Эйнштейна
  - 2.2. Гипотеза де Бройля. Волна де Бройля
  - 2.3 Соотношение неопределенностей. Волновой дуализм
- §3 Статистический характер квантовых закономерностей
  - 3.1 Вероятностный характер поведения микрообъектов
  - 3.2 Статистический характер квантовой механики
  - 3.3 Статистическая интерпретация волновой функции
  - 3.4 Интерференция электронов от двух щелей

### Глава II Математический аппарат и аксиоматика квантовой механики

- §4 Математический аппарат квантовой механики
  - 4.1 Векторы в линейном векторном пространстве
    - А) Линейное векторное (комплексное) пространство
    - В) Унитарное и гильбертово пространство
  - 4.2 Операторы в линейном векторном пространстве
    - А) Линейные самосопряжённые (эрмитовы) операторы
    - В) Собственные векторы и собственные значения самосопряжённых операторов
- §5 Принципы и постулаты квантовой механики
  - 5.1 Принцип соответствия
  - 5.2 Определение состояния квантовой системы
  - 5.3 Принцип суперпозиции состояний
  - 5.4 Постулат квантования
  - 5.5 Правила квантования
  - 5.6 Вычисление средних значений физических величин
  - 5.7 Принцип тождественности (неразличимости) одинаковых частиц

### Глава III Основы теории представлений

- §6 Координатное представление
  - 6.1 Векторы состояния в координатном представлении
  - 6.2 Операторы физических величин в координатном представлении
  - 6.3 Средние значения физических величин в координатном представлении
- §7 Импульсное представление
  - 7.1 Векторы состояния в импульсном представлении
  - 7.2 Средние значения физических величин в импульсном представлении
- §8 Матричное представление
  - 8.1 Векторы состояния в матричном представлении
  - 8.2 Операторы физических величин в матричном представлении
  - 8.3 Средние значения физических величин и матрица плотности

### Глава IV Одновременная измеримость физических величин. Соотношения неопределенностей Гейзенберга

- §9 Одновременная измеримость физических величин

9.1 О возможности одновременно точного определения динамических переменных (наблюдаемых)

9.2 Условие возможности одновременного измерения двух физических величин

§10 Полный набор физических величин. Перестановочные соотношения Гейзенберга

§11 Вывод соотношений неопределённостей для координат и канонически сопряжённых импульсов

§12 Соотношения неопределённостей для произвольных физических величин с некоммутирующими операторами

Глава V Квантовая динамика. Эволюция квантовых систем во времени

§13 Эволюция квантовых систем во времени: уравнение Гейзенберга

§14 Шредингеровская картина движения. Волновое уравнение Шредингера

§15 Уравнение фон Неймана. Сопоставление способов описания эволюции квантовых систем во времени

15.1 Уравнение фон Неймана для матрицы плотности

15.2 Сопоставление способов описания эволюции квантовых систем во времени

15.3 Принцип причинности

§16 Следствия из квантовых уравнений движения

16.1 Стационарные состояния в квантовой механике

16.2 Законы сохранения (интегралы движения) в квантовой механике

Глава VI Квантовая теория гармонических колебаний и волн

§17 Спектр значений энергии гармонического осциллятора

§18 Стационарные состояния гармонического осциллятора. Координатное, импульсное и матричное представления

Глава VII Квантовая теория момента

§19 Общие свойства и особенности квантового момента

§20 Собственные значения и собственные векторы проекции и квадрата момента

**§21 Орбитальный и спиновый моменты. Спин как внутренняя степень свободы.**

**§22 Спин электрона. Матрицы Паули и их свойства.**

**§23 Сложение квантовых моментов**

**§24 Уравнение Паули. Собственный магнитный момент электрона.**

**§25. Спин электрона и релятивистская теория. Уравнение Дирака.**

**Библиография**

**Аннотация**  
**к учебному пособию**  
**Ефремова Г.Ф., Янкиной А.А., Ларионовой Н.В., Четнёвой Ю.И.**  
**по курсу теоретической физики**  
**«Квантовая механика для бакалавров»**

Настоящее учебное пособие написано на основе обработки лекций по курсу теоретической физики (квантовая механика) для бакалавров, читавшемуся в течение ряда лет студентам радиофизического факультета ННГУ. Необходимость написания нового учебного пособия по квантовой теории обусловлена её всё возрастающей ролью в различных областях науки и техники.

В 1900 году произошло открытие, которое перевернуло наши представления об окружающем нас мире, существенно повлияло на темп и характер развития человеческой цивилизации. Речь идёт об открытии кванта действия М.Планком (гипотеза дискретности), которое положено в основу современной физической картины мира. Современная физическая теория является принципиально квантовой и включает в себя как предельный случай классическую. В настоящее время имеется ряд прекрасных учебников по нерелятивистской квантовой механике. В тоже время релятивистская квантовая теория полей излагается в монографиях и трудах, не доступных для физиков-бакалавров на первой стадии изучения квантовой теории.

Современные приложения квантовой теории настоятельно требуют единого взгляда на релятивистскую и нерелятивистскую квантовую теорию. Цель данного пособия дать единый аксиоматический подход к изучению квантовой теории как релятивистских так и нерелятивистских систем. В основе квантовой теории имеется минимальное число принципов-постулатов, которые не могут быть доказаны в рамках существующей теории.

Пособие состоит из двух частей. В первой части изложены общие положения современной квантовой теории. Применение полевого операторного метода в квантовой теории гармонических колебаний и волн направлено на наиболее важные приложения в квантовой теории колебаний кристаллической решётки, квантовой теории электромагнитного поля. Близкий операторный метод применяется при построении общей теории квантового момента, включающей одновременно спиновый и орбитальный моменты. Завершается первая часть описанием электрона с учётом его спина. Дан вывод уравнения Паули и на его основе проведено обобщение на релятивистскую область, изложена теория Дирака.

Во второй части пособия рассматриваются преобразования симметрии, их следствия и ряд приложений. Уделено большое внимание теореме Блоха, необходимой для физики кристаллических тел. На основе принципа тождественности частиц излагается метод вторичного квантования для ферми и бозе систем. Метод возмущений демонстрируется на задачах из физики твёрдого тела и квантовой радиофизики.

## Предисловие.

Настоящее учебное пособие написано на основе обработки лекций по курсу теоретической физики (квантовая механика) для бакалавров, читавшемуся в течение ряда лет студентам радиофизического факультета ННГУ. Необходимость написания нового учебного пособия по квантовой теории обусловлена её всё возрастающей ролью в различных областях науки и техники.

В 1900 году произошло открытие, которое перевернуло наши представления об окружающем нас мире, существенно повлияло на темп и характер развития человеческой цивилизации. Речь идёт об открытии кванта действия М.Планком (гипотеза дискретности), которое положено в основу современной физической картины мира. Современная физическая теория является принципиально квантовой и включает в себя как предельный случай классическую. В настоящее время имеется ряд прекрасных учебников по нерелятивистской квантовой механике. В тоже время релятивистская квантовая теория полей излагается в монографиях и трудах, не доступных для физиков-бакалавров на первой стадии изучения квантовой теории.

Современные приложения квантовой теории настоятельно требуют единого взгляда на релятивистскую и нерелятивистскую квантовую теорию. Цель данного пособия дать единый аксиоматический подход к изучению квантовой теории как релятивистских так и нерелятивистских систем. В основе квантовой теории имеется минимальное число принципов-постулатов, которые не могут быть доказаны в рамках существующей теории.

Пособие состоит из двух частей. В первой части изложены общие положения современной квантовой теории. Применение полевого операторного метода в квантовой теории гармонических колебаний и волн направлено на наиболее важные приложения в квантовой теории колебаний кристаллической решётки, квантовой теории электромагнитного поля. Близкий операторный метод применяется при построении общей теории квантового момента, включающей одновременно спиновый и орбитальный моменты. Завершается первая часть описанием электрона с учётом его спина. Дан вывод уравнения Паули и на его основе проведено обобщение на релятивистскую область, изложена теория Дирака.

Во второй части пособия рассматриваются преобразования симметрии, их следствия и ряд приложений. Уделено большое внимание теореме Блоха, необходимой для физики кристаллических тел. На основе принципа тождественности частиц излагается метод вторичного квантования для ферми и бозе систем. Метод возмущений демонстрируется на задачах из физики твёрдого тела и квантовой радиофизики.

## Глава I. Фундаментальные идеи квантовой механики

Остановимся на историческом аспекте квантовой физики.

Квантовая механика является одним из важнейших разделов теоретической физики. Она неразрывно связана с другими разделами физики: классической механикой, электродинамикой, статистической физикой.

Остановимся на историческом аспекте квантовой физики.

В октябре 1900 года произошло открытие, которое перевернуло наши представления об окружающем нас мире, существенно повлияло на темпы и характер развития человеческой цивилизации.

Речь идет об открытии кванта действия М.Планком, которое положено в основу современной квантовой теории. Анализ событий истории и в особенности такого эпохального открытия весьма поучителен и полезен для прогноза развития науки в XXI веке. Исторический анализ состояния физики до и после открытия кванта действия важен с точки зрения правильного понимания современной квантовой теории.

Остановимся на состоянии физики до открытия квантовых представлений.

Современная физика условно делится на классическую и квантовую. Более общая квантовая теория включает в себя как предельный случай классическую. Перечислим основные достижения классической физики:

1. Разработаны мощные аналитические методы механики (Лагранж, Гамильтон, Якоби, Жуковский и др.)
2. Заложены основы классической электродинамики, включающей в себя уравнения Максвелла и электронную теорию Лоренца.
3. Сформулированы удивительные по красоте универсальные принципы термодинамики.
4. Сформулированы основные положения статистической физики и кинетики (распределения Максвелла – Больцмана – Гиббса; кинетическая теория Больцмана; теория электропроводности и теплопроводности Друде).

Таким образом, было построено изящное здание классической физики.

К концу XIX века – началу XX века наука становится основной производительной силой. Совершенствовалась техника эксперимента, существенно повысилась точность физического эксперимента. Вырисовывалась логически непротиворечивая физическая теория, которая в последствии стала называться классической.

На фоне ясной физической картины мира лишь несколько небольших вопросов ожидали своего разрешения, которые, как, оказалось, превратились в проблемы и привели к созданию новой физики – квантовой механики. Квантовая механика возникла в начале XX века на базе противоречия накопленных экспериментальных данных с существующей на тот момент физической теорией. В основном она была построена за четверть века к 1927-28 годам. В результате на смену классической теории пришла более общая теория – квантовая, которая включила в себя классическую как предельный случай при  $\hbar \rightarrow 0$ .

Совершенствование и развитие квантовой теории продолжается и в настоящее время. Это есть сложный и длительный процесс, который осуществляется благодаря титаническим усилиям большого числа выдающихся учёных.

## **§1. Идея о дискретности значений физических величин**

### **1.1. Классическая теория равновесного излучения**

Первая проблема связана с теоретическим обоснованием равновесного излучения, возникающего внутри полости, окруженной со всех сторон непроницаемыми стенками, нагретыми до некоторой температуры  $T$  (рис.1.1). Следует заметить, что небольшое отверстие, сделанное в стенке такой полости, можно рассматривать как абсолютно черное тело (Вин и Луммер, 1895г.)

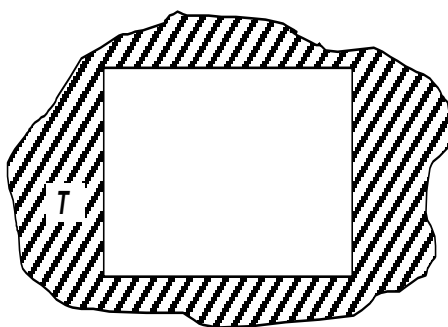


Рис. 1.1.

Универсальность законов термодинамики обеспечивает применимость их как к веществу, так и к полю (как к классическим, так и к квантовым системам). В применении к равновесному излучению термодинамика позволила установить следующее :

1. Закон Кирхгофа, согласно которому отношение лучеиспускательной способности тела, к его поглотительной способности при данной температуре, не зависят от физических свойств тела и равно лучеиспускательной способности абсолютно



черного тела, т.е. является универсальной функцией температуры  $T$  и частоты  $\omega$  (1859г.).

2. Существование светового давления  $P$  излучения (величину светового давления легко найти, исходя из законов электродинамики:  $P = \frac{U}{3}$ , где  $U$  – плотность энергии излучения).

3. Закон Стефана – Больцмана<sup>1</sup> о зависимости плотности энергии от температуры:

$$U = \sigma T^4, \quad (1.1)$$

отсюда на основе опытных данных для температуры  $T$  и плотности энергии  $U$  равновесного излучения вычисляют постоянную  $\sigma^2$ .

4. Закон Вина о спектральной плотности  $\rho_T(\omega)$  равновесного излучения:

$$\rho_T(\omega) = \omega^3 f\left(\frac{\omega}{T}\right), \quad (1.2)$$

вид функции  $f\left(\frac{\omega}{T}\right)$  остается термодинамически неопределенным.

5. Закон смещения Вина о том, что длина волны, соответствующая максимальной спектральной плотности энергии равновесного (черного) излучения, обратно пропорциональна абсолютной температуре:

$$\lambda_{\max} T = b, \quad (1.3)$$

где  $b$  - постоянная Вина.

Закон Вина (1.2) позволяет по заданной кривой распределения спектральной плотности энергии,  $\rho_T(\omega)$  при какой – либо температуре  $T$  построить аналогичную кривую при любой другой температуре  $T_1$  (рис. 1.2).

Формула Вина (1.2) автоматически приводит к закону Стефана – Больцмана (1.1):

$$U = \int_0^{\infty} \rho_T(\omega) d\omega = \int_0^{\infty} \omega^3 f\left(\frac{\omega}{T}\right) d\omega,$$

<sup>1</sup> Стефан установил этот закон в 1879г. на основании опытных данных, а в1884г. Больцман получил этот закон, исходя из второго начала термодинамики.

<sup>2</sup> На опыте обычно измеряют не  $U$ , а энергию  $\sigma_0 T^4$ , излучаемую в 1с черным телом с 1 см<sup>2</sup> его поверхности в одну сторону ( $\Omega = 2\pi$ ), в этом случае  $\sigma_0 T^4 = \frac{c}{4} U$ , откуда  $\sigma_0 = \frac{c\sigma}{4}$ , т.е. зная

$\sigma_0 = 5.67 \cdot 10^{-8} \frac{\text{Дж}}{\text{м}^2 \cdot \text{с} \cdot \text{град}^4}$ , вычисляют  $\sigma = \frac{4\sigma_0}{c} \approx 7.56 \cdot 10^{-16} \frac{\text{Дж}}{\text{м}^3 \cdot \text{град}^4}$ .

Вводя новую переменную  $\frac{\omega}{T} = \xi$ , получим:

$$U = T^4 \int_0^{\infty} \xi^3 f(\xi) d\xi = \sigma T^4. \quad (1.1')$$

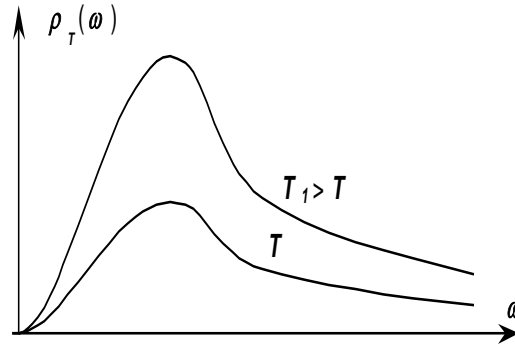


Рис. 1.2.

Таким образом, задача определения универсальной функции  $\rho_T(\omega)$ , с которой связано теоретическое обоснование законов равновесного излучения, вышла на первое место в физике.

В классической физике эта задача решалась следующим образом. В полости кубической формы с ребром  $L$  существуют колебания всевозможных частот. В состоянии динамического равновесия колебания представляют суперпозицию стоячих волн. В декартовой системе координат, оси которой направлены вдоль трех ребер куба (рис. 1.3), условия существования стоячих волн записываются в виде:

$$\left. \begin{aligned} k_x L &= \pi n_x \\ k_y L &= \pi n_y \\ k_z L &= \pi n_z \end{aligned} \right\}, \quad (1.4)$$

где  $n_x, n_y, n_z$  — целые положительные числа.

Тогда число стоячих волн  $dN$ , волновые числа которых заключены в интервале  $\vec{k} \div \vec{k} + d\vec{k}$ , равно числу целых чисел в объеме  $dn_x dn_y dn_z$ , т.е.

$$dN = dn_x dn_y dn_z = \left( \frac{L}{\pi} \right)^3 dk_x dk_y dk_z. \quad (1.5)$$

Переходя к сферическим координатам, где элементарный кубик  $dk_x dk_y dk_z$  (рис. 1.3) будет представлен элементарным объемом сферического слоя радиуса  $k$  и толщины

$dk$  в первом октанте (из-за целых положительных значений чисел  $n_x, n_y, n_z$ ), число стоячих волн  $dN$  в полости объема  $L^3$  переписывается в виде:

$$dN = \frac{L^3}{\pi^3} \cdot \frac{4\pi k^2 dk}{8}. \quad (1.6)$$

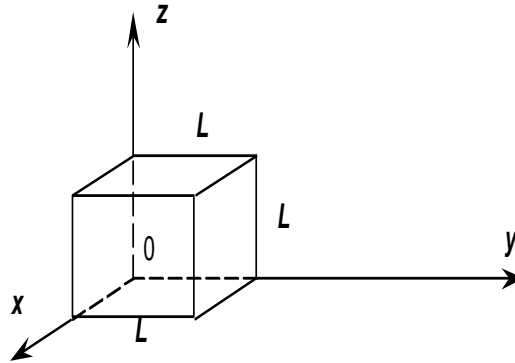


Рис. 1.3.

Подставляя соотношение  $k = \frac{\omega}{c}$  в формулу (1.6.), получим для числа колебаний с частотой  $\omega$  из интервала  $\omega \div \omega + d\omega$  в объеме  $L^3$  полости формулу:

$$dN = \frac{L^3 \omega^2}{2\pi^2 c^3} d\omega. \quad (1.7)$$

Вейлем было показано, что это выражение справедливо независимо от формы полости и природы волн. Полное число электромагнитных колебаний следует увеличить в 2 раза за счет существования двух независимых поляризаций у поперечных волн:

$$dN = \frac{L^3 \omega^2}{\pi^2 c^3} d\omega. \quad (1.8)$$

В первоначальных теориях число частот  $\omega$  из интервала  $\omega \div \omega + d\omega$ , даваемое формулой Вейля (1.8), рассматривали как число осцилляторов оболочки полости, посылающих электромагнитные волны в полость объема  $L^3$ .

Пользуясь этим представлением и рассчитав среднюю энергию линейного гармонического осциллятора на основе законов классической статистической физики, а именно, теоремы о равномерном распределении энергии по степеням свободы:

$$\bar{E} = k_0 T. \quad (1.9)$$

Релей и Джинс получили формулу для энергии излучения, с частотой  $\omega$ , в полости в виде:

$$\frac{dU(\omega)}{d\omega} = \frac{L^3 \omega^2}{\pi^2 c^3} k_0 T. \quad (1.10)$$

Отсюда следует выражение:

$$\frac{dU(\omega)}{d\omega} \equiv \rho_T(\omega) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} k_0 T, \quad (1.11)$$

называемое формулой Релея – Джинса. Она удовлетворяет термодинамическому закону Вина (1.2), но резко противоречит эксперименту и закону Стефана – Больцмана. Действительно, плотность энергии равновесного излучения

$$U = \int_0^{\infty} \rho_T(\omega) d\omega = \frac{k_0 T}{\pi^2 c^3} \int_0^{\infty} \omega^2 d\omega = \infty, \text{ но не } \sigma T^4.$$

Этот результат настолько противоречил эксперименту, что получил название «ультрафиолетовой катастрофы» (Эренфест, см. рис 1.4.)

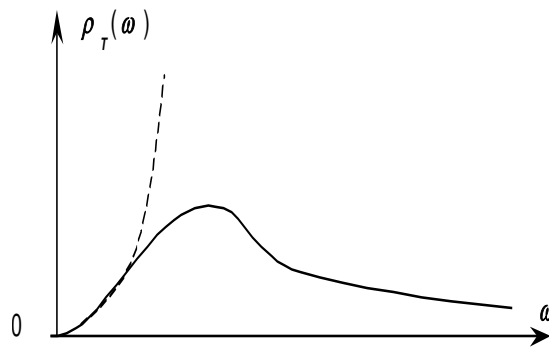


Рис. 1.4.

Возможен и другой подход к выводу формулы для  $\rho_T(\omega)$  в рамках классических представлений. Число колебаний  $\Delta N$  с частотой  $\omega$ , являющиеся носителями определенной энергии  $\varepsilon(\omega)$ , дается распределением Больцмана:

$$\Delta N = N_0 e^{-\frac{\varepsilon}{k_0 T}}, \quad (1.12)$$

где  $N_0$  – полное число носителей энергии. Отсюда для средней энергии колебаний с частотой  $\omega$  оказывается равным

$$\bar{\varepsilon} = \varepsilon(\omega) \frac{\Delta N}{N} e^{-\frac{\varepsilon(\omega)}{k_0 T}}, \quad (1.13)$$

следовательно,

$$\rho_T(\omega) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \varepsilon(\omega) e^{-\frac{\varepsilon(\omega)}{k_0 T}}, \quad (1.14)$$

Вин на основе общих термодинамических соображений показал, что  $\varepsilon(\omega) = \hbar\omega$ , где  $\hbar$  - коэффициент пропорциональности. Тогда формула Вина принимает вид:

$$\rho_T(\omega) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} e^{-\frac{\hbar\omega}{k_0 T}}. \quad (1.15)$$

Этот закон Вина выполняется хорошо лишь для достаточно больших частот излучения.

Таким образом, формулы Релея – Джинса и Вина описывались лишь концы спектра равновесного излучения (абсолютно черного тела).

Нужны были новые идеи для создания более общей и строгой теории, объясняющей законы равновесного излучения (1.1), (1.2), (1.3) и разрешающей проблему с «ультрафиолетовой катастрофой».

## **1.2. Гипотеза Планка. Формула Планка. Фундаментальная постоянная Планка.**

В 1900 г. М. Планк, анализируя опытные данные по излучению абсолютно черного тела, выдвинул гипотезу, которая коренным образом изменила представление классической физики. Согласно этой гипотезе осцилляторы (атомные системы) не могут иметь произвольную энергию; колеблясь с частотой  $\omega$ , энергия осциллятора должна быть кратной некоторому минимальному значению  $\varepsilon_0$ , т.е.

$$E_n = \varepsilon_0 n, \quad (1.16)$$

где  $n=0,1,2,3, \dots$ . Указанная совокупность энергий образует бесконечный, но дискретный ряд величин. Тогда средняя энергия осциллятора легко рассчитывается по формуле среднего статистического

$$\bar{E} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} E_n e^{-\frac{E_n}{k_0 T}}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{E_n}{k_0 T}}} = \varepsilon_0 \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n e^{-\frac{\varepsilon_0 n}{k_0 T}}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{\varepsilon_0 n}{k_0 T}}}. \quad (1.17)$$

Обозначив  $e^{-\frac{\varepsilon_0}{k_0 T}} = x$ , формулу (1.17) преобразуем к виду:

$$\bar{E} = \varepsilon_0 x \frac{\partial}{\partial x} \ln \sum_n x^n. \quad (1.18)$$

Вычисляя сумму  $\sum x^n = 1 + x + x^2 + \dots = \frac{1}{1-x}$ , получим

$$\bar{E} = \varepsilon_0 \frac{e^{-\frac{\varepsilon_0}{k_0 T}}}{1 - e^{-\frac{\varepsilon_0}{k_0 T}}} = \frac{\varepsilon_0}{e^{-\frac{\varepsilon_0}{k_0 T}} - 1}. \quad (1.19)$$

Это и есть формула Планка для средней энергии линейного осциллятора. Спектральная плотность энергии равновесного излучения в этом случае оказывается равной:

$$\rho_T(\omega) = \frac{\omega^2 \varepsilon_0}{\pi^2 c^3} = \frac{1}{e^{-\frac{\varepsilon_0}{k_0 T}} - 1}. \quad (1.20)$$

Чтобы формулу (1.20) привести в соответствии с термодинамической формулой Вина (1.2), Планк положил минимальную порцию энергии равной  $\varepsilon_0 = \hbar \omega$ , и получил знаменитую формулу<sup>1</sup>:

$$\rho_T(\omega) = \frac{\hbar \omega^3}{\pi^2 c^3 (e^{\frac{\hbar \omega}{k_0 T}} - 1)}, \quad (1.21)$$

величина  $\hbar \approx 1,05 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}$ , имеющая размерность действия, называется постоянной Планка.

В случае  $\hbar \omega \ll k_0 T$  (низкие частоты) имеем  $e^{\frac{\hbar \omega}{k_0 T}} \approx 1 + \frac{\hbar \omega}{k_0 T}$  и формула (1.21)

переходит в формулу Релея – Джинса (1.11).

Если же  $\hbar \omega \gg k_0 T$  (высокие частоты) формула (1.21) переходит в формулу Вина (1.15), т. к.  $e^{\frac{\hbar \omega}{k_0 T}} - 1 \approx e^{\frac{\hbar \omega}{k_0 T}}$ .

Формула Планка (1.21), описывающая зависимость спектральной плотности равновесного излучения  $\rho_T(\omega)$  от частоты  $\omega$ , находится в блестящем согласии с экспериментом.

На основе формулы (1.21) легко найти плотность равновесного излучения:

$$U = \int_0^\infty \rho_T(\omega) d\omega = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \int_0^\infty \frac{\omega^3}{e^{\frac{\hbar \omega}{k_0 T}} - 1} d\omega.$$

Вводя новую переменную  $\xi = \frac{\hbar \omega}{k_0 T}$ , откуда  $d\omega = \frac{k_0 T}{\hbar} d\xi$ , и учитывая табличный интеграл

<sup>1</sup> Предложенный первоначальный вывод формулы Планка страдает рядом недостатков. При рассуждениях непоследовательно соединялись противоречивые понятия осцилляторов и стоячих волн в полости

$$\int_0^{\infty} \frac{\xi^3}{e^{\xi}-1} d\xi = \frac{\pi^4}{15},$$

получаем закон Стефана – Больцмана:

$$U = \frac{\pi^2}{15} \cdot \frac{k_0^4}{c^3 \hbar^3} T^4 = \sigma T^4,$$

где постоянная Стефана – Больцмана выражена через универсальные константы:

$$\sigma = \frac{\pi^2}{15} \cdot \frac{k_0^4}{c^3 \hbar^3}. \quad (1.22)$$

С помощью формулы (1.21) теоретически строго обосновывается закон смещения Вина, который обычно записывается для спектрального распределения  $\rho_T(\lambda)$  по длинам волн  $\lambda$ . Примем во внимание соотношения

$$\omega = 2\pi\nu = \frac{2\pi c}{\lambda}, \quad d\omega = -\frac{2\pi c}{\lambda^2} d\lambda = \frac{2\pi c}{\lambda^2} |d\lambda|,$$

тогда из равенства

$$\rho_{\omega} d\omega = \rho_{\omega} \frac{2\pi c}{\lambda^2} |d\lambda| = \rho_{\lambda} |d\lambda|$$

следует выражение для  $\rho_{\lambda}$ :

$$\rho_T(\lambda) = \frac{16\pi^2 c \hbar}{\lambda^5 (e^{\frac{2\pi c \hbar}{kT\lambda}} - 1)}. \quad (1.23)$$

Исследуя (1.23) на экстремум, приходим к уравнению

$$5 - y = 5e^{-y}, \quad (1.24)$$

где  $y = \frac{2\pi c \hbar}{kT\lambda}$ . Это уравнение решается графически. Корень этого уравнения  $y^* \approx 4,965$

связывает температуру  $T$  и длину волны  $\lambda_{\max}$ , на которую приходится максимальное значение  $\rho_{\lambda}$ :

$$\lambda_{\max} T = \frac{2\pi c \hbar}{4,965 \cdot k_0} \equiv b. \quad (1.25)$$

Это есть закон смещения Вина, где  $b$  называется постоянной Вина.

Итак, гипотеза Планка позволила разрешить «ультрафиолетовую катастрофу», обосновать законы равновесного излучения и вычислить значение введенной фундаментальной константы  $\hbar$  - постоянной Планка.

Из соотношений (1.22) и (1.25) по экспериментальным значениям постоянных Стефана – Больцмана  $\sigma$  и Вина  $b$ , можно рассчитать постоянную  $\hbar$  и уточнить значение

постоянной Больцмана. Таким образом, впервые и было найдено значение  $\hbar \approx 1,054 \cdot 10^{-34}$  Дж·с и уточнено значение  $k_0$ .

Из формулы Планка (1.21) видно, что при  $\hbar \rightarrow 0$  получается классическая формула Релея – Джинса. Уже и здесь проявилась фундаментальность этой физической константы, определяющей широкий круг физических явлений, для которых существенна дискретность величин.

## **§2. Корпускулярно-волновой дуализм.**

В классической физике используются две основные модели материальных объектов: корпускулы (материальная точка, система материальных точек) в механике и поля, например, электромагнитные поля в электродинамике. В связи с этим, из классической физики известны два вида движения: корпускулярное и волновое. Для корпускулярного вида характерна локализация объекта в пространстве и движение его траектории, для волнового движения - делокализация его в пространстве, так как это движение некой среды.

На уровне макроявлений эти два вида движений четко разграничены и являются как бы двумя полюсами (одно дело движение тела, брошенного под углом к горизонту, другое - движение световой волны).

На уровне микромира - это четкое разграничение в осуществленной мере стирается: движение микрочастицы одновременно характеризуется и корпускулярными, и волновыми свойствами, т.е. микрочастицы не являются ни "чистыми корпускулами", ни "чистыми волнами". Они являются сложными образованиями: в зависимости от условий, в которых находится микрочастица, проявляются в определенной мере ее корпускулярные свойства, а в какой-то мере - волновые свойства. Эти свойства - корпускулярные и волновые - присущи микрообъекту одновременно. Это и принято называть корпускулярно-волновым дуализмом или двойственной природой микрообъектов.

### **2.1. Квантовая теория света Эйнштейна.**

Первоначально идея корпускулярно-волнового дуализма была применена к электрическому излучению. В 19 веке, физики твердо установили волновую природу света (уравнение Максвелла, 1873 г.). Но уже к концу 19 века, было открыто явление фотоэлектрического эффекта (Герц, 1887 г.), законы которого нельзя было объяснить на основе представлений классической физики.



А. Эйнштейн, анализируя идею Планка о дискретности значений энергии линейного гармонического осциллятора, сделал новый шаг на пути развития теории "квант". Он выдвинул новую гипотезу: осцилляторы могут порциями не только испускать, но и поглощать электромагнитную энергию благодаря тому, что само электромагнитное поле состоит из отдельных корпускулов - квантов с энергией.

$$\varepsilon = \hbar \omega. \quad (2.1)$$

Используя далее известное релятивистское выражение для энергии в виде

$$\varepsilon = c \sqrt{p^2 + m_0^2 c^2}, \quad (2.2)$$

он получил формулу для импульса  $p$ , положив массу покоя  $m_0 = 0$ :

$$p = \frac{\varepsilon}{c} = \frac{\hbar \omega}{c}, \quad (2.3)$$

где  $c$  - скорость света в вакууме. Если учесть связь волнового вектора  $\vec{k}$  волны с длиной  $\lambda$  в виде известного соотношения

$$\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \vec{n}, \quad (2.4)$$

где  $\vec{n}$  - единичный вектор направления распространения фронта волны, то вектор импульса  $\vec{p}$  кванта света оказывается равным

$$\vec{p} = \hbar \vec{k}. \quad (2.5)$$

На основе корпускулярных представлений об электромагнитном поле Эйнштейн в 1905 г. разработал количественную теорию фотоэффекта. С помощью этой теории блестяще подтверждены законы фотоэффекта, которые экспериментально были установлены А. Г. Столетовым (1888 - 1890 г.).

Особенно ярко корпускулярные свойства излучения проявились при теоретическом обосновании законов эффекта Комптона (1923 г.), при исследовании рассеяния рентгеновских лучей свободными и связанными электронами. С этого времени кванты света стали называть фотонами.

Опыты С. И. Вавилова с флуктуациями световых пучков дали новое понимание связи волновых и корпускулярных свойств света, а именно: свет обладает двойственной корпускулярно-волновой природой, выражаемой уравнениями Эйнштейна (2.1) и (2.5).

## 2.2. Гипотеза де Бройля. Волна де Бройля.

Французский физик Луи де Бройль, анализируя идею дуализма и уравнения Эйнштейна, выдвинул в 1924 году гипотезу о возможности их обобщения на

микрообъектах и в первую очередь на электронах. Эта гипотеза была им высказана с целью физического обоснования квантования энергии электронов в атоме (теория Бора) и для объяснения первых опытов по дифракции электронов.

Высказав гипотезу о том, что корпускулярно-волновой дуализм свойственен не только свету, но и материальным телам, де Бройль предложил с каждым микрообъектом связывать корпускулярные характеристики (энергию  $E$  и импульс  $\vec{p}$ ) и волновые характеристики (частоту  $\omega$  и волновой вектор  $\vec{k}$ ). Взаимосвязь между ними должна быть релятивистски ковариантной, т. е. записана в четырехмерной форме. Используя четырехмерную запись вектора импульса и волнового вектора в виде:

$$\left. \begin{aligned} \vec{p} &= (p_x; p_y; p_z; i \frac{E}{c}) \\ \vec{k} &= (k_x; k_y; k_z; i \frac{\omega}{c}) \end{aligned} \right\}, \quad (2.6)$$

де Бройль записал соотношение между ними с помощью постоянной Планка

$$\vec{p} = \hbar \vec{k} \quad \Longleftrightarrow \quad \begin{aligned} \vec{p} &= \hbar \vec{k} \\ E &= \hbar \omega \end{aligned}. \quad (2.7)$$

Таким образом, уравнения Эйнштейна (2.7), благодаря гипотезе де Бройля, приобрели универсальный характер и стали одинаково применимы как для анализа корпускулярных свойств света, так и при исследовании волновых свойств движущихся микрообъектов (объектов).

Из уравнения (2.7) следует:

$$p = \frac{h}{\lambda}, \quad (2.8)$$

т.е. микрочастице с импульсом  $\vec{p}$  сопоставляется плоская монохроматическая волна с длиной  $\lambda$ . Эта волна называется волной де Бройля, определяется формулой:

$$\Psi_{\vec{p}}(\vec{r}; t) = A e^{\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p}\vec{r})} = A e^{-i(\omega t - \vec{k}\vec{r})} \quad (2.9)$$

Вскоре гипотеза де Бройля получила надежное экспериментальное обоснование. В 1923 году Дэвиссон и Кунсман, наблюдая рассеяние пучка электронов от поверхности кристалла, обнаружили дифракционные максимумы. В 1927 году Дэвиссон и Джермер подтвердили этот результат в специально поставленных опытах по обнаружению волновых свойств электронов (рассеяние электронов на монокристаллах Ni). В экспериментах Тартаковского и Томсона были обнаружены дифракционные кольца, образованные электронами, прошедшими через фольгу из поликристаллического

вещества. В этих исследованиях по результатам измерения радиусов  $R$  дифракционных колец, вычислялась длина волны  $\lambda$  де Бройля; импульс электронов был заранее известен (электроны ускорялись в электронной пушке). В результате формула (2.8) получила блестящее подтверждение.

Позднее наблюдалась дифракционная картина от атомов, молекул, нейтронов и других частиц. В 1947 году советские физики Сушкин, Фабрикант и Биберман поставили интересный опыт, пропуская через дифракционное устройство электроны из пучка один за другим; на экране при этом вновь наблюдалась дифракционная картина. Тем самым экспериментально было доказано: волновые свойства присущи не коллективу электронов в пучке, а каждому электрону.

Итак, микрообъект есть специфический объект, способный в зависимости от условий проявлять в той или иной мере корпускулярные и волновые свойства, т.е. корпускулярно-волновой дуализм следует понимать, как потенциальную способность микрообъекта проявлять в различных внешних условиях различные свойства.

### **2.3. Соотношение неопределенностей. Волновой дуализм.**

При описании состояния движения классической частицы пользуются заданием обобщенных координат и обобщенных импульсов:  $x, y, z, p_x, p_y, p_z$ .

Как описывать состояние движения микрочастицы?

Микрочастица обладает корпускулярно-волновой природой, но это не означает, что при задании состояния движения ей следует приписать все свойства частиц и все свойства волн. То, что это не классическая частица означает: описание корпускулярных свойств вряд ли можно проводить с помощью канонических переменных, одновременно задавая координаты и сопряженные им импульсы.

Действительно, микрочастице, движущейся с импульсом  $p = p_x$ , сопоставляется плоская монохроматическая волна де Бройля с длиной  $\lambda = \frac{h}{p}$ . Но отсюда следует: для такой частицы нельзя одновременно точно задавать  $x$  и  $p_x$ , так как задание  $p_x$  означает задание длины волны  $\lambda$ , что в свою очередь предполагает задание некоторой области пространства. Другими словами, выражение "длина волны микрочастицы, имеющей координату  $x$ , лишено смысла.

Таким образом, в квантовой области нет таких микрообъектов, у которых координата и сопряженный ей импульс одновременно имеют точные (определенные)

значения. Если же все-таки и координату  $x$ , и соответствующую проекцию импульса  $p_x$  указывать (измерять) одновременно, то обязательно возникнут неопределенности  $\Delta x$  и  $\Delta p_x$ , причем произведение этих неопределенностей по порядку величины не меньше постоянной Планка:

$$\left. \begin{aligned} \Delta x \Delta p_x &\geq \frac{\hbar}{2} \\ \Delta y \Delta p_y &\geq \frac{\hbar}{2} \\ \Delta z \Delta p_z &\geq \frac{\hbar}{2} \end{aligned} \right\}, \quad (2.10)$$

Это знаменитые соотношения неопределенности Гейзенберга выражают корпускулярно-волновую природу микрообъекта.

