где f_{nm} — матричные элементы величины f. Это выражение аналогично формуле (11,1) [1]).

Величины a_{mn} должны удовлетворять определенным неравенствам. «Диагональные элементы» $\rho(x, x)$ матрицы плотности, определяющие распределение вероятности для координат, должны, очевидно, быть величинами положительными. Из выражения (14,6) (с $x' = x$) поэтому следует, что построенная на коэффициентах a_{mn} квадратичная форма вида

$$\sum_n \sum_m a_{mn}\xi_n^*\xi_m$$

(где ξ_n — произвольные комплексные величины) должна быть существенно положительной. Это накладывает на величины a_{mn} известные из теории квадратичных форм условия. В частности, должны быть положительными все диагональные элементы

$$a_{nn} \geqslant 0, \tag{14,9}$$

а каждые три величины a_{nn}, a_{mm}, a_{mn} должны удовлетворять неравенству

$$a_{nn}a_{mm} \geqslant |a_{mn}|^2. \tag{14,10}$$

«Чистому» случаю, в котором матрица плотности сводится к произведению функций, соответствует матрица a_{mn} вида

$$a_{mn} = a_m a_n^*. \tag{14,11}$$

Укажем простой критерий, позволяющий легко определить по матрице a_{mn}, имеем ли мы дело с «чистым» или «смешанным» состоянием. В чистом случае имеем

$$(a^2)_{mn} = \sum_k a_{mk}a_{kn} = \sum_k a_k^* a_m a_n^* a_k = a_m a_n^* \sum_k |a_k|^2 = a_m a_n^*$$

или

$$(a^2)_{mn} = a_{mn}, \tag{14,12}$$

т. е. квадрат матрицы плотности совпадает с ней самой.

§ 15. Импульс

Рассмотрим замкнутую систему частиц, не находящуюся во внешнем поле. Поскольку все положения такой системы как целого в пространстве эквивалентны, то можно утверждать, что гамильтониан системы не изменится при параллельном переносе системы на произвольное расстояние. Достаточно потребовать

[1]) Величины a_{mn} составляют матрицу плотности в энергетическом представлении. Описание состояний системы с помощью такой матрицы было введено независимо *Ландау* и *Блохом* (*F. Bloch*) в 1927 г.

выполнения этого условия для произвольного бесконечно малого смещения; тогда оно будет выполняться и для всякого конечного смещения.

Бесконечно малое параллельное смещение на расстояние $\delta\mathbf{r}$ означает преобразование, при котором радиусы-векторы $\mathbf{r}_a$ всех частиц (a — номер частицы) получают одинаковое приращение $\delta\mathbf{r} : \mathbf{r}_a \to \mathbf{r}_a + \delta\mathbf{r}$. Произвольная функция $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots)$ координат частиц при таком преобразовании переходит в функцию

$$\psi(\mathbf{r}_1 + \delta\mathbf{r},\ \mathbf{r}_2 + \delta\mathbf{r},\ \ldots) = \psi(\mathbf{r}_1,\ \mathbf{r}_2,\ \ldots) + \delta\mathbf{r} \sum_a \nabla_a\psi =$$

$$= \left(1 + \delta\mathbf{r} \sum_a \nabla_a\right) \psi(\mathbf{r}_1,\ \mathbf{r}_2,\ \ldots)$$

(∇_a — оператор дифференцирования по $\mathbf{r}_a$). Выражение

$$1 + \delta\mathbf{r} \sum_a \nabla_a$$

есть оператор бесконечно малого переноса, переводящий функцию $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots)$ в функцию $\psi(\mathbf{r}_1 + \delta\mathbf{r},\ \mathbf{r}_2 + \delta\mathbf{r}, \ldots)$.

Утверждение, что некоторое преобразование не меняет гамильтониана, означает, что если произвести это преобразование над функцией $\hat{H}\psi$, то результат будет таким же, как если произвести его только над функцией ψ и лишь затем применить к ней оператор $\hat{H}$. Математически это может быть записано следующим образом. Пусть $\hat{O}$ есть оператор, «производящий» рассматриваемое преобразование. Тогда имеем $\hat{O}(\hat{H}\psi) = \hat{H}(\hat{O}\psi)$, откуда

$$\hat{O}\hat{H} - \hat{H}\hat{O} = 0,$$

т. е. гамильтониан должен быть коммутативен с оператором $\hat{O}$.