Рассмотрим свободно движущуюся частицу и импульсом  $\vec{p} = \text{const}$  ( $p_x = \text{const}, p_y = \text{const}, p_z = \text{const}$ ). При точно заданном импульсе неопределенности  $\Delta p_x = \Delta p_y = \Delta p_z = 0$ , тогда из соотношений (2.10) следует, что  $\Delta x = \Delta y = \Delta z$  бесконечно велики, т.е. координаты частицы совершенно не определены, это означает, что частицу с равной вероятностью можно обнаружить в любой точке пространства. При этом величина квадрата модуля волны де Бройля, сопоставляемой свободно движущейся частице с импульсом  $\vec{p}$ , оказывается постоянной:

$$|\Psi_p(\vec{r}, t)|^2 = |A|^2 = \text{const}. \quad (2.11)$$

Свободно движущаяся частица с заданным импульсом является идеализацией. Какая же волна описывает волновые свойства у частицы, локализованной в некоторой области пространства, например,  $\Delta x$ ? Интересующую нас волну, связанную с областью локализации  $\Delta x$ , можно получить как суперпозицию плоских монохроматических волн де Бройля с импульсом, изменяющимся непрерывно в интервале от  $p_0 - \Delta p$  до  $p_0 + \Delta p$ :

$$\Psi(x, t) = \int_{p_0 - \Delta p}^{p_0 + \Delta p} A(p) e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)} dp. \quad (2.12)$$

Такая группа волн называется волновым пакетом.

Для исследования вида функции (2.12) вычислим приближенно интеграл в этой формуле. Если интервал  $\Delta p$  достаточно мал, то можно считать

$$A(p) \approx A(p_0) = A_0, \quad (2.13)$$

$$E(p) \approx E(p_0) + \left( \frac{dE}{dp} \right)_0 (p - p_0) = E_0 + V_0 \hbar, \quad (2.14)$$

где

$$\hbar = p - p_0, \quad V_0 = \left( \frac{dE}{dp} \right)_0, \quad E(p_0) = E_0. \quad (2.15)$$

Подставляя выражения (2.13), (2.14), (2.15) в соотношение (2.12), получаем

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &\approx A_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(E_0 t - p_0 x)} \int_{-\Delta p}^{\Delta p} e^{-\frac{i}{\hbar}(V_0 - x)\xi} d\xi = \\ &= 2A_0 \Delta p \frac{\sin \frac{\Delta p}{\hbar}(V_0 t - x)}{\frac{\Delta p}{\hbar}(V_0 t - x)} e^{-\frac{i}{\hbar}(E_0 t - p_0 x)} = B(x, t) e^{-\frac{i}{\hbar}(E_0 t - p_0 x)}. \end{aligned} \quad (2.16)$$

Квадрат модуля этой волны, равной квадрату модуля ее амплитуды, представляется формулой:

$$|\Psi(x, t)|^2 = |B(x, t)|^2 = 4A_0^2 (\Delta p)^2 \frac{\sin^2 \alpha}{\alpha^2}, \quad (2.17)$$

где

$$\alpha = \frac{\Delta p}{\hbar}(V_0 t - x). \quad (2.18)$$

График функции  $\frac{\sin^2 \alpha}{\alpha^2}$ , с точностью до постоянного множителя, представляющий

график  $|\Psi(x, t)|^2$ , дан на рис.1.5.

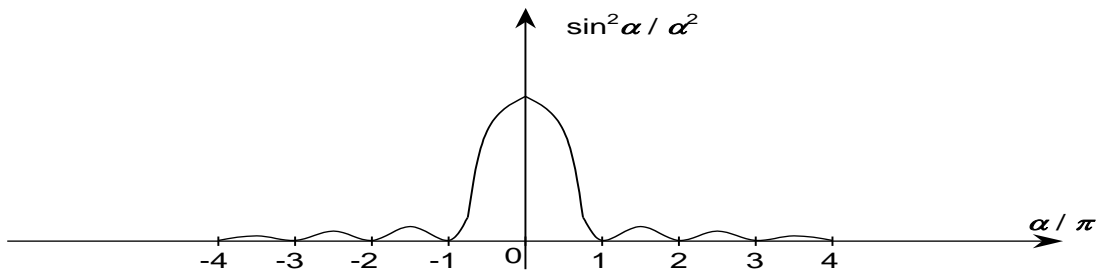


Рис. 1.5.

Эта функция заметно отлична от нуля лишь в интервале от  $-\pi$  до  $\pi$ . Вне указанного интервала значения функции  $|\Psi(x, t)|^2$  могут быть приравнены нулю. Поэтому частица с

подавляющей вероятностью находится на участке оси  $Ox$  между точками  $x_1 \left( \alpha_1 = \frac{\pi}{\alpha} \right)$  и  $x_2 \left( \alpha_2 = -\frac{\pi}{\alpha} \right)$ . Длина участка  $\Delta x \approx x_2 - x_1 \geq \frac{2\pi\hbar}{\Delta p}$ , отсюда следует одно из соотношений неопределенностей:

$$\Delta x \Delta p \approx 2\pi\hbar = h. \quad (2.19)$$

Следует заметить, что групповая скорость (скорость центра волнового пакета) равна скорости движения частицы  $V_0$ . Если учесть высшие члены в разложении (2.14), то окажется, что с течением времени волновой пакет расплывается, захватывая все большую область пространства. В связи с этим нельзя волновой пакет связать со структурой частицы, т.е. волновая функция описывает состояние частицы и позволяет судить о вероятности ее обнаружения в различных точках пространства.

### **§3. Статистический характер квантовых закономерностей.**

#### **3.1. Вероятностный характер поведения микрообъектов.**

Классическая механика являет собою образец теории, где господствуют динамические законы, а значит, господствует детерминизм. С помощью законов классической механики, зная начальные условия для материальной системы, можно предсказать ее будущее. Это положение Лаплас выразил словами: "Дайте мне  $x_0$  и  $\dot{x}_0$ , и я предскажу будущее мира". Это утверждение любому на первый взгляд покажется тривиальным, но на самом деле при его обосновании содержится большая доля умолчания.

Действительно, можно ли начальные условия определить бесконечно точно? Строго говоря, речь идет о некотором распределении начальных данных. Поэтому следовало бы рассмотреть: в какой мере эта неопределенность в начальных данных влияет на предсказание состояния системы в будущем, т.е. при  $t \rightarrow \infty$ ? Кроме того, в процессе движения системы не будут ли действовать на нее случайные силы, которые классическая механика не в состоянии предсказать? Даже если эти силы малы, их эффект действия может оказаться значительным за большой промежуток времени  $\Delta t$ . Да и вообще, в течение большого промежутка времени будет ли система оставаться изолированной?

Другими словами, лапласовский детерминизм исключает из рассмотрения элемент случайности в поведении отдельного объекта. Поэтому в классической механике

безраздельно господствует необходимость. По этой причине законы классической механики являются динамическими законами, а не статическими.

Элементы случайности появляются в классической физике лишь при рассмотрении поведения больших коллективов частиц, для объяснения поведения и свойств которых требуется привлечение статистических методов.

В квантовой механике мы дело с качественной ситуацией: уже в поведении отдельного микрообъекта присутствуют как элементы случайности, так и элементы необходимости. В качестве примера можно рассмотреть прохождение электронов через отверстие в диафрагме (Д) с последующим попаданием на экран (Э) (рис. 1.6).

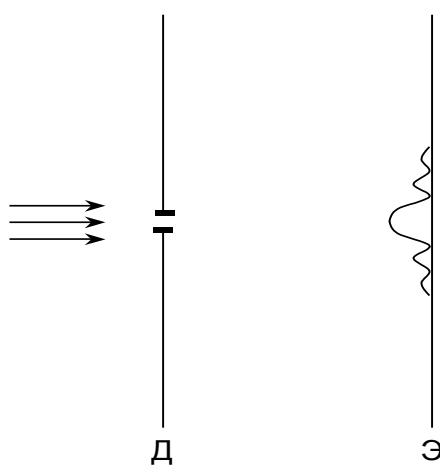


Рис. 1.6.

Каждый электрон попадает в ту или другую точку экрана - это случайное явление, но статическая закономерность проявляется с необходимостью: дифракционная картина будет одной и той же как при прохождении пучка  $N$  электронов, так и при последовательном пропускании их "поодиночке" через отверстие в диафрагме.

Наличие необходимого и случайного в поведении отдельного микрообъекта обуславливает вероятностный характер их поведения. Факт регистрации конкретного электрона в той или иной точке на экране - детекторе случаен, можно характеризовать этот факт лишь его вероятностью, интересно отметить высказывание Фока по этому вопросу: "... в квантовой механике понятие вероятности есть понятие первичное, и оно играет там фундаментальную роль".

Итак, поведение отдельного микрообъекта случайно, но вероятность этого поведения необходима, т.е. необходимость "пробивает себе дорогу в рамках случайности" (Энгельс).

### **3.2. Статистический характер квантовой механики.**

Наличие и случайного, и необходимого в поведении любого микрообъекта приводит к важному выводу: квантовая механика является принципиально статистической теорией, где вероятность события играет важнейшую роль.

В рамках классической физики законы поведения больших совокупностей объектов (частиц) являются статистическими, законы же поведения отдельных объектов - это динамические законы.

Случайность в поведении отдельного микрообъекта ставит квантовую механику в особое положение - как статистическую теорию отдельного микрообъекта.

В чем заключается причина наличия элементов случайности в поведении микрообъекта?

Строго говоря, ответ на поставленный вопрос должна дать более общая и строгая теория, чем квантовая механика (нерелятивистская теория). В настоящее время наличие элементов случайности в поведении микрообъекта объясняется его взаимодействием со всем окружающим его миром (внешние условия). Специфика квантовой механики состоит в том, что ни один микрообъект не может считаться полностью изолированным, независимо от внешнего окружения. Нельзя не согласиться со словами Мякишева, что "причина статистического характера квантовой механики также, что и в классической статистической механике, - наличие большого числа связей, влияющих на движение объекта. Частица, рассматриваемая в квантовой механике как свободная, в действительности свободна только от воздействий динамического характера. Но она находится под действием случайных сил, вызывающих квантовые флуктуации ее поведения, отражение соотношений неопределенностей".

Какова природа случайных воздействий на микрообъект?

Как известно из квантовой электродинамики, где случайные воздействия на микрообъект проявляются в явном виде, они представляют взаимодействие микрообъекта с вакуумом. При этом следует заметить, что физический вакуум не есть пустота, вакуум заполнен виртуальными частицами.

Квантовая механика, являясь статистической теорией отдельного объекта, имеет специфику статистических коллективов. По словам Фока "элементами статистических коллективов, рассматриваемых в квантовой механике, являются не самые микрообъекты, а результаты опытов над ними, причем определенная постановка опыта соответствует одному определенному коллективу".



Таким образом, классические и квантово-механические коллективы имеют разную природу. В классической физике статистический коллектив образован совокупностью многих частиц (объектов), а в квантовой механике - совокупностью многих потенциально возможных способов реализации свойств микрообъекта, находящегося в заданных условиях, причем всякое изменение условий приводит к новому коллективу. Это различие проявляется и в том, что в классической статистической физике усреднение выполняется по различным состояниям системы, в квантовой же механике усреднение ведется в данном состоянии системы.

### 3.3. Статистическая интерпретация волновой функции.

Согласно идеям де Бройля состояние движения свободной частицы описывается плоской монохроматической волной (2.9) с постоянным квадратом модуля амплитуды волны (2.11).

Для описания поведения микрочастицы, локализованной в некоторой области пространства  $\Delta x$  (ради простоты в пункте "Б") рассматривается одномерный случай движения) в качестве волны де Бройля выбран волновой пакет (2.12), амплитуда которого

$$B(x, t) = 2A_0 \Delta p \frac{\sin \frac{\Delta p}{\hbar} (x - V_0 t)}{\frac{\Delta p}{\hbar} (x - V_0 t)} \quad (3.1)$$

заметно отлична от нуля в области  $\Delta x \approx \frac{2\pi\hbar}{\Delta p}$ .

Волны де Бройля типа (2.9), (2.12), характеризующие волновые свойства микрочастиц (систем), называют волновыми функциями.

Каков же физический смысл волновой функции?

Первая интерпретация волновой функции была предложена Шредингером (1926 г.). Согласно его гипотезе, микрообъект или частица представляет собою сгусток из волн - волновой пакет, причем плотность распределения такого сгустка в пространстве описывается квадратом модуля амплитуды волнового пакета (2.20), т.е. формулой (2.17).

Итак, согласно Шредингеру волновая функция непосредственно связана со структурой микрочастицы.

Однако такая интерпретация оказалась несостоятельной. Дело в том, что хотя теоретически всегда можно из монохроматических волн образовать волновой пакет протяженностью  $\Delta r(\Delta x)$  в пространстве порядка радиуса микрочастицы (например, у

электрона, классический радиус которого  $10^{-15}$  м.), однако фазовые скорости  $u$  волн в пакете различны, что приводит с неизбежностью к расплыванию волнового пакета с течением времени. С учетом квадратичного члена в разложении (2.14) можно оценить в нерелятивистском приближении время  $\Delta t$  расплывания волнового пакета:

$$\Delta t \approx \frac{m_0}{2\pi\hbar} (\Delta x)^2. \quad (3.2)$$

В случае макроскопической частицы с массой  $m_0=0,1$  г. и  $\Delta x=0,1$  см. время расплывания оказывается чрезвычайно большим:  $\Delta t \sim 10^{25}$  с., т.е. такой волновой пакет фактически не будет расплываться.

В случае же микрочастицы, например электрона ( $m_0 \approx 10^{-27}$  г. и  $\Delta x \sim 10^{-15}$  см.) волновой пакет расплывается практически мгновенно  $\Delta t \sim 10^{-26}$  с.

Таким образом, учитывая устойчивость микроструктуры объекта, интерпретация волновой функции, предложенная Шредингером, оказалась несостоятельной.

В настоящее время принята статистическая интерпретация волновой функции, предложенная М. Борном в 1926 году<sup>1</sup>, согласно которой интенсивность волн де Бройля, т.е. интенсивность волновых функций определяет вероятность местонахождения частицы в пространстве в некоторый (любой) момент времени. Имея в виду, что  $\Psi(\vec{r};t)$  может быть комплексной функцией, а вероятность должна быть вещественной и положительной величиной, за меру интенсивности Борн предложил брать не  $\Psi^2$ , а квадрат модуля волновой функции, т.е. величину  $|\Psi(\vec{r};t)|^2 = \Psi^*(\vec{r};t)\Psi(\vec{r};t)$ , где  $\Psi^*$  - комплексно-сопряженная волновая функция.

Следует заметить, что вероятность обнаружить микрочастицу в окрестности точки с координатами  $x, y, z$  зависит от размеров выбираемой области  $dV = dx dy dz$ . Рассматривая малую область возле точки  $(x, y, z)$ , где координаты берутся соответственно из интервалов  $x \div x+dx, y \div y+dy, z \div z+dz$ , можно считать  $\Psi$  в момент времени  $t$  в этой области  $dV$  пропорциональной этому объему, т.е.

$$dW(x, y, z, t) = |\Psi(x, y, z, t)|^2 dx dy dz. \quad (3.3)$$

Это равенство по известной волновой функции позволяет найти вероятность местонахождения частицы. Тогда величину

$$\frac{dW(\vec{r}, t)}{dV} \equiv w(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 \quad (3.4)$$

<sup>1</sup> За работы по вопросам квантовой механики М. Борну в 1954 г. присуждена Нобелевская премия.

называют плотностью вероятности, и она оказалась равной квадрату модуля волновой функции. Учитывая два последних выражения и теорему сложения вероятностей, легко записать вероятность того, что микрочастица в момент  $t$  находится в объеме  $V$ , где она движется:

$$W(V, t) = \int_V dW(\vec{r}, t) = \int_V |\Psi(x, y, z, t)|^2 dV. \quad (3.5)$$

Считая вероятность достоверного события равной единице, запишем:

$$\int_V |\Psi(x, y, z, t)|^2 dV = 1, \quad (3.6)$$

это условие нормировки. Функция  $\Psi(\vec{r}, t)$ , удовлетворяющая этому условию, называется нормированной волновой функцией.

Итак, статистическая интерпретация волновой функции  $\Psi$  не связана со структурой самой микрочастицы (в частности, электрон может считаться вообще точечным), поэтому изменение  $\Psi$  с течением времени (расплывание волнового пакета) означает лишь изменение со временем вероятности нахождения микрообъекта в различных точках пространства.

Так, например, свободно движущуюся частицу с учетом (2.11) с равной вероятностью обнаружить в любой точке пространства в любой момент времени  $t$ . Этот же вывод следует из соотношений неопределенностей (2.10). Легко проверить, что волновая функция (2.9) не удовлетворяет нормировке на единицу (3.6). В этом случае волновая функция нормируется на  $\delta$ -функцию:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{p_x}^*(x) \Psi_{p_x'}(x) dx = \delta(p_x' - p_x), \quad (3.7)$$

откуда нормировочный коэффициент оказывается равным

$$A_1 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}. \quad (3.8)$$

Тогда для трехмерного случая плоская монохроматическая волна запишется в виде:

$$\Psi_{\vec{p}}(\vec{r}, t) = (2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}} e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p}\vec{r})}. \quad (3.9)$$

При статической трактовке волновых функций они ничего общего не имеют с волнами, рассматриваемыми в классической физике. Действительно, в классической физике волны - это физическое поле, поэтому изменение амплитуды волны означает и изменение физического состояния, так как в электромагнитной волне, например, вектора напряженностей электрического и магнитного полей характеризуют энергию волны.

Волновая функция - не физическое поле, а поле информации о свойствах микрочастицы или квантовой системы. В самом деле, помимо вероятности обнаружения микрообъекта в различных местах пространства волновая функция позволяет рассчитать средние значения различных величин и вероятности дозволённых значений физических величин в этом состоянии.

Итак, состояние микрочастицы (любой квантовой системы) полностью описывается волновой функцией  $\Psi(x, y, z, t)$ , имеющей статический смысл, результат чего и проявляется в статическом характере закономерностей квантовой механики.

Таким образом, в основе новой более общей и строгой теории - квантовой механики - лежат три идеи:

- 1) идея о дискретности значений физической величины;
- 2) идея о корпускулярно-волновой природе материальных объектов;
- 3) идея о статистическом характере квантовых закономерностей;

или:

- 1) о дискретном значении физических величин;
- 2) о двойственной корпускулярно-волновой природе материальных объектов;
- 3) о статистическом характере квантовых закономерностей

лежат в основе новой теории - квантовой механики. Эта более общая и строгая теория - нерелятивистская квантовая механика - содержит классическую механику как предельный ( $\hbar \rightarrow 0$ ) случай.

### **3.4. Интерференция электронов от двух щелей.**

Объяснение интерференции света на основе волновых представлений было дано в начале XIX века Юнгом. Его знаменитый опыт заключался в следующем: монохроматический свет из точечного источника 1 (рис.1.7.) падает на экран с двумя малыми щелями А и В, попадая затем на экран-детектор 3, регистрирующий интенсивность падающего на него света.. Эта интенсивность на рис.1.7 представлена интерференционной кривой  $J(x)$ , которая очень просто объясняется с волновой точки зрения о свете.

Если затем постепенно уменьшать интенсивность света от источника 1, освещённость экрана, естественно, уменьшается, однако, интерференционная картина сохраняется. Увеличивая время экспозиции, можно получить интерференционную кривую  $J(x)$  в принципе при сколь угодно малой интенсивности света. Но тогда с корпускулярной

точки зрения о свете легко прийти к выводу: распределение попаданий отдельных фотонов дает на экране-детекторе ту же интерференционную картину  $J(x)$ , как и световые волны.

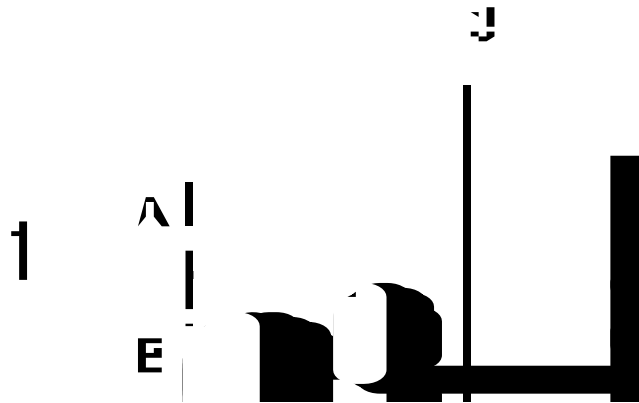


Рис.1.7.

Нетрудно представить мысленный эксперимент, в котором интерференционная картина останется той же, но в точке 1 будет помещен источник монохроматических электронов, при этом опять можно уменьшать интенсивность электронного пучка настолько, что можно считать электроны, проходящими через прибор (интерферометр) поодиночке.

С другой стороны, так как в природе никогда не наблюдалось половины или части электрона, то каждый электрон в этом опыте может пройти через одну из щелей: через щель А или через щель В. Значит, при закрытой щели В картина распределения электронов на экране, прошедших через щель А, представится пунктирной кривой  $J_1(x)$ , а при закрытой щели А электроны, проходя через щель В, и попадая на экран, дают распределение интенсивности в согласии с пунктирной кривой  $J_2(x)$  (рис.1.8).

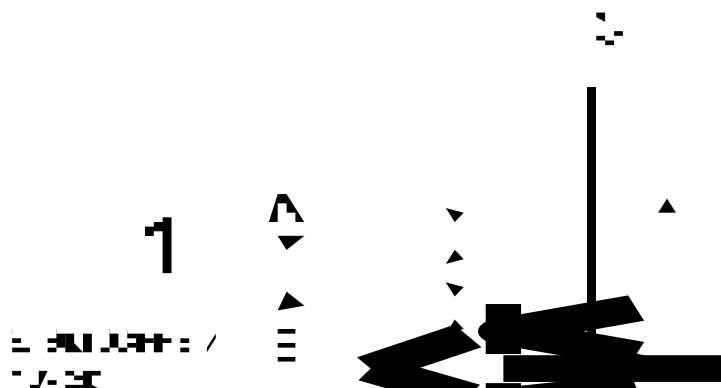


Рис.1.8.

Поскольку интенсивность  $J(x)$  представляет распределение вероятности попадания электронов в различные точки экрана, то по теореме сложения вероятностей при открытых обеих щелях А и В распределение электронов на экране должно представляться суммой распределений для каждой из щелей в отдельности (сплошная кривая  $J(x)$ ).

Хотя логика этого эксперимента кажется безукоризненной, распределение, характерное для открытых обеих щелей А и В, не имеет места. Вместо этого, по убеждению физиков, должна наблюдаться стандартная интерференционная картина для двух щелей (рис.1.9), как и в случае со светом (фотонами). Этот эксперимент получил название «великого парадокса».



Рис.1.9.

В 1961 году удалось зафиксировать на фотопластинке подлинную картину интерференции электронов на двух щелях в эксперименте, выполненном К.Иенссоном<sup>1</sup>. Интерференционная картина совпала с той, которую и ожидали физики, вопреки логике здравого смысла. Схема опытной установки Иенссона (в Тюбингенском университете), в принципе повторяет мысленный эксперимент, изображенный на рис.1.10.



Рис. 1.10.

<sup>1</sup>Сложность эксперимента обусловлена тем, что дебройлевская длина волны электронов существенно меньше длин волн видимого света.

Единственный способ объяснения этих парадоксальных результатов состоит в создании адекватного математического формализма, совместимого с идеей дискретности значений физических величин и всегда правильно предсказывающего наблюдаемые интерференционные явления. Но математический аппарат связан с интерпретацией волновой функции  $\psi(x, y, z, t)$ , описывающей состояние квантовой системы. Действительно, если учесть, что вероятность обнаружить частицу в точке с координатами  $x, y, z$  в момент времени  $t$  пропорциональна квадрату модуля волновой функции  $|\psi(\vec{r}, t)|^2$ , то отсюда следует, что волновую функцию целесообразно считать амплитудой вероятности. Тогда квадрат амплитуды вероятности равен плотности вероятности обнаружения частицы в момент  $t$  с координатами  $x, y, z$ :

$$\omega(x, y, z, t) = |\psi(x, y, z, t)|^2.$$

Если событие может произойти несколькими взаимоисключающими способами (как, скажем, при прохождении электрона через одну из щелей А или В в рассматриваемых экспериментах), то амплитуда вероятности этого события представляет собою сумму амплитуд вероятностей каждого из способов:

$$\psi = \psi_A(x, y, z, t) + \psi_B(x, y, z, t) \quad (3.10)$$

Это утверждение совпадает с правилом сложения амплитуд в оптике. В рассмотренном выше примере функция  $\psi_A$  представляет волну, проходящую через щель А, а  $\psi_B$  – через щель В. На экране обе волны перекрываются и дают классическую интерференционную картину от двух щелей:

$$|\psi|^2 = |\psi_A + \psi_B|^2 = |\psi_A|^2 + |\psi_B|^2 + (\psi_A \psi_B^* + \psi_A^* \psi_B), \quad (3.11)$$

причем  $\omega \neq \omega_A + \omega_B$ , т.е. последние два слагаемых в (3.11) и обеспечивают интерференционную картину.

Таким образом, главное, что следует из квантовой механики, можно сформулировать так:

- 1) основными закономерностями в природе являются закономерности не динамического, а статистического типа;
- 2) с вероятностями в природе следует обращаться не всегда так, как это принято в классических статистических теориях. Оказывается, что в определенных случаях необходимо складывать не сами вероятности событий, а амплитуды этих вероятностей, что и приводит к специфическим интерференционным эффектам.

Интересно в этом отношении высказывание М. Борна: «Статистические методы в физике по мере развития науки распространялись все больше и больше, и сегодня можно сказать, что современная физика полностью опирается на статистическую основу... Сегодня квантовая теория привела нас к более глубокому пониманию: она установила более тесную связь между статистикой и основами физики. Это является событием в истории человеческого мышления, значение которого выходит за пределы самой науки».

Более того, как отмечает Мякишев: «Главное отличие квантовой механики от классической заключается ...в том, что в квантовой механике первичной величиной служит не вероятность, а ее амплитуда – волновая функция».



## Глава II. Математический аппарат и аксиоматика квантовой механики.

### § 4. Математический аппарат квантовой механики.

При построении новой теории можно выделить три этапа: первый этап, на котором формируются и осмысливаются основополагающие идеи и закладывается физический фундамент теории; на втором этапе подбирается адекватный физическим идеям математический аппарат, позволяющий достаточно просто и логически стройно изложить соответствующую физическую теорию, т.е. производится "сшивание" физических идей и математического аппарата; на третьем этапе математический аппарат, нагруженный физическим содержанием, загружается в работу, получаемые при этом результаты сравниваются с экспериментальными данными, новые результаты проверяются на опыте. Вследствие этого продолжается осмысление физического содержания теории и развитие математического аппарата, что способствует расширению возможностей применения теории и более глубокому пониманию её идей.

**Так, например, когда И.Ньютон создавал классическую механику, ему пришлось разрабатывать математический аппарат, который в дальнейшем послужил основанием для развития дифференциального и интегрального исчисления. В период же создания квантовой механики подходящий математический аппарат уже существовал как теория линейных операторов в линейном векторном пространстве**

#### *4.1. Векторы в линейном векторном пространстве.*

А) Линейное векторное (комплексное) пространство.

**Различные математические объекты, для которых определены операции сложения и умножения на число (комплексное в общем случае), называются векторами. Множество векторов образует линейное векторное (комплексное) пространство, если любая линейная комбинация векторов из этого множества есть вектор того же множества.**

**В квантовой механике вектор как элемент линейного векторного пространства обозначается символами  $\psi$ ,  $\varphi$ ,  $\chi$  и т.д. Используются и другие обозначения, отражающие (или оставляющие без внимания) дискретный или непрерывный характер множества векторов:  $\psi_n$  и  $\psi$ ,  $\varphi_n$  и  $\varphi$ , где  $n = 1, 2, 3, \dots$**

Для операций сложения векторов и умножения на число постулируются следующие

свойства:

1.  $\psi_1 + \psi_2 = \psi_2 + \psi_1$ ;
  2.  $(\psi_1 + \psi_2) + \psi_3 = \psi_1 + (\psi_2 + \psi_3)$ ;
  3.  $I \cdot \psi = \psi$ ;
  4.  $(c_1 + c_2)\psi = c_1\psi + c_2\psi$ ,  $c_1$  и  $c_2$  – любые комплексные числа;
  5.  $c_1(c_2\psi) = c_1c_2\psi$ ;
- (4.1)
6.  $c(\psi_1 + \psi_2) = c\psi_1 + c\psi_2$ ;
  7. множество содержит нулевой вектор, такой, что  $\psi_1 + 0 = \psi_1$ ;

$$8. \quad \psi_I + (-\psi_I) = 0.$$

Указанные действия с векторами справедливы, например, для обычных (геометрических) векторов, матриц, комплексных функций действительного переменного, т.е. волновых функций. Из вышеуказанных объектов можно построить линейные пространства, в которых линейные комбинации векторов в виде суммы

$$\Psi = \sum c_n \varphi_n \quad (4.2)$$

Для дискретного множества или в виде интеграла

$$\Psi = \int da c(a) \varphi_a \quad (4.3)$$

При непрерывном характере множества представляют вектора того же множества, где  $c_n$  – в общем случае комплексные числа,  $c(a)$  – комплексная функция непрерывного аргумента  $a$ , причём в ряд (4.2) входит произвольное число слагаемых (как и область интегрирования в (4.3) может быть выбрана произвольно).

Рассмотрим несколько векторов  $\varphi_1, \varphi_2$  ЛВ – пространства. Если ни один из них нельзя выразить линейной комбинацией всех других, то такие векторы называются линейно независимыми. В этом случае из равенства, выражающего линейную независимость векторов

$$c_1 \varphi_1 + c_2 \varphi_2 = 0 \quad (4.4)$$

следует, что  $c_1 = c_2 = \dots = 0$ .

Если ЛВ–пространство содержит конечное число  $n$  линейно независимых векторов, то оно называется конечномерным, число его измерений равно  $n$  ( $n$ -мерное ЛВ–пространство). Всякий вектор в этом пространстве представляется линейной комбинацией  $n$  линейно независимых векторов, образующих базис, причём базисные векторы можно выбрать бесконечным числом способов. Существуют ЛВ–пространства, в которых число базисных векторов не ограничено. Другие векторы в таких пространствах определяются линейной комбинацией полной системы базисных векторов в виде бесконечных рядов (или интегралов):

$$\Psi = \sum c_i \varphi_i, \quad (4.5)$$

где совокупность чисел  $c_i$  ( $c_1, c_2, \dots$ ) – координаты вектора  $\Psi$  в системе координат с базисом  $\varphi_1, \varphi_2, \dots$

В) Унитарное и гильбертово пространство.

Линейное комплексное пространство называется унитарным, если в нём определена операция скалярного произведения, ставящая в соответствие каждой паре векторов  $\psi$  и  $\varphi$  в общем случае комплексное число.

Постулируются следующие свойства скалярных произведений:

$$1. (\psi, \varphi)^* = (\varphi, \psi) \text{ – эрмитова симметрия,} \quad (4.6)$$

$$2. (\psi, \varphi_1 + \varphi_2) = (\psi, \varphi_1) + (\psi, \varphi_2) \text{ – закон дистрибутивности,} \quad (4.7)$$

$$3. (\psi, \alpha \varphi) = \alpha (\psi, \varphi) \text{ – закон ассоциативности,} \quad (4.8)$$

$$4. (\psi, \psi) \geq 0 \text{ – положительная определённость нормы вектора.} \quad (4.9)$$

Из свойств (4.6) – (4.8) следуют соотношения (4.10):

$$(\psi, \sum c_i \varphi_i) = \sum c_i (\psi, \varphi_i) \text{ – линейность скалярного произведения по второму сомножителю;}$$

$$(\sum c_i \psi_i, \varphi) = \sum c_i^* (\psi_i, \varphi) \text{ – антилинейность по первому сомножителю.}$$

(4.10)

Скалярный квадрат вектора называется нормой или квадратом модуля вектора:

$$(\psi, \psi) = \|\psi\|^2 \quad (4.11)$$

Из свойств (4.6) и (4.9) следует вещественность модуля вектора.

Бесконечномерные полные унитарные пространства с конечной нормой для всех векторов называются гильбертовыми пространствами (Г–пространствами). Полнота

пространства означает, что оно содержит все необходимые векторы для разложения любого своего вектора в сумму (или интеграл) (4.5).

В Г-пространстве можно выбрать ортогональную систему линейно независимых векторов с единичными модулями

$$(\varphi_b, \varphi_k) = \delta_{ik} \quad (4.12)$$

С помощью условия ортогональности базисных векторов (4.12) в разложении (4.5) легко найти координаты вектора. Для этого достаточно умножить вектор (4.5) слева скалярно на  $\varphi_k$ :

$$(\varphi_k, \psi) = \sum (\varphi_k, c_i \varphi_i) = \sum c_i (\varphi_k, \varphi_i) = c_k, \quad (4.13)$$

т.е. координаты вектора в ортонормированном базисе называются его проекциями. Совокупность проекций вектора даёт исчерпывающую информацию о нём. Следовательно, вектор при известном базисе может быть задан в виде упорядоченной совокупности своих проекций.

Формулу для расчёта скалярного произведения двух векторов через их проекции в ортонормированном базисе получим, используя разложение (4.5), выражение  $\chi = \sum d_k \varphi_k$  и свойства скалярного произведения (4.10):

$$(\psi, \varphi) = \sum \sum c_i^* d_k (\varphi_i, \varphi_k) = \sum c_i^* d_i \quad (4.14)$$

Норма вектора представляется аналогичной формулой:

$$(\psi, \psi) = \sum c_i^* c_i. \quad (4.14')$$

В выражениях (4.14), (4.14') бесконечные ряды сходятся к конечным вещественным числам.

В ряде задач квантовой механики используются в качестве базисных такие векторы, норма которых не является конечным числом, т.е. векторы не гильбертова пространства. В таких случаях система базисных векторов оказывается непрерывной и нормированной на  $\delta$ -функцию Дирака.

## 4.2. Операторы в линейном векторном пространстве.

Оператор есть символ, выражающий правило, согласно которому каждому вектору  $\psi$  из некоторого множества ставится в соответствие другой вектор  $\varphi$  (из этого же или другого множества):

$$\hat{A}\psi = \varphi \quad (4.15)$$

Операторы обозначаются большими латинскими буквами со “шляпкой-крышкой” наверху, например,  $\hat{A}$ ,  $\hat{C}$ ,  $\hat{H}$ ,  $\hat{S}$ ,...

В уравнении (4.15) под  $\hat{A}$  можно подразумевать любую операцию: умножение на координату  $x$  ( $\hat{A} = x$ ), дифференцирование по  $x$  ( $\hat{A} = \frac{\partial}{\partial x}$ ), извлечение корня квадратного ( $\hat{A} = \sqrt{\quad}$ ) и т.д.

В квантовой механике используются линейные операторы.

А) Линейные самосопряжённые (эрмитовы) операторы.

Оператор  $\hat{A}$  называют линейным, если он удовлетворяет условию:

$$\hat{A}(c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2) = c_1 \hat{A} \psi_1 + c_2 \hat{A} \psi_2, \quad (4.16)$$

где  $c_1$  и  $c_2$  – некоторые постоянные комплексные числа.

Символы операторов представляют собою самостоятельные математические объекты, над которыми можно производить ряд математических действий: сложение, умножение, возведение в степень, разложение в степенной ряд.

Оператор  $\hat{C}$  называется суммой операторов  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$ , т.е.

$$\hat{C} = \hat{A} + \hat{B}, \quad (4.17)$$

если выполняется равенство

$$\hat{C}\psi = (\hat{A} + \hat{B})\psi = \hat{A}\psi + \hat{B}\psi \quad (4.18)$$

Операция сложения операторов ассоциативна и коммутативна:

$$\begin{aligned} (\hat{A} + \hat{B}) + \hat{C} &= \hat{A} + (\hat{B} + \hat{C}); \\ \hat{A} + \hat{B} &= \hat{B} + \hat{A}. \end{aligned} \quad (4.19)$$

Оператор  $\hat{W}$  называется произведением операторов  $\hat{A}$  и  $\hat{G}$ , т.е.

$$\hat{W} = \hat{A} \cdot \hat{G}, \quad (4.20)$$

если справедливо равенство:

$$\hat{W}\psi = \hat{A}(\hat{G}\psi) \quad (4.21)$$

Операция умножения операторов в общем случае не коммутативна:

$$\hat{A} \cdot \hat{G} \neq \hat{G} \cdot \hat{A}.$$

Операторы, для которых  $\hat{A} \cdot \hat{G} = \hat{G} \cdot \hat{A}$ , называются коммутирующими. Оператор вида

$$\hat{A} \cdot \hat{G} - \hat{G} \cdot \hat{A} = [\hat{A}, \hat{G}] \quad (4.22)$$

называют коммутатором операторов  $\hat{A}$  и  $\hat{G}$ . Для коммутирующих операторов

$$[\hat{A}, \hat{G}] = 0, \quad (4.23)$$

т.е. операторы коммутируют, если они перестановочные.

Скалярное произведение векторов  $\varphi$  и  $\hat{A}\psi$  записывается в виде  $(\varphi, \hat{A}\psi)$ .