В данном случае оператором $\hat{O}$ является оператор бесконечно малого переноса. Поскольку единичный оператор (оператор умножения на 1) коммутативен, конечно, со всяким вообще оператором, а постоянный множитель $\delta\mathbf{r}$ может быть вынесен из-под знака $\hat{H}$, то условие $\hat{O}\hat{H} - \hat{H}\hat{O} = 0$ сводится здесь к условию

$$\left(\sum_a \nabla_a\right)\hat{H} - \hat{H}\left(\sum_a \nabla_a\right) = 0. \qquad (15{,}1)$$

Как мы уже знаем, коммутативность некоторого оператора (не содержащего времени явно) с гамильтонианом означает, что соответствующая этому оператору физическая величина сохраняется. Величина, сохранение которой для замкнутой системы следует из свойства однородности пространства, есть импульс системы (ср. I, § 7). Таким образом соотношение (15,1) выражает собой закон сохранения импульса в квантовой механике; оператор $\sum \nabla_a$ должен соответствовать, с точностью до постоянного множителя, полному импульсу системы, а каждый из членов суммы — импульсу отдельной частицы.

Коэффициент пропорциональности между оператором импульса $\hat{\mathbf{p}}$ и оператором ∇ может быть определен с помощью предельного перехода к классической механике и равен $-i\hbar$:

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla, \tag{15,2}$$

или в компонентах:

$$\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{p}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}.$$

Действительно, воспользовавшись предельным выражением волновой функции (6,1), имеем

$$\hat{\mathbf{p}}\Psi = -i\hbar\frac{i}{\hbar}\Psi\nabla S = \Psi\nabla S,$$

т. е. в классическом приближении действие оператора $\hat{\mathbf{p}}$ сводится к умножению на ∇S. Но градиент действия и есть классический импульс частицы $\mathbf{p}$ (см. I, § 43).

Легко убедиться в том, что оператор (15,2), как и следовало, эрмитов. Действительно, для произвольных функций $\psi(x)$ и $\varphi(x)$, обращающихся на бесконечности в нуль, имеем

$$\int \varphi\hat{p}_x\psi\,dx = -i\hbar\int\varphi\frac{\partial\psi}{\partial x}dx = i\hbar\int\psi\frac{\partial\varphi}{\partial x}dx = \int\psi\hat{p}_x^*\varphi\,dx,$$

что и является условием эрмитовости оператора.

Поскольку результат дифференцирования функций по двум различным переменным не зависит от порядка дифференцирования, то ясно, что операторы трех компонент импульса коммутативны:

$$\hat{p}_x\hat{p}_y - \hat{p}_y\hat{p}_x = 0, \quad \hat{p}_x\hat{p}_z - \hat{p}_z\hat{p}_x = 0, \quad \hat{p}_y\hat{p}_z - \hat{p}_z\hat{p}_y = 0. \tag{15,3}$$

Это значит, что все три компоненты импульса частицы могут одновременно иметь определенные значения.

Найдем собственные функции и собственные значения операторов импульса. Они определяются векторным уравнением

$$-i\hbar\nabla\psi = \mathbf{p}\psi. \tag{15,4}$$

Его решения имеют вид

$$\psi = \mathrm{const}\cdot e^{i\mathbf{pr}/\hbar}. \tag{15,5}$$

Одновременное задание всех трех компонент импульса полностью определяет, как мы видим, волновую функцию частицы. Другими словами, величины p_x, p_y, p_z составляют для частицы один из возможных полных наборов физических величин. Их собственные значения образуют непрерывный спектр, простирающийся от $-\infty$ до ∞.

Согласно правилу нормировки собственных функций непрерывного спектра (5,4) интеграл $\int \psi^*_{\mathbf{p}'}\psi_{\mathbf{p}} dV$, взятый по всему пространству ($dV = dx\,dy\,dz$), должен быть равен δ-функции $\delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p})$ [1].

По причинам, которые станут ясными из дальнейших применений, более естественна, однако, нормировка собственных функций импульса частицы на δ-функцию от разности импульсов, деленных на $2\pi\hbar$:

$$\int \psi^*_{\mathbf{p}'}\psi_{\mathbf{p}}\, dV = \delta\left(\frac{\mathbf{p}' - \mathbf{p}}{2\pi\hbar}\right)$$

или, что то же,

$$\int \psi^*_{\mathbf{p}'}\psi_{\mathbf{p}}\, dV = (2\pi\hbar)^3\,\delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \tag{15,6}$$

(поскольку каждый из трех множителей, на которые распадается трехмерная δ-функция, $\delta((p'_x - p_x)/2\pi\hbar) = 2\pi\hbar\delta(p'_x - p_x)$ и т. п.).