Оператор  $\hat{A}^+$  называется сопряжённым оператору  $\hat{A}$ , если они удовлетворяют условию:

$$(\varphi, \hat{A}\psi) = (\hat{A}^+ \varphi, \psi), \quad (4.24)$$

где  $\varphi$  и  $\psi$  – любые векторы из данного пространства. Пользуясь дважды определением сопряжённого оператора, легко доказать, что

$$(\varphi, \hat{A}\psi) = (\hat{A}^+ \varphi, \psi) = (\psi, \hat{A}^+ \varphi)^* = ((\hat{A}^+)^+ \psi, \varphi)^* = (\varphi, (\hat{A}^+)^+ \psi),$$

откуда следует

$$\hat{A} = (\hat{A}^+)^+ \quad (4.25)$$

Аналогичным методом можно доказать, что

$$(\hat{A}\hat{G})^+ = \hat{G}^+ \hat{A}^+ \quad (4.26)$$

Существуют операторы, для которых справедливо равенство

$$\hat{A} = \hat{A}^+, \quad (4.27)$$

они называются самосопряжёнными или эрмитовыми операторами. В квантовой механике в основном используются эрмитовы операторы. Условие самосопряжённости с учётом (4.24) записывается в виде:

$$(\varphi, \hat{A}\psi) = (\psi, \hat{A}\varphi)^* \quad (4.28)$$

Очевидно, что сумма самосопряжённых операторов есть самосопряжённый оператор. При умножении самосопряжённых операторов  $\hat{A}$  и  $\hat{G}$  следует иметь в виду, что их произведение даёт эрмитов оператор лишь в том случае, если коммутатор их  $[\hat{A}, \hat{G}] = 0$ , т.е. операторы–сомножители коммутируют друг с другом. Так как всякий оператор коммутирует сам с собой, то целая положительная степень эрмитова оператора  $\hat{A}$  есть так же эрмитов оператор:

$$\hat{A}^n = \underbrace{\hat{A} \cdot \hat{A} \cdot \dots \cdot \hat{A}}_n \quad (4.29)$$

Символом  $\hat{I}$  обозначается единичный оператор:

$$\hat{I}\psi = \psi \quad (4.30)$$

Очевидно,  $\hat{I}\hat{A} = \hat{A}\hat{I}$  для любого оператора. Если для оператора  $\hat{A}$  можно подобрать такой коммутирующий с ним оператор  $\hat{A}^{-1}$ , что будет выполняться условие

$$\hat{A} \hat{A}^{-1} = \hat{A}^{-1} \hat{A} = \hat{I}, \quad (4.31)$$

то  $\hat{A}^{-1}$  называется обратным по отношению к оператору  $\hat{A}$ .

Операторы, для которых

$$\hat{A}^+ = \hat{A}^{-1}, \quad (4.32)$$

называются унитарными операторами, следовательно, для них справедливо равенство:

$$\hat{A}^+ \hat{A} = \hat{A}^{-1} \hat{A} = \hat{I}. \quad (4.33)$$

Легко доказать полезное соотношение:

$$(\hat{A}, \hat{B})^{-1} = \hat{B}^{-1} \cdot \hat{A}^{-1}. \quad (4.34)$$

### **В) Собственные векторы и собственные значения самосопряжённых операторов.**

Если в результате действия оператора  $\hat{A}$  на вектор  $\varphi$  получается произведение некоторой константы  $a$  на тот же вектор, т.е. выполняется равенство

$$\hat{A}\varphi = a\varphi, \quad (4.35)$$

то вектор  $\varphi$  называется собственным вектором оператора  $\hat{A}$ , принадлежащим его собственному значению  $a$ . Уравнение (4.35) называется уравнением для собственных векторов (функций) и собственных значений. Совокупность всех собственных значений называется спектром оператора. Спектр бывает дискретным, непрерывным или смешанным (дискретно-непрерывным).

Рассмотрим свойства собственных векторов и собственных значений эрмитовых операторов.

Теорема 1. Эрмитов оператор имеет вещественные собственные значения.

Доказательство. Итак, пусть дан эрмитов оператор  $\hat{A}$ , т.е.  $\hat{A} = \hat{A}^+$ , и его уравнение для собственных векторов и собственных значений (дискретный спектр):  $\hat{A}\varphi_n = a_n\varphi_n$ . Требуется доказать, что  $a_n$  — действительные числа.

Пользуясь определением самосопряжённости оператора (4.28) для случая  $\psi = \varphi = \varphi_n$ , запишем:

$$(\varphi_n, \hat{A}\varphi_n) = (\varphi_n, \hat{A}\varphi_n)^* = (\hat{A}\varphi_n, \varphi_n),$$

откуда

$$(\varphi_n, a_n\varphi_n) = (a_n\varphi_n, \varphi_n),$$

т.е.

$$a_n(\varphi_n, \varphi_n) = a_n^*(\varphi_n, \varphi_n),$$

значит

$$a_n = a_n^*,$$

т.е. собственные значения эрмитова оператора  $\hat{A}$  действительны.

Теорема 2. Собственные вектора  $\varphi_n$  и  $\varphi_m$  эрмитова оператора  $\hat{A}$ , принадлежащие различным собственным значениям  $a_n \neq a_m$ , взаимно ортогональны.

Доказательство. На основе эрмитовости оператора (условие (4.28)) можно записать:

$$(\varphi_m, \hat{A}\varphi_n) = (\hat{A}\varphi_m, \varphi_n).$$

С учётом теоремы 1 и свойств скалярного произведения векторов (4.10) преобразуем это равенство к виду:

$$a_n(\varphi_n, \varphi_m) = a_m(\varphi_m, \varphi_n),$$

откуда

$$(a_n - a_m)(\varphi_m, \varphi_n) = 0.$$

Учитывая условие  $a_n \neq a_m$ , получаем

$$(\varphi_m, \varphi_n) = 0, \quad (4.37)$$

что означает ортогональность собственных векторов  $\varphi_m$  и  $\varphi_n$ , принадлежащих различным собственным значениям. Таким образом, теорема доказана.

Поскольку уравнение (4.35) однородно, то собственные вектора определяются им с точностью до произвольного множителя. Этот множитель можно выбрать так, чтобы норма собственных векторов, согласно (4.9), равнялась единице, т.е.

$$(\varphi_n, \varphi_n) = 1 \quad (4.38)$$

Объединяя (4.37) и (4.38), получаем условие ортонормировки собственных векторов эрмитовых операторов с дискретным спектром:

$$(\varphi_m, \varphi_n) = \delta_{mn} \equiv \begin{cases} 0, m \neq n \\ 1, m = n \end{cases} \quad (4.39)$$

Если спектр собственных значений оператора  $\hat{A}$  непрерывен, то собственные векторы нельзя пронумеровать числами. В этом случае собственные векторы зависят от собственных значений  $a$  как от параметра, что обозначается через  $\varphi_a$ :

$$\hat{A}\varphi_a = a\varphi_a \quad (4.40)$$

Так первая и вторая теоремы легко обобщаются и на случай непрерывного спектра собственных значений эрмитова оператора. Норма же собственных векторов в этом случае не является конечной, т.к.  $(\varphi_a, \varphi_a) = \infty$ . Поэтому условие ортонормировки записывается с помощью  $\delta$ -функции Дирака:

$$(\varphi_a, \varphi_{a'}) = \delta(a' - a) \equiv \begin{cases} \infty, a = a' \\ 0, a \neq a' \end{cases} \quad (4.41)$$

В случае  $f$ -кратного вырождения некоторого собственного значения собственные векторы, принадлежащие ему, вообще говоря, не ортогональны. Однако, можно составить  $f$  линейных комбинаций из этих собственных векторов, удовлетворяющих условию

ортонормировки. Система собственных векторов эрмитова<sup>1</sup> оператора является полной (замкнутой), если всякий вектор гильбертова пространства может быть разложен в ряд по собственным векторам эрмитова оператора, т.е

$$\psi = \sum_n c_n \varphi_n \quad (4.42)$$

Это выражение аналогично (4.5), когда базисными векторами являются собственные вектора  $\varphi_n$  оператора  $\hat{A}$ . Для определения коэффициентов  $c_n$  в разложении (4.42) умножим его скалярно слева на  $\varphi_m$ :

$$(\varphi_m, \psi) = \sum_n (\varphi_m, c_n \varphi_n) = \sum_n c_n (\varphi_m, \varphi_n) = c_m.$$

Тогда формула для коэффициентов разложения в (4.42) представиться в виде:

$$C_n = (\varphi_n, \psi) \quad (4.43)$$

В случае непрерывного спектра собственных значений оператора  $\hat{A}$  любой вектор  $\psi$  гильбертова пространства раскладывается в интеграл, подобный интегралу Фурье:

$$\psi = \int c(a) \varphi_a da, \quad (4.44)$$

где  $\varphi_a$ —собственный вектор оператора  $\hat{A}$  (4.40), коэффициенты разложения определяются формулой:

$$c(a) = (\varphi_a, \psi) \quad (4.45)$$

Действительно, достаточно (4.44) умножить слева скалярно на вектор  $\varphi_{a'}$ , чтобы получить нужный результат:

$$(\varphi_{a'}, \psi) = \int (\varphi_{a'}, c(a) \varphi_a) da = \int c(a) (\varphi_{a'}, \varphi_a) da = c(a'),$$

откуда следует формула (4.45).

Прямым следствием замкнутости (полноты) системы собственных векторов эрмитовых операторов является выражение скалярного произведения двух векторов гильбертова пространства:

$$(\psi, \Phi) = \int c^*(a) b(a) da, \quad (4.46)$$

где  $c(a)$  и  $b(a)$  – проекции векторов  $\psi$  и  $\Phi$  на базисные векторы  $\varphi_a$ , т.е. на собственные векторы эрмитова оператора  $\hat{A}$ .

## §5. Принципы и постулаты квантовой механики.

---

<sup>1</sup> Система собственных векторов является ортогональной и полной не только для эрмитова оператора, но и для операторов более широкого класса.

В основе квантовой механики лежит минимальное число принципов и постулатов, которые нельзя доказать в рамках имеющихся физических теорий. Все остальные положения и утверждения в квантовой механике доказываются и обосновываются. Можно сказать, что принципы и постулаты в квантовой механике являются логическим обобщением основных идей квантовой физики.

К числу основополагающих идей квантовой теории, рассмотренных в первой главе, относятся:

1) идея квантования (дискретность), согласно которой физические величины, относящиеся к микрообъектам (квантовым системам), могут принимать в соответствующих условиях только вполне определённые, т.е. дискретные значения;

2) идея корпускулярно-волнового дуализма, утверждающая, что с каждым микрообъектом уравнения де Бройля связываются, с одной стороны, корпускулярные характеристики (энергия  $E$  и вектор импульса  $\vec{p}$ ) и, с другой стороны, волновые характеристики (частота  $\omega$  и волновой вектор  $\vec{k}$ );

3) идея статистического характера основных закономерностей в природе, в связи с чем квантовая механика предсказывает (позволяет рассчитывать) вероятности измерения дозволенных значений физических величин.

В квантовой механике решаются три типа практических задач. Задача первого типа (прямая): зная состояние квантовой системы, требуется предсказать возможные результаты измерений её физических величин. Задача второго типа (обратная): по результатам эксперимента определить состояние квантовой системы. В задачах третьего типа изучается изменение состояния квантовой системы со временем. Эти задачи связаны с представлениями о квантовом статистическом ансамбле и роли и свойствах измерительных приборов.

Для построения логически стройной теории, решения указанных задач и многих других вопросов в основу квантовой механики положены следующие принципы и постулаты:

1. Принцип соответствия.
2. Определение состояния квантовой системы.
3. Принцип суперпозиции.
4. Постулат квантования.
5. Постулат вероятности.
6. Принцип тождественности одинаковых частиц и постулат симметрии.

Рассмотрим математические формулировки и физическое содержание исходных принципов квантовой механики.



Согласно корпускулярно-волновому дуализму в квантовой области не существует таких состояний микрообъектов, в которых координаты и соответствующие проекции импульсов имели бы однозначно определённые значения, что выражается соотношениями неопределённостей (2.10). Это находит своё отражение в математическом аппарате квантовой теории, который резко отличается от аппарата классической механики.

Математической основой для наиболее общей формулировки законов квантовой механики являются полные бесконечномерные унитарные пространства с конечной нормой для всех векторов – гильбертовы пространства ( $\Gamma$ -пространства) и его расширения. Изложим исходные аксиомы квантовой механики с помощью математического аппарата векторов и операторов в  $\Gamma$ -пространстве.

### ***5.1. Принцип соответствия.***

Принцип соответствия – это физический постулат, который утверждает:

1) результаты квантовой и классической механики совпадают в предельном случае, когда квантовые эффекты малы;

2) формулировка основных положений и законов квантовой механики принципиально невозможна без привлечения классической механики, в частности, существует аналогия между классическими соотношениями и формулами, связывающими операторы соответствующих физических величин.

Интересна история возникновения и углубления принципа соответствия. Ещё в 1900г. М.Планк заметил, что формула для плотности энергии теплового излучения (1.21) переходит в классическую формулу Рэля-Джинса (1.10), если  $\hbar\omega \ll kT$ . Это натолкнуло его на мысль, что классическую теорию можно рассматривать как теорию, в которой постоянной  $\hbar$  можно пренебречь. В 1923г. Н.Бор выдвинул принцип соответствия как эвристический принцип. Идея Бора заключалась в следующем: поскольку законы классической физики подтверждаются экспериментом для широкой области явлений, то следует принять, как необходимый, постулат, согласно которому новая, более строгая теория в применении к этим явлениям должна давать тот же результат, что и классическая теория. Так, например, частота излучения, испускаемого атомом при переходе из одного энергетического состояния в другое, асимптотически (при больших значениях квантовых чисел) совпадает с частотой, рассчитанной по классической теории (частотой обращения электрона на соответствующей стационарной орбите). С точки зрения этого принципа релятивистская механика содержит ньютоновскую механику в предельном случае малых (по сравнению со скоростью света  $c$ ) скоростей. Волновая оптика,

представляя собою обобщение геометрической, является частным случаем квантовой оптики и т.д.

Возникнув на заре квантовой механики, принцип соответствия сыграл исключительно важную роль в её становлении и развитии. Происходило углубление содержания самого принципа, понимание того, что квантовая механика не только содержит классическую как свой предельный случай (при  $\hbar \rightarrow 0$ ), но “в то же время нуждается в этом предельном случае для самого своего обоснования”[3]. Это проявляется, в частности, в том, что для записи волнового уравнения Шредингера (основного уравнения квантовой механики) в каждом конкретном случае необходимо взять “из классической механики выражение потенциальной энергии для каждой задачи:  $-\frac{e^2}{r}$  – для атома водорода,  $\frac{kx^2}{2}$  – для осциллятора и т.д. Иначе говоря, принцип соответствия является в квантовой механике неотъемлемой составной частью теории” [4]. В связи с этим принцип соответствия в квантовой механике называется первым постулатом – первой аксиомой.

Следует заметить, что принцип соответствия представляет собою важнейшее достижение теоретической физики XX века. “Благодаря ему история физической науки предстаёт перед нами не как хаотическая смена различных более или менее удачных теоретических воззрений, не как череда их катастрофических крушений, а как закономерный и последовательный процесс познания, идущего ко всё более широким обобщениям” [4].

## **5.2. Определение состояния квантовой системы.**

Второй, чрезвычайно важный, постулат касается математического определения состояния квантовой системы и его физического содержания. Классический способ определения состояния систем оказывается непригодным в квантовой области в силу корпускулярно-волнового дуализма. Согласно фундаментальной идее де Бройля состояние свободной частицы с определённым импульсом  $\vec{p}$  задаётся комплексной волновой функцией

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{r}, t) = ce^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - \varepsilon(\vec{p})t)}, \quad (5.1)$$

так называемой волной де Бройля. Функция (5.1), заданная во всём пространстве, математически представляет собой вектор бесконечномерного векторного линейного пространства.

Второй постулат можно рассматривать как математическое обобщение гениальной идеи де Бройля. Он утверждает: в квантовой механике состояние микрообъекта (любой системы) наиболее полно описывается вектором гильбертова пространства  $\psi$ . Причём  $\psi$  и  $c\psi$  ( $c$ –

произвольное комплексное число) физически определяют одно и то же состояние системы. Вследствие этого можно считать, что вектор состояния  $\psi$  удовлетворяет условию нормировки:

$$(\psi, \psi) = 1 \quad (5.2)$$

Теоретически, смысл этого условия заключается в том, что состояние системы определяется лишь направлением вектора  $\psi$ .

### 5.3. Принцип суперпозиции состояний.

Квантовомеханический принцип суперпозиции утверждает: если квантовая система может находиться в состояниях, описываемых векторами гильбертова пространства  $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_k$ , то она может находиться и в состоянии, описываемом линейной комбинацией этих векторов:

$$\psi = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2 + \dots + c_k \psi_k, \quad (5.3)$$

где  $c_1, c_2, \dots, c_k$  — произвольные комплексные числа, т.е. физически возможна суперпозиция состояний.

Важно обратить внимание на то, что состояние квантовой системы описывается вектором гильбертова пространства, норма которого равна 1, поэтому существенно только направление вектора. Отсюда следует, что векторы  $\psi$  и  $c\psi$  ( $c$  — произвольное комплексное число) описывают одно и то же состояние квантовой системы. В этом состоит особенность принципа суперпозиции квантовой механики, отличающая его от классического принципа суперпозиции. Отличие квантовой суперпозиции от классической можно проиллюстрировать таким примером. Суперпозиция двух классических волн приводит к возникновению новой волны, обладающей, естественно, и новыми физическими характеристиками. Квантовая же суперпозиция двух состояний, описываемых одинаковыми векторами  $\psi_1$  и  $\psi_2 = \psi_1$ , не приводит к новому состоянию в силу того, что вектор, описывающий получившееся состояние оказывается равным  $\psi = \psi_1 + \psi_2 = 2\psi_1$ , а, следовательно, направление векторов  $\psi$  и  $\psi_1$  одинаково, т.е. они описывают одно и то же состояние.

Из принципа суперпозиции состояний следует, что все уравнения, которым удовлетворяют векторы состояний  $\psi$ , должны быть линейными (относительно  $\psi$ ).

Принцип суперпозиции состояний отражает волновую природу микрочастиц и выполняется в нерелятивистской квантовой механике без исключения. Ярким подтверждением этого является опыт с интерференцией пучка электронов от двух щелей (§3, п.4). Сложение векторов состояний (волновых функций), а не вероятностей, представляет важнейшую особенность суперпозиции состояний в микромире.

Важным примером суперпозиции состояний, бесконечно мало отличающихся друг от друга (когда сумма (5.3) заменяется интегралом), является представление произвольного состояния микрообъекта суперпозицией волн де Бройля, т.е. состояний заданным импульсом  $\vec{p}(p_x, p_y, p_z)$  частицы.<sup>1</sup>

#### 5.4. Постулат квантования.

Четвёртый постулат – постулат квантования – утверждает: каждой физической величине  $A$  в квантовой механике сопоставляется линейный самосопряжённый (эрмитов) оператор  $\hat{A}$ , действующий в гильбертовом пространстве. Единственно возможным результатом измерений этой величины  $A$  являются собственные значения сопоставляемого ей оператора  $\hat{A}$ .

Линейность операторов физических величин обусловлена принципом суперпозиции. Эрмитовость же операторов обеспечивает вещественность предсказанных квантовой теорией результатов измерений физических величин, т.к. лишь у самосопряжённых операторов собственные значения вещественны (4.36):  $a_n = a_n^*$ .

Спектр собственных значений эрмитова оператора  $\hat{A}$ , определяемый уравнением для собственных векторов и собственных значений (4.35), может быть дискретным, непрерывным или смешанным (§4, п.2). Случай дискретного спектра собственных значений оператора  $\hat{A}$  соответствует квантованию физической величины  $A$ :

$$\hat{A}\varphi_n = a_n\varphi_n, \quad (5.4)$$

т.е.  $(a_1, a_2, \dots, a_n, \dots)$ , чем и обусловлено название постулата. Согласно этому постулату, если вектор состояния  $\psi$  системы совпадает с одним из собственных векторов,  $\varphi_1$  например, оператора, то при измерениях физической величины получаются вполне определённые значения  $a_1$ . Если же вектор состояния  $\psi$  не совпадает ни с одним из собственных векторов  $\varphi_n$  оператора  $\hat{A}$ , то результат измерения физической величины  $A$  оказывается неоднозначным, т.е. при измерениях получаются различные значения, но всегда совпадающие с собственными значениями  $(a_1, a_2, \dots, a_n, \dots)$  оператора.

В случае непрерывного спектра собственных значений эрмитова оператора  $\hat{B}$ , сопоставляемого физической величине  $B$  квантовой системы, при измерении будут получаться числа, совпадающие с собственными значениями  $b$  соответствующего оператора:

$$\hat{B}\varphi_b = b\varphi_b \quad (5.4)$$

<sup>1</sup> Плоские монохроматические волны де Бройля (5.1), описывая состояние идеализированного объекта (свободной частицы), являются векторами унитарного пространства, т.к. их норма не равна 1; но суперпозиция таких векторов даёт волновые пакеты, представляющие векторы Г-пространства.

Это соответствует непрерывному изменению физической величины. Примером таких величин являются координаты, проекции импульсов и т.д.

### 5.5. Правила квантования.

Для квантовомеханической системы результата измерения физической величины  $A$ , изображающейся эрмитовым оператором  $\hat{A}$ , в общем случае неоднозначен. Квантовая механика, как статистическая теория, должна предсказывать не только значения результатов измерения физической величины  $A$ , но и вероятности  $w_n$  возможных значений  $a_n$  этой величины в состоянии системы, которое описывается  $\psi$  вектором гильбертова пространства. Эти вероятности  $w_n$  и определяются пятым постулатом. Согласно четвертому:  $\varphi_1 \rightarrow a_1$ ;  $\varphi_2 \rightarrow a_2$ , т.к.  $\varphi_1$  и  $\varphi_2$  – возможные состояния, тогда согласно третьему:  $\Psi = c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2$  – возможное состояние системы и вероятности  $w_1 = |c_1|^2$  и  $w_2 = |c_2|^2$ .

Пятый постулат – правила квантования – гласит: для системы, находящейся в состоянии  $\Psi$ , вероятность  $W_k$  получить при измерении физической величины  $A$  значение  $a_n$  равна квадрату модуля соответствующего коэффициента Фурье – разложения вектора  $\Psi$  по собственным векторам  $\varphi_n$  оператора  $\hat{A}$ , изображающего эту физическую величину:

$$W_n = |(\varphi_n, \Psi)|^2 = |c_n|^2 \quad (5.5)$$

При непрерывном спектре собственных значений оператора  $\hat{A}$  квадрат модуля коэффициента Фурье–разложения  $|(\varphi_a, \Psi)|^2$  следует рассматривать как плотность вероятности.

В качестве примера рассмотрим результаты измерения величины  $A$  в состоянии квантовомеханической системы, когда  $\Psi = \varphi_1$ , где  $\varphi_1$  – собственный вектор оператора  $\hat{A}$ , определяемый уравнением  $\hat{A}\varphi_n = a_n\varphi_n$ . В этом случае вероятность  $W_1$  измерения значения  $a_1$  равна 1, т.к.  $c_1 = (\varphi_1, \varphi_1) = 1$ , все же другие коэффициенты в разложении  $\Psi = c_1\varphi_1 + \dots c_n\varphi_n + \dots = \sum_{n=1}^{\infty} c_n\varphi_n$  равны нулю:  $(\varphi_n, \varphi_1) = 0$  при  $n \neq 1$  в силу ортогональности собственных векторов эрмитовых операторов. Значит, полученные результаты можно записать в виде:

$$W_n = \begin{cases} 1, n=1 \\ 0, n \neq 1 \end{cases}$$

Если же вектор состояния  $\Psi$  системы не совпадает ни с одним из собственных векторов  $\varphi_n$  оператора  $\hat{A}$ , то используя разложение  $\Psi$  в ряд Фурье по полной системе ортонормированных собственных векторов  $\varphi_n$  (4.42) и вычисляя коэффициенты  $c_n$  разложения по формуле (4.43), на основе четвертого постулата запишем:

[illegible]

Очевидно, что

$$\sum_n |c_n|^2 \equiv \sum_n |(\varphi_n, \psi)|^2 = 1 \quad (5.8)$$

что легко доказать, учитывая, что норма вектора  $\Psi$  равна единице:

$$(\psi, \psi) = \left( \sum_k c_k \varphi_k, \sum_n c_n \varphi_n \right) = \sum_{k,n} c_k^* c_n (\varphi_k, \varphi_n) = \sum_n |c_n|^2 = 1$$

Из рассмотренных примеров следует, что пятый постулат, определяющий вероятности  $W_n$  измерения тех или иных дозволённых значений физической величины, вполне логично назвать правилами квантования.

### 5.6. Вычисление средних значений физических величин.

Расчет средних значений физических величин имеет важное значение в микромире. Когда в рассматриваемом состоянии квантовомеханической системы физическая величина не имеет определенного значения, т.е. при измерении этой физической величины получается неоднозначный результат, то среднее значение этой величины в какой-то мере характеризует состояние.

Получим формулу для расчета среднего значения величины  $A$ , изображающейся эрмитовым оператором  $\hat{A}$ , в состоянии  $\Psi$ . Ради простоты рассмотрим случай дискретного спектра собственных значений оператора:  $a_1, a_2, \dots, a_n, \dots$ . Если  $W_n$  – вероятности обнаружения дозволённых значений  $a_n$  (5 постулат) равны  $|\langle \varphi_n, \Psi \rangle|^2$ , то по теореме о среднем из теории вероятности:

$$\langle A \rangle = \bar{a} = \sum_n W_n a_n = \sum_n a_n |(\varphi_n, \psi)|^2 \quad (5.9)$$

Учитывая свойства скалярных произведений векторов гильбертова пространства (4.7) и (4.10), получим

$$\bar{a} = \sum_n (\psi, \varphi_n) c_n a_n = \sum_n (\psi, c_n a_n \varphi_n) = \sum_n (\psi, c_n \hat{A} \varphi_n) = \left( \psi, \sum_n \hat{A} c_n \varphi_n \right) = \left( \psi, \hat{A} \sum_n c_n \varphi_n \right) = (\psi, \hat{A} \psi)$$

Таким образом, для расчета среднего значения физической величины  $A$ , изображающейся соответствующим оператором  $\hat{A}$ , необходимо знать вектор состояния  $\psi$ :

$$\langle A \rangle = (\psi, \hat{A} \psi) \quad (5.10)$$

Очевидно, если  $\Psi = \varphi_n$ , где  $\varphi_n$  определяется уравнением  $\hat{A}\varphi_n = a_n\varphi_n$ , то формула (5.10) дает следующий результат:

$$\bar{a} = (\varphi_n, \hat{A}\varphi_n) = a(\varphi_n, \varphi_n) = a_n \quad (5.11)$$

Если  $(\Psi, \Psi) \neq 1$ , тогда для среднего значения физической величины справедливо выражение:

$$\langle A \rangle = \frac{(\psi, \hat{A} \psi)}{(\psi, \psi)} \quad (5.12)$$

### **5.7. Принцип тождественности (неразличимости) одинаковых частиц.**

При изучении свойств систем одинаковых частиц (одного сорта) используется шестой постулат (аксиома), согласно которому *в системе одинаковых частиц реализуются лишь такие состояния, которые не меняются при обмене одинаковых частиц.*

Этот принцип связан с симметрией волновых функций систем одинаковых частиц, он объясняет существование обменного взаимодействия.

### Глава 3. Основы теории представлений

#### §6. Координатное представление

И в квантовой механике существуют физические величины, обладающие непрерывным спектром собственных значений. Примером таких величин являются координаты частицы  $x, y, z$ .

##### 6.1. Векторы состояния в координатном представлении

Рассмотрим ради простоты одномерный случай: частица движется вдоль оси  $Ox$ .

Собственные векторы эрмитова оператора координаты  $x$  являются базисными в координатном представлении. Обозначив их через  $\varphi_x$ , запишем уравнение для собственных векторов и собственных значений оператора  $x$ :

$$x\varphi_x = x\varphi_x. \quad (6.1)$$

Аналогично, собственный вектор  $\varphi_{x'}$ , принадлежащий конкретному значению координаты  $x'$ , удовлетворяет уравнению:

$$x\varphi_{x'} = x'\varphi_{x'}. \quad (6.2)$$

Любой вектор  $\Psi$  гильбертова пространства, определяющий состояние одномерной квантовой системы, может быть разложен в интеграл Фурье по базисным векторам  $\varphi_x$  согласно формуле:

$$\Psi = \int \psi(x)\varphi_x dx, \quad (6.3)$$

где коэффициенты разложения записываются в виде:

$$\psi(x) = (\varphi_x, \Psi) \quad (6.4)$$

и представляют собою координаты вектора  $\Psi$  или его проекции на базисные векторы  $\varphi_x$  в координатном представлении.

Вектор  $\Psi \in \Gamma$  обладает единичной нормой  $(\Psi, \Psi) = 1$ , причем норму вектора  $\Psi$  можно представить следующим выражением:

$$(\Psi, \Psi) = \iint dx' dx (\psi(x'), \varphi_{x'}) (\psi(x), \varphi_x) = \iint dx' dx \psi^*(x') \psi(x) (\varphi_{x'}, \varphi_x) = 1.$$

Этому условию можно удовлетворить, если считать, что собственные векторы  $\varphi_x$  оператора  $x$  с непрерывным спектром собственных значений нормируются на  $\delta$ -функцию Дирака:



$$(\varphi_{x'}, \varphi_x) = \delta(x - x'). \quad (6.5)$$

Тогда

$$(\Psi, \Psi) = \int dx \psi^*(x) \psi(x) = \int |\psi(x)|^2 dx = 1, \quad (6.6)$$

т.е. в координатном представлении проекциями вектора  $\Psi$  являются значения комплексной функции  $\psi(x)$  при различных значениях  $x$ , и что  $|\psi(x)|^2 dx = dW(x)$  - вероятность обнаружения частицы с координатой  $x$  из интервала  $x \div x + dx$ . Следовательно, квадраты модулей коэффициентов Фурье-разложения (6.4) представляют известную формулу плотности вероятности  $\omega(x) = |\psi(x)|^2$ .

Таким образом, совокупность проекций  $\psi(x)$  или координат  $\Psi$ -вектора определяет этот вектор  $\Psi$  в координатном представлении. Другими словами, множество проекций (координат)  $\psi(x)$  называют вектором состояния в координатном представлении или коротко волновой функцией.

Формула (6.5) свидетельствует об ортогональности собственных векторов эрмитова оператора  $x$ :

$$(\varphi_{x'}, \varphi_x) = \delta(x - x') = \begin{cases} 0, & x \neq x' \\ \infty, & x = x' \end{cases}, \quad (6.7)$$

в то же время норма собственных векторов  $\varphi_x$  равна  $\infty$ .<sup>1</sup>

Определим скалярное произведение двух векторов  $\psi$  и  $\chi$  гильбертова пространства в координатном представлении. Записывая векторы  $\psi$  и  $\chi$  в форме разложения по базисным векторам в координатном представлении

$$\psi = \int dx \psi(x) \varphi_x; \chi = \int dx' \chi(x') \varphi_{x'},$$

получим

$$\begin{aligned} (\psi, \chi) &= \iint dx dx' (\psi(x), \varphi_x) (\chi(x'), \varphi_{x'}) = \iint dx dx' \psi^*(x) \chi(x') (\varphi_x, \varphi_{x'}) = \\ &= \int \psi^*(x) \chi(x) dx. \end{aligned} \quad (6.8)$$

Эта формула является обобщением выражения скалярного произведения геометрических векторов на случай векторов гильбертова пространства.

---

<sup>1</sup> Как уже отмечалось, в квантовой механике используются векторы  $\Gamma$ -пространства с расширением, т.е. векторы, норма у которых равна 1, и векторы, которые нормируются на  $\delta$ -функцию Дирака.

## **6.2. Операторы физических величин в координатном представлении**

Основная проблема квантовой механики - проблема квантования - связана с определением явного вида операторов физических величин.

Пусть некоторая физическая величина изображается линейным эрмитовым оператором  $A$ , состояние же квантовой системы описывается вектором  $\Psi \in \Gamma$ . В общем случае

$$A\Psi = \chi, \quad (6.9)$$

где  $\chi \in \Gamma$ .

В координатном представлении состояние квантовой системы описывается комплексной функцией координаты  $x$ :

$$\Psi \rightarrow \psi(x), \text{ где } \psi(x) = (\varphi_x, \Psi),$$

$$\chi \rightarrow \chi(x), \text{ где } \chi(x) = (\varphi_x, \chi).$$

Следовательно, оператор  $A$  в координатном представлении каждой функции  $\psi(x)$  ставит в соответствие функцию  $\chi(x)$ :

$$A\psi(x) = \chi(x). \quad (6.10)$$

Если учесть, что каждая физическая величина есть функция канонических переменных, т.е.  $A = A(q_j, p_j)$ , где  $j = 1, 2, 3, \dots, s$  ( $s$  - число степеней свободы), тогда согласно принципу соответствия соотношения между физическими величинами и каноническими переменными (координатами  $q_j$  и обобщенными импульсами  $p_j$ ) переносятся на операторы физических величин.

Таким образом, очень важно установить явный вид операторов координат  $x, y, z$  и проекций импульсов  $p_x, p_y, p_z$ . Для этого прежде всего рассмотрим одномерную задачу.

### **Оператор координаты $x$ в координатном представлении.**

Пусть  $A = x$ , тогда уравнение (6.9) примет вид:

$$x\Psi = \chi. \quad (6.9')$$

В координатном представлении это уравнение преобразуется в согласии с (6.10):

$$x\psi(x) = \chi(x). \quad (6.10')$$

Разложим векторы  $\Psi$  и  $\chi$  в интеграл Фурье по базисным векторам  $\varphi_x$ , для которых справедливы уравнения (6.1), и подставим в левую часть уравнения (6.9'):

$$x\Psi = \int dx \psi(x) x \varphi_x = \int dx \psi(x) x \varphi_x = \int dx \cdot x \psi(x) \varphi_x.$$

Тогда уравнение (6.10') записывается в виде:

$$\int dx \cdot x \psi(x) \rho_x = \int dx \chi(x) dx,$$

откуда

$$x \psi(x) = \chi(x). \quad (6.11)$$

Сравнивая (6.10') и (6.11), получаем

$$x = x. \quad (6.12)$$

Следовательно, в координатном представлении оператор координаты  $x$  есть сама координата  $x$ , т.е. оператор  $x$  в координатном представлении есть простая операция умножения на эту координату.

Аналогичным образом можно показать, что

$$y = y; z = z,$$

т.е.

$$\vec{r} = \vec{r}. \quad (6.13)$$

### **Оператор $p_x$ в координатном представлении.**

Для частицы, движущейся вдоль оси  $x$ ,  $p = p_x$ . Пусть эта физическая величина изображается эрмитовым оператором  $p$ . Запишем уравнение для собственных векторов и собственных значений этого оператора  $p$ :

$$p \varphi_p = p \varphi_p. \quad (6.14)$$

Для конкретного значения импульса  $p'$  это уравнение имеет вид:

$$p \varphi_{p'} = p' \varphi_{p'}. \quad (6.14')$$

Учтем, что в случае непрерывного спектра собственных значений оператора  $p$  собственные его векторы нормируются на  $\delta$ -функцию Дирака:

$$(\varphi_p, \varphi_{p'}) = \delta(p - p'). \quad (6.15)$$

Разложим вектор  $\varphi_p$  по собственным векторам оператора  $x$ :

$$\varphi_p = \int dx \varphi_p(x) \varphi_x, \quad (6.16)$$

где  $\varphi_p(x) = (\varphi_x, \varphi_p)$  - проекции собственных векторов  $\varphi_p$ , совокупность которых определяет вектор  $\varphi_p$  в координатном представлении, т.е.  $\varphi_p(x)$  является волновой функцией частицы с заданной величиной импульса. Согласно гипотезе деБройля в качестве такой волновой функции следует взять плоскую монохроматическую волну

$\varphi_p(x) = ce^{\frac{i}{\hbar} p x}$ . Таким образом,

$$\varphi_p(x) = ce^{\frac{i}{\hbar}px} = (\varphi_x, \varphi_p). \quad (6.17)$$

Определим нормировочный коэффициент  $c$ , пользуясь условием (6.15):

$$\begin{aligned} (\varphi_p, \varphi_{p'}) &= \iint dx dx' (\varphi_p(x), \varphi_x) (\varphi_{p'}(x'), \varphi_{x'}) = \iint dx dx' \varphi_p^*(x) \varphi_{p'}(x') (\varphi_x, \varphi_{x'}) = \\ &= \int dx \varphi_p^*(x) \varphi_{p'}(x) = |c|^2 \int e^{\frac{i}{\hbar}(p'-p)x} dx. \end{aligned}$$

Переходя к новой переменной интегрирования  $\xi = \frac{1}{\hbar}x$  и учитывая определение  $\delta$  - функции

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\alpha\xi} d\xi = \delta(\alpha), \quad (6.18)$$

для скалярного произведения  $(\varphi_p, \varphi_{p'})$  получим следующий результат:

$$(\varphi_p, \varphi_{p'}) = |c|^2 \hbar \cdot 2\pi \cdot \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \cdot e^{i(p'-p)\xi} = |c|^2 \cdot 2\pi\hbar \cdot \delta(p' - p).$$

С учетом условия нормировки (6.15) находим:

$$|c|^2 \cdot 2\pi\hbar = 1,$$

откуда

$$c = (2\pi\hbar)^{-1/2}. \quad (6.19)$$

Следовательно, нормированная волновая функция частицы (6.19), движущейся вдоль оси  $Ox$  с определенным импульсом  $p = p_x$ , имеет вид:

$$\varphi_{p_x}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}p_x x}. \quad (6.20)$$

Заметим, что

$$\frac{\hbar}{i} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \varphi_{p_x}(x) = \frac{\hbar}{i} (2\pi\hbar)^{-1/2} \cdot \frac{i}{\hbar} p_x e^{\frac{i}{\hbar}p_x x} \equiv p_x \varphi_{p_x}(x),$$

в то же время уравнение (6.14) позволяет записать

$$p_x \varphi_{p_x}(x) = p_x \varphi_{p_x}(x).$$

---

<sup>1</sup> Для случая частицы, движущейся с заданным вектором импульса  $\vec{p}(p_x, p_y, p_z)$ , волновая функция

$$\varphi_{\vec{p}}(\vec{r}) = c_x \varphi_{p_x}(x) c_y \varphi_{p_y}(y) c_z \varphi_{p_z}(z) = (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}}.$$

Из сравнения левых частей этих уравнений следует выражение для оператора в координатном представлении

$$p_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}. \quad (6.21)$$

Правильный явный вид оператора  $(p = p_x)$  в координатном представлении (6.21) подтверждают расчеты с произвольным вектором  $\Psi$  квантового состояния системы. Разложим для этого  $\Psi$  по собственным векторам  $\varphi_x$  оператора  $x$ , а затем по собственным векторам  $\varphi_p$  оператора  $p$ :

$$\begin{aligned} \Psi &= \int \psi(x) \varphi_x dx, \\ \Psi &= \int \phi(p) \varphi_p dp, \end{aligned}$$

где  $|\psi(x)|^2$  - плотность вероятности обнаружения у частицы координаты  $x$ ,  $|\phi(p)|^2$  - плотность вероятности обнаружения у частицы импульса  $p_x = p$ .

Тогда волновая функция  $\psi(x)$  с учетом (6.17) может быть представлена в виде:

$$\psi(x) = (\varphi_x, \Psi) = \int dp (\varphi_x, \phi(p) \varphi_p) = \int dp \phi(p) (\varphi_x, \varphi_p) = \int dp \phi(p) \varphi_p(x). \quad (6.22)$$

Действуя оператором  $p_x$  на волновую функцию  $\psi(x)$ , получим:

$$p_x \psi(x) = \int dp \phi(p) p_x \varphi_p(x) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \int dp \phi(p) \varphi_p(x) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x).$$

Зная явный вид оператора проекций импульса  $p_x$  в координатном представлении, подобным образом можно доказать справедливость аналогичных выражений для операторов  $p_y, p_z$ , т.е.

$$\left. \begin{aligned} p_x &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \\ p_y &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} \\ p_z &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \quad \vec{p} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}. \quad (6.23)$$

### **Операторы кинетической энергии, момента импульса, функции Гамильтона, энергии в координатном представлении.**

На основе принципа соответствия по известному явному виду операторов канонических переменных (координат и проекций вектора импульса) легко записать явный вид оператора любой физической величины в том же представлении. Для этого в классическую формулу физической величины вместо координат и проекций импульсов

следует вставить соответствующие операторы. Важно при этом проверить эрмитовость полученного оператора.

Так классическая формула для кинетической энергии  $T = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m_0}$ , где  $m_0$  - масса частицы, позволяет записать оператор кинетической энергии в виде:

$$T = \frac{1}{2m_0} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2. \quad (6.24)$$

Легко видеть, что если  $p_x, p_y, p_z$  - эрмитовы операторы, то и квадраты их, а затем и сумма последних есть эрмитов оператор.

По классической формуле для механического момента импульса движущейся частицы

$$\vec{L} = [\vec{r} \times \vec{p}] \equiv \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix}$$

легко записать операторы проекций и квадрата механического момента:

$$\left. \begin{aligned} L_x &= yp_z - zp_y, \\ L_y &= zp_x - xp_z, \\ L_z &= xp_y - yp_x, \\ L^2 &= L_x^2 + L_y^2 + L_z^2. \end{aligned} \right\} \quad (6.25)$$

Не составляет труда проверить линейность и эрмитовость этих операторов.

В теоретической физике большое значение имеет функция Гамильтона:  $H = T + U(x, y, z, t)$ . Оператор ее называется гамильтонианом квантовой системы. Если учесть, что время  $t$  в квантовой механике считается параметром, то гамильтониан частицы, движущейся в переменном потенциальном поле, имеет вид:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + U(x, y, z, t). \quad (6.26)$$

В случае стационарных потенциальных полей, когда  $\frac{\partial U}{\partial t} = 0$ , функция Гамильтона  $H$ , равная сумме кинетической и потенциальной энергии, представляет полную энергию  $E$ , поэтому гамильтониан в этом случае является оператором энергии:

$$H = E = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + U(\vec{r}). \quad (6.27)$$

Уравнение для собственных функций и собственных значений оператора  $H$  в этом случае называется стационарным уравнением Шредингера или уравнением для стационарных состояний

$$H\psi_n(\vec{r}) = E\psi_n(\vec{r}). \quad (6.28)$$

### **6.3. Средние значения физических величин в координатном представлении**

В состоянии  $\psi$  квантовой системы среднее значение физических величин определяется по формуле (5.10) или по формуле (5.12), если норма вектора  $\psi$  не равна 1.

Ограничиваясь рассмотрением одномерного случая, примем во внимание, что состояние квантовой системы описывается волновой функцией  $\psi(x)$  и явный вид операторов координаты  $x$  и импульса  $p_x$  в координатном представлении имеют вид:

$$x = x;$$

$$p_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}.$$

Тогда средние значения координаты и импульса представятся выражениями:

$$\langle x \rangle \equiv \bar{x} = \int \psi^*(x) x \psi(x) dx = \int \psi^*(x) x \psi(x) dx, \quad (6.29)$$

$$\langle p_x \rangle \equiv \bar{p}_x = \int \psi^*(x) p_x \psi(x) dx = \int \psi^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) dx. \quad (6.30)$$

## **§7. Импульсное представление**

Согласно постулатам квантовой механики любая физическая величина изображается самосопряженным линейным оператором. Явный вид оператора зависит от выбранного представления. Так в координатном представлении операторы координат и проекций импульса определены формулами (6.13) и (6.23). Знание этих операторов позволяет с помощью принципа соответствия записать операторы других физических величин в этом же представлении.

### **7.1. Векторы состояния и операторы физических величин в импульсном представлении**

И в импульсном представлении прежде всего надо найти явный вид операторов координат  $x, y, z$  и проекций импульсов  $p_x, p_y, p_z$ .

Рассмотрим ради простоты одномерный случай: движение частицы вдоль оси  $Ox$ , тогда импульс ее  $p_x = p$  изображается оператором  $p_x \equiv p$ . Найдем явный вид оператора  $p$  в импульсном представлении. Для этого используем уравнение для собственных векторов и собственных значений оператора  $p$ :

$$p\varphi_p = p\varphi_p. \quad (7.1)$$

Пусть в результате действия оператора  $p$  на некоторый вектор  $\Psi$  гильбертова пространства получается другой вектор  $\chi \in \Gamma$ :

$$p\Psi = \chi. \quad (7.2)$$

Воспользуемся Фурье-разложением векторов  $\psi$  и  $\chi$  по базисным векторам  $\varphi_p$ :

$$\Psi = \int dp \phi(p) \varphi_p; \chi = \int dp K(p) \varphi_p, \quad (7.3)$$

где

$$\phi(p) = (\varphi_p, \Psi), K(p) = (\varphi_p, \chi). \quad (7.4)$$

Тогда уравнение (7.2) приводится к виду:

$$p\phi(p) = K(p). \quad (7.5)$$

Подставляя (7.3) в уравнение (7.2), получим

$$\int dp \phi(p) p \varphi_p = \int dp K(p) \varphi_p, \quad (7.6)$$

откуда с учетом (7.1) следует соотношение:

$$p\phi(p) = K(p). \quad (7.7)$$

Из сравнения (7.7) и (7.5) находим явный вид оператора  $p = p_x$  в импульсном представлении:

$$p_x = p_x. \quad (7.8)$$

Аналогичным способом можно получить:

$$p_y = p_y; p_z = p_z.$$

Таким образом, в импульсном представлении

$$\vec{p} = \vec{p}. \quad (7.9)$$

Для определения явного вида оператора  $x$  в импульсном представлении используем уравнение для собственных векторов и собственных значений этого оператора ( $x\varphi_x = x\varphi_x$ ) в « $p$ -представлении». Для этого разложим вектор  $\varphi_x$  в интеграл Фурье по базисным векторам  $\varphi_p$ :



$$\varphi_x = \int dp \varphi_x(p) \varphi_p, \quad (7.10)$$

где коэффициенты разложения  $\varphi_x(p)$ , являясь собственными функциями оператора  $x$  в импульсном представлении, вычисляются по формулам:

$$\varphi_x(p) = (\varphi_p, \varphi_x) = (\varphi_x, \varphi_p)^* = \varphi_p^*(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar} px} \quad (7.11)$$

(в преобразованиях учтены свойства скалярных произведений векторов унитарного пространства и формула (6.17)).

Уравнение для собственных функций и собственных значений оператора  $x$  в импульсном представлении примет вид:

$$x \varphi_x(p) = x \varphi_x(p). \quad (7.12)$$

Если учесть выражение (7.11), то уравнение (7.12) выполняется для

$$x = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p}. \quad (7.13)$$

Рассмотрим обобщение полученного выражения оператора  $x$ . Выбрав произвольный вектор  $\Psi$ , описывающий квантовое состояние частицы, разложим его по базисным векторам  $\varphi_x$  в координатном представлении, а затем по  $\varphi_p$  в импульсном представлении:

$$\begin{aligned} \Psi &= \int dx \psi(x) \varphi_x, \\ \Psi &= \int dp \phi(p) \varphi_p, \end{aligned}$$

причем  $\phi(p) = (\varphi_p, \Psi) = \int dx (\varphi_p, \psi(x) \varphi_x) = \int dx \psi(x) (\varphi_p, \varphi_x) = \int dx \psi(x) \varphi_x(p)$  – совокупность коэффициентов разложения есть  $\Psi$ -вектор в импульсном представлении, называемый волновой функцией в  $p$ -представлении. Тогда, если справедлива формула (7.13), то должно выполняться уравнение

$$x \phi(p) = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \phi(p).$$

И действительно,

$$x \phi(p) = \int dx \psi(x) x \varphi_x(p) = \int dx \psi(x) \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \varphi_x(p) \right) = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \int dx \psi(x) \varphi_x(p),$$

т.е.

$$x \phi(p) = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \phi(p),$$

откуда получаем:

$$x = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \equiv i\hbar \frac{\partial}{\partial p_x}. \quad (7.14)$$

Итак, в импульсном представлении операторы координат имеют вид:

$$x = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_x}, y = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_y}, z = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_z}, \quad (7.15)$$

$$\vec{r} = i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{p}}. \quad (7.16)$$

## **7.2. Средние значения физических величин в импульсном представлении (одномерный случай $p=p_x$ )**

В состоянии  $\psi$  квантовой системы среднее значение физических величин определяется по формуле (5.10) или по формуле (5.12), если норма вектора  $\psi$  не равна 1.

Если волновая функция  $\phi(p)$  удовлетворяет условию нормировки

$$\int |\phi(p)|^2 dp = 1, \quad (7.17)$$

то для расчета среднего значения физической величины справедлива формула

$$\langle A \rangle \equiv \bar{A} = \int \phi^*(p) A \phi(p) dp, \quad (7.18)$$

в частности,

$$\langle x \rangle = \int \phi^*(p) i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \phi(p) dp, \quad (7.19)$$

$$\langle p_x \rangle = \int \phi^*(p) p \phi(p) dp. \quad (7.20)$$

## §8. Матричное представление.

### 8.1. Векторы состояния в матричном представлении

Вектор состояния  $\Psi$  квантовой системы всегда можно разложить в ряд Фурье по полной системе собственных векторов  $\varphi_n$  оператора  $A$  с дискретным спектром собственных значений. Если уравнение для собственных векторов и собственных значений оператора  $A$  имеет вид:

$$A\varphi_n = A_n\varphi_n, \quad (8.1)$$

то

$$\Psi = c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2 + \dots + c_n\varphi_n + \dots = \sum_n c_n\varphi_n. \quad (8.2)$$

Коэффициенты Фурье-разложения определяются формулой:

$$c_n = (\varphi_n, \Psi). \quad (8.3)$$

Совокупность коэффициентов  $c_n$  определяет вектор  $\Psi$  состояния в «А–представлении». Название представления связывается с базисными векторами в разложении (8.2). Эту совокупность коэффициентов  $c_n$ , задающую вектор состояния  $\Psi$ , представляют в виде матрицы с одним столбцом:

$$\Psi = \begin{vmatrix} c_1 & 0 & 0 & \dots \\ c_2 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ c_n & 0 & 0 & \dots \end{vmatrix}. \quad (8.4)$$

и это есть матричное представление вектора состояния.

Сопряженный вектор состояния  $\Psi^+$  записывается в виде матрицы с одной строкой с комплексно сопряженными элементами  $c_n^*$ :

$$\Psi^+ = \begin{vmatrix} c_1^* & c_2^* & \dots & c_n^* \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix}. \quad (8.5)$$

Если разложить  $\Psi$  вектор состояния в интеграл Фурье по базисным векторам  $\varphi_x$  оператора  $x$  с непрерывным спектром собственных значений, то коэффициенты Фурье-разложения

$$\psi(x) = (\varphi_x, \Psi)$$

представляют вектор в координатном представлении ( $x$ -представление).

Бесконечную совокупность значений комплексной функции  $\psi(x)$ , называемую волновой функцией, можно считать непрерывной матрицей – столбцом. Аналогично,  $\Psi$  – вектор в импульсном представлении ( $p$ -представление) изображается матрицей – столбцом:

$$\phi(p) = (\varphi_p, \Psi).$$

Матричное представление векторов состояния облегчает в известной мере запись операторных уравнений.

## 8.2. Операторы физических величин в матричном представлении

Пусть в результате действия эрмитова оператора  $L$  на вектор  $\Psi$  получается вектор  $\chi$ :

$$L\psi = \chi. \quad (8.7)$$

Разложим векторы  $\psi$  и  $\chi$  по базисным векторам  $\varphi_n$  уравнения (8.1):

$$\left. \begin{aligned} \psi &= \sum_n c_n \varphi_n, \\ \chi &= \sum_n b_n \varphi_n. \end{aligned} \right\} \quad (8.8)$$

Подставив выражение (8.8) в уравнение (8.7), умножим его затем скалярно на вектор  $\varphi_m$ :

$$\sum_n (\varphi_m, c_n L \varphi_n) = \sum_n (\varphi_m, b_n \varphi_n).$$

Последнее равенство легко преобразуется к виду:

$$\sum_n c_n (\varphi_m, L \varphi_n) = \sum_n b_n (\varphi_m, \varphi_n) \equiv b_m.$$

Величину

$$(\varphi_m, L \varphi_n) = L_{mn} \quad (8.9)$$

называют матричным элементом оператора  $L$ . Тогда уравнение (8.7) в «А – представлении» примет матричную форму:

$$\sum_n c_n L_{mn} = b_m. \quad (8.10)$$

Совокупность матричных элементов  $L_{mn}$  полностью определяет оператор  $L$  в матричном «А – представлении». Эту совокупность  $L_{mn}$  можно представить в виде квадратной таблицы, имеющей бесконечное число строк и столбцов. У каждого

матричного элемента первый индекс ( $m$ ) означает номер строки, второй ( $n$ ) – номер столбца. Эта таблица называется матрицей величины  $L$  (оператора  $L$ ):

$$L = \begin{vmatrix} L_{11} & L_{12} & \dots & L_{1n} & \dots \\ L_{21} & L_{22} & \dots & L_{2n} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ L_{m1} & L_{m2} & \dots & L_{mn} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix}. \quad (8.11)$$

Вычислим матричные элементы оператора  $L$  в своем собственном представлении, т.е. когда базисными векторами в разложении (8.8) являются собственные векторы  $\psi_n$  оператора  $L$ :

$$L\psi_n = L_n\psi_n. \quad (8.12)$$

В этом случае

$$L_{mn} = (\psi_m, L\psi_n) = L_n(\psi_m, \psi_n) = L_n\delta_{mn}, \quad (8.13)$$

т.е. отличны от нуля лишь диагональные элементы матрицы. Таким образом, оператор в своем собственном представлении изображается диагональной матрицей:

$$L = \begin{vmatrix} L_1 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & L_2 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & L_n & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix}, \quad (8.11')$$

в которой диагональные элементы совпадают с собственными значениями оператора  $L$ .

Эрмитовость операторов, используемых в квантовой механике в матричной форме, выражается следующим образом:

$$L_{mn} = (\varphi_m, L\varphi_n) = (L^+ \varphi_m, \varphi_n) = (\varphi_n, L\varphi_m)^* = L_{nm}^*,$$

т.е. матрица называется самосопряженной или эрмитовой, если

$$L_{mn} = L_{nm}^*. \quad (8.14)$$

Матричное представление операторов легко обобщается на случай непрерывного спектра собственных значений. Для этого достаточно заменить суммы на интеграл и символ  $\delta_{mn}$  Кронекера-Вейерштрассе на  $\delta$ -функцию Дирака.

Так матричная запись оператора  $x$  в координатном представлении (своем собственном) выглядит так:

$$x_{x'x} = (\varphi_{x'}, x\varphi_x) = x(\varphi_{x'}, \varphi_x) = x\delta(x' - x). \quad (8.15)$$

Подобным образом оператор  $x$  может быть записан в матричной форме в « $p$  – представлении»:

$$x_{p'p} = (\varphi_{p'}, x\varphi_p) = \left( \varphi_{p'}, i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \varphi_p \right) = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \delta(p' - p). \quad (8.16)$$

### 8.3. Средние значения физических величин и матрицы плотности

Если состояние квантовой системы описывается вектором  $\Psi \in \Gamma$ , то его можно записать в произвольном « $A$  – представлении». Для этого следует  $\Psi$  разложить в ряд по собственным векторам  $\varphi_n$  оператора  $A$  ( $A\varphi_n = A_n\varphi_n$ ):

$$\Psi = \sum_n c_n \varphi_n.$$

Тогда среднее значение некоторой физической величины  $L$  в состоянии  $\Psi$  представится в виде:

$$\langle L \rangle \equiv \bar{L} = (\Psi, L\Psi) = \sum_{m,n} (c_m \varphi_m, L c_n \varphi_n) = \sum_{m,n} c_m^* c_n (\varphi_m, L \varphi_n) = \sum_{m,n} c_n c_m^* L_{mn}, \quad (8.17)$$

где  $L_{mn} = (\varphi_m, L \varphi_n)$  - матричный элемент оператора в « $A$  – представлении».

Обозначим

$$c_n c_m^* = \rho_{nm}, \quad (8.18)$$

где  $\rho_{nm}$  - матричный элемент некоторого оператора  $\rho$ . Матрица оператора  $\rho$  является также эрмитовой и называется матрицей плотности. Согласно определению матричного элемента оператора  $\rho$

$$\rho_{nm} = (\varphi_n, \rho \varphi_m), \quad (8.19)$$

причем диагональные элементы матрицы плотности определяют вероятности (или плотности вероятностей) измерения какой-либо физической величины.

Очевидно, сумма диагональных элементов матрицы плотности равна единице:

$$Sp \rho = 1, \quad (8.20)$$

где знак  $Sp$  - «шпур» – означает сумму диагональных элементов матрицы.

Тогда формула для среднего значения физической величины  $L$  в состоянии  $\Psi$  примет вид:

$$\langle L \rangle \equiv \bar{L} = \sum_{n,m} \rho_{nm} L_{mn} = \sum_n (\rho L)_{nn} = Sp(\rho L),$$

т.е.

$$\langle L \rangle \equiv \bar{L} = Sp(\rho L). \quad (8.21)$$

Таким образом, матрица плотности есть оператор, с помощью которого вычисляется среднее значение любой физической величины. Описание состояний систем с помощью матрицы плотности является наиболее общей формой квантовомеханического рассмотрения. Даже смешанные состояния квантовомеханических систем описываются матрицей плотности.

## Глава IV. Одновременная измеримость физических величин.

### Соотношения неопределенностей Гейзенберга.

#### § 9. Одновременная измеримость физических величин.

##### *9.1. О возможности одновременно точного определения динамических переменных (наблюдаемых).*

В классической механике частицу в каждый момент времени характеризуют определенными значениями координат и проекциями импульсов.

В квантовой же механике дело обстоит иным образом. Для этого рассмотрим одномерное движение частицы вдоль оси ОХ с заданным импульсом  $p_x = p$ , состояние которой описывается в координатном представлении волновой функцией (6.17):

$$\varphi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}px}.$$

Вероятность измерения координаты  $x$  в этом состоянии определяется плотностью вероятности  $w(x) = |\varphi_p(x)|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar}$ . Таким образом, все значения координаты  $x$  частицы в этом состоянии  $\varphi_p(x)$  оказываются равновероятными.

Если же иметь состояние с определенным значением координаты  $x_0$ , которое описывается волновой функцией в импульсном представлении (7.11):

$$\varphi_{x_0}(p_x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar}x_0p_x},$$

то в этом случае равновероятными оказываются все значения импульса  $p_x$ :

$$w(p_x) = |\varphi_{x_0}(p_x)|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar} = \text{const.}$$
 Из приведенных примеров следует, что в квантовой

области не существует таких состояний частиц, в которых импульс и сопряженная ему



координата одновременно имели бы определенные значения. В таком же взаимоисключающем положении находятся и многие другие величины.

Таким образом, в квантовой механике некоторые физические величины не могут иметь определенных значений в одном и том же состоянии системы, т.е. эти величины не могут быть одновременно измеримы. В связи с этим необходимо вывести условие одновременной измеримости физических величин.

Согласно четвертому постулату квантовой механики каждой физической величине  $A$  сопоставляется линейный эрмитов оператор  $\hat{A}$ :  $\hat{A}\varphi_n = a_n\varphi_n$ . Динамическая переменная  $A$  имеет в состоянии  $\psi$  определенное значение, если вектор состояния совпадает с одним из собственных векторов оператора  $\hat{A}$ , т.е. если  $\psi = \varphi_n$ , то физическая величина  $A$  в этом состоянии имеет значение  $a_n$ .

Пусть собственный вектор  $\varphi_n$  оператора  $\hat{A}$  является одновременно собственным вектором и оператора  $\hat{B}$ , тогда этот вектор удобно записать в виде  $\varphi_{nl}$ , т.к.

$$\left. \begin{aligned} \hat{B}\varphi_{nl} &= b_l\varphi_{nl} \\ \hat{A}\varphi_{nl} &= a_n\varphi_{nl} \end{aligned} \right\} \quad (9.1)$$

Такой вектор состояния  $\varphi_{nl}$  называется общим собственным вектором операторов  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  и описывает такое состояние, в котором функции величин  $A$  и  $B$  имеют определенное значение. Если система общих собственных векторов  $\varphi_{nl}$  операторов  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  является полной, тогда любой вектор состояния можно представить в виде суперпозиции:

$$\psi = \sum_{n,l} c_{nl}\varphi_{nl},$$

где квадраты коэффициентов разложения  $|c_{nl}|^2$  определяют вероятность получения определенных значений  $a_n$  и  $b_l$  при измерении физических величин  $A$  и  $B$ . В этом случае говорят, что физические величины  $A$  и  $B$  в принципе одновременно измеримы, что реализуется в случае, когда вектор состояния  $\psi$  совпадает с одним из собственных

векторов  $\varphi_{nl}$ . Следовательно, динамические переменные  $A$  и  $B$  одновременно измеримы, если их операторы  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  имеют общую полную систему собственных векторов.

## 9.2. Условие возможности одновременного измерения двух физических величин.

Для решения поставленного вопроса докажем теорему:

*Теорема:* Для того, чтобы физические величины  $A$  и  $B$  были в принципе одновременно измеримы, необходимо и достаточно равенства нулю коммутатора операторов  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  этих величин, т.е.  $[\vec{A}, \vec{B}] = 0$ .

*Доказательство:* Пусть физические величины  $A$  и  $B$  могут быть одновременно измерены, т.е. операторы  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  имеют общую полную систему собственных векторов  $\varphi_{nl}$ . Докажем, что коммутатор операторов  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  равен нулю:  $[\vec{A}, \vec{B}] = 0$ .

Разложим любой вектор  $\psi$  состояния квантовой системы по общей полной системе собственных векторов  $\varphi_{nl}$ :

$$\psi = \sum_{n,l} c_{nl} \varphi_{nl} . \quad (9.2)$$

Вычислим результат действия оператора  $(\hat{A}\hat{B})$  на вектор (9.2):

$$\hat{A}\hat{B}\psi = \hat{A}(\hat{B}\psi) = \hat{A} \sum_{n,l} c_{nl} \hat{B}\varphi_{nl} = \sum_{n,l} c_{nl} b_l a_n \varphi_{nl} . \quad (9.3)$$

Затем вычислим результат действия  $(\hat{B}\hat{A})$  на  $\psi$ :

$$\hat{B}\hat{A}\psi = \hat{B} \sum_{n,l} c_{nl} a_n \varphi_{nl} = \sum_{n,l} c_{nl} a_n b_l \varphi_{nl} . \quad (9.4)$$

Из равенства правых частей в выражениях (9.3) и (9.4) следует:

$$AB\psi = BA\psi ,$$

где  $\psi$  – произвольный вектор. Таким образом,

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

т.е.:

$$[\vec{A}, \vec{B}] = 0. \quad (9.5)$$

Доказательство достаточности условия (9.5).

Докажем, что если операторы  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  коммутируют друг с другом, то соответствующие физические величины  $A$  и  $B$  в принципе одновременно измеримы, т.е. операторы  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  имеют общую полную систему собственных векторов  $\varphi_n$ .

Предварительно докажем лемму:

*Лемма:* Если  $\varphi_n$  есть собственные векторы оператора  $\hat{A}$  с собственными значениями  $a_n$  ( $\hat{A}\varphi_n = a_n\varphi_n$ ), и оператор  $\hat{A}$  коммутирует с оператором  $\hat{B}$ , т.е.  $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$ , то векторы ( $\hat{B}\varphi_n$ ) также являются собственными векторами  $\hat{A}$ , принадлежащими тем же собственным значениям  $a_n$ , т.е.  $\hat{A}(\hat{B}\varphi_n) = a_n(\hat{B}\varphi_n)$ .

*Доказательство:* В этом легко убедиться, вычислив результат действия  $\hat{A}$  на векторы ( $\hat{B}\varphi_n$ ):

$$\hat{A}(\hat{B}\varphi_n) = \hat{B}(\hat{A}\varphi_n) = a_n(\hat{B}\varphi_n). \quad (9.6)$$

При доказательстве достаточности условия (9.5) рассмотрим два случая.

1) Случай отсутствия вырождения собственных значений  $a_n$  оператора  $\hat{A}$ .

По условию каждому значению  $a_n$  принадлежит один собственный вектор, описывающий одно и только одно квантовое состояние:  $\hat{A}\varphi_n = a_n\varphi_n$ . С учетом леммы:  $\hat{A}(\hat{B}\varphi_n) = a_n\varphi_n$ , откуда следует, что векторы  $\varphi_n$  и ( $\hat{B}\varphi_n$ ), описывая одно и то же состояние, могут отличаться друг от друга лишь постоянным множителем:

$$\hat{B}\varphi_n = b_n \varphi_n. \quad (9.7)$$

Значит, каждый собственный вектор  $\varphi_n$  является собственным для операторов  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$ , т.е. операторы  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  имеют общую полную систему собственных векторов. Следовательно, физические величины  $A$  и  $B$  в принципе одновременно измеримы, если  $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ .

2) Случай наличия вырождения: собственному значению  $a_n$  принадлежит несколько собственных векторов оператора  $\hat{A}$ . В этом случае  $\varphi_n$  и  $\hat{B}\varphi_n$  могут и не совпадать.

Разложим вектор  $\varphi_n$  по собственным векторам оператора  $\hat{B}$ :

$$\varphi_n = \sum_l c_l' \varphi_{nl}, \quad (9.8)$$

где  $\varphi_{nl}$  определяются уравнением  $\hat{B}\varphi_{nl} = b_l \varphi_{nl}$ . Преобразуем уравнение  $\hat{A}\varphi_n = a_n \varphi_n$  с помощью разложения (9.8) к виду:

$$(\hat{A} - a_n) \sum_l c_l' \varphi_{nl} \equiv \sum_l c_l' (\hat{A} - a_n) \varphi_{nl} = 0. \quad (9.9)$$

Согласно лемме

$$(\hat{A} - a_n) \hat{B}\varphi_n = 0, \quad (9.10)$$

Тогда с учетом разложения (9.8) уравнение (9.10) записывается в виде:

$$\sum_l c_l' (\hat{A} - a_n) \hat{B}\varphi_{nl} \equiv \sum_l c_l' b_l (\hat{A} - a_n) \varphi_{nl} = 0. \quad (9.11)$$

В результате получаем систему уравнений:

$$\begin{cases} \sum_l c_l' (\hat{A} - a_n) \varphi_{nl} = 0, \\ \sum_l c_l' b_l (\hat{A} - a_n) \varphi_{nl} = 0. \end{cases} \quad (9.12)$$

Эта система уравнений совместима, если

$$(\hat{A} - a_n)\varphi_{nl} = 0, \quad (9.13)$$

откуда следует, что  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  имеют общую полную систему векторов  $\varphi_{nl}$ , т.е.  $A$  и  $B$  в принципе одновременно измеримы. Итак, если два оператора коммутируют, то они имеют общую полную систему собственных векторов, физические же величины, изображающиеся этими операторами, могут быть одновременно точно определены (измерены).

## § 10. Полный набор физических величин. Перестановочные соотношения Гейзенберга.

Свойство коммутативности операторов не является транзитивным. Если оператор  $\hat{A}$  коммутирует с  $\hat{B}$  и  $\hat{C}$ , то это не значит, что  $\hat{B}$  и  $\hat{C}$  коммутируют друг с другом. Поэтому теорему, доказанную в § 9, можно распространить на несколько физических величин, если их операторы попарно коммутируют друг с другом: лишь в этом случае соответствующие физические величины могут быть одновременно определены (измерены).

Максимальная совокупность всех независимых физических величин, которые одновременно могут иметь определенные значения, называют полным набором. Проиллюстрируем это примерами. Для квантовой частицы, движущейся в пространстве, число степеней свободы равно трем, поэтому в качестве полного набора физических величин могут выступать:

$x, y, z$  — координаты частицы,

$p_x, p_y, p_z$  — проекции импульса частицы, (10.1)

$x, p_y, p_z$  — координата и два несопряженных ей импульса и т.д.

В частных случаях полный набор может сводиться к одной величине. Например, квантовое состояние частицы, свободно движущейся по оси  $OX$ , описывается в

координатном представлении волновой функцией  $\varphi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} px}$ , поэтому полный набор включает в себя одну величину: импульс  $p_x = p$ .

Физические величины полного набора могут быть выражены через квантовые числа. Тогда волновой вектор или волновая функция определяются квантовыми числами полного набора. Так, например, квантовое состояние электрона в атоме водорода в координатном представлении описывается волновой функцией  $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$ , которая определяется тремя квантовыми числами, где  $n$  – главное квантовое число, квантующее энергию  $E_n$ ,  $l$  – орбитальное квантовое число, определяющее квантованные значения квадрата орбитального механического момента импульса электрона  $L_l^2$ , и  $m$  – магнитное квантовое число, квантующее проекцию на ось OZ орбитального механического момента  $(L_z)_m$ . Эти три величины  $E_n$ ,  $L_l^2$ ,  $(L_z)_m$  образуют полный набор физических величин электрона в атоме водорода, т.к. операторы их попарно коммутируют друг с другом, т.е. они могут быть одновременно точно измеримы, и число их равно числу степеней свободы (без учета спина).

Физические величины любого из полных наборов, в частности, (10.1), могут иметь одновременно определенные значения, поскольку операторы их коммутируют попарно друг с другом:

$$\left. \begin{aligned} [\hat{x}, \hat{y}] &= 0; [\hat{x}, \hat{z}] = 0; [\hat{y}, \hat{z}] = 0; \\ [\hat{p}_x, \hat{p}_y] &= 0; [\hat{p}_x, \hat{p}_z] = 0; [\hat{p}_y, \hat{p}_z] = 0; \\ [\hat{x}, \hat{p}_y] &= 0; [\hat{x}, \hat{p}_z] = 0; [\hat{p}_y, \hat{p}_z] = 0. \end{aligned} \right\} \quad (10.2)$$

Условия одновременной измеримости физических величин полного набора можно записать в развернутом виде:

$$\left. \begin{aligned} \hat{x}\hat{y} - \hat{y}\hat{x} &= 0, \hat{x}\hat{z} - \hat{z}\hat{x} = 0, \hat{y}\hat{z} - \hat{z}\hat{y} = 0; \\ \hat{p}_x\hat{p}_y - \hat{p}_y\hat{p}_x &= 0, \hat{p}_x\hat{p}_z - \hat{p}_z\hat{p}_x = 0, \hat{p}_y\hat{p}_z - \hat{p}_z\hat{p}_y = 0; \\ \hat{x}\hat{p}_y - \hat{p}_y\hat{x} &= 0, \hat{x}\hat{p}_z - \hat{p}_z\hat{x} = 0, \hat{p}_y\hat{p}_z - \hat{p}_z\hat{p}_y = 0. \end{aligned} \right\} \quad (10.3)$$

Правила перестановок (10.3) носят название перестановочных соотношений Гейзенберга. Они помогают определить полные наборы физических величин, определяющих вектор состояния системы.

Квантовые состояния систем, описываемые векторами (или волновыми функциями), которые определяются полными наборами физических величин, называются чистыми состояниями. Если же состояние системы нельзя описать вектором (волновой функцией), т.е. нельзя указать полный набор физических величин, то состояние системы называется смешанным и описывается матрицей плотности.

В отличие от выражений (10.2) и (10.3) операторы координат и канонически сопряженных импульсов не переставимы. Действительно, используя явный вид операторов  $\hat{x}$  и  $\hat{p}_x$  в координатном представлении, запишем:

$$(\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x})\psi = \frac{\hbar}{i} \left( x \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} x \psi \right) = i\hbar \psi,$$

откуда

$$\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x} = i\hbar, \quad (10.4)$$

т.е. координата и сопряженный ей импульс не могут быть одновременно измеримы. Перестановочные соотношения Гейзенберга для координат и канонически сопряженных импульсов записываются в виде:

$$\left. \begin{aligned} \hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x} &= [\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar \\ \hat{y}\hat{p}_y - \hat{p}_y\hat{y} &= [\hat{y}, \hat{p}_y] = i\hbar \\ \hat{z}\hat{p}_z - \hat{p}_z\hat{z} &= [\hat{z}, \hat{p}_z] = i\hbar \end{aligned} \right\} \quad (10.4')$$

Эти перестановочные соотношения (10.4') выражают собою двойственную корпускулярно-волновую природу частиц. Другими словами, соотношения (10.4') в операторной форме выражают известные соотношения неопределенностей (2.10).

## § 11. Вывод соотношений неопределенностей для координат и канонически сопряженных импульсов.

Физические величины, изображающиеся не коммутирующими операторами в рамках квантовой механики не могут быть одновременно определены (изменены). Наиболее важным является в этом случае вычисление отклонений значений таких величин от средних значений их операторов.

Вычислим отклонение от средних значений операторов двух канонически сопряженных величин: координаты  $x$  и импульса  $p_x$ . Для этого ради простоты рассмотрим одномерный стационарный случай движения частицы вдоль оси ОХ. Тогда средние значения координаты и импульса в координатном представлении могут быть найдены соответственно из соотношений:

$$\langle \hat{x} \rangle \equiv \bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* x \psi dx, \quad (11.1)$$

$$\langle \hat{p}_x \rangle \equiv \bar{p}_x = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{\partial}{\partial x} \psi dx. \quad (11.2)$$

Разброс значений величин около их средних значений характеризуется дисперсией или среднеквадратичным отклонением:

$$\overline{(\Delta x)^2} = \overline{(x - \bar{x})^2} = \overline{x^2} - (\bar{x})^2 \quad (11.3)$$

$$\overline{(\Delta p_x)^2} = \overline{p_x^2} - (\bar{p}_x)^2 \quad (11.4)$$

Без ограничения общности доказательства можно выбрать систему координат с началом в центре волнового пакета ( $\bar{x} = 0$ ), причем так, что система координат движется с ним ( $\langle p_x \rangle = 0$ ). В этом случае будем иметь:

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* x^2 \psi dx, \quad (11.5)$$

$$\langle (\Delta p_x)^2 \rangle = \langle p_x^2 \rangle = -\hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi dx \quad (11.6)$$

Для нахождения связи между  $\langle (\Delta x)^2 \rangle$  и  $\langle (\Delta p_x)^2 \rangle$  рассмотрим интеграл:



$$J(\alpha) = \int_{-\infty}^{\infty} \left| \alpha x \psi + \frac{d\psi}{dx} \right|^2 dx, \quad (11.7)$$

где  $\alpha$  – некоторая вещественная переменная величина, не зависящая от  $x$ . Выражение (11.7) можно представить в виде неотрицательного трехчлена:

$$J(\alpha) = A\alpha^2 + B\alpha + C \geq 0, \quad (11.8)$$

где

$$A = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* x^2 \psi dx = \langle x^2 \rangle = \langle (\Delta x)^2 \rangle > 0, \quad (11.9)$$

$$B = \int_{-\infty}^{\infty} \left( x \psi \frac{d\psi^*}{dx} + x \psi^* \frac{d\psi}{dx} \right) dx = \int_{-\infty}^{\infty} x \frac{d\psi \psi^*}{dx} dx = -1, \quad (11.10)$$

$$C = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\psi}{dx} \frac{d\psi^*}{dx} dx = - \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{d^2 \psi}{dx^2} dx = \frac{\langle (\Delta p_x)^2 \rangle}{\hbar^2}, \quad (11.11)$$

интегралы в (11.10) и (11.11) вычислены по частям и при этом учтены стандартные условия (а именно, конечность), наложенные на волновые функции.

Условие  $J(\alpha) \geq 0$  при  $A > 0$  на основании теоремы о корнях квадратного уравнения принимает вид:

$$B^2 - 4AC \leq 0, \quad (11.12)$$

откуда  $AC \geq \frac{1}{4} B^2$ , т.е.

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p_x)^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4} \quad (11.13)$$

Это неравенство представляет строгую формулировку соотношения неопределенностей для координаты  $x$  и импульса  $p_x$ . Извлекая квадратный корень из обеих частей неравенства (11.13), получим:

$$\sqrt{\langle (\Delta x)^2 \rangle} \cdot \sqrt{\langle (\Delta p_x)^2 \rangle} \geq \frac{\hbar}{2} \quad (11.13')$$

Аналогичные соотношения неопределенностей имеют место для координат  $y, z$  и сопряженных для них импульсов  $p_y, p_z$ .

Таким образом, соотношения неопределенностей Гейзенберга для координат и канонически сопряженных импульсов имеют вид:

$$\left. \begin{aligned} \sqrt{\langle (\Delta x)^2 \rangle} \cdot \sqrt{\langle (\Delta p_x)^2 \rangle} &\equiv \Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \\ \sqrt{\langle (\Delta y)^2 \rangle} \cdot \sqrt{\langle (\Delta p_y)^2 \rangle} &\equiv \Delta y \cdot \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2} \\ \sqrt{\langle (\Delta z)^2 \rangle} \cdot \sqrt{\langle (\Delta p_z)^2 \rangle} &\equiv \Delta z \cdot \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2} \end{aligned} \right\} \quad (11.14)$$

Соотношения (11.14) показывают, что координаты и сопряженные импульсы не могут быть одновременно точно измерены, и что минимально возможная величина произведения дисперсий измеряемых координаты ( $x$ ) и импульса ( $p_x$ ) ограничена постоянной Планка. Это ограничение связано не с методикой измерения, но обусловлено наличием корпускулярно-волновой природы квантовых объектов.

Соотношения неопределенностей (11.14) являются и рабочим инструментом в квантовой механике, позволяя проводить важные количественные оценки: энергии основного состояния атома водорода, минимально возможной энергии у частиц в потенциальных ямах; ответить на вопросы такого типа: могут ли быть электроны в составе атомного ядра и т.д.

В качестве примера подобного использования соотношений неопределенностей оценим минимальную энергию колебаний линейного гармонического осциллятора (ЛГО).

Из классического выражения для энергии ЛГО

$$E = \frac{p_x^2}{2m_0} + \frac{m_0 \omega^2 x^2}{2}, \quad (11.15)$$

где  $m_0$  и  $\omega$  - масса и собственная частота осциллятора, следует, что энергия будет минимальной, когда значения  $x$  и  $p_x$  минимальны, но  $(p_x)_{\min} \approx \Delta p_x$ ;  $(x)_{\min} \approx \Delta x$ . Поэтому

из соотношений неопределенностей (11.14) следует связь минимальных значений координаты и импульса:  $x \cdot p_x \approx \frac{\hbar}{2}$ . Подставляя  $x \approx \frac{\hbar}{2p_x}$  в формулу энергии ЛГО, получим

$$E = \frac{p_x^2}{2m_0} + \frac{m_0 \omega^2 \hbar^2}{8p_x^2} \quad (11.16)$$

Исследуя выражение (11.16) на экстремум ( $\frac{\partial E}{\partial p_x} < 0$ ), находим  $(p_x^2)_{\min} = \frac{m_0 \hbar \omega}{2}$ .

Следовательно, минимальная энергия ЛГО оказывается равной:

$$E_{\min} = \frac{\hbar \omega}{2}, \quad (11.17)$$

это так называемая энергия нулевых колебаний осциллятора, отличие ее от нуля иллюстрирует принципиально общее положение квантовой механики: нельзя реализовать микрообъект на «дне потенциальной ямы», причем этот вывод не зависит от вида потенциальной ямы, т.к. является прямым следствием соотношений неопределенностей.

## § 12. Соотношения неопределенностей для произвольных физических величин с не коммутирующими операторами.

Рассмотрим две физические величины  $A$  и  $B$ , коммутатор операторов которых отличен от нуля:  $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$ . Докажем теорему.

*Теорема:* Если операторы  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  не коммутируют, то произведение дисперсий соответствующих физических величин не меньше четверти квадрата модуля среднего значения коммутатора их операторов  $[\hat{A}, \hat{B}]$ , т.е.  $\overline{(\Delta A)^2} \cdot \overline{(\Delta B)^2} \geq \frac{1}{4} |[\hat{A}, \hat{B}]|^2$ .

*Доказательство:* Введем в рассмотрение операторы

$$\Delta \hat{A} = \hat{A} - \bar{A}, \quad \Delta \hat{B} = \hat{B} - \bar{B}, \quad (12.1)$$

и примем во внимание, что статистический разброс значений физических величин определяется дисперсией:

$$D(A) = \langle (\Delta \hat{A})^2 \rangle = (\psi, (\Delta \hat{A})^2 \psi) = \overline{(\Delta A)^2} = \overline{A^2} - (\overline{A})^2$$

$$D(B) = \langle (\Delta \hat{B})^2 \rangle = (\psi, (\Delta \hat{B})^2 \psi) = \overline{(\Delta B)^2} = \overline{B^2} - (\overline{B})^2, \quad (12.2)$$

где  $\psi \in \Gamma$  – произвольный вектор состояния квантовой системы. Для определения связи с дисперсией (12.2) рассмотрим векторы гильбертова пространства

$$\left. \begin{aligned} \varphi_1 &= \Delta \hat{A} \psi \\ \varphi_2 &= \Delta \hat{B} \psi \end{aligned} \right\} \quad (12.3)$$

Согласно неравенству Буняковского-Коши, которое справедливо и в гильбертовом пространстве, можно записать:

$$|\varphi_1|^2 \cdot |\varphi_2|^2 \geq |(\varphi_1, \varphi_2)|^2 \quad (12.4)$$

где

$$\begin{aligned} |\varphi_1|^2 &= (\varphi_1, \varphi_1) = (\Delta \hat{A} \psi, \Delta \hat{A} \psi) = (\psi, (\Delta \hat{A})^2 \psi) = \overline{(\Delta A)^2} = D(A), \\ |\varphi_2|^2 &= (\varphi_2, \varphi_2) = (\Delta \hat{B} \psi, \Delta \hat{B} \psi) = (\psi, (\Delta \hat{B})^2 \psi) = \overline{(\Delta B)^2} = D(B). \end{aligned} \quad (12.5)$$

В преобразованиях (12.5) учтена эрмитовость операторов  $\Delta \hat{A}$  и  $\Delta \hat{B}$ . Квадрат модуля скалярного произведения векторов  $\varphi_1$  и  $\varphi_2$  преобразуется к виду:

$$(\varphi_1, \varphi_2) = (\Delta \hat{A} \psi, \Delta \hat{B} \psi) = (\psi, \Delta \hat{A} \Delta \hat{B} \psi) = \langle \Delta \hat{A} \cdot \Delta \hat{B} \rangle = \overline{\Delta A \cdot \Delta B} \quad (12.6)$$

Тогда неравенство (12.4) примет вид:

$$\overline{(\Delta A)^2} \cdot \overline{(\Delta B)^2} \geq \overline{(\Delta A \cdot \Delta B)^2} \quad (12.7)$$

Для определения среднего значения  $\overline{\Delta A \cdot \Delta B}$  преобразуем оператор  $\Delta \hat{A} \cdot \Delta \hat{B}$ :

$$\begin{aligned}\Delta\hat{A} \cdot \Delta\hat{B} &= \frac{1}{2}(\Delta\hat{A} \cdot \Delta\hat{B} + \Delta\hat{B} \cdot \Delta\hat{A}) + \frac{1}{2}(\Delta\hat{A} \cdot \Delta\hat{B} - \Delta\hat{B} \cdot \Delta\hat{A}) = \\ &= \frac{1}{2}[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}]_+ + i \cdot \frac{1}{2i}[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}] = \frac{1}{2}[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}]_+ + i \frac{1}{2i}[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{a} + i\hat{b},\end{aligned}\quad (12.8)$$

где  $\hat{a} = \frac{1}{2}[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}]_+$  и  $\hat{b} = \frac{1}{2i}[\hat{A}, \hat{B}]$  – эрмитовы операторы. На основе (12.8) находим:

$$\overline{\Delta\hat{A} \cdot \Delta\hat{B}} = \overline{<\Delta\hat{A} \cdot \Delta\hat{B}>} = \bar{a} + i\bar{b} \quad (12.9)$$

подставляя (12.9) в неравенство (12.7), получим  $\overline{(\Delta\hat{A})^2} \cdot \overline{(\Delta\hat{B})^2} \geq (\bar{a})^2 + (\bar{b})^2$ , откуда тем более справедливо неравенство

$$\overline{(\Delta\hat{A})^2} \cdot \overline{(\Delta\hat{B})^2} \geq (\bar{b})^2, \text{ т.е. } \overline{(\Delta\hat{A})^2} \cdot \overline{(\Delta\hat{B})^2} \geq \frac{1}{4} \left| \overline{[\hat{A}, \hat{B}]} \right|^2, \quad (12.10)$$

что и требовалось доказать: произведение дисперсий физических величин  $A$  и  $B$  с некоммутирующими операторами не меньше четверти квадрата модуля среднего значения коммутатора этих операторов  $[\hat{A}, \hat{B}]$ .

Извлекая корень квадратный из соотношения (12.10), получим:

$$\sqrt{\overline{(\Delta\hat{A})^2}} \cdot \sqrt{\overline{(\Delta\hat{B})^2}} \geq \frac{1}{2} \left| \overline{[\hat{A}, \hat{B}]} \right|. \quad (12.11)$$

Обычно для упрощения записи это неравенство записывается в виде:

$$\Delta\hat{A} \cdot \Delta\hat{B} \geq \frac{1}{2} |<K>|, \quad (12.12)$$

где  $<K> = \overline{[\hat{A}, \hat{B}]}$ .

Для случая, когда  $\hat{A} = \hat{x}$ ,  $\hat{B} = \hat{p}_x$ , выражение (12.12) дает ранее полученное соотношение неопределенностей (11.13').

Итак, соотношения неопределенностей, которые существуют между некоторыми физическими величинами, полностью определяются коммутаторами этих операторов этих величин.

Отсюда, в частности, следует вывод, что если операторы физических величин попарно коммутируют друг с другом, то эти физические величины могут одновременно иметь определенные значения. Это условие одновременной измеримости физических величин доказано в §9.

Физическая сущность соотношений неопределенностей состоит в том, что для квантовых систем, в отличие от классических, не имеет смысла требовать одновременно определенных значений всех физических величин, что обусловлено двойственной природой объектов микромира. Существование соотношений неопределенностей для физических величин в квантовой механике обусловлено не какими-то особенностями измерения, а внутренними особенностями самих квантовых систем.

Таким образом, соотношения неопределенностей являются математическим выражением наличия у частиц (микрообъектов) как корпускулярных, так и волновых свойств.

## Глава V. Квантовая динамика. Эволюция квантовых систем во времени

Уравнения движения составляют основу физической теории. Так в классической механике состояние системы описывается каноническими переменными  $q_j, p_j$ , число которых равно удвоенному числу степеней свободы. Все другие физические величины являются функциями канонических переменных. Зависимость этих переменных от времени  $q_j=q_j(t)$ ,  $p_j=p_j(t)$  есть одновременно эволюция во времени и состояние классической системы, и всех физических величин.

Рассмотрим особенности квантовой динамики, учитывая, что состояние квантовой системы описывается вектором  $\psi \in \Gamma$ , физические же величины изображаются линейными самосопряженными операторами.

Что же должно изменяться с течением времени в процессе эволюции квантовой системы?

Ответить однозначно на этот вопрос нельзя, поскольку существуют различные способы описания эволюции квантовых систем во времени. Так в 1925 г. В.Гейзенберг записал знаменитое уравнение эволюции во времени эрмитовых операторов физических величин, характеризующих квантовую систему, при этом полагалось, что вектор состояния во времени не меняется, т.е.  $\psi(t)=\psi(0)=\psi$  - гейзенберговская картина движения. Уравнение Гейзенберга было первоначально введено в матричной форме, тем самым было положено начало направлению, которое получило название "матричной механики". В 1926г. появилось уравнение Шредингера для волновой функции  $\psi(\vec{r}, t)$ , описывающее эволюцию во времени состояния квантовой системы. Операторы же физических величин при этом не зависят от времени:  $A'''(t) = A(0) = A$ . Такова картина движения Шредингера, который положил начало направлению, получившему название "волновой механики".

В 1927 г. П.Дирак показал эквивалентность уравнений Гейзенберга и Шредингера.

### §13. Эволюция квантовой системы во времени: уравнение Гейзенберга

В классической механике при отыскании первых интегралов движения важное значение имеют скобки Пуассона. Дело в том, что выражение полной производной по времени от некоторой функции канонических переменных и времени имеет вид:

$$\frac{dA(q_j, p_j, t)}{dt} = \frac{\partial A(q_j, p_j, t)}{\partial t} + \{A, H\}_{кл}, \quad (13.1)$$

где

$$\{A, H\}_{кл} = \frac{\partial A}{\partial q_j} \cdot \frac{\partial H}{\partial p_j} - \frac{\partial H}{\partial q_j} \cdot \frac{\partial A}{\partial p_j} \quad (13.2)$$

называются скобками Пуассона,  $H(q_j, p_j, t)$  - функция Гамильтона.

Уравнение (13.1) выражает эволюцию классической системы во времени. Действительно, если выбирать в качестве физической величины  $A$  канонические переменные  $q_j, p_j$ , то легко получить уравнения движения Гамильтона:

$$\left. \begin{aligned} \dot{q}_j &= \left\{ q_j, H \right\}_{кл} \\ \dot{p}_j &= \left\{ p_j, H \right\}_{кл} \end{aligned} \right\} \quad (13.3)$$

Согласно 4-му постулату квантовой механики каждой физической величине (динамической переменной) ставится в соответствие линейный эрмитов оператор:

$$\begin{aligned} A(q_j, p_j) &\sim \hat{A} \\ B(q_j, p_j) &\sim \hat{B} \end{aligned}$$

Следовательно, классическим скобкам Пуассона

$$\{A, B\}_{кл} = \frac{\partial A}{\partial q_j} \cdot \frac{\partial B}{\partial p_j} - \frac{\partial B}{\partial q_j} \cdot \frac{\partial A}{\partial p_j} \quad (13.2')$$

должны быть поставлены в соответствие квантовые скобки  $\{A, B\}_{кк}$ , вид которых определен Дираком из следующих соображений.

Если  $A=x$ ,  $B=p_x$ , то  $\{x, p_x\}_{кл} = 1$ . Тогда с учетом коммутатора операторов  $x$  и  $p_x$  (10.4) можно получить аналогичное квантовое выражение, равное единице:

$$\frac{1}{i\hbar}(xp_x - p_x x) = 1, \quad (13.4)$$

т.е. квантовые скобки для операторов величин  $x$  и  $p_x$  должны иметь вид:

$$\{x, p_x\}_{кк} = \frac{1}{i\hbar}(xp_x - p_x x). \quad (13.5)$$

Таким образом, классическим скобкам соответствуют квантовые скобки Пуассона:

$$\{A, B\}_{кк} = \frac{1}{i\hbar}(AB - BA). \quad (13.6)$$

Тогда в силу принципа соответствия классическому уравнению (13.1), выражающему временную эволюцию системы, следует сопоставить квантовое уравнение движения:

$$\frac{dA(t)}{dt} = \frac{\partial A(t)}{\partial t} + \{A(t), H(t)\}_{кк} \quad (13.7)$$



Это и есть уравнение Гейзенберга, при этом система описывается не меняющимся с течением времени вектором  $\psi$ :  $\psi(0)=\psi(t)=\psi$ . Эволюция квантовой системы связана с тем, что от времени зависят операторы всех физических величин согласно уравнению (13.7), вектор же состояния системы не зависит от времени - гейзенберговская картина движения (гейзенберговское представление).

Выбирая в качестве  $A$  операторы координат и импульса, которые явно не зависят от времени, из уравнения (13.7) получим квантовые канонические уравнения движения - уравнения Гамильтона:

$$\left. \begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= \{x, H\}, & \frac{dp_x}{dt} &= \{p_x, H\}, \\ \frac{dy}{dt} &= \{y, H\}, & \frac{dp_y}{dt} &= \{p_y, H\}, \\ \frac{dz}{dt} &= \{z, H\}, & \frac{dp_z}{dt} &= \{p_z, H\}. \end{aligned} \right\} \quad (13.8)$$

Получим строгое решение уравнения Гейзенберга для случая, когда  $\frac{\partial A}{\partial t} = 0$  и  $\frac{\partial H}{\partial t} = 0$ .

Если  $A$  и  $H$  явно не зависят от времени, то квантовое уравнение движения (13.7) принимает вид:

$$\frac{dA}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [A, H], \quad (13.9)$$

причем  $\frac{dH}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [H, H] = 0$ , т.е. оператор полной энергии не зависит от времени:

$H(t)=H(0)=H$ . Тогда уравнение (13.9) упрощается:

$$\frac{dA}{dt} = \frac{i}{\hbar} HA(t) - \frac{i}{\hbar} A(t)H. \quad (13.10)$$

Для определения вида решения уравнения (13.10) учтем лишь пока первое слагаемое в правой части, т.е. рассмотрим уравнение

$$\frac{dA}{dt} = \frac{i}{\hbar} HA(t). \quad (13.11)$$

Решением этого уравнения является оператор

$$A(t) = e^{\frac{i}{\hbar} Ht} A(0), \quad (13.12)$$

где экспоненту можно представить разложением в ряд:

$$e^{\frac{i}{\hbar} Ht} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left( \frac{i}{\hbar} Ht \right)^n. \quad (13.13)$$

Тогда решение уравнения (13.10) будем искать в виде:

$$A(t) = e^{\frac{i}{\hbar} Ht} \tilde{A}(t), \quad (13.14)$$

здесь  $\tilde{A}(t)$  учитывает наличие второго слагаемого в правой части уравнения (13.10).

Потребуем, чтобы (13.14) было решением уравнения (13.10). Для этого вычислим  $\frac{dA(t)}{dt}$ :

$$\frac{dA(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} HA(t) + e^{\frac{i}{\hbar} Ht} \frac{d\tilde{A}(t)}{dt}. \quad (13.15)$$

Подставив (13.14) и (13.15) в уравнение (13.10), найдем:

$$e^{\frac{i}{\hbar} Ht} \frac{d\tilde{A}(t)}{dt} = e^{\frac{i}{\hbar} Ht} \tilde{A}(t) \left( -\frac{i}{\hbar} H \right). \quad (13.16)$$

Отсюда для искомого оператора  $\tilde{A}(t)$  получаем уравнение:

$$\frac{d\tilde{A}(t)}{dt} = \tilde{A}(t) \left( -\frac{i}{\hbar} H \right), \quad (13.17)$$

решением которого является оператор

$$\tilde{A}(t) = A(0) e^{-\frac{i}{\hbar} Ht}. \quad (13.18)$$

Следовательно, оператор любой физической величины меняется со временем по закону:

$$A^\Gamma(t) = e^{\frac{i}{\hbar} Ht} A(0) e^{-\frac{i}{\hbar} Ht}. \quad (13.19)$$

Этот закон можно записать через унитарные операторы. Для этого введем в рассмотрение оператор

$$S(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} Ht}, \quad (13.20)$$

называемый оператором эволюции системы во времени. Тогда обратным ему оператором будет

$$S^{-1}(t) = e^{\frac{i}{\hbar} Ht}. \quad (13.21)$$

Учитывая эрмитовость гамильтониана  $H$ , найдем оператор  $S^+(t)$ , сопряженный оператору (13.20):

$$S^+(t) = \left( e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \right)^+ = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left[ \left( -\frac{i}{\hbar} H t \right)^n \right]^+ = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left( \frac{i}{\hbar} H t \right)^n = S^{-1}(t).^1$$

Итак,

$$S^+(t) = S^{-1}(t), \quad (13.22)$$

тогда

$$S(t)S^+(t) = 1, \quad (13.23)$$

т.е. оператор эволюции системы  $S(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} H t}$  является унитарным оператором.

Таким образом, связь оператора Гейзенберга  $A^\Gamma(t)$  с  $A(0)$  осуществляется унитарным преобразованием:

$$A^\Gamma(t) = S^+(t) \cdot A(0) \cdot S(t). \quad (13.24)$$

## §14. Шредингеровская картина движения. Волновое уравнение

### Шредингера

Э.Шредингер в 1926 г. записал свое квантовое уравнение движения, считая, что с течением времени меняется вектор состояния системы  $\psi(t)$ , а операторы динамических переменных не зависят от времени:  $A^{\text{III}}(t) = A(0) = A$ . Эта картина эволюции квантовой системы во времени получила название шредингеровской картины движения. Какому же уравнению удовлетворяет вектор состояния, т.е. каков вид основного уравнения квантовой динамики в шредингеровском представлении<sup>2</sup>?

Для ответа на этот вопрос воспользуемся формулой среднего значения динамической переменной в представлении Гейзенберга:

$$\langle A(t) \rangle = (\psi, A(t)\psi), \quad (14.1)$$

где

$$A(t) = S^+(t)A(0)S(t). \quad (13.24)$$

Тогда выражение (14.1) преобразуется к виду:

$$\bar{A}(t) \equiv \langle A(t) \rangle = (\psi, S^+(t)A(0)S(t)\psi) = (S(t)\psi, A(0)S(t)\psi). \quad (14.2)$$

<sup>1</sup> По определению сопряжённого оператора, если  $B\varphi_n = b_n\varphi_n$ , то  $B^+\varphi_n = b_n^*\varphi_n$ .

<sup>2</sup> Термин «представление» здесь используется в более широком смысле: в смысле картины эволюции во времени квантовой системы. Этот термин часто используется в более узком смысле: координатное, импульсное, энергетическое и т.д. представления.

где унитарный оператор  $S(t)$ , действуя на вектор состояния, переносит на него временную эволюцию квантовой системы:

$$S(t)\psi = \psi(t). \quad (14.3)$$

Таким образом, в шредингеровском представлении вектор состояния квантовой системы со временем меняется согласно закону:

$$\psi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} \psi, \quad (14.4)$$

операторы же остаются неизменными:  $A^H(t) = A(0)$ .

Следовательно, связь между гейзенберговской и шредингеровской картинами развития системы во времени осуществляется унитарным преобразованием, производимым с помощью оператора эволюции  $S(t)$  (13.20).

Дифференцируя по времени выражение (14.4), получим квантовомеханическое уравнение движения Шредингера:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} H \psi(t). \quad (14.5)$$

В координатном представлении вектор состояния переходит в волновую функцию  $\psi(\vec{r}, t)$ , а уравнение (14.5) приобретает вид известного волнового уравнения квантовой динамики:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = H \psi(\vec{r}, t). \quad (14.6)$$

Гамильтониан  $H$ , например, для квантовой частицы с массой  $m_0$ , движущейся в потенциальном поле, имеет вид (6.27):

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + U(\vec{r}).$$

## **§15. Уравнение фон Неймана. Сопоставление способов описания эволюции квантовых систем во времени.**

### ***15.1. Уравнение фон Неймана для матрицы плотности.***

Рассмотрим описание состояния квантовой системы с помощью оператора матрицы плотности  $\rho$ . Как меняется с течением времени оператор  $\rho$ ?

Для выяснения этого вопроса вновь используем выражение среднего значения некоторой физической величины  $A$ , изображающейся линейным эрмитовым оператором  $A(t)$  в гейзенберговском представлении:

$$\langle A(t) \rangle = Sp(\rho, A(t)).$$

Согласно (13.24)

$$A(t) = S^+(t)A(0)S(t),$$

поэтому

$$\langle A(t) \rangle = Sp(\rho, S^+(t)A(0)S(t)) = Sp(S(t)\rho S^+(t)A(0)), \quad (15.1)$$

где учтено свойство цикличной инвариантности следа матрицы плотности (8.22).

В выражении (15.1) эволюция во времени перенесена на матрицу плотности  $\rho(t)$ :

$$\rho(t) = S(t)\rho S^+(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} \rho e^{\frac{i}{\hbar}Ht}. \quad (15.2)$$

Дифференцируя (15.2) по времени, получим<sup>1</sup>

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho(t)}{\partial t} &= -\frac{i}{\hbar} H e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} \rho e^{\frac{i}{\hbar}Ht} + e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} \rho e^{\frac{i}{\hbar}Ht} \frac{i}{\hbar} H = \\ &= -\frac{i}{\hbar} H \rho(t) + \frac{i}{\hbar} \rho(t) H = \frac{1}{i\hbar} [H, \rho(t)]. \end{aligned}$$

Таким образом, уравнение, описывающее эволюцию матрицы плотности во времени имеет вид:

$$\frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = \{H, \rho(t)\}_{\text{KB}} \equiv \frac{1}{i\hbar} [H, \rho(t)]. \quad (15.3)$$

Это уравнение, полученное фон Нейманом, позволяет определить оператор  $\rho$  для любого момента времени, если он известен при  $t_0=0$ .

## **15.2. Сопоставление способов описания эволюции квантовых систем во времени**

При сопоставлении рассмотренных картин эволюции прежде всего следует заметить, что если в начальный момент времени  $t_0=0$  в координатном представлении имеем  $\psi_u(\vec{r}, t_0) = \varphi_\Gamma(\vec{r}, t_0)$  и  $A^{\text{III}}(\vec{r}) = A^\Gamma(\vec{r}, t_0)$ , т.е. совпадают как волновые функции, так и

---

<sup>1</sup> Оператор матрицы плотности зависит от некоторых переменных, например, в координатном представлении от координат. В связи с этим при дифференцировании  $\rho(t)$  по времени использован знак частной производной.

операторы физических величин в картинах движения Шредингера и Гейзенберга, то в последующие моменты времени обнаруживаются две различные ситуации: в представлении Шредингера зависимость от времени перенесена на волновую функцию  $\psi_{ii}(\vec{r}, t)$ , а в представлении Гейзенберга - на операторы  $A^{\Gamma}(\vec{r}, t)$ .

Эквивалентность обоих методов описания следует и из равенства матричных элементов эрмитовых операторов в шредингеровской и гейзенберговской картинах временной эволюции.

Действительно, в картине эволюции Шредингера в координатном представлении матричный элемент оператора  $A$  для любых двух состояний и равен:

$$A_{12}^u = (\psi_1^*(\vec{r}, t); A(0)\psi_2(\vec{r}, t)) \quad (15.4)$$

Используя унитарное преобразование (14.4), запишем

$$\left. \begin{aligned} \psi_1^*(\vec{r}, t) &= S^+(t)\phi_1^*(\vec{r}), \\ \psi_2(\vec{r}, t) &= S(t)\phi_2(\vec{r}) \end{aligned} \right\} \quad (15.5)$$

где  $\phi_1(\vec{r}, 0)$  и  $\phi_2(\vec{r}, 0)$  - волновые функции соответственно тех же двух состояний в гейзенберговской картине эволюции системы во времени.

С учетом выражений (15.5) матричный элемент (15.4) преобразуется к виду:

$$\begin{aligned} A_{12}^u &= (S^+(t)\phi_1^*(\vec{r})AS(t)\phi_2(\vec{r})) = (AS(t)\phi_2(\vec{r})S^+(t)\phi_1^*(\vec{r}))^* = \\ &= (S(t)AS(t)\phi_2(\vec{r}), \phi_1^*(\vec{r}))^* = (\phi_1^*(\vec{r}), S^+(t)AS(t)\phi_2(\vec{r})) = \\ &= (\phi_1^*(\vec{r}), A^{\Gamma}(t)\phi_2(\vec{r})) = A_{12}^{\Gamma}(t), \end{aligned} \quad (15.6)$$

т.е.

$$A_{12}^u = A_{12}^{\Gamma}(t). \quad (15.6')$$

Матричные элементы операторов определяют физически наблюдаемые величины, поэтому не могут быть различными в эквивалентных представлениях (о чем свидетельствует вывод уравнения (14.5)). Другими словами, физические результаты должны входить в математический аппарат квантовой механики как унитарные инварианты.

Таким образом, требование унитарной инвариантности соответствующих результатов может служить дополнительным критерием правильности сформулированных ранее (глава 2, §5) основных постулатов (аксиом), положенных в основу квантовой механики.

Гейзенберговская картина эволюции обладает тем преимуществом, что позволяет выявить математическую аналогию квантовой механики и классической механики. Именно в представлении Гейзенберга квантовомеханические соотношения имеют вид классических

соотношений, в которых физические величины заменены соответствующими операторами. Особенно широко применяется гейзенберговское представление в квантовой теории поля.

Для практических расчетов удобнее всего пользоваться шредингеровской картиной эволюции, в которой операторы  $A$ , сопоставляемые классическим динамическим переменным, не зависят от времени. Всю информацию о временном развитии системы несет волновая функция  $\psi(\vec{r}, t)$ , удовлетворяющая волновому уравнению Шредингера (14.6). В большинстве случаев решить дифференциальное уравнение (14.6) значительно легче, чем найти решение матричных уравнений Гейзенберга.

Помимо гейзенберговского и шредингеровского представлений часто применяется представление взаимодействия, введенное Дираком. В представлении Дирака в общем случае операторы и векторы состояний явно зависят от времени.

Это представление удобно, когда в гамильтониане  $H$  задачи можно выделить малую часть  $V$  так, что

$$H = H^{(0)} + V, \quad (15.7)$$

где  $H^{(0)}$  не зависит от времени; оператор  $V$ , называемый оператором возмущения, может зависеть и от времени.

В конкретных расчетах оператор  $H^{(0)}$  описывает, например, систему невзаимодействующих частиц (электронов в атоме гелия), а оператор  $V$  учитывает их взаимодействие. Это представление очень удобно при использовании одного из приближенных методов квантовой механики - теории возмущений (стационарной, когда  $\frac{\partial V}{\partial t} = 0$ , и нестационарной -  $V = V(\vec{r}, t)$ ). Очень часто представление взаимодействия используется в квантовой электродинамике.

Наиболее же общая форма описания состояния квантовых систем (гейзенберговская картина эволюции) основана на использовании оператора матрицы плотности  $\rho(t)$ , удовлетворяющего уравнению фон Неймана (15.3). Преимущество этого метода описания состоит в единообразном рассмотрении чистых и смешанных состояний квантовых систем.

### ***15.3. Принцип причинности***

К числу основных принципов в физике принадлежит и принцип причинности, согласно которому начальное состояние системы при известном взаимодействии между ее частицами определяет состояние системы в любой последующий момент времени.

В классической механике Ньютона состояние системы однозначно задается каноническими переменными: обобщенными координатами и обобщенными импульсами. Зная характер полей, в которых движется система, с помощью основных дифференциальных уравнений динамики по состоянию системы  $(q_j^{(0)}, p_j^{(0)})$  в начальный момент времени можно однозначно определить состояние системы  $(q_j(t), p_j(t))$  в любой последующий момент времени.

Таким образом, состояние системы в момент времени  $t_0$  и закон взаимодействия ее частиц между собой и с внешними телами могут рассматриваться как причина, а состояние системы в последующий момент  $t$  времени - как следствие. В этом заключается существо представлений о динамической или однозначной причинности, получившей название классического детерминизма. Классический детерминизм, не учитывающий элементов случайности, приводит к динамическим закономерностям.

Квантовая механика принципиально статистическая теория, которая в любом представлении позволяет вычислять распределение вероятностей значений любой физической величины, характеризующей систему. Так, например, в шредингеровской картине временной эволюции квантовой частицы ее состояние полностью определяется волновой функцией  $\psi(\vec{r}, t)$  (координатное представление), квадрат модуля которой равен плотности вероятности нахождения частицы в точке с координатами  $x, y, z$  в момент времени  $t$ :

$$|\psi(\vec{r}, t)|^2 = \omega(x, y, z, t)$$

Зная волновую функцию, можно вычислить распределение вероятностей значений любой динамической переменной: для этого достаточно разложить  $\psi(\vec{r}, t)$  в ряд по собственным функциям эрмитова оператора соответствующей величины, при этом квадраты коэффициентов разложения представляют собою вероятности дозволённых значений этой физической величины.

Волновая функция  $\psi(\vec{r}, t)$  удовлетворяет квантовому уравнению движения Шредингера (14.6), которое позволяет определить  $\psi(\vec{r}, t)$  в любой момент времени  $t$  по заданной начальной функции  $\psi(\vec{r}_0, t_0)$ , если известен гамильтониан  $H$ , зависящий от взаимодействия частиц системы.

Следовательно, при заданном гамильтониане  $H$  начальное состояние системы, характеризующееся волновой функцией  $\psi(\vec{r}_0, t_0)$ , можно рассматривать как причину, а



состояние в произвольный момент времени  $t$  с волновой функцией  $\psi(\vec{r}, t)$  - как следствие. Вероятностный смысл волновых функций, причинно связанных уравнением движения Шредингера (14.6), позволяет сделать вывод о наличии новой формы причинности, которая получила название вероятностной причинности.

Математическим выражением вероятностной причинности в различных представлениях является соответствующее квантовое уравнение эволюции системы во времени (13.7; 14.6; 15.3). Понимание причинности остается прежним: состояние системы в данный момент времени при известном гамильтониане определяется прошлым системы, но способ самого описания состояния становится вероятностным, что приводит к статистическим законам.

Статистические закономерности с присущей им вероятностной формой причинности более глубоко отображают объективные связи в природе, чем классический детерминизм и динамические закономерности.

## §16. Следствия из квантовых уравнений движения.

### 16.1. Стационарные состояния в квантовой механике.

Состояние квантовой системы, в котором ее энергия имеет определенное значение, а среднее значение всех других физических величин, характеризующих систему, не меняются с течением времени, называется стационарным.

Выявим условия стационарности состояния квантовой системы. Воспользуемся для этого шредингеровским представлением описания движения с помощью оператора матрицы плотности  $\rho(t)$ .

Из уравнения фон Неймана (15.3)

$$i\hbar \frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = [H, \rho(t)]$$

следует, что если коммутатор  $[H, \rho(t)] = 0$ , то  $\frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = 0$ . Это означает:

$$\rho(t) = \rho(0) = \rho, \quad (16.1)$$

т.е. матричные элементы оператора матрицы плотности  $\rho$  не зависят от времени

$$\rho_{mn}(t) = \rho_{mn}(0). \quad (16.2)$$

Физический смысл соотношения (16.2) свидетельствует о том, что вероятности измерения любых величин в этом состоянии системы не зависят от времени (т.к. диагональные

матричные элементы матрицы  $\rho$  имеют смысл вероятности или плотности вероятности). Следовательно, и средние значения этих физических величин не изменяются с течением времени.

Для решения вопроса об энергии системы в этом состоянии рассмотрим случай чистого состояния, когда оно может быть описано в шредингеровском представлении вектором состояния  $\psi(t)$ .

Из формулы матричного оператора  $\rho$  в виде

$$\rho_{nm} = c_n c_m^* \quad (16.3)$$

и соотношения (16.2) следует вывод о том, что зависимость  $c_n, c_m^*$  от времени может быть лишь типа:

$$c_n, c_m \sim e^{-i\alpha t}, \quad (16.4)$$

где  $\alpha$  - некоторая постоянная. Тогда и волновой вектор будет зависеть от времени таким же образом:

$$\psi(t) = \psi \cdot e^{-i\alpha t}. \quad (16.5)$$

Учтем, что вектор состояния является решением волнового уравнения Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \psi(t)}{\partial t} = H\psi(t) \quad (16.6)$$

и что левая часть этого уравнения равна

$$i\hbar \frac{\partial \psi(t)}{\partial t} = \hbar \alpha \psi(t). \quad (16.7)$$

Тогда из соотношений (16.6) и (16.7) следует новое уравнение

$$H\psi(t) = \hbar \alpha \psi(t). \quad (16.8)$$

Принимая во внимание уравнение для собственных векторов и собственных значений оператора энергии  $H(\frac{\partial H}{\partial t} = 0)$  для случая дискретного спектра

$$H\psi_n(t) = E_n \psi_n(t) \quad (16.9)$$

и сокращая в уравнениях (16.9) и (16.8) временной множитель  $e^{-i\alpha t}$ , получим

$$\left. \begin{aligned} H\psi_n &= E_n \psi_n \\ H\psi_n &= \hbar \alpha_n \psi_n \end{aligned} \right\} \quad (16.10)$$

откуда следует, что  $E_n = \hbar \alpha_n = const$ , т.е. энергия в этом состоянии имеет определенное значение  $E_n$ . Значит, состояние системы действительно является стационарным.

Уравнение (16.9) получило название стационарного уравнения Шредингера.

## **16.2. Законы сохранения (интегралы движения) в квантовой механике**

В классической механике при исследовании движения систем частиц важную роль играют первые интегралы движения. Среди них есть несколько таких интегралов движения, постоянство которых имеет глубокое происхождение, связанное с симметрией времени и пространства - их однородностью и изотропностью. Эти интегралы движения, имеющие вид

$$f_{\alpha}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n, \vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_n) = c_{\alpha}, \quad (16.11)$$

(где  $f_{\alpha}$  - некоторая функция радиусов-векторов и векторов скоростей  $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n, \vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_n$  частиц свободной механической системы,  $c_{\alpha}$  - константа), выделяют в особую группу и называют законами сохранения. Помимо связи законов сохранения с симметрией пространства и времени есть еще ряд причин, выделяющих эти интегралы движения в особую группу. Во-первых, все сохраняющиеся величины типа (16.11) обладают свойством аддитивности, т.е. значения указанных величин для системы невзаимодействующих между собой частиц равно сумме тех же величин для каждой частицы в отдельности. Во-вторых, если любые первые интегралы движения можно записать лишь на основе анализа дифференциальных уравнений движения, то о законах сохранения для механической системы можно судить по наиболее общим признакам (принадлежность системы к определенному классу механических систем). К ним прежде всего относятся законы сохранения энергии, импульса, момента импульса. Эти физические величины называются универсальными динамическими переменными и широко используются в физике при рассмотрении разнообразных явлений.

В классической физике указанные законы сохранения получают с помощью теории об изменении со временем энергии, импульса, момента импульса. С помощью этих теорем рассматриваются специальные условия, при которых данные величины не изменяются во времени, т.е. сохраняются. Такими условиями, например, служат замкнутость (изолированность) изучаемой системы или симметрия внешнего силового поля.

В квантовой механике подход к законам сохранения основывается на квантовых уравнениях движения (13.7):

$$\frac{dA(t)}{dt} = \frac{\partial A(t)}{\partial t} + \{A(t), H(t)\}_{\text{KB}}$$

Из него следует, что при выполнении условия

$$\frac{dA}{dt} = 0 \quad (16.12)$$

среднее значение величины  $A(t)$  сохраняется во времени:

$$\frac{d\bar{A}(t)}{dt} = 0, \quad (16.13)$$

т.е.  $\bar{A}(t) = const$  - интеграл движения.

Особый интерес представляет случай, когда оператор физической величины явно не зависит от времени:

$$\frac{\partial A}{\partial t} = 0. \quad (16.14)$$

Тогда (16.12) принимает вид:

$$\frac{dA}{dt} = \{A, H\} = 0, \quad (16.15)$$

т.е. физическая величина  $\bar{A}$  будет являться интегралом движения, если ее оператор  $A$  коммутирует с гамильтонианом  $H$  системы.

Рассмотрим условия сохранения определенного значения физической величины. Если для оператора физической величины  $A$  выполняется условие (16.12) и одна из собственных функций  $\varphi_n$  этого оператора совпадает с функцией состояния, в котором находится система, то определенное значение  $A_n$  этой системы сохраняется. В этом случае из формулы для среднего и условия (16.13) получаем:

$$\bar{A} = A_n = const, \quad (16.16)$$

т.е. определенное значение  $A_n$  физической величины является интегралом движения.

### **Закон сохранения энергии.**

Для энергии  $E$  - одной из универсальных динамических переменных - оператором является гамильтониан  $H$ , который может зависеть явно от времени, но может и не зависеть от него. В случае стационарных полей  $\frac{\partial H}{\partial t} = 0$ . Кроме того, очевидно, что квантовые скобки Пуассона в этом случае всегда равны нулю:

$$\{A, H\} \equiv \{H, H\} = 0. \quad (16.17)$$

Следовательно,  $\frac{dH}{dt} = 0$ , т.е.  $\bar{E} = const$ .

Если функция состояния системы, находящейся в стационарном поле, является собственной для гамильтониана  $H$ , то энергия имеет определенное сохраняющееся значение. Такие состояния, как известно, называются стационарными.

Таким образом, энергия микрочастицы в стационарном поле сохраняется.

В случае свободной частицы гамильтониан ее  $H = \frac{\vec{p}^2}{2m_0}$  явно не зависит от времени и  $t$ ,

откуда следует: энергия свободно движущейся частицы сохраняется.

Важным случаем является замкнутая система. Замкнутость системы означает, что потенциальная энергия взаимодействующих между собой частиц ее зависит только от расстояний между ними. Но гамильтониан системы явно не содержит времени, поэтому энергия замкнутой системы микрочастиц сохраняется.

### **Закон сохранения импульса.**

Оператор импульса  $\vec{p}$  частицы (6.23) явно не содержит времени и коммутирует с гамильтонианом  $H$  для свободной частицы. Следовательно, справедлив закон сохранения импульса в случае свободно движущейся частицы.

Если частица находится в силовом поле, то гамильтониан ее представляется формулой (6.27), т.е. содержит координаты, на которые действует оператор импульса, результатом чего является некоммутируемость операторов  $\vec{p}, H$ :

$$\{\vec{p}, H\} \neq 0. \quad (6.17)$$

Значит, в силовом поле импульс микрочастицы  $\vec{p}$  не сохраняется.

Для замкнутой системы взаимодействующих частиц можно доказать (2 часть), что оператор импульса такой системы коммутирует с ее гамильтонианом, т.е. справедлив закон сохранения импульса замкнутой системы микрочастиц.

### **Закон сохранения момента импульса.**

Оператор момента импульса частицы (6.25) явно не содержит времени и коммутирует с оператором  $H$  свободно движущейся частицы. Следовательно, для свободной частицы имеет место закон сохранения момента импульса.

В общем случае движения частицы в силовом поле момент импульса ее не сохраняется.

Для замкнутой системы оператор момента импульса явно не зависит от времени и коммутирует с оператором функции Гамильтона системы (2 часть), т.е. и в микромире имеет место закон сохранения момента импульса для замкнутых систем взаимодействующих микрочастиц.

Таким образом, и в микромире однородность и изотропность пространства-времени обуславливают законы сохранения энергии, импульса, момента импульса для замкнутых систем микрочастиц.

## Глава VI. Квантовая теория гармонических колебаний и волн.

Квантовая теория гармонических колебаний чрезвычайно важна в силу фундаментальности своих приложений. В классической физике все виды колебаний имеют общие закономерности. Наиболее простыми и фундаментальными являются гармонические колебания, которые могут быть различной природы. Ещё более универсален характер гармонических колебаний в квантовой теории. Рассмотрим несколько примеров:

### 1) Квантовая электродинамика.

Согласно корпускулярно-волновому дуализму монохроматической волне, задаваемой  $\omega_s$  и волновым вектором  $\vec{k}$ , можно поставить в соответствие квант поля, энергия которого  $\varepsilon = \hbar\omega_s(\vec{k})$ , а импульс  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ . Таким образом, энергия монохроматической волны пробегает дискретный ряд значений  $E = \hbar\omega_s(\vec{k}), 2\hbar\omega_s(\vec{k}), \dots, n\hbar\omega_s(\vec{k})$ .

С динамической точки зрения, свободное электромагнитное поле, находящееся в некотором объёме, эквивалентно системе независимых гармонических колебаний – гармонических осцилляторов (мод поля).

Таким образом, если мы построим квантовую теорию гармонических осцилляторов, то мы построим и квантовую теорию поля.

### 2) Квантовая теория колебаний кристаллической решётки.

Введём понятие идеальной кристаллической решётки. Пусть  $a$ -период решётки. На графике ось  $x$  -выбранное направление в кристалле, а ось  $\rho(x)$ -плотность вероятности положения ядра. Таким образом,  $x=0, a, 2a, \dots$  есть наиболее вероятные положения ядер.

Пусть  $u$  - смещение ядра относительно положения равновесия. Если  $\langle u^2 \rangle \ll a^2$ , то колебания решётки с большой степенью точности можно считать гармоническими. А, следовательно, колебания решётки в кристалле можно представить в виде совокупности независимых гармонических осцилляторов, задаваемых законом дисперсии  $\omega_s(\vec{k})$ .

Упругой волне в кристалле частоты  $\omega_s(\vec{k})$  ставятся в соответствие кванты-фононы с энергией  $\varepsilon = \hbar\omega_s(\vec{k})$  и импульсом  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ .

### 3) Квантовая теория колебаний атомов в молекуле.

С достаточной степенью точности можно рассмотреть колебания атомов в молекуле как гармонические. Следовательно, колебания атомов в молекуле есть совокупность независимых гармонических осцилляторов.

#### 4) Частица в потенциальной яме.

Одномерное движение квантовой частицы в параболической потенциальной яме есть гармонический осциллятор.

Гармонические колебания определяются частотой  $\omega_s(\vec{k})$ , и все особенности колебаний в квантовой теории определяются частотой и зависят от неё. Следовательно, основные выводы квантовой теории гармонических колебаний и волн не зависят от физической природы гармонического осциллятора.

Перейдём теперь к изложению последовательной квантовой теории гармонических колебаний отдельного осциллятора. Для определённости будем рассматривать одномерное движение нерелятивистской частицы в параболическом потенциале.

### §17. Спектр значений энергии гармонического осциллятора.

Основная задача заключается в определении спектра значений энергии гармонического осциллятора. Исходным является уравнение:

$$H\varphi_n = E_n\varphi_n. \quad (17.1)$$

Потенциальная энергия гармонического осциллятора равна  $\frac{m\omega^2 x^2}{2}$ , где  $\omega$ -собственная частота колебаний, а кинетическая энергия есть  $\frac{p^2}{2m}$ . Следовательно, гамильтониан осциллятора запишется в виде:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \quad (17.2)$$

Поскольку потенциальная энергия обращается в бесконечность при  $x = \pm\infty$ , то гармонический осциллятор может совершать лишь финитное движение (в ограниченной области пространства). В соответствие с этим энергетический спектр осциллятора дискретен.

Из вида операторов  $H$ ,  $\vec{p}$  и  $x$  следует, что  $E_n \geq 0$ .

Существует несколько способов решения данной задачи:

- 1) координатное представление;

- 2) импульсное представление;
- 3) матричный метод;
- 4) операторный метод.

Из всех перечисленных подходов к решению задач операторный метод является наиболее общим, позволяющим перейти к описанию квантованных полей. В операторном методе для определения спектра значений энергии гармонического осциллятора используются лишь перестановочные соотношения для канонически сопряжённых переменных  $x$  и  $p$ :

$$[x, p] = i\hbar.$$

Универсальность теории гармонического осциллятора и её независимость от физической природы станет очевидной после перехода к безразмерным переменным  $\xi$  и  $\eta$ :

$$\begin{aligned} x &\rightarrow \xi; \\ p &\rightarrow \eta. \end{aligned}$$

Заметим, что для гармонического осциллятора частоты  $\omega$  имеется единственная величина, имеющая размерность энергии  $\hbar\omega$ , а так как  $H$  имеет размерность энергии, то  $H = \hbar\omega H(\xi, \eta)$

Найдём вид оператора  $H(\xi, \eta) \cdot \frac{p^2}{2m}$  имеет размерность энергии, т.е.  $\frac{p^2}{2m} \sim \hbar\omega$ ,

откуда можно записать, что  $\frac{p^2}{2m} = \hbar\omega \frac{\eta^2}{2}$  или

$$p = \sqrt{\hbar\omega m} \cdot \eta \quad (17.3)$$

Аналогично  $\frac{m\omega^2 x^2}{2} = \hbar\omega \frac{\xi^2}{2}$ , откуда

$$x = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{m}} \cdot \xi \quad (17.4)$$

Гамильтониан такой системы будет иметь вид:

$$\begin{aligned} H &= \hbar\omega \frac{\eta^2}{2} + \hbar\omega \frac{\xi^2}{2} \\ H &= \hbar\omega \frac{\eta^2 + \xi^2}{2} \end{aligned} \quad (17.5)$$



Тогда оператор  $H(\xi, \eta)$  примет вид:  $H(\xi, \eta) = \frac{\eta^2 + \xi^2}{2}$ .

Запишем уравнения осциллятора для переменных  $\eta$  и  $\xi$ :

$$\left. \begin{aligned} \ddot{\xi} + \omega^2 \xi &= 0 \\ \ddot{\eta} + \omega^2 \eta &= 0 \end{aligned} \right\}$$

Откуда  $\xi \sim \cos \omega t$ ,  $\eta \sim \sin \omega t$  или  $\xi + i\eta \sim e^{i\omega t}$ . Эта переменная подчиняется дифференциальному уравнению первого порядка, т.к.  $\frac{d}{dt} e^{i\omega t} \sim e^{i\omega t}$ .

Целесообразно ввести новую переменную  $b(t)$ :  $b(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\xi + i\eta)$

. В квантовой механике ей соответствует оператор:

$$b = \frac{1}{\sqrt{2}}(\xi + i\eta) \quad (17.6)$$

Сопряжённый ему оператор  $b^+$  имеет вид:

$$b^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\xi - i\eta) \quad (17.7)$$

Оператор не эрмитовский. Покажем это. Установим перестановочные соотношения для вновь введённых переменных  $b$  и  $b^+$  и запишем гамильтониан гармонического осциллятора в этих переменных.

$$[b, b^+] = bb^+ - b^+b = \frac{1}{2}(\xi + i\eta)(\xi - i\eta) - \frac{1}{2}(\xi - i\eta)(\xi + i\eta) = i[\eta, \xi] = -i[\xi, \eta] \text{ т.е.}$$

$$[b, b^+] = -i[\xi, \eta] \quad (17.8)$$

Т.к.  $[x, p] = i\hbar$ , то  $[\xi, \eta] = i$ . Подставив полученный результат в (17.8) получим:

$$[b, b^+] = 1. \quad (17.9)$$

Выразим  $\xi$  и  $\eta$  через  $b$  и  $b^+$ . Получим:

$$\xi = \frac{1}{\sqrt{2}}(b + b^+) \quad (17.10)$$

$$\eta = \frac{i}{\sqrt{2}}(b^+ - b). \quad (17.11)$$

Откуда определим гамильтониан гармонического осциллятора:

$$H = \hbar\omega \left( \frac{\xi^2 + \eta^2}{2} \right) = \frac{\hbar\omega}{2} (bb^+ + b^+b)$$

Из соотношения (17.9) следует соотношение

$$bb_+ = 1 + b^+b, \quad (17.12)$$

учитывая которое гамильтониан примет вид

$$H = \hbar\omega \left( b^+b + \frac{1}{2} \right)$$

или

$$H = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad (17.13)$$

где оператор  $n$  есть

$$n = b^+b. \quad (17.14)$$

Обозначим собственные значения оператора  $n$  через  $\alpha_n$  и рассмотрим следующие уравнения на собственные функции и собственные значения:

$$\begin{aligned} H\varphi_n &= E_n\varphi_n \\ n\varphi_n &= \alpha_n\varphi_n \end{aligned}$$

Откуда, учитывая (17.12), получим

$$E_n = \hbar\omega \left( \alpha_n + \frac{1}{2} \right). \quad (17.15)$$

Таким образом, наша задача свелась к нахождению собственных значений  $\alpha_n$  оператора  $n$ .

Прежде всего докажем, что  $\alpha_n$  не могут быть отрицательными. Для этого рассмотрим уравнение:

$$n\varphi_n = b^+b\varphi_n = \alpha_n\varphi_n.$$

Умножая скалярно левую и правую части равенства на  $\varphi_n$  и учитывая условие нормировки для векторов  $\varphi_n$ , получим:

$$(\varphi_n, b^+b\varphi_n) = (\varphi_n, \alpha_n\varphi_n) = \alpha_n(\varphi_n, \varphi_n) = \alpha_n.$$

С другой стороны, учитывая, что  $(b^+)^+ = b$ :

$$(\varphi_n, b^+ b \varphi_n) = ((b^+)^+ \varphi_n, b \varphi_n) = (b \varphi_n, b \varphi_n) > 0.$$

Таким образом,  $\alpha_n \geq 0$ .

Далее установим две вспомогательные леммы.

Лемма1: Если  $\varphi_n$  - собственный вектора с собственными значениями  $\alpha_n$ , то вектор  $(b \varphi_n)$  также является собственным вектором оператора с собственным значением  $(\alpha_n - 1)$ , т.е.

$$n(b \varphi_n) = (\alpha_n - 1)(b \varphi_n). \quad (17.16)$$

Доказательство: Учитывая равенства (17.12), (17.14), (17.15) запишем

$$\begin{aligned} n(b \varphi_n) &= b^+ b b \varphi_n = (b b^+ - 1) b \varphi_n = b b^+ b \varphi_n - b \varphi_n = b(\alpha_n \varphi_n) - b \varphi_n = \\ &= (\alpha_n - 1)(b \varphi_n). \end{aligned}$$

Таким образом, лемма доказана.

Лемма2: Если  $\varphi_n$  - собственный вектор оператора  $n$  с собственным значением  $\alpha_n$ , то вектор  $(b^+ \varphi_n)$  также является собственным вектором оператора  $n$  с собственным значением  $(\alpha_n + 1)$ , т.е.

$$n(b^+ \varphi_n) = (\alpha_n + 1)(b^+ \varphi_n). \quad (17.17)$$

Доказательство: Учитывая равенства (17.14), (17.12), (17.15) получим

$$\begin{aligned} n(b^+ \varphi_n) &= b^+ b b^+ \varphi_n = b^+ (1 + b^+ b) \varphi_n = b^+ \varphi_n + b^+ b^+ b \varphi_n = b^+ \varphi_n + b^+ (\alpha_n \varphi_n) = \\ &= (\alpha_n + 1)(b^+ \varphi_n), \end{aligned}$$

что и требовалось доказать.

Отсюда имеем собственные вектора состояния  $\varphi_0$ , которым соответствует минимальное собственное значение  $\alpha_0$ , т.е.  $n \varphi_0 = \alpha_0 \varphi_0$ . Согласно лемме1,  $b \varphi_0$  также является собственным вектором оператора  $n$ :

$$n(b \varphi_0) = (\alpha_0 - 1)b \varphi_0,$$

но  $\alpha_0$  - минимальное собственное значение оператора и  $\alpha_0 \geq 0$ . Следовательно,  $b \varphi_0 \equiv 0$ , откуда  $n \varphi_0 = b^+ b \varphi_0 = 0 \cdot \varphi_0$  или  $\alpha_0 = 0$ .

Так как собственные значения  $\alpha_n$ , согласно леммам 1 и 2, отличаются друг от друга на единицу, то  $\alpha_n = 0, 1, 2, \dots, n$ . Обозначим и запишем леммы 1 и 2 с учётом вновь введённого обозначения:

$$n(b\varphi_n) = (n-1)(b\varphi_n) \quad (17.16')$$

$$n(b^+\varphi_n) = (n+1)(b^+\varphi_n) \quad (17.17')$$

Откуда следует, что  $b\varphi_n$  и  $b^+\varphi_n$  можно записать в следующем виде:

$$\begin{aligned} b\varphi_n &= c_1\varphi_{n-1}, \\ b^+\varphi_n &= c_2\varphi_{n+1}. \end{aligned}$$

$c_1$  и  $c_2$  найдём из условия нормировки:

$$(\varphi_n, \varphi_n) = (\varphi_{n+1}, \varphi_{n+1}) = (\varphi_{n-1}, \varphi_{n-1}) = 1.$$

Рассмотри скалярное произведение  $(b\varphi_n, b\varphi_n)$ :

$$(b\varphi_n, b\varphi_n) = (\varphi_n, b^+b\varphi_n) = (\varphi_n, n\varphi_n) = n(\varphi_n, \varphi_n) = n.$$

С другой стороны,

$$(b\varphi_n, b\varphi_n) = (c_1\varphi_{n-1}, c_1\varphi_{n-1}) = c_1 \cdot c_1^* = |c_1|^2.$$

Таким образом,  $c_1 = \sqrt{n}$  и

$$b\varphi_n = \sqrt{n} \cdot \varphi_{n-1}. \quad (17.18)$$

Аналогичным образом находим  $c_2$ , откуда

$$b^+\varphi_n = \sqrt{n+1} \cdot \varphi_{n+1}. \quad (17.19)$$

Таким образом, собственные значения оператора Гамильтона  $H$  примет вид:

$$E_n = \hbar\omega\left(\alpha_n + \frac{1}{2}\right) = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad (17.20)$$

где  $n=0,1,2,\dots$

Из соотношения (17.20) следует, что минимальное значение энергии гармонического осциллятора отлично от нуля  $\left(\varepsilon_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \neq 0\right)$  и спектр энергии гармонического осциллятора эквидистантен.

Применим полученный результат к некоторым примерам, рассмотренным в начале параграфа.

1). Электромагнитное поле эквивалентно совокупности независимых гармонических осцилляторов. Для любого такого осциллятора спектр значений энергии имеет вид:

$$\varepsilon_s(\vec{k}) = \hbar \omega_s(\vec{k}) \left( n_{sk} + \frac{1}{2} \right).$$

Так как осцилляторы независимы, то спектр значений энергии свободного электромагнитного поля равен сумме возможных значений энергий гармонического осциллятора:

$$E = \sum_{s,k} \varepsilon_s(\vec{k}) = \sum_{s,k} \hbar \omega_s(\vec{k}) \left( n_{sk} + \frac{1}{2} \right), \text{ где } n_{s,k} = 0, 1, 2, \dots$$

Выясним физический смысл оператора  $n$ . Монохроматической волне ( $\omega_s(\vec{k})$ ) ставится в соответствие кванты поля ( $\varepsilon = \hbar \omega_s(\vec{k})$ ). Тогда в выражении для энергии  $n_{s,k}$  приобретает смысл числа фотонов в состоянии  $\vec{k}, s$ , при этом  $n_{s,k} = b_{s,k}^+ b_{s,k}$  есть оператор числа фотонов в состоянии  $\vec{k}, s$ . Из соотношений же

$$\begin{aligned} b_{s,k} \varphi_n &= \sqrt{n} \varphi_{n-1} \\ b_{s,k}^+ \varphi_n &= \sqrt{n+1} \varphi_{n+1} \end{aligned}$$

следует, что  $b_{s,k}$  есть оператор уничтожения фотона в состоянии  $s, \vec{k}$ , а  $b_{s,k}^+$  - оператор рождения фотона в состоянии  $s, \vec{k}$ .

2). Колебания кристаллической решётки есть совокупность независимых гармонических осцилляторов. Таким образом,  $E_{кр} = \sum_{s,k} \hbar \omega_s(\vec{k}) \left( n_{s,k} + \frac{1}{2} \right)$ , где  $n_{s,k} = 0, 1, 2, \dots$ . Упругой волне в кристалле ( $\omega_s(\vec{k})$ ) ставится в соответствие квант-фонон. Тогда  $n_{s,k}$  - оператор числа фононов.

## §18. Стационарные состояния гармонического осциллятора.

### Координатное, импульсное и матричное представления.

Проанализируем особенности стационарных состояний гармонического осциллятора в различных представлениях.

#### 1). Координатное представление.

Для нахождения стационарных состояний гармонического осциллятора воспользуемся стационарным уравнением Шредингера:

$$H \varphi_n = \varepsilon_n \varphi_n.$$

Введём безразмерные переменные  $\xi (x \rightarrow \xi)$  и  $\eta = -i \frac{d}{d\xi}$ . Откуда, согласно (17.6):

$$b = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \xi + \frac{d}{d\xi} \right). \quad (18.1)$$

Используя равенство (17.19), найдём  $b^+ \varphi_0$ , а затем  $(b^+)^2 \varphi_0$ :

$$\begin{aligned} b^+ \varphi_0 &= \sqrt{1} \varphi_1, \\ (b^+)^2 \varphi_0 &= b^+ (b^+ \varphi_0) = b^+ \sqrt{1} \varphi_1 = \sqrt{1} \sqrt{2} \varphi_2. \end{aligned}$$

Аналогично:

$$(b^+)^n \varphi_0(\xi) = \sqrt{n!} \cdot \varphi_n(\xi). \quad (18.2)$$

Определим вид собственной функции  $\varphi_0(\xi)$ , для чего воспользуемся соотношением:

$$\begin{aligned} b \varphi_0(\xi) &= \left( \xi + \frac{d}{d\xi} \right) \varphi_0(\xi) = \xi \cdot \varphi_0(\xi) + \frac{d\varphi_0(\xi)}{d\xi} = 0, \\ \xi \cdot \varphi_0(\xi) &= -\frac{d\varphi_0(\xi)}{d\xi}, \\ \frac{d\varphi_0(\xi)}{\varphi_0(\xi)} &= -\xi \cdot d\xi = d\left(-\frac{1}{2} \xi^2\right), \\ \varphi_0(\xi) &= C e^{-\frac{\xi^2}{2}}. \end{aligned} \quad (18.3)$$

Постоянную  $C$  найдём из условия нормировки:

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi |\varphi_0(\xi)|^2 = |C|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \cdot e^{-\xi^2} = |C|^2 \sqrt{\pi}.$$

Откуда

$$C = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}}$$

и согласно выражению (18.3)

$$\varphi_0(\xi) = \frac{e^{-\xi^2/2}}{\sqrt[4]{\pi}}. \quad (18.4)$$

Воспользуемся соотношением (18.1) для нахождения вектора  $\varphi_n(\xi)$ :

$$\begin{aligned}\varphi_n(\xi) &= \frac{1}{\sqrt{n!}} (b^+)^n \varphi_0(\xi) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left( \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \xi + \frac{d\xi}{\psi} \right) \right)^n \varphi_0(\xi) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2^n \cdot n!}} \left( \xi + \frac{d\xi}{\xi} \right)^n \varphi_0(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2^n \cdot n!}} H_n(\xi) \varphi_0(\xi),\end{aligned}$$

т.е.

$$\varphi_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2^n \cdot n!}} H_n(\xi) \varphi_0(\xi), \quad (18.5)$$

где  $H_n(\xi)$  - полином Чебышева-Эрмита:

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{-\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{\xi^2} \quad (18.6)$$

или в развёрнутом виде:

$$\begin{aligned}H_1(\xi) &= 2\xi, \\ H_2(\xi) &= 2(2\xi^2 + 1), \\ &\dots\dots\dots \\ H_n(-\xi) &= (-1)^n H_n(\xi).\end{aligned} \quad (18.6')$$

Из последних соотношений очевидно, что состояния гармонического осциллятора могут быть как чётными, так и нечётными.

## 2). Импульсное представление.

По аналогии с выше рассмотренным представлением, определяя операторы  $\eta$  и  $\xi$  следующим образом:

$$\begin{aligned}\vec{p} &\rightarrow \eta \\ \xi &= i \frac{d}{d\eta}, \\ b &= \frac{i}{\sqrt{2}} \left( \eta + \frac{d}{d\eta} \right),\end{aligned} \quad (18.7)$$

получим следующие выражения для волновых функций стационарных состояний гармонического осциллятора в импульсном представлении:

$$\varphi_0(\eta) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} e^{-\eta^2/2},$$

$$\begin{aligned}\varphi_n(\eta) &= \frac{1}{\sqrt{2^n \cdot n!}} \left( \frac{d\eta}{\eta} - \eta \right)^n \varphi_0(\eta) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2^n \cdot n!}} (-1)^n \left( \eta - \frac{d\eta}{\eta} \right)^n \varphi_0(\eta).\end{aligned}\quad (18.8)$$

### 3). Матричное представление.

Согласно (17.4) и (17.10):

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \cdot (b + b^+). \quad (18.9)$$

Найдём матричные элементы оператора  $b$ .

$$b_{mn} = (\varphi_m, b\varphi_n) = (\varphi_m, \sqrt{n} \cdot \varphi_{n-1}) = \sqrt{n} \cdot (\varphi_m, \varphi_{n-1}) = \sqrt{n} \cdot \delta_{m, n-1}.$$

Откуда,

$$b_{n-1, n} = \sqrt{n}.$$

Найдём минимальное  $n$ :  $n-1=0$ ,  $n=1$ .

Таким образом, матрица оператора  $b$  примет вид:

$$b = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & \dots & 0 \\ & & \dots & \dots & \end{pmatrix} \quad (18.10)$$

Матрица  $b^+$  получится путём транспонирования, т.е. путём замены строчек на столбцы:

$$b^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \\ \sqrt{1} & 0 & \vdots \\ 0 & \sqrt{2} & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \end{pmatrix} \quad (18.11)$$

Подставляя (18.10) и (18.11) в (18.9) находим вид оператора координаты в матричном представлении:

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \cdot \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \quad (18.12)$$



Аналогично, используя соотношения (17.3), (17.11), можно получить вид оператора импульса в матричном представлении.

## Глава VII. Квантовая теория момента.

Наряду с энергией и импульсом момент количества движения относится к фундаментальным физическим величинам, связанным с наиболее общими свойствами пространства-времени. Из однородности пространства-времени следует сохранение энергии-импульса для замкнутой системы. Изотропность пространства (симметрия относительно вращения) приводит к сохранению момента количества движения.

В квантовой механике моменту количества движения отводится особое место в силу его специфических квантовых свойств.

### § 19. Общие свойства и особенности квантового момента.

При построении квантовой теории момента количества движения воспользуемся принципом соответствия, согласно которому каждой физической величине ставится в соответствие линейный эрмитов оператор

$$\begin{aligned} A(q_i, p_i) &\rightarrow \hat{A}, \\ B(q_i, p_i) &\rightarrow \hat{B}. \end{aligned}$$

Следовательно, соотношения между физическими величинами в классической теории должны перейти в соотношения между операторами физических величин в квантовой механике. В частности, классическим скобкам Пуассона

$$\{A, B\}_{\text{кл.}} = \sum_i \frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial B}{\partial q_i} \frac{\partial A}{\partial p_i} \quad (19.1)$$

ставится в соответствие квантовые скобки  $\{A, B\}_{\text{кв.}}$ :

$$\{A, B\}_{\text{кв.}} = \frac{1}{i\hbar} (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) = \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}, \hat{B}]. \quad (19.2)$$

Это своеобразное применение принципа соответствия между классической и квантовой механиками оказалось очень плодотворным.

Учитывая выражение момента импульса

$$\vec{L} = [\vec{r}, \vec{p}],$$

с помощью (19.1) можно получить следующие классические соотношения:

$$\begin{aligned}
\{L_x, L_y\}_{\text{кл.}} &= L_z, \\
\{L_y, L_z\}_{\text{кл.}} &= L_x, \\
\{L_z, L_x\}_{\text{кл.}} &= L_y, \\
\{L_z, \vec{L}^2\}_{\text{кл.}} &= \{L_y, \vec{L}^2\}_{\text{кл.}} = \{L_x, \vec{L}^2\}_{\text{кл.}} = 0.
\end{aligned}$$

Откуда, согласно принципу соответствия, сопоставив классическим скобкам Пуассона квантовые, получаем следующие соотношения для квантово-механического момента импульса  $\vec{J}$

$$\begin{aligned}
\{\hat{J}_x, \hat{J}_y\}_{\text{кв.}} &= \hat{J}_z, \\
\{\hat{J}_y, \hat{J}_z\}_{\text{кв.}} &= \hat{J}_x, \\
\{\hat{J}_z, \hat{J}_x\}_{\text{кв.}} &= \hat{J}_y, \\
\{\hat{J}_x, \hat{J}^2\}_{\text{кв.}} &= \{\hat{J}_y, \hat{J}^2\}_{\text{кв.}} = \{\hat{J}_z, \hat{J}^2\}_{\text{кв.}} = 0,
\end{aligned}$$

т.е. согласно (19.2)

$$\begin{aligned}
[\hat{J}_x, \hat{J}_y] &= i\hbar \hat{J}_z, \\
[\hat{J}_y, \hat{J}_z] &= i\hbar \hat{J}_x, \\
[\hat{J}_z, \hat{J}_x] &= i\hbar \hat{J}_y,
\end{aligned} \tag{19.3}$$

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_i] = 0, \quad i = x, y, z. \tag{19.4}$$

Из соотношений (19.3) и (19.4) следует, что одновременно измеримыми величинами являются квадрат момента и одна из его проекций. В качестве последней примем  $J_z$ :

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_z] = 0.$$

Геометрически это можно представить с помощью так называемого «конуса состояния» (рис. 1).

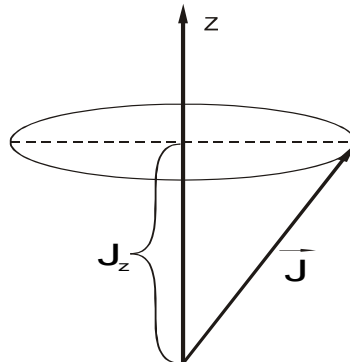


Рис. 1. «Конус состояния». Одновременно точные значения могут иметь лишь величины  $J_z$  и  $\vec{J}^2$ .

## § 20. Собственные значения и собственные векторы проекции и квадрата момента.

Основная задача квантовой теории момента заключается в определении общих собственных векторов и собственных значений проекции и квадрата момента. Из одновременной измеримости  $\vec{J}^2$  и  $J_z$  следует, что соответствующие операторы этих величин имеют общую систему собственных функций  $\psi_{j,m}$ :

$$\hat{J}_z \psi_{j,m} = \hbar m \psi_{j,m}, \quad (20.1)$$

$$\hat{\vec{J}}^2 \psi_{j,m} = J_j^2 \psi_{j,m}. \quad (20.2)$$

Рассмотрим некоторые свойства оператора момента количества движения.

Свойство 1: При фиксированном значении квадрата момента количества движения  $(J^2)_j$  проекция момента  $(J_z)_m = \hbar m$  принимает значения из интервала:

$$|\hbar m| \leq \sqrt{(J^2)_j}. \quad (20.3)$$

Доказательство: Для доказательства этого свойства воспользуемся определением:

$$\hat{\vec{J}}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2.$$

Поддействуем оператором квадрата момента  $\hat{\vec{J}}^2$  на вектор состояния  $\psi_{j',m}$ :

$$\hat{\vec{J}}^2 \psi_{j',m} = (\hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2) \psi_{j',m} = \hat{J}_x^2 \psi_{j',m} + \hat{J}_y^2 \psi_{j',m} + \hat{J}_z^2 \psi_{j',m}.$$

Умножая последнее выражение на  $\psi_{j',m}$  и интегрируя по всей области изменения переменных получим:

$$J_{j'}^2 = (\hbar m)^2 + \langle J_x^2 \rangle + \langle J_y^2 \rangle.$$

Тогда, учитывая, что средние значения не отрицательны, приходим к выводу:

$$(\hbar m)^2 \leq J_j^2,$$

т.е. максимальная проекция момента не превосходит длины вектора момента количества движения:

$$|\hbar m| \leq \sqrt{J_j^2}.$$

что и требовалось доказать.

Свойство 2: Если  $\psi_{j,m}$  - собственный вектор оператора квадрата момента  $\hat{J}^2$  с собственным значением  $J_j^2$ , то  $\hat{J}_x \psi_{j,m}$  и  $\hat{J}_y \psi_{j,m}$  также собственные вектора оператора квадрата момента с тем же собственным значением  $J_j^2$ , т.е.

$$\hat{J}^2 (\hat{J}_x \psi_{j,m}) = J_j^2 (\hat{J}_x \psi_{j,m}), \quad (20.4)$$

$$\hat{J}^2 (\hat{J}_y \psi_{j,m}) = J_j^2 (\hat{J}_y \psi_{j,m}). \quad (20.5)$$

Доказательство: Подействуем оператором  $\hat{J}^2$  на вектор состояния  $\hat{J}_x \psi_{j,m}$  и воспользуемся свойством (19.4):

$$\hat{J}^2 (\hat{J}_x \psi_{j,m}) = \hat{J}_x (\hat{J}^2 \psi_{j,m}) = \hat{J}_x J_j^2 \psi_{j,m} = J_j^2 (\hat{J}_x \psi_{j,m}),$$

$$\hat{J}^2 (\hat{J}_y \psi_{j,m}) = J_j^2 (\hat{J}_y \psi_{j,m}).$$

Аналогично проводится доказательство для вектора  $\hat{J}_y \psi_{j,m}$ .

Таким образом, из коммутруемости операторов проекций  $\hat{J}_x$  и  $\hat{J}_y$  с оператором квадрата момента импульса  $\hat{J}^2$  следует, что их действие на вектор состояния  $\psi_{j,m}$  не меняет  $J_j^2$ .

Вместо операторов  $\hat{J}_x, \hat{J}_y$  удобно перейти к их комплексным комбинациям:

$$\hat{J}^+ = \hat{J}_x + i\hat{J}_y, \quad (20.6)$$

$$\hat{J}^- = \hat{J}_x - i\hat{J}_y. \quad (20.7)$$

Выразим имеющиеся соотношения через введенные комплексные операторы. Для этого найдем коммутатор  $[\hat{J}^+, \hat{J}_z]$ :

$$[\hat{J}^+, \hat{J}_z] = [\hat{J}_x + i\hat{J}_y, \hat{J}_z].$$

Для дальнейших вычислений воспользуемся свойством коммутатора:

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

Тогда:

$$\begin{aligned} [\hat{J}^+, \hat{J}_z] &= [\hat{J}_x + i\hat{J}_y, \hat{J}_z] = [\hat{J}_x, \hat{J}_z] + i[\hat{J}_y, \hat{J}_z] = \\ &= -i\hbar\hat{J}_y + i(i\hbar\hat{J}_x) = -\hbar(\hat{J}_x + i\hat{J}_y) = -\hbar\hat{J}^+. \end{aligned} \quad (20.8)$$

Можно показать, что

$$\begin{aligned}\hat{J}_z \hat{J}^+ &= \hat{J}^+ (\hat{J}_z + \hbar), \\ \hat{J}^+ \hat{J}_z &= (\hat{J}_z - \hbar) \hat{J}^+.\end{aligned}\quad (20.9)$$

Аналогично проводятся вычисления для  $\hat{J}^-$ :

$$[\hat{J}^-, \hat{J}_z] = \hbar \hat{J}^-, \quad (20.10)$$

$$\hat{J}_z \hat{J}^- = \hat{J}^- (\hat{J}_z - \hbar). \quad (20.11)$$

$$\begin{aligned}\hat{J}^- \hat{J}^+ &= (\hat{J}_x + i\hat{J}_y)(\hat{J}_x - i\hat{J}_y) = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + i(\hat{J}_x \hat{J}_y - \hat{J}_y \hat{J}_x) = \\ &= \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + i[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + i(i\hbar \hat{J}_z) = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 - \hbar \hat{J}_z.\end{aligned}\quad (20.12)$$

Откуда, учитывая определение квадрата момента  $\hat{J}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2$  следует, что

$$\hat{J}^2 = \hat{J}^- \hat{J}^+ + \hbar \hat{J}_z + \hat{J}_z^2 \quad (20.13)$$

или

$$\hat{J}^2 = \hat{J}^+ \hat{J}^- - \hbar \hat{J}_z + \hat{J}_z^2. \quad (20.14)$$

Для решения задачи о нахождении спектра собственных значений операторов  $\hat{J}_z$  и  $\hat{J}^2$  рассмотрим несколько вспомогательных теорем.

Лемма 1: Если  $\psi_{j,m}$  - собственный вектор оператора  $\hat{J}_z$  с собственным значением  $\hbar m$  ( $\hat{J}_z \psi_{j,m} = \hbar m \psi_{j,m}$ ), то вектор  $\hat{J}^+ \psi_{j,m}$  тоже собственный вектор оператора  $\hat{J}_z$  с собственным значением  $\hbar(m+1)$ , т.е.

$$\hat{J}_z (\hat{J}^+ \psi_{j,m}) = \hbar(m+1) (\hat{J}^+ \psi_{j,m}).$$

Доказательство: Подействуем оператором  $\hat{J}_z$  на вектор  $\hat{J}^+ \psi_{j,m}$ . С учетом равенств (20.9) и (20.1) получаем:

$$\begin{aligned}\hat{J}_z (\hat{J}^+ \psi_{j,m}) &= \hat{J}^+ (\hat{J}_z + \hbar) \psi_{j,m} = \hat{J}^+ \hat{J}_z \psi_{j,m} + \hat{J}^+ \hbar \psi_{j,m} = \\ &= \hat{J}^+ \hbar m \psi_{j,m} + \hat{J}^+ \hbar \psi_{j,m} = \hbar(m+1) \hat{J}^+ \psi_{j,m}.\end{aligned}$$

Что и требовалось доказать.

Лемма 2: Если  $\psi_{j,m}$  - собственный вектор оператора  $\hat{J}_z$  с собственным значением  $\hbar m$ , то  $\hat{J}^- \psi_{j,m}$  тоже есть собственный вектор  $\hat{J}_z$  с собственным значением  $\hbar(m-1)$ , т.е.

$$\hat{J}_z (\hat{J}^- \psi_{j,m}) = \hbar(m-1) (\hat{J}^- \psi_{j,m}).$$

Доказательство проводится аналогично с учетом формул (20.11) и (20.1).

Из рассмотренных вспомогательных лемм в дальнейшем нам понадобятся два следствия:

$$1) \quad \hat{J}^+ \psi_{j,m} = C_1 \psi_{j,m+1}; \quad (20.15)$$

$$2) \quad \hat{J}^- \psi_{j,m} = C_2 \psi_{j,m-1}; \quad (20.16)$$

где  $C_1, C_2$  - некоторые постоянные.

Данные леммы и их следствия дают ответ на вопрос о спектре собственных значений проекции момента, если нам известно хотя бы одно значение. Согласно леммам 1 и 2 собственные значения проекции момента количества движения  $J_z$ , которым принадлежат собственные функции  $\hat{J}^+ \psi_{j,m}, \psi_{j,m}, \hat{J}^- \psi_{j,m}$ , отличаются на единицу и находятся, согласно доказанной теореме, в интервале  $|\hbar m| \leq \sqrt{J_j^2}$ . Таким образом, при фиксированном значении  $J_j^2$  значения  $m$  ограничены сверху и снизу. Пусть  $m_1$  и  $m_2$  соответственно наименьшее и наибольшее значения  $m$  при заданном  $J_j^2$ , т.е.  $m_1 \leq m \leq m_2$ . Тогда

$$\hat{J}^- \psi_{j,m_1} = 0, \quad (20.17)$$

$$\hat{J}^+ \psi_{j,m_2} = 0. \quad (20.18)$$

С учетом равенств (20.17), (20.14) и (20.18), (20.1) можно записать

$$\begin{aligned} \hat{J}^- \hat{J}^+ \psi_{j,m_2} &= (J^2 - \hbar J_z + J_z^2) \psi_{j,m_2} = J_j^2 - \hbar^2 m_2 - \hbar^2 m_2^2 = 0, \\ \hat{J}^+ \hat{J}^- \psi_{j,m_1} &= (J^2 + \hbar J_z - J_z^2) \psi_{j,m_1} = J_j^2 + \hbar^2 m_1 - \hbar^2 m_1^2 = 0. \end{aligned}$$

Откуда

$$\hbar^2 (m_1 + m_2)(m_2 - m_1 + 1) = 0.$$

Так как по условию  $m_2 \geq m_1$ , то  $m_2 = -m_1 = j$ , откуда

$$J_j^2 = \hbar^2 j(j+1). \quad (20.19)$$

Определим значения постоянных  $C_1$  и  $C_2$  в выражениях (20.15), (20.16). Для этого применим условие нормировки

$$(\hat{J}^+ \psi_{j,m+1}, \hat{J}^+ \psi_{j,m+1}) = (C_1 \psi_{j,m+1}, C_1 \psi_{j,m+1}) = C_1^* C_1 = |C_1|^2.$$

С другой стороны,

$$\begin{aligned} (\hat{J}^+ \psi_{j,m}, \hat{J}^+ \psi_{j,m}) &= (\psi_{j,m}, \hat{J}^- \hat{J}^+ \psi_{j,m}) = \left( \psi_{j,m}, \left( \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar \hat{J}_z \right) \psi_{j,m} \right) = \\ &= \left( \psi_{j,m}, \left( \hbar^2 j(j+1) - (\hbar m)^2 - \hbar^2 m \right) \psi_{j,m} \right) = \left( \psi_{j,m}, \left( \hbar^2 j(j+1) - \hbar^2 m(m+1) \right) \psi_{j,m} \right) = \\ &= \hbar^2 \{ j(j+1) - m(m+1) \}. \end{aligned}$$

Сравнивая полученные выражения, делаем вывод, что

$$C_1 = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m+1)}, \quad (20.20)$$

$$C_2 = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m-1)}. \quad (20.21)$$

Согласно (20.15), (20.16), (20.20), (20.21):

$$\hat{J}^+ \psi_{j,m} = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m+1)}, \quad (20.22)$$

$$\hat{J}^- \psi_{j,m} = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m-1)}. \quad (20.23)$$

## § 21. Орбитальный и спиновый моменты. Спин как внутренняя степень свободы.

Состояние с заданным значением  $J_j^2$  вырождено с кратностью  $2j+1$  по значениям проекции момента  $J_z$ , т.е. при заданном значении  $J_j^2$  проекция момента может принимать  $(2j+1)$  отличающихся на единицу значений:  $-j \leq m \leq j$ . Поэтому  $m_2 - m_1 = 2j$  должно быть целым, откуда следует заключение о значениях квантового числа  $j$ : оно может быть как целым, так и полуцелым.

Это объясняется тем, что квантовый момент может быть связан как с пространственным движением частицы (орбитальный момент), так и с собственным внутренним моментом квантовой частицы, называемым спином.

Легко показать, что проекция орбитального момента частицы может быть только целой. Орбитальный момент импульса частицы  $\vec{L} = [\vec{r}, \vec{p}]$  достаточно хорошо изучен в классической механике. В квантовой механике проекция орбитального момента импульса в сферической системе координат имеет вид:

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (21.1)$$



Используя выражение (21.1) определим спектр значений проекции орбитального момента импульса  $\hat{L}_z$ . Для этого необходимо решить задачу на собственные значения и собственные функции оператора  $\hat{L}_z$ :

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

или

$$-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} = L_z \psi, \quad (21.2)$$

где  $\psi(\varphi)$  - непрерывная, однозначная, ограниченная функция.

Будем искать решение в виде

$$\psi = e^{\alpha \varphi}. \quad (21.3)$$

Подставляя (21.3) в выражение (21.2), определим значение постоянной  $\alpha$ :

$$\alpha = \frac{iL_z}{\hbar},$$

откуда волновая функция  $\psi(\varphi)$  примет вид

$$\psi = C e^{\frac{i}{\hbar} L_z \varphi},$$

где постоянную  $C$  определим из условия нормировки  $C^2 \int_0^{2\pi} e^{\frac{i}{\hbar} L_z \varphi} e^{-\frac{i}{\hbar} L_z \varphi} = 1$ :

$$C = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}.$$

Таким образом, волновая функция имеет вид:

$$\psi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\frac{i}{\hbar} L_z \varphi}. \quad (21.4)$$

Функция (21.4) должна удовлетворять условию

$$\psi(\varphi + 2\pi) = \psi(\varphi), \quad (21.5)$$

согласно условию однозначности функции. Подставляя (21.4) в (21.5), получаем

$$e^{\frac{i}{\hbar} L_z (\varphi + 2\pi)} = e^{\frac{i}{\hbar} L_z \varphi}$$

или

$$e^{\frac{i}{\hbar} L_z 2\pi} = 1.$$

Данное выражение имеет место при выполнении условия

$$L_z = \hbar m, \quad (21.6)$$

где  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm j$  - магнитное квантовое число.

Таким образом, целые значения  $j$  соответствуют орбитальному моменту, а полуцелые связаны с собственным механическим моментом частицы – спином.

Затруднительно представить механическую модель спина. Это внутренняя степень свободы квантовой частицы, которая не имеет классического аналога.

## § 22. Спин электрона. Матрицы Паули и их свойства.

Операторы спина обозначаются  $\hat{S} \{ \hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z \}$ . Все выражения, полученные в § 19, 20 для общего момента  $\hat{J}$  справедливы как для орбитального  $\hat{L}$ , так и для спинного момента  $\hat{S}$ . Поэтому, согласно общей теории момента,

$$\hat{S}_z \psi_{j,m} = \hbar m \psi_{j,m}; \quad (22.1)$$

$$\hat{S}^2 \psi_{j,m} = \hbar^2 j(j+1) \psi_{j,m}. \quad (22.2)$$

Спин может иметь как целые, так и полуцелые значения. В соответствие с этим выделяют два класса частиц: с целым спином – бозе-частицы и с полуцелым спином – ферми-частицы.

Рассмотрим элементарный случай, когда  $j = \frac{1}{2}$ :

$$S^2 = \hbar^2 j(j+1) = \frac{3}{4} \hbar^2. \quad (22.3)$$

И проекцию спина на произвольно выбранное направление, например на ось OZ:

$$S_z = \pm \frac{\hbar}{2}. \quad (22.4)$$

Т.к. операторы спина коммутируют с операторами координаты и импульса, то полный набор физических величин с учётом спина может быть представлен двумя комбинациями:

$$1) \ x, y, z, S_z, S^2,$$

$$2) \ p_x, p_y, p_z, S_z, S^2.$$

Представим спинные операторы и состояния системы в матричном виде (в  $S_z$  – представлении). Для этого сначала выберем базисные вектора. Т.к.  $\psi_{j,m}$  определяет состояние частицы с учётом спина, то введём следующие обозначения:

$$\begin{aligned}\psi_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}} &= \chi_1, \\ \psi_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} &= \chi_2.\end{aligned}\tag{22.5}$$

где  $\chi_1, \chi_2$  - ортонормированные вектора выбранного базиса. Любое состояние  $\psi$  можно записать с помощью этих базисных векторов:

$$\psi = c_1 \chi_1 + c_2 \chi_2,$$

где вектор  $\psi$  нормированный, т.е.  $1 = (\psi, \psi) = |c_1|^2 + |c_2|^2$ . В состоянии  $\psi$  при измерении

проекции спина на ось OZ мы получим значение  $S_z = \frac{\hbar}{2}$  с вероятностью  $w_1 = |c_1|^2$  и

$S_z = -\frac{\hbar}{2}$  с вероятностью  $w_2 = |c_2|^2$ . Таким образом, вектор  $\psi$  можно записать как

$$\psi = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}.$$

Найдём вид матрицы  $S_z$  в  $S_z$ -представлении.

$$S_z = \begin{pmatrix} S_{z11} & S_{z12} \\ S_{z21} & S_{z22} \end{pmatrix},$$

где элементы матрицы вычисляются следующим образом:

$$\begin{aligned}S_{z11} &= (\chi_1, \hat{S}_z \chi_1) = \frac{\hbar}{2}, \\ S_{z12} &= (\chi_1, \hat{S}_z \chi_2) = 0, \\ S_{z21} &= 0, \\ S_{z22} &= -\frac{\hbar}{2}.\end{aligned}$$

Откуда

$$\hat{S}_z = \begin{pmatrix} \frac{\hbar}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar}{2} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.\tag{22.6}$$

Для нахождения вида операторов  $\hat{S}_x$  и  $\hat{S}_y$  определим вид операторов  $\hat{S}^+$  и  $\hat{S}^-$ .

Согласно уравнению (20.22)

$$\hat{S}^+ \psi_{j,m} = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} \psi_{j,m+1},$$

$$\hat{S}^+ \chi_1 = \hat{S}^+ \psi_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}} = 0,$$

$$\hat{S}^+ \chi_2 = \hat{S}^+ \psi_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} = \hbar \psi_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}} = \hbar \chi_1.$$

Тогда

$$\begin{aligned} S_{11}^+ &= 0, \\ S_{12}^+ &= (\chi_1, \hat{S}^+ \chi_2) = \hbar, \\ S_{21}^+ &= 0, \\ S_{22}^+ &= 0, \end{aligned}$$

и матрица  $\hat{S}^+$  примет вид

$$\hat{S}^+ = \begin{pmatrix} 0 & \hbar \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (22.7)$$

Матрица  $\hat{S}^-$  получается из матрицы  $\hat{S}^+$  путём перестановки строк и столбцов матрицы (транспонирования матрицы  $\hat{S}^+$ ):

$$\hat{S}^- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (22.8)$$

Операторы  $\hat{S}^+$  и  $\hat{S}^-$  выражаются через операторы  $\hat{S}_x, \hat{S}_y$  следующим образом:

$$\begin{aligned} \hat{S}^+ &= \hat{S}_x + i\hat{S}_y, \\ \hat{S}^- &= \hat{S}_x - i\hat{S}_y. \end{aligned}$$

Откуда получаем вид операторов  $\hat{S}_x$  и  $\hat{S}_y$ :

$$\begin{aligned} \hat{S}_x &= \frac{1}{2}(\hat{S}^+ + \hat{S}^-), \\ \hat{S}_y &= \frac{1}{i2}(\hat{S}^+ - \hat{S}^-) = \frac{i}{2}(\hat{S}^- - \hat{S}^+), \end{aligned}$$

или

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (22.9)$$

$$\hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \quad (22.10)$$

Таким образом, для случая  $j = \frac{1}{2}$  спиновые матрицы являются двухрядными.

Принято записывать их в следующем виде:

$$\hat{\vec{S}} = \frac{\hbar}{2} \hat{\vec{\sigma}}, \quad (22.11)$$

где  $\hat{\vec{\sigma}}$  - матрицы Паули в  $S_z$ -представлении:

$$\begin{aligned}
\hat{\sigma}_x &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \\
\hat{\sigma}_y &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \\
\hat{\sigma}_z &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{22.12}$$

Матрицы Паули обладают следующими свойствами.

Свойство 1. Любая двухрядная матрица может быть представлена через матрицы Паули и единичную матрицу.

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} = \sum_i c_i \hat{\sigma}_i + c_0 I, \quad i = x, y, z. \tag{22.13}$$

Свойство 2. Собственные значения любой матрицы Паули есть  $\pm 1$ .

Найдём матричное представление собственных векторов матрицы Паули (например  $\hat{\sigma}_z$ )  $\varphi_1, \varphi_2$ .

С одной стороны,

$$\hat{\sigma}_z \varphi_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 \\ -c_2 \end{pmatrix},$$

с другой

$$\hat{\sigma}_z \varphi_1 = 1 \cdot \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}.$$

Откуда

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ -c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix},$$

$$c_2 = -c_2 = 0.$$

Таким образом,  $\varphi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ . Аналогичным образом находим  $\varphi_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ .

Аналогично определяются собственные вектора операторов  $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y$ .

Свойство 3.

$$\hat{\sigma}_x^2 = \hat{\sigma}_y^2 = \hat{\sigma}_z^2 = I \equiv 1. \tag{22.14}$$

Доказательство. Доказательство проведём для оператора  $\hat{\sigma}_z$ .

$$\hat{\sigma}_z^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = I \equiv 1.$$

Свойство 4.

$$[\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y] = 2i\hat{\sigma}_z. \quad (22.15)$$

Свойство 5.

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y + \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_x &= 0, \\ \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y &= i\hat{\sigma}_z. \end{aligned} \quad (22.16)$$

Доказательство. Следует из свойства 4.

С учётом спина волновая функция должна зависеть не только от пространственных переменных, но и от спиновых:  $\psi = \psi(x, y, z, S_z)$ .

Рассмотрим состояние электрона с учётом спина:

$$\begin{aligned} \psi_1 &= \chi_1 \varphi_1(x, y, z) = \begin{pmatrix} \varphi_1(x, y, z) \\ 0 \end{pmatrix}, \\ \psi_2 &= \chi_2 \varphi_2(x, y, z) = \begin{pmatrix} 0 \\ \varphi_2(x, y, z) \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Согласно принципу суперпозиции состояний, если система может находиться в состояниях  $\psi_1$  и  $\psi_2$ , то она может находиться и в состоянии

$$\psi = \chi_1 \varphi_1 + \chi_2 \varphi_2 = \begin{pmatrix} \varphi_1(x, y, z) \\ \varphi_2(x, y, z) \end{pmatrix}. \quad (22.17)$$

где  $\psi$  - нормированный вектор. Матрица (22.17) называется спинором.

### § 23. Сложение квантовых моментов.

Как правило, при анализе физических явлений приходится иметь дело со сложной системой, состоящей из нескольких подсистем. При этом возникает вопрос о правилах сложения квантовых моментов, которые существенно отличаются от сложения векторных классических величин. Эта проблема существует даже для отдельной частицы, имеющей собственный момент – спин. Полный момент в этом случае будет состоять из  $\vec{S}$  и  $\vec{L}$ :  $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ .

Пусть система состоит из двух подсистем с квантовыми моментами  $\vec{J}(1)$  и  $\vec{J}(2)$  соответственно. Тогда в силу аддитивности момента квантовый момент системы равен:

$$\begin{aligned} \hat{J} &= \hat{J}(1) + \hat{J}(2), \\ \hat{J}_z &= \hat{J}_z(1) + \hat{J}_z(2), \end{aligned}$$

где  $J_z(1) = \hbar m_1 (m_1 = j_1, \dots, -j_1)$ , аналогично  $J_z(2)$ . Также будем считать, что заданы величины:

$$\begin{aligned} J^2(1) &= \hbar^2 j_1(j_1 + 1); \\ J^2(2) &= \hbar^2 j_2(j_2 + 1), \end{aligned}$$

и пусть они не меняются в процессе взаимодействия. Тогда  $\hat{J}^2 = (\hat{J}(1) + \hat{J}(2))^2$ . Но с другой стороны,  $J^2 = \hbar^2 j(j+1)$ . Возникает вопрос: какие значения может принимать  $j$  при заданных квантовых числах  $j_1$  и  $j_2$ ? Прежде чем решать поставленную задачу, выберем систему базисных векторов.

Для подсистемы (1) можно одновременно задать  $J^2(1) = \hbar^2 j_1(j_1 + 1)$  и  $J_z(1) = \hbar m_1$ . Состояние подсистемы можно описать с помощью волновой функции  $\psi_{j_1, m_1}$ . Аналогично, для подсистемы (2):  $J^2(2), J_z(2), \psi_{j_2, m_2}$ .

Поскольку операторы моментов, относящихся к разным подсистемам, коммутируют друг с другом, то следующие величины одновременно измеримы и образуют полный набор:  $J^2(1), J_z(1), J^2(2), J_z(2)$ . Соответствующие им квантовые числа:  $j_1, m_1, j_2, m_2$ . Собственный вектор, характеризующий состояние всей системы, есть:  $\psi_{m_1, m_2}^{j_1, j_2} = \psi_{j_1, m_1} \cdot \psi_{j_2, m_2}$ . Число таких независимых состояний:  $N = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ . Таким образом, система базисных векторов  $\psi_{m_1, m_2}^{j_1, j_2}$  является полной, и любой вектор состояния может быть разложен следующим образом:

$$\psi = \sum C_{m_1, m_2}^{j_1, j_2} \psi_{j_1, m_1} \cdot \psi_{j_2, m_2}. \quad (23.1)$$

Существует и другая возможность выбора системы базисных векторов. Можно задать полный момент всей системы  $J^2$  и его проекцию  $J_z$ , так как

$$[\hat{J}^2, \hat{J}^2(1)] = [\hat{J}^2, \hat{J}^2(2)] = 0.$$

Таким образом, величины  $J^2(1), J^2(2), J_z, J^2$  образуют полный набор величин с соответствующими квантовыми числами  $j_1, j_2, m, j$ . Система базисных векторов  $\psi_{j, m}^{j_1, j_2}$  состоит из  $N = \sum_j (2j + 1)$  векторов. Любое состояние можно разложить по базисным векторам  $\psi_{j, m}^{j_1, j_2}$ .

Итак, существуют два набора базисных векторов, т.е. два способа задания состояния квантовой системы. Отметим особенности этих двух базисов. Из определения оператора полного момента  $\hat{J}_z = \hat{J}_z(1) + \hat{J}_z(2)$  следует, что если  $m_1$  и  $m_2$  заданы, то задана и проекция полного момента. Т.к.  $[\hat{J}_z, \hat{J}_z(1)] = [\hat{J}_z, \hat{J}_z(2)] = 0$ , то

$$\hbar m = \hbar m_1 + \hbar m_2;$$

$$m = m_1 + m_2.$$

Однако,  $[\hat{J}^2, \hat{J}_z(1)] \neq 0, [\hat{J}^2, \hat{J}_z(2)] \neq 0$ , т.е. нельзя одновременно задать  $J^2$  и  $J_z(1)$ ;  $J^2$  и  $J_z(2)$ , а значит  $j$  и  $m_1$ ,  $j$  и  $m_2$ . Эту наиболее важную особенность можно наглядно изобразить на векторной модели сложения моментов. Квантовые числа  $m_1$  и  $m_2$  нельзя фиксировать одновременно с  $j$ .

Любой из базисных векторов  $\psi_{j,m}^{j_1,j_2}$  можно разложить по полному набору  $\psi_{j_1,m_1}, \psi_{j_2,m_2}$ :

$$\psi_{j,m}^{j_1,j_2} = \sum_{\substack{m_1,m_2 \\ m=m_1+m_2}} C_{m_1,m_2}^{j,m} \psi_{j_1,m_1} \psi_{j_2,m_2}. \quad (23.2)$$

Коэффициенты разложения  $C_{m_1,m_2}^{j,m}$  называют коэффициентами Клебша-Гордона. Квадрат модуля  $|C_{m_1,m_2}^{j,m}|^2$  показывает вероятность измерения проекции  $m_1, m_2$  при заданных числах  $j, m$ .

Очевидно, что можно записать и обратное разложение:

$$\psi_{j_1,m_1} \psi_{j_2,m_2} = \sum_{\substack{j \\ m=m_1+m_2}} C_j^{m_1,m_2} \psi_{j,m}^{j_1,j_2}. \quad (23.3)$$

Коэффициенты  $C_j^{m_1,m_2}$  называются обратными коэффициентами Клебша-Гордона. Они взаимосвязаны с коэффициентами  $C_{m_1,m_2}^{j,m}$ .

Пусть  $j_1$  и  $j_2$  – фиксированные, т.е.  $J^2(1)$  и  $J^2(2)$  имеют определенные значения, которые не меняются в процессе взаимодействия.

Каковы же возможные значения  $j$  при фиксированных  $j_1$  и  $j_2$ ? Для ответа на этот вопрос рассмотрим следующую теорему.



Теорема: При заданных значениях квадратов моментов двух частей системы  $J^2(1)$ ,  $J^2(2)$ , определяемых квантовыми числами  $j_1$  и  $j_2$ , значение квантового числа  $j$ , определяющего квадрат полного момента  $J^2$ , принимает следующий ряд значений:

$$j = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \dots, j_1 - j_2 \quad (j_1 \geq j_2). \quad (23.4)$$

Доказательство: Для доказательства воспользуемся следующими свойствами:

- 1)  $m = m_1 + m_2$ ;
- 2)  $N = \sum_j (2j+1) = (2j_1+1)(2j_2+1)$ ;
- 3)  $j \geq m$ ;
- 4)  $\psi_{j_1, m_1} \psi_{j_2, m_2} = \sum_{\substack{j \\ m=m_1+m_2}} C_j^{m_1, m_2} \psi_{j, m}^{j_1, j_2}$ .

Будем считать для определенности, что  $j_1 > j_2$ . Пусть  $m_1 = j_1$  (поворот системы координат). Тогда  $\psi_{j_1, j_1} \psi_{j_2, m_2} = \sum_j C_j^{j_1, m_2} \psi_{j, m}^{j_1, j_2}$ , здесь  $m = m_1 + m_2 = j_1 + m_2$ . Мы предположили, что  $j \geq m$ , следовательно, мы можем положить:

$$j \geq j_1 + m_2 \Rightarrow j = j_1 + m_2.$$

Для нахождения возможных значений  $j$  будем перебирать различные значения  $m_2$ :  $m_2 = j_2, j_2 - 1, \dots, -j_2$ . Тогда  $j$  будет принимать следующий ряд значений:

$$j = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \dots, j_1 - j_2.$$

Докажем, что других значений  $j$  нет. Число базисных векторов  $N$ :

$$\begin{aligned} N &= \sum_{j=j_1-j_2}^{j=j_1+j_2} (2j+1) = \frac{2(j_1+j_2)+1+2(j_1-j_2)+1}{2} (2j_2+1) = \\ &= (2j_1+1)(2j_2+1). \end{aligned}$$

Т.е. других значений квантовое число  $j$  иметь не может. Теорема доказана.

В качестве простейшего примера на сложение квантовых моментов мы рассмотрим сложение двух спинов.

Пусть имеется квантовая система, состоящая из двух электронов. Квантовые числа, соответствующие спинам электронов:  $j_1 = j_2 = \frac{1}{2}$ . Обозначим спиновое состояние частицы с проекцией  $\frac{\hbar}{2}$  на ось  $Oz$  -  $\alpha_i$  ( $i=1,2$ ), а с проекцией  $-\frac{\hbar}{2}$  -  $\beta_i$  ( $i=1,2$ ). Таким образом, получим всего четыре независимых спиновых состояния с определенной

проекцией  $S_z$  каждого спина:  $\alpha_1\alpha_2$ ;  $\alpha_1\beta_1$ ;  $\alpha_2\beta_1$ ;  $\beta_1\beta_2$ . Любое состояние квантовой системы из двух электронов может быть представлено как суперпозиция четырех базисных векторов.

Теперь рассмотрим состояние  $\psi_{j,m}$ , где  $j$  - суммарный спиновый момент,  $m$  - проекция полного момента. По правилу сложения имеем:

$$j = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \dots, j_1 - j_2.$$

Отсюда следует, что  $j = 1, 0$ .

При  $j = 0$ ,  $m = 0$  возможно только одно состояние системы  $\psi_{0,0}$ . Такое состояние называется синглетным.

При  $j = 1$ ,  $m = 1, 0, -1$  возможны три состояния:  $\psi_{1,1}$ ,  $\psi_{1,0}$ ,  $\psi_{1,-1}$ . Такое состояние системы называется триплетным. Таким образом, любое состояние системы можно выразить через четыре этих вектора.

Теперь свяжем между собой два базисных набора, т.е. найдем коэффициенты Клебша-Гордона. Т.к.  $m = m_1 + m_2$  и  $m = 1$ , то можно сделать вывод, что  $m_1 = m_2 = \frac{1}{2}$ , т.е.

$\psi_{1,1} = \alpha_1\alpha_2$ . Аналогично показывается, что  $\psi_{1,-1} = \beta_1\beta_2$ .

Построим теперь  $\psi_{1,0}$ :

$$\hat{J}^+ \psi_{1,-1} = \hbar \sqrt{1(1+1)+1(1-1)} \psi_{1,0} = \hbar \sqrt{2} \psi_{1,0}.$$

С другой стороны,  $\hat{J}^+ = \hat{S}^+(1) + \hat{S}^+(2)$ . Подействуем оператором  $\hat{J}^+$  на вектор  $\psi_{1,-1}$ :

$$\hat{J}^+ \psi_{1,-1} = \hat{J}^+ \beta_1\beta_2 = (\hat{S}^+(1) + \hat{S}^+(2)) \beta_1\beta_2 = \hbar(\alpha_1\beta_2 + \beta_1\alpha_2),$$

где  $\hat{S}^+(1)\beta_1 = \hbar\alpha_1$ ;  $\hat{S}^+(2)\beta_2 = \hbar\alpha_2$ .

Приравниваем эти выражения и получаем:

$$\psi_{1,0} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_1\beta_2 + \beta_1\alpha_2)$$

Остается построить еще синглетное состояние  $\psi_{0,0}$ :

$$m = 0 \Rightarrow \begin{cases} m_1 = \frac{1}{2}, m_2 = -\frac{1}{2} \rightarrow \alpha_1\beta_2 \\ m_1 = -\frac{1}{2}, m_2 = \frac{1}{2} \rightarrow \beta_1\alpha_2 \end{cases}.$$

Таким образом,  $\psi_{0,0} = c_1\alpha_1\beta_2 + c_2\beta_1\alpha_2$ . Векторы  $\psi_{1,0}$  и  $\psi_{0,0}$  нормированные, поэтому  $(\psi_{1,0}; \psi_{0,0}) = 0$ .

$$(\psi_{1,0}; \psi_{0,0}) = \left( \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_1\beta_2 + \alpha_2\beta_1); (c_1\alpha_1\beta_2 + c_2\beta_1\alpha_2) \right) = \frac{1}{\sqrt{2}}(c_1 + c_2) = 0,$$

т.к. векторы  $\alpha_i, \beta_i$  тоже нормированные вектора. Следовательно,  $c_1 + c_2 = 0 \Rightarrow c_1 = -c_2 = c = \frac{1}{\sqrt{2}}$ . Окончательно получаем, что

$$\psi_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_1\beta_2 - \beta_1\alpha_2).$$

На основе полученных формул можно сделать вывод: триплетное состояние симметрично относительно перестановки спинов, а синглетное состояние антисимметрично.

## § 24. Уравнение Паули. Собственный магнитный момент электрона.

Основным уравнением нерелятивистской квантовой механики является уравнение Шредингера, описывающее движение нерелятивистской частицы без учета спина:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \psi(\vec{r}, t),$$

где  $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\vec{r})$  - оператор Гамильтона. Теория Шредингера исходила из предположения, что электрон обладает лишь степенями свободы, которые соответствуют движению материальной точки в пространстве координат  $x, y, z$ .

Введение же новой степени свободы, связанной со спином, дает новые возможности для перехода от величин классической механики к квантовым операторам и позволяет построить оператор

$$(\vec{\sigma}, \vec{p}) = \sigma_x p_x + \sigma_y p_y + \sigma_z p_z, \quad (24.1)$$

где  $\sigma_i (i = x, y, z)$  - матрицы Паули, а  $\vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla}$  - импульс частицы. Оператор (24.1) может быть использован при построении оператора энергии.

Произвольное состояние электрона при учете спина записывается в виде двухрядной матрицы

$$\psi = \begin{pmatrix} \varphi_1(\vec{r}, t) \\ \varphi_2(\vec{r}, t) \end{pmatrix}.$$

Вследствие этого и гамильтониан  $\hat{H}$  тоже должен быть двухрядной матрицей и, согласно свойствам матриц Паули, может быть представлен через матрицы Паули  $\sigma_i$  и единичную матрицу  $I$ .

Гамильтониан не должен зависеть от направлений, т.е. пространственные переменные должны входить в гамильтониан равноправным образом и в то же время он должен включать в себя матрицы Паули  $\hat{\sigma}$ . Таким образом, из соображений размерности можно положить, что гамильтониан свободной частицы с учетом спина имеет вид:

$$\hat{H} = \frac{(\hat{\vec{p}}, \hat{\vec{\sigma}})^2}{2m}. \quad (24.2)$$

Используя свойства матриц  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$

$$\begin{aligned} \sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1, \\ \sigma_x \sigma_y + \sigma_y \sigma_x = 0 \end{aligned}$$

и коммутативность операторов  $p_x, p_y, p_z$

$$[p_x, p_y] = [p_y, p_z] = [p_z, p_x] = 0,$$

вычислим квадрат скалярного произведения  $(\hat{\vec{\sigma}}, \hat{\vec{p}})^2$ :

$$(\hat{\vec{\sigma}}, \hat{\vec{p}})^2 = (\sigma_x p_x + \sigma_y p_y + \sigma_z p_z)^2 = \hat{\vec{p}}^2.$$

Откуда

$$\hat{H} = \frac{(\hat{\vec{\sigma}}, \hat{\vec{p}})^2}{2m} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}.$$

Как и следовало ожидать в отсутствие внешних полей наличие спина никоим образом не проявляется, и введение оператора, определяемого формулой (24.1), здесь ничего не вносит.

Иначе обстоит дело при наличии магнитного поля, когда классическая функция Гамильтона электрона в электромагнитном поле с векторным потенциалом  $\vec{A}$  и скалярным потенциалом  $A_0$  имеет вид:

$$H = \frac{1}{2m} \left( \vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 - eA_0 = \frac{1}{2m} \vec{\pi}^2 - eA_0.$$

Согласно правилам квантования

$$\begin{aligned} H &\rightarrow \hat{H}; \\ \vec{\pi} &\rightarrow \hat{\vec{\pi}}; \end{aligned}$$

и учитывая наличие спина у электрона

$$\hat{\vec{\pi}} \rightarrow \hat{\vec{\pi}} \hat{\vec{\sigma}},$$

оператор Гамильтона примет вид:

$$\hat{H} = \frac{(\hat{\vec{\pi}}, \hat{\vec{\sigma}})^2}{2m} - eA_0. \quad (24.3)$$

Рассмотрим квадрат скалярного произведения операторов  $\hat{\vec{\pi}}$  и  $\hat{\vec{\sigma}}$ :

$$(\hat{\vec{\pi}}, \hat{\vec{\sigma}})^2 = (\pi_x \sigma_x + \pi_y \sigma_y + \pi_z \sigma_z)^2.$$

Используя свойства матриц Паули, получим

$$(\hat{\vec{\pi}}, \hat{\vec{\sigma}})^2 = \hat{\pi}^2 + \sigma_x \sigma_y [\pi_x, \pi_y] + \sigma_y \sigma_z [\pi_y, \pi_z] + \sigma_z \sigma_x [\pi_z, \pi_x].$$

Учитывая выражения, справедливые для  $\sigma_i$  ( $i = x, y, z$ )

$$\begin{aligned} \sigma_x \sigma_y &= i\sigma_z, \\ \sigma_y \sigma_z &= i\sigma_x, \\ \sigma_z \sigma_x &= i\sigma_y, \end{aligned}$$

квадрат скалярного произведения примет вид:

$$(\hat{\vec{\pi}}, \hat{\vec{\sigma}})^2 = \hat{\pi}^2 + i\sigma_z [\pi_x, \pi_y] + i\sigma_x [\pi_y, \pi_z] + i\sigma_y [\pi_z, \pi_x]. \quad (24.4)$$

В данном случае операторы  $\pi_x, \pi_y, \pi_z$  не коммутативны, а удовлетворяют перестановочным соотношениям:

$$\begin{cases} [\pi_x, \pi_y] = -i\hbar \frac{e}{c} \left( \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right) = -i\hbar \frac{e}{c} H_z, \\ [\pi_y, \pi_z] = -i\hbar \frac{e}{c} \left( \frac{\partial A_z}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial z} \right) = -i\hbar \frac{e}{c} H_x, \\ [\pi_z, \pi_x] = -i\hbar \frac{e}{c} \left( \frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x} \right) = -i\hbar \frac{e}{c} H_y, \end{cases} \quad (24.5)$$

где  $H_x, H_y, H_z$  - составляющие магнитного поля.

Оператор Гамильтона (24.3) с учетом (24.4), (24.5) примет вид:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\pi}^2}{2m} - \frac{e\hbar}{2mc} (\vec{\sigma}, \vec{H}) - eA_0 \quad (24.6)$$

или

$$\hat{H} = \frac{\hat{\pi}^2}{2m} - \mu^0 (\vec{\sigma}, \vec{H}) - eA_0, \quad (24.7)$$

где постоянная  $\mu^0 = \frac{e\hbar}{2mc}$  есть магнитный момент электрона. Таким образом, наличие спина у электрона влечет за собой наличие собственного магнитного момента электрона.

Определив выражение оператора Гамильтона (24.7), запишем волновое уравнение, называемое уравнением Паули, которое описывает состояние электрона в магнитном поле без поправки на теорию относительности:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left\{ \frac{1}{2m} \left( \vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 - \mu^0 (\vec{\sigma}, \vec{H}) - eA_0 \right\} \psi. \quad (24.8)$$

## § 25. Спин электрона и релятивистская теория. Уравнение Дирака.

Теории Шредингера и Паули носят нерелятивистский характер. Дирак в 1928 году обобщил уравнение Паули на теорию относительности и получил релятивистски инвариантное уравнение, описывающее движение электрона  $\left(s = \frac{1}{2}\right)$  в магнитном поле.

Рассмотрим сначала уравнение Дирака для свободного электрона (в отсутствие внешних полей). В этом случае классическое выражение функции Гамильтона в теории относительности имеет вид:

$$H_{кл.} = \sqrt{c^2 p^2 + (mc^2)^2}, \quad (25.1)$$

где  $\vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla}$ . Согласно правилам квантования

$$\begin{aligned} H &\rightarrow \hat{H}; \\ \vec{p} &\rightarrow \hat{\vec{p}}; \end{aligned}$$

и с учетом спина электрона

$$\hat{\vec{p}} = \hat{\vec{\sigma}} \hat{\vec{p}}$$

запишем

$$\hat{H} = c \sqrt{(\hat{\vec{\sigma}} \hat{\vec{p}})^2 + (mc)^2}. \quad (25.2)$$

Для нахождения явного вида оператора Гамильтона  $\hat{H}$  необходимо извлечь корень  $\sqrt{(\hat{\vec{\sigma}} \hat{\vec{p}})^2 + (mc)^2}$ . Для этого введем матрицы  $\beta_1, \beta_2, \beta_3$ , аналогичные матрицам Паули, такие, что

$$\begin{aligned}\beta_1^2 = \beta_2^2 = \beta_3^2 &= I, \\ \beta_1\beta_3 + \beta_3\beta_1 &= 0.\end{aligned}\quad (25.3)$$

Нетрудно показать, используя свойства (25.3), что

$$\sqrt{\hat{A}^2 + \hat{B}^2} = \hat{A}\beta_1 + \hat{B}\beta_3, \quad (25.4)$$

при условии, что  $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ . Откуда с учетом (25.4) оператор Гамильтона (25.2) примет вид:

$$\hat{H} = c\left(\left(\hat{\vec{\sigma}}\hat{\vec{p}}\right)\beta_1 + (mc)\beta_3\right). \quad (25.5)$$

Введя обозначение  $\vec{\alpha} = \vec{\sigma}\beta_1$ , где  $\alpha$  - так называемые матрицы Дирака, и выбирая на роль  $\beta_1$  и  $\beta_3$  матрицы:

$$\begin{aligned}\beta_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \\ \beta_3 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},\end{aligned}$$

запишем уравнение Дирака для свободного электрона

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \{c(\vec{\alpha}\vec{p}) + mc^2\beta\}\psi, \quad (25.6)$$

$$\text{где } \vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \beta = \beta_3 I = \begin{pmatrix} \beta_3 & 0 \\ 0 & \beta_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \text{ а } \psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}.$$

Таким образом, уравнение Дирака – это фактически система четырех уравнений для  $(\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4)$  от  $x, y, z, t$ .

Огромным успехом теории электрона Дирака стало теоретическое предсказание существования позитрона, который вскоре после этого и был обнаружен.

Обобщим полученное уравнение (25.6) на случай электромагнитного поля.

Очевидно, что для этого достаточно произвести замену  $\vec{p} \rightarrow \vec{\pi} = \vec{p} + \frac{e}{c}\vec{A}$  и прибавить потенциальную энергию  $(-eA_0)$ :

$$-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \{c(\vec{\alpha}\vec{\pi}) + mc^2\beta - eA_0\}\psi. \quad (25.7)$$

Уравнение Дирака – это релятивистски инвариантное уравнение для частицы со спином  $s = \frac{1}{2}$ , т.е. для ферми-частицы.



## ГЛАВА VIII. Движение квантовых частиц в сферически симметричном потенциале. Атом водорода.

### §25. Движение частиц в сферически симметричном потенциале. Интегралы движения. Полный набор физических величин и их общие собственные функции.

Рассмотрим квантовые системы, обладающие сферической симметрией. К данному классу относятся наиболее часто встречающиеся задачи квантовой физики:

- 1) задачи по определению уровней энергии связанных состояний атомов, ионов и других атомоподобных систем;
- 2) задачи о рассеянии квантовых частиц.

Квантовая система в нерелятивистском приближении будет обладать сферической симметрией, если может быть выбрана система координат, в которой гамильтониан  $H = \sum_j \frac{\vec{p}_j^2}{2m} + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$  не меняется при вращении.

Для наглядности рассмотрим частный случай – отдельную частицу в сферически симметричном потенциале без учёта спина  $s$ . Гамильтониан частицы имеет вид:

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}), V(\vec{r}) = V(r), r = |\vec{r}|. \quad (25.1)$$

В случае сферически-симметричного поля, когда потенциал поля зависит только от  $r$  (а не от  $\theta$  и  $\phi$ ), вращение относительно любой оси оставляет неизменным гамильтониан  $H$ . Отсюда следует и сохранение момента количества движения и всех его проекций. Таким образом,  $\vec{L}^2, L_z$  являются интегралами движения.

$$\begin{aligned} [H, L^2] &= 0, \\ [H, L_z] &= 0, \\ [L^2, L_z] &= 0. \end{aligned} \quad (25.2)$$

Из соотношений (25.2) следует, что величины  $E, L^2, L_z, s_z$  – одновременно измеримы, т.е. составляют полный набор величин, задание которого определяет состояние квантовой системы. Иначе говоря, состояние квантовой системы однозначно задаётся квантовыми числами  $n, l, m, s_z$ .

Согласно рассмотренной выше теореме, если операторы коммутируют, то они имеют общую полную систему собственных функций. Общие собственные функции операторов  $\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_z$  одновременно удовлетворяют уравнениям:

$$\hat{H}\psi = \varepsilon\psi, \quad (25.3)$$

$$\hat{L}^2\psi = \hbar^2 l(l+1)\psi, \quad (25.4)$$

$$\hat{L}_z\psi = \hbar m\psi. \quad (25.5)$$

Для нахождения спектра значений энергии  $\varepsilon$ , определяемого уравнением (25.3), следует отыскать функции, которые являются одновременно собственными функциями операторов  $\hat{L}^2$  и  $\hat{L}_z$ . Для определения спектра значений энергии квантовой частицы в сферическом потенциале  $V(\vec{r})=V(r)$  будем искать решение (25.3) в виде:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi), \quad (25.6)$$

Где  $R_{n,l}(r)$  -радиальная, а  $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$  - сферическая (шаровая) волновые функции.

Так как  $\hat{L}^2$  и  $\hat{L}_z$  зависят только от угловых переменных  $\theta$  и  $\varphi$ , то функции  $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$  удовлетворяют уравнениям:

$$\hat{L}^2 Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{l,m}(\theta, \varphi), \quad (25.7)$$

$$\hat{L}_z Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \hbar m Y_{l,m}(\theta, \varphi). \quad (25.8)$$

Подставляя (25.1) и (25.6) в (25.3) получим следующее радиальное уравнение Шредингера для квантовой частицы в сферически-симметричном потенциале:

$$\left( \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(r) \right) R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \varepsilon R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi).$$

Выразим гамильтониан системы  $\hat{H}$  в сферической системе координат.

Поскольку  $\hat{p}^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$ , то для этого достаточно выразить оператор Лапласа в сферической системе координат. Мы же воспользуемся для этого принципом соответствия. Для этого запишем функцию Гамильтона в сферической системе координат, а затем перейдём к операторному равенству.

$$\vec{L} = [\vec{r} \times \vec{p}].$$

Используя формулу  $[A \times B]^2 = A^2 B^2 - (\vec{A} \vec{B})^2$  получим:

$$L^2 = r^2 p^2 - (\vec{r} \vec{p})^2 = p^2 r^2 - p_r^2 r^2,$$

где

$$p_r = \frac{\vec{p} \vec{r}}{r} = \frac{1}{r} \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial r} \right) r.$$

Откуда  $\bar{p}^2 = p_r^2 + \frac{L^2}{r^2}.$

Таким образом,  $H_{кл}$  в сферической системе координат выглядит следующим образом:

$$H = \frac{1}{2m} p_r^2 + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r).$$

Откуда по принципу соответствия оператор Гамильтона имеет вид:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}_r^2 + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} + V(r),$$

Или

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r) \quad (25.9)$$

Используя явный вид оператора  $\hat{H}$  в сферической системе координат (25.9) и подставляя решение  $\psi$  в виде (25.6) получим стационарное уравнение Шредингера:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r) \right\} R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \varepsilon R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi). \quad (25.10)$$

## **§26. Движение электрона в кулоновском потенциале. Стационарное уравнение Шредингера для радиальной составляющей волновой функции.**

### **Асимптотика уравнения на малых и больших расстояниях.**

Рассмотрим движение электрона в кулоновском потенциале (например, электрон в атоме водорода или водородоподобных атомах). Для полного описания атома водорода следовало бы учесть: во-первых, движение обеих частиц – как протона, так и электрона; а во вторых, наличие спина у электрона. Мы используем два приближения:

- 1) будем считать протон очень тяжёлым (настолько, что он как бы закреплён в центре атома);
- 2) будем рассматривать электрон как частицу без спина.

Небольшие магнитные эффекты появляются из-за того, что протон с точки зрения электрона есть циркулирующий по кругу заряд, который создаёт магнитное поле. Энергия электрона в этом поле будет различна, в зависимости от направления спина. В результате этого энергия атома будет немного сдвинута относительно ниже вычисленной величины. Мы пренебрежём этим слабым сдвигом энергии и вообразим, что электрон подобен волчку, движущемуся в пространстве по кругу и сохраняющему всё время одинаковое направление спина.

Поскольку речь идёт о свободном атоме в пространстве, полный момент количества движения будет сохраняться. В нашем приближении будет считаться, что момент количества движения, вызываемый спином электрона считается неизменным, так что оставшийся момент количества движения атома («орбитальный» момент количества движения) также не будет изменяться. В очень хорошем приближении можно считать, что электрон движется в атоме водорода как частица без спина – его орбитальный момент количества движения постоянен.

Для решения задачи воспользуемся уже полученными уравнениями, описывающими движение частиц в сферически-симметричном потенциале.

Запишем стационарное уравнение Шредингера для радиальной составляющей волновой функции. Для этого перепишем уравнение (25.10) в виде:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right\} R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \varepsilon R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi)$$

Откуда сократив на  $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$  и домножив левую и правую на  $r$  получим:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right\} (rR_{n,l}(r)) = E(rR_{n,l}(r)) \quad (26.1)$$

Будем искать решение этого уравнения в виде

$$\chi(r) = rR(r). \quad (26.2)$$

После введения безразмерной переменной

$$\rho = \frac{r}{a}, \quad (26.3)$$

где  $a$  - радиус первой боровской орбиты, получим стационарное уравнение

Шредингера для частицы в кулоновском потенциале  $\left( V = -\frac{ze^2}{r} \right)$ :

$$\left\{ -\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} - \left( \frac{ma^2 e^2}{\hbar^2 a^2} \right) \frac{2z}{\rho} \right\} \chi = \frac{E}{E_0} \chi, \quad (26.4)$$

где

$$\begin{aligned} E_0 &= \frac{\hbar^2}{2ma^2}, \\ \frac{ma^2}{\hbar^2} \frac{l^2}{a} &= 1. \end{aligned} \quad (26.5)$$

Из уравнения (26.4) получим  $a = \frac{\hbar^2}{2ml^2}$  и подставив в (26.5) имеем:

$$E_0 = \frac{me^4}{2\hbar^2}.$$

Перепишем уравнение (26.4) в следующем виде

$$\left\{ -\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} - \frac{2z}{\rho} \right\} \chi = \varepsilon \chi, \quad (26.6)$$

где

$$\varepsilon = -\alpha^2 < 0, \quad (26.7)$$

т.к. рассматриваем связанные состояния.

Рассмотрим асимптотику уравнения (26.6) на больших и малых расстояниях, т.е при: а)  $\rho \rightarrow \infty$ ;

б)  $\rho \rightarrow 0$ .

а)  $\rho \rightarrow \infty$ .

При этом условии уравнение (26.6) с учётом (26.7) примет вид:

$$-\frac{d^2}{d\rho^2} \chi = -\alpha^2 \chi.$$

Данному уравнению удовлетворяет функция  $\chi(\rho) \propto e^{-\alpha\rho}$ , которая стремится к нулю, при  $\rho \rightarrow \infty$ . Таким образом,  $\chi(\rho)$  можно записать в следующем виде

$$\chi(\rho) = F(\rho) e^{-\alpha\rho}. \quad (26.8)$$

Задача теперь просто свелась к отысканию подходящей функции  $F(\rho)$ .

б)  $\rho \rightarrow 0$ .

При данном условии уравнение (26.6) примет вид:

$$\left\{ -\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right\} \chi = 0. \quad (26.9)$$

Данному уравнению удовлетворяет функция

$$\chi \propto \rho^{\nu}. \quad (26.10)$$

Из уравнений (26.9) и (26.10) получим уравнение

$$-\nu(\nu-1) + l(l+1) = 0,$$

$$1) \nu = -l,$$

которое имеет два корня:

$$2) \nu = l + 1.$$

Рассмотрим последовательно оба варианта.

1)  $\nu = -l$ .

$$\chi(\rho) = \rho F(\rho) \propto \rho^{\nu} = \rho^{-l},$$

откуда  $R(\rho) \propto \frac{1}{\rho^{l+1}}$ , т.е.  $R(\rho) \rightarrow \infty$ , при  $\rho \rightarrow 0$ . Вследствие чего (из соображений ограниченности волновой функции) данное решение отбрасывается.

3)  $\nu = l + 1$ .

$$\begin{aligned} \chi(\rho) &= \rho R(\rho) \propto \rho^{\nu} = \rho^{l+1}, \\ R(\rho) &\propto \rho^l. \end{aligned}$$

Таким образом,

$$R(\rho) \propto \rho^{l+1}. \quad (26.11)$$

Из равенств (26.8) и (26.11) получим следующее соотношение для  $F(\rho)$ :

$$F(\rho) \propto \rho^{l+1}. \quad (26.12)$$

## §27. Спектр энергии. Радиальные волновые функции. Полиномы Лаггера.

Для нахождения спектра энергии электрона в кулоновском потенциале необходимо найти собственные значения оператора  $\hat{H}$ , т.е. решить стационарное уравнение Шредингера (26.6). Как было выяснено в §26 решение уравнения (26.6) удовлетворяет соотношения (26.8):  $\chi(\rho) = F(\rho)e^{-\alpha\rho}$ , где

$$F(\rho) \propto \rho^{l+1} \quad (26.12)$$

Подставляя уравнение (26.8) в (26.6) получим уравнение для функции  $F(\rho)$ :

$$\left(-\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)F(\rho) + 2\left(\alpha\frac{d}{d\rho} - \frac{z}{\rho}\right)F(\rho) = 0. \quad (27.1)$$

Будем искать решение уравнения (27.1) в виде степенного ряда:

$$F(\rho) = \rho^{l+1} (\beta_0 + \beta_1 \rho + \beta_2 \rho^2 + \dots) = \rho^{l+1} \sum_{\nu=0} \beta_{\nu} \rho^{\nu} = \sum_{\nu=0} \beta_{\nu} \rho^{\nu+l+1}. \quad (27.2)$$

Подставляя (27.2) в (27.1) путём не сложных вычислений получим соотношение:

$$\sum_{\nu=0} \beta_{\nu} \rho^{\nu+l-1} \{l(l+1) - (l+\nu)(l+\nu+1)\} + 2 \sum_{\nu=0} \beta_{\nu} \rho^{l+\nu} \{\alpha(l+\nu+1) - z\} = 0.$$

или, заменяя в первом слагаемом  $\nu \rightarrow \nu' + 1$  и перенося второе слагаемое в правую часть, получим:

$$\sum_{\nu'} \beta_{\nu'+1} \rho^{l+\nu'} \{l(l+1) - (l+\nu'+1)(l+\nu'+2)\} = \sum_{\nu} \beta_{\nu} \rho^{l+\nu} \{2z - 2\alpha(l+\nu+1)\}. \quad (27.3)$$

Считая  $\nu = \nu'$  приравняем коэффициенты при одинаковых степенях  $\rho^{l+\nu}$ . Откуда получим рекуррентное соотношение для коэффициентов  $\beta_{\nu}$ :

$$\beta_{\nu+1} = \frac{2\{z - \alpha(l+\nu+1)\}}{l(l+1) - (l+\nu+1)(l+\nu+2)} \beta_{\nu}. \quad (27.4)$$

Исследуем соотношение (27.4) при  $\nu \rightarrow \infty$ . Получим, что  $\beta_{\nu+1} \approx \frac{2\alpha}{\nu} \beta_{\nu}$ .

Откуда  $\beta_{\nu} \approx \frac{1}{\nu!} (2\alpha)^{\nu}$  и  $F(\rho) \approx \sum_{\nu} \frac{(2\alpha)^{\nu}}{\nu!} \rho^{\nu} \approx e^{2\alpha\rho}$ . Тогда, согласно соотношению

(26.8)  $\chi(\rho) \approx e^{-\alpha\rho} e^{2\alpha\rho} \approx e^{\alpha\rho} \rightarrow \infty$ . Следовательно, ряд (27.2) должен быть конечен, т.е.

$$\beta_{\nu} \neq 0, \beta_{\nu+1} = 0. \quad (27.5)$$

Тогда из рекуррентного соотношения (27.4) получим соотношение:

$$z = \alpha(l + \nu + 1),$$

$$\alpha = \frac{z}{l + \nu + 1} = \frac{z}{n}, \quad (27.6)$$

,где

$$n = l + \nu + 1, \quad (27.7)$$

$l$  - орбитальное квантовое число,  $\nu$  - радиальное квантовое число.

Из соотношения (26.7) с учётом (27.6) и (27.7) имеем:

$$\varepsilon_n = -\frac{z^2}{n^2},$$

$$E_n = \varepsilon_n E_0 = -\frac{me^4 z^2}{2\hbar^2 n^2}. \quad (27.8)$$

Уравнение (27.8) определяет спектр значений энергии электрона в атоме водорода (при  $z = 1$ ). Таким образом, уравнение Шредингера (26.6) имеет непрерывные, однозначные и конечные решения лишь при дискретных значениях энергии, т.е. энергия электрона в атоме водорода квантуется.

Отметим, что знак «минус» в (27.8) означает лишь, что в качестве нуля энергии была выбрана энергия электрона, расположенного вдалеке от протона.

Для атома водорода ( $z = 1$ ) радиальная волновая функция имеет вид:

$$R_{n,l}(\rho) = \rho^l e^{-\rho/n} L_{n+l}^{2l+1}(\rho), \quad (27.9)$$

где  $L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$  - полиномы Лаггера, которые имеют вид:

$$\begin{aligned} L_{n'}^{m'} &= \frac{d^{m'}}{d\rho^{m'}} L_{n'}(\rho), \\ L_{n'}(\rho) &= e^\rho \frac{d^n}{d\rho^n} (e^{-\rho} \rho^n), \\ m' &= 2l + 1, \\ n' &= n + l. \end{aligned} \quad (27.10)$$

Простейшие радиальные волновые функции  $R_{n,l}(r)$  имеют следующий вид.

$$n=1, \quad R_{1,0}(r) = 2e^{-\rho}. \quad (27.11)$$

Таким образом, если атом водорода находится в своём основном состоянии, то амплитуда того, что электрон будет обнаружен в каком-то месте, экспоненциально падает с расстоянием от протона. Вероятнее всего встретить его вплотную близ протона на расстоянии одного боровского радиуса  $a$ .

При более высоком уровне  $n=2$ , получаем:

$$\begin{aligned} n=2, \quad R_{2,0}(\rho) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 - \frac{\rho}{2}\right) e^{-\rho/2} \\ R_{2,1}(\rho) &= \frac{1}{2\sqrt{6}} \rho e^{-\rho/2}. \end{aligned} \quad (27.12)$$

## §28. Сферические гармоники и их свойства.

### 28.1 Шаровые функции.

Общая теория момента одинаково применима как для собственного момента (спина), так и для орбитального и, в силу аддитивности момента, полного момента всей системы.



Сферические гармоники (шаровые функции) есть собственные функции в сферической системе координат  $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ . Найдём их угловую зависимость, используя общую теорию момента. Для этого воспользуемся явным выражением  $\hat{L}_z$  и  $\hat{L}^{\pm}$  в сферической системе координат:

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad (28.1)$$

$$\hat{L}^{\pm} = \hbar e^{\pm i\varphi} \left( \pm \frac{\partial}{\partial \varphi} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) = L_x \mp iL_y. \quad (28.2)$$

Известно, что операторы проекции момента количества движения  $\hat{L}_z$  и квадрата орбитального момента  $\hat{L}^2$  одновременно измеримы, т.е.  $[\hat{L}_z, \hat{L}^2] = 0$ . Следовательно, они обладают общей системой собственных векторов, т.е.

$$\hat{L}_z Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \hbar m Y_{l,m}(\theta, \varphi), \quad (28.3)$$

$$\hat{L}^2 Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{l,m}(\theta, \varphi). \quad (28.4)$$

Из уравнений (28.1) и (28.3) получим уравнение:

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \hbar m Y_{l,m}(\theta, \varphi),$$

решение которого

$$Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \Theta_{l,m}(\theta). \quad (28.5)$$

В соответствие с условиями, накладываемыми на волновую функцию, функция  $\psi(\vec{r}) = \psi(r, \theta, \varphi)$  должна быть однозначной. Это возможно в том случае, если она периодична по  $\varphi$  с периодом  $2\pi$ , т.е.  $\psi(r, \theta, \varphi + 2\pi) = \psi(r, \theta, \varphi)$ . Учитывая уравнение (28.5) имеем:  $e^{im2\pi} = 1$ . Этому условию удовлетворяют лишь целые значения  $m$ :  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$ . А т.к.  $l = m_{\max}$ , то  $l$  тоже принимает лишь целые значения:  $l = 0, 1, 2, \dots$ .

## 28.2 Свойства сферических гармоник и их явные выражения.

Остановимся на свойствах шаровых функций, следующих из общей теории момента.

1) Сферические гармоники  $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$  являются общими собственными функциями операторов  $\hat{L}_z$  и  $\hat{L}^2$

$$\hat{L}^2 Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{l,m}(\theta, \varphi), \quad l=0,1,2,\dots$$

$$\hat{L}_z Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \hbar m Y_{l,m}(\theta, \varphi), \quad m=0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l.$$

2) Сферические гармоники удовлетворяют следующему условию ортонормировки:

$$\int d\Omega Y_{l,m}^*(\theta, \varphi) Y_{l_1, m_1}(\theta, \varphi) = \delta_{l, l_1} \delta_{m, m_1}, \quad (28.6)$$

где  $\delta_{l, l_1}, \delta_{m, m_1}$  - символы Кронекера, которые определяются следующим соотношением

$$\delta_{l, l_1} = \begin{cases} 0, & l \neq l_1, \\ 1, & l = l_1. \end{cases}$$

а  $d\Omega$  - элемент объёма.

Иначе условие (28.6) можно записать в виде:

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin \theta Y_{l,m}^*(\theta, \varphi) Y_{l_1, m_1}(\theta, \varphi) = \delta_{l, l_1} \delta_{m, m_1}.$$

Условие нормировки с учётом (28.5) примет вид:

$$\int d\Omega \left| Y_{l,m}(\theta, \varphi) \right|^2 = \int_0^\pi d\theta \sin \theta \left| \Theta_{l,m}(\theta) \right|^2 = 1.$$

3) Из общей теории момента следует:

$$\hat{L}^+ Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \sqrt{l(l+1)-m(m+1)} Y_{l, m+1}(\theta, \varphi), \quad (28.7)$$

$$\hat{L}^- Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \sqrt{l(l+1)-m(m-1)} Y_{l, m-1}(\theta, \varphi). \quad (27.8)$$

В частности, из уравнения (28.7) следует:

$$\hat{L}^+ Y_{l,l}(\theta, \varphi) = 0. \quad (28.9)$$

Перечисленных свойств достаточно для выполнения любых расчётов, связанных с шаровыми функциями.

Для нахождения угловой зависимости сферических гармоник следует воспользоваться явным выражением оператора  $\hat{L}^\pm$  в сферической системе

координат. Подставляя (28.2) и (28.5) в (28.9) получим дифференциальное уравнение

$$\left(\frac{\partial}{\partial \varphi} + i \cdot \cot \theta \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi}\right) e^{i\varphi} \Theta_{l,m}(\theta) = 0, \quad (28.10)$$

решение которого имеет вид:

$$\Theta_{l,l}(\theta) = \sqrt{\frac{(2l+1)!}{2}} \cdot \frac{1}{2^l \cdot l!} (\sin \theta)^l. \quad (28.11)$$

Ниже в таблице приведён вид некоторых сферических гармоник.

Таблица. Сферические гармоники.

l	m	Угловая зависимость амплитуд	Состояние	Чётность
0	0	$Y_{0,0}(\theta, \varphi) = \frac{1}{4\pi}$	S	+
2	0	$Y_{1,0}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$	P	-
	$\pm 1$	$Y_{1,\pm 1}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{\pm i\varphi} \sin \theta$		
	0	$Y_{2,0}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \left( \frac{3}{2} \cos^2 \theta - \frac{1}{2} \right)$	D	+
	$\pm 1$	$Y_{2,\pm 1}(\theta, \varphi) = \pm \frac{1}{2} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} e^{\pm i\varphi} \sin \theta \cos \theta$		
l	$\pm 2$	$Y_{2,\pm 2}(\theta, \varphi) = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} e^{\pm 2i\varphi} \sin^2 \theta$		
	m	$Y_{l,m}(\theta, \varphi) = P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}$		$(-1)^l$

Рассмотрим распределение амплитуд наблюдения электрона в том или ином месте атома водорода на примере электрона в p-состоянии (m=0):

$Y_{1,0}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$ . Это означает, что амплитуда положительна в верхней части

( $\theta < \pi/2$ ), отрицательна в нижней части ( $\theta > \pi/2$ ) и равна нулю при  $\theta = \pi/2$ . Возводя её в квадрат получим зависимость вероятности от  $\theta$  (см. рис ).

### 28.3 Закон сохранения чётности.

Сферические функции  $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$  обладают определённой чётностью при преобразовании  $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$ :

$$\hat{I}\psi(\vec{r}) = \psi(-\vec{r}),$$

причём оператор этого преобразования  $\hat{I}$ , называемый чётностью, удовлетворяет следующим соотношениям:

$$\begin{aligned} [\hat{I}, \hat{H}] &= 0, \\ [\hat{I}, \hat{L}^2] &= 0, \\ [\hat{I}, \hat{L}_z] &= 0. \end{aligned}$$

Собственные значения оператора  $\hat{I}$  принимают лишь два значения  $\pm 1$ , в зависимости от  $l$ .

$$\hat{I}Y_{l,l}(\theta, \varphi) = (-1)^l Y_{l,l}(\theta, \varphi).$$

- 1) Если  $l$  - чётное, то  $I=1$  и волновая функция описывает чётное состояние (см. таблицу).
- 2) Если  $l$  - нечётное, то  $I=-1$  и волновая функция соответствует нечётному состоянию.

## Глава VIII. Преобразования симметрии

Особенности любой квантовой системы связаны с определенной симметрией. Есть определенные типы симметрии в квантовой теории, которые не встречаются в классической. Наша задача сейчас – рассмотреть особенности преобразований симметрии в квантовой физике.

Под симметрией понимается совокупность определенных преобразований, относительно которых уравнения движения остаются неизменными.

### § 8.1. Необходимые и достаточные признаки симметрии

Рассмотрим математическую формулировку преобразований симметрии.

Введем некоторый оператор  $\hat{T}$ , который действует на любое состояние системы  $\varphi$  по правилу:

$$\hat{T}\varphi = \varphi',$$

где  $\varphi'$  - новое состояние системы.

И потребуем, чтобы обратное преобразование  $\hat{T}^{-1}$  переводило систему обратно в исходное состояние, т.е.

$$\hat{T}^{-1}\varphi' = \varphi.$$

Таким образом, из этих соотношений следует, что  $\hat{T}\hat{T}^{-1} = \hat{T}^{-1}\hat{T} = 1$ , т.е. произведение  $\hat{T}$  и  $\hat{T}^{-1}$  есть тождественное преобразование.

Все операции в квантовой механике инвариантны относительно этого преобразования. Рассмотрим оператор  $\hat{A}$ :  $\hat{A}\varphi = \chi$  и подействуем на это выражение оператором  $\hat{T}$ :

$$\hat{T}\hat{A}\varphi = \hat{T}\chi = \chi'.$$

Если на систему еще подействовать тождественным оператором  $\hat{T}^{-1}\hat{T}$ , то мы получаем такое выражение:

$$\hat{T}\hat{A}(\hat{T}^{-1}\hat{T})\varphi = (\hat{T}\hat{A}\hat{T}^{-1})\hat{T}\varphi = \hat{T}\chi.$$

Обозначим оператор  $\hat{T}\hat{A}\hat{T}^{-1} = \hat{A}'$  и тогда получим выражение:

$$\hat{A}'\varphi' = \chi'.$$

Таким образом, любое соотношение между физическими величинами после преобразования  $\hat{T}$  не меняет вид:

$$\hat{A}\hat{B} = \hat{C} \Rightarrow \hat{A}'\hat{B}' = \hat{C}'.$$

Найдем класс преобразований, которые оставляют без изменения измерения. Для этого выясним вид оператора, при котором амплитуда вероятности оставалась бы без изменений. Потребуем, чтобы  $(\varphi, \psi) = (\varphi', \psi')$ . Подробнее рассмотрим  $(\varphi', \psi')$ :

$$(\varphi', \psi') = (\hat{T}\varphi, \hat{T}\psi) = (\varphi, \hat{T}^+\hat{T}\psi) = (\varphi, \psi).$$

Таким образом, из рассмотренного соотношения вытекает, что данное преобразование оставляет амплитуду вероятности неизменной, если  $\hat{T}^+\hat{T}$  равен единичному оператору, т.е.

$$\hat{T}^+ = \hat{T}^{-1}.$$

А это есть унитарное преобразование.

При унитарном преобразовании эрмитовский оператор переходит в эрмитовский. Покажем это. Пусть  $\hat{A}$  - эрмитовский оператор. Докажем, что после унитарного преобразования  $\hat{A}'$  тоже будет эрмитовским оператором. Здесь  $\hat{A}' = \hat{T}\hat{A}\hat{T}^{-1}$ . То есть нужно доказать тот факт, что если  $\hat{A} = \hat{A}^+$ , то после преобразования должно получиться  $\hat{A}' = (\hat{A}')^+$ .

$$(\hat{A}')^+ = (\hat{T}\hat{A}\hat{T}^{-1})^+ = \hat{T}^+\hat{A}^+(\hat{T}^{-1})^+ = \hat{T}^{-1}\hat{A}\hat{T} = \hat{A}.$$

Унитарное преобразование  $\hat{T}$  есть преобразование симметрии данной физической системы, если после преобразования не меняются уравнения физической системы.

Будем исходить из уравнения Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) = \hat{H}\psi(t).$$

Определим класс преобразований  $\hat{T}$ :  $\hat{T}\psi = \psi'$ , не меняющих это уравнение, то есть нужно посмотреть, при каких условиях преобразование  $\hat{T}$  переводит уравнение Шредингера для вектора  $\psi$  в уравнение такого же вида только для вектора  $\psi'$ .

Для этого подействуем на уравнение Шредингера оператором  $\hat{T}$ :

$$\hat{T}i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{T}\hat{H}\psi,$$

$$\left(\hat{T}i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{T}^{-1}\right)\hat{T}\psi=\left(\hat{T}i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{T}^{-1}\right)\psi'\equiv\left(\hat{T}\hat{H}\hat{T}^{-1}\right)\psi'=\left(\hat{T}\hat{H}\hat{T}^{-1}\right)\hat{T}\psi.$$

Таким образом, у нас есть два условия (необходимое и достаточное), при выполнении которых преобразование  $\hat{T}$  есть преобразование симметрии:

$$1) \hat{T}i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{T}^{-1}=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Rightarrow\left[\hat{T},i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right]=0;$$

$$2) \hat{T}\hat{H}\hat{T}^{-1}=\hat{H}\Rightarrow\left[\hat{T},\hat{H}\right]=0.$$

## § 8.2. Микроскопическая обратимость во времени в квантовой механике

Введем оператор  $\hat{\Theta}$  обращения во времени, действующий по закону:

$$\hat{\Theta}\psi(t)=\psi(-t).$$

Вектор  $\psi$  комплексный, и мы можем ввести оператор  $\hat{K}$  комплексного сопряжения:

$$\hat{K}\psi=\psi^+.$$

Запишем новый оператор  $\hat{T}=\hat{\Theta}\hat{K}$ . И теперь, если к оператору  $\hat{T}$  применить необходимое и достаточное условия, то он будет считаться преобразованием симметрии. А отсюда следует, что уравнения движения инвариантны относительно обращения во времени.

Таким образом, все физические величины делятся на два класса: которые меняют знак при обращении времени (например, скорость, импульс) и которые не меняют (например, координата, кинетическая энергия).

## § 8.3. Бесконечно малые преобразования симметрии. Законы сохранения в квантовой механике

Пусть  $\hat{T}$  не содержит обращения во времени и является преобразованием симметрии. Представим, что есть сколь угодно малое значение  $\varepsilon (\varepsilon > 0)$ , которое определяет  $\hat{T}$ :

$$\hat{T}_\varepsilon = e^{i\hat{A}\varepsilon},$$

где  $\hat{A}$  - эрмитовский оператор.

Если разложить значение оператора  $\hat{T}_\varepsilon$  в ряд, то получится:

$$\hat{T}_\varepsilon = 1 + i\hat{A}\varepsilon + \dots,$$

т.е. преобразование отличается от тождественного на бесконечно малую величину.  $\hat{T}_\varepsilon$  - унитарное преобразование и для него выполняется два условия симметрии, отсюда следует, что  $\hat{T}_\varepsilon$  – преобразование симметрии.

Рассмотрим теорему.

Теорема: Если имеется сколь угодно малое преобразование симметрии, то имеется сохранение величины  $A$ .

Доказательство:

$$[\hat{T}_\varepsilon, \hat{H}] = 0 \rightarrow [\hat{T}_\varepsilon, \hat{H}] = [e^{i\hat{A}\varepsilon}, \hat{H}] = i\varepsilon [\hat{A}, \hat{H}] = 0 \rightarrow [\hat{A}, \hat{H}] = 0.$$

Имеет место также обратная теорема.

Теорема обратная: Пусть  $A$  - интеграл движения, тогда мы можем построить унитарный оператор симметрии.

Доказательство:

$$[\hat{A}, \hat{H}] = 0 \rightarrow \hat{T}_\varepsilon = 1 + i\hat{A}\varepsilon = e^{i\hat{A}\varepsilon} \rightarrow [\hat{T}_\varepsilon, \hat{H}] = 0.$$

Рассмотрим примеры.

Пусть имеется замкнутая система, в которой интегралами движения являются энергия  $H$ , обобщенный импульс  $\vec{P}$ , момент количества движения  $\vec{J}$ . Тогда мы можем сделать вывод о том, что время в системе однородно, а пространство однородно и изотропно.

Покажем это.



1)  $H$  - интеграл движения и  $t \rightarrow t' = t + \delta t \Rightarrow \hat{T}_{\delta t} = 1 + \frac{i}{\hbar} \hat{H} \delta t = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} \delta t}$  - преобразование

симметрии, т.е.  $\hat{T}_{\delta t} \psi(t) = \psi(t + \delta t) \Rightarrow$  однородность во времени;

2)  $\vec{P}$  - интеграл движения и  $\vec{r} \rightarrow \vec{r}' = \vec{r} + \delta \vec{r} \Rightarrow \hat{T}_{\delta \vec{r}} = 1 + \frac{i}{\hbar} \vec{P} \delta \vec{r} = e^{\frac{i}{\hbar} \vec{P} \delta \vec{r}}$  -

преобразование симметрии, т.е.  $\hat{T}_{\delta \vec{r}} \psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r} + \delta \vec{r}) \Rightarrow$  однородность в пространстве;

3)  $\vec{J}$  - интеграл движения и  $\varphi \rightarrow \varphi' = \varphi + \delta \varphi \Rightarrow \hat{T}_{\delta \varphi} = 1 + \frac{i}{\hbar} \vec{J} \delta \varphi = e^{\frac{i}{\hbar} \vec{J} \delta \varphi}$  -

преобразование симметрии, т.е.  $\hat{T}_{\delta \varphi} \psi(\varphi) = \psi(\varphi + \delta \varphi) \Rightarrow$  изотропность в пространстве.

А теперь рассмотрим, как используется симметрия для решения конкретных задач.

## § 8.4. Трансляционная симметрия кристаллических тел.

### Функции Блоха

Вся квантовая механика инвариантна относительно унитарных операторов. Некоторые из них оставляют инвариантными уравнения движения. Эти операторы есть преобразования симметрии.

Если преобразования симметрии не затрагивают время, то симметрии этой физической системы означает инвариантность гамильтониана системы, т.е.  $[\hat{T}, \hat{H}] = 0$ .

В физике кристаллические тела обладают повышенной симметрией. Для них характерен определенный порядок в кристалле.

Выделим в кристалле направление  $(Ox)$ , где  $a$  - период решетки. При трансляции на вектор  $\vec{R}_n = n\vec{a}$ , где  $n$  - целое число, кристалл совмещается сам с собой.

Все спектры энергии возбуждения кристалла определяются трансляционной симметрией.

Рассмотрим простейшую ситуацию одномерного кристалла. Состояние системы определяется уравнением Шредингера:  $\hat{H}\psi = \varepsilon\psi$ . Введем оператор симметрии  $\hat{T}_a$  (кристалл не меняется при трансляции на период решетки  $a$ ), т.е.  $\hat{T}_a \psi(x) = \psi(x + a)$ .

А так как оператор трансляции и гамильтониан коммутируют, т.е.  $[\hat{T}_a, \hat{H}] = 0$ , следовательно, они имеют полную систему общих собственных векторов:

$$\begin{cases} \hat{T}_a \psi_k(x) = \alpha_k \psi_k(x); \\ \hat{H} \psi_k(x) = \varepsilon(k) \psi_k(x). \end{cases}$$

Нужно найти собственные вектора и собственные значения оператора симметрии  $\hat{T}_a$  для того, чтобы подставить их в уравнение Шредингера и найти оттуда спектр энергии  $\varepsilon(k)$  в кристалле.

Обратим внимание на то, что  $\psi_k(x)$  комплексная функция, и поэтому ее можно представить в виде:

$$\psi(x) = u(x) e^{i\varphi(x)},$$

где  $u(x), \varphi(x)$  - действительные функции.

Рассмотрим, чему равна плотность вероятности  $W(x)$ :

$$W(x) = |\psi(x)|^2 = |u(x)|^2 = W(x+a),$$

так как трансляция на вектор не меняет кристалл. Это возможно тогда и только тогда, когда  $u(x)$  - периодическая функция, т.е.  $u(x) = u(x+a)$ .

Мы ищем решения в виде:

$$\psi_k(x) = u_k(x) e^{i\varphi_k(x)}.$$

Подставляем это решение в уравнение  $\hat{T}_a \psi_k(x) = \alpha_k \psi_k(x)$ :

$$\hat{T}_a \psi_k(x) = u_k(x+a) e^{i\varphi_k(x+a)} = u_k(x) e^{i\varphi_k(x+a)} = \alpha_k \psi_k(x).$$

Отсюда следует, что  $\alpha_k = e^{i(\varphi_k(x+a) - \varphi_k(x))}$ .

Представим  $\varphi_k(x)$  в виде ряда:

$$\varphi_k(x) = \varphi^0 + kx,$$

в определенной системе отсчета можно задать  $\varphi^0 = 0$ .

Подставляя значение  $\varphi_k$  в выражение для собственного значения оператора трансляции  $\hat{T}_a$ , получаем:

$$\alpha_k = e^{ika},$$

$$\psi_k(x) = u_k(x) e^{ikx},$$

где  $k$  - действительное число,  $a$  - период решетки.

$\alpha_k = \alpha(k)$  - функция периодическая:

$$\alpha(k) = e^{ika} = \alpha\left(k + \frac{2\pi}{a}\right) = \alpha(k + K),$$

где  $K = \frac{2\pi}{a}$  - вектор обратной решетки.

Квантовое число  $k$  можно задать в пределах этого периода:  $0 < k \leq \frac{2\pi}{a}$ ,

называемого элементарной ячейкой обратной решетки.

Таким образом, собственное значение оператора трансляции есть периодическая функция с периодом обратной решетки.

Исходя из этого, можно сделать вывод, что энергия в кристалле тоже периодическая функция с периодом обратной решетки:

$$\varepsilon(k) = \varepsilon\left(k + \frac{2\pi}{a}\right).$$

При данном значении  $k$  могут быть, вообще говоря, несколько значений энергии  $\varepsilon_1(k), \varepsilon_2(k), \dots$ .

При трансляционной симметрии в таком кристалле состояние описывается формулами Блоха, которые определяются произвольной периодической функцией и выражаются через период решетки или через квазиимпульс:

$$\psi_k(x) = u_k(x) e^{ikx} \text{ или } \psi_p(x) = u_p(x) e^{ipx}.$$

Функция Блоха  $\psi_p(x, t)$  запишется так:

$$\psi_p(x, t) = u_p(x) e^{\frac{i}{\hbar}(px - \varepsilon_p t)}.$$

Учтем тот факт, что энергия в кристалле есть периодическая функция  $\varepsilon_l(p) = \varepsilon_l\left(p + \frac{2\pi}{a}\hbar\right)$  и четная относительно обращения во времени  $\varepsilon_l(p) = \varepsilon_l(-p)$ .