Интегрирование производится с помощью формулы [2]

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i\alpha\xi}\, d\xi = \delta(\alpha). \tag{15,7}$$

Из нее очевидно, что для нормировки, согласно (15,6), в функциях (15,5) надо положить $\mathrm{const} = 1$ [3]:

$$\psi_{\mathbf{p}} = e^{i\mathbf{pr}/\hbar}. \tag{15,8}$$

---

[1] Дельта-функция от векторного аргумента **a** (трехмерная δ-функция) определяется как произведение δ-функций от каждой из компонент вектора: $\delta(\mathbf{a}) = \delta(a_x)\,\delta(a_y)\,\delta(a_z)$.

[2] Условный смысл этой формулы состоит в том, что функция, стоящая в левой стороне равенства, обладает присущим δ-функции свойством (5,8). Действительно, подставив функцию $\delta(x - a)$, выраженную в виде (15,7), в (5,8), получим известную интегральную формулу Фурье

$$f(a) = \int\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\, e^{i\xi(x-a)} dx\, \frac{d\xi}{2\pi}.$$

[3] Обратим внимание на то, что при такой нормировке плотность вероятности $|\psi|^2 = 1$, т. е. функция нормирована на «одну частицу в единичном объеме». Это совпадение, разумеется, не случайно — ср. ниже примечание на стр. 214.

Разложение произвольной волновой функции $\psi(\mathbf{r})$ по собственным функциям ее импульса представляет собой не что иное, как разложение в интеграл Фурье:

$$\psi(\mathbf{r}) = \int a(\mathbf{p})\,\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} = \int a(\mathbf{p})\,e^{i\mathbf{pr}/\hbar}\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \tag{15,9}$$

($d^3p = dp_x dp_y dp_z$). В соответствии с формулой (5,3) коэффициенты разложения равны

$$a(\mathbf{p}) = \int \psi(\mathbf{r})\,\psi^*_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})\,dV = \int \psi(\mathbf{r})\,e^{-i\mathbf{pr}/\hbar}\,dV. \tag{15,10}$$

Функцию $a(\mathbf{p})$ можно рассматривать (см. § 5) как волновую функцию частицы в импульсном представлении:

$$|a(\mathbf{p})|^2\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}$$

— вероятность импульсу иметь значения в интервале d^3p.

Подобно тому как оператор $\hat{\mathbf{p}}$ соответствует импульсу, определяя его собственные функции в координатном представлении, можно ввести оператор $\hat{\mathbf{r}}$ координат частицы в импульсном представлении. Он должен быть определен так, чтобы среднее значение координат могло быть записано в виде

$$\bar{\mathbf{r}} = \int a^*(\mathbf{p})\,\hat{\mathbf{r}}a(\mathbf{p})\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}. \tag{15,11}$$

С другой стороны, это же среднее значение определяется по волновой функции $\psi(\mathbf{r})$ посредством

$$\bar{\mathbf{r}} = \int \psi^*\mathbf{r}\psi\,dV.$$

Подставив $\psi(\mathbf{r})$ в виде (15,9) и интегрируя по частям, имеем

$$\mathbf{r}\psi(\mathbf{r}) = \int \mathbf{r}a(\mathbf{p})\,e^{i\mathbf{pr}/\hbar}\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} = \int i\hbar e^{i\mathbf{pr}/\hbar}\frac{\partial a(p)}{\partial\mathbf{p}}\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}.$$

С помощью этого выражения и учитывая (15,10), находим

$$\bar{\mathbf{r}} = \iint \psi^*(\mathbf{r})\,i\hbar\frac{\partial a(\mathbf{p})}{\partial\mathbf{p}}e^{i\mathbf{pr}/\hbar}\,dV\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} = \int i\hbar a^*(\mathbf{p})\frac{\partial a(\mathbf{p})}{\partial\mathbf{p}}\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}.$$

Сравнив с (15,11), мы видим, что оператор радиуса-вектора в импульсном представлении

$$\hat{\mathbf{r}} = i\hbar\frac{\partial}{\partial\mathbf{p}}. \tag{15,12}$$

Оператор же импульса в этом представлении сводится к умножению на $\mathbf{p}$.

Наконец, выведем формулу, выражающую через $\hat{\mathbf{p}}$ оператор параллельного переноса в пространстве на любое конечное (а не только бесконечно малое) расстояние $\mathbf{a}$. По определению такого оператора (назовем его $\hat{T}_{\mathbf{a}}$) должно быть

$$\hat{T}_{\mathbf{a}}\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}+\mathbf{a}).$$

Разлагая функцию $\psi(\mathbf{r}+\mathbf{a})$ в ряд Тэйлора, имеем

$$\psi(\mathbf{r}+\mathbf{a}) = \psi(\mathbf{r}) + \mathbf{a}\frac{\partial\psi(\mathbf{r})}{\partial\mathbf{r}} + \dots$$

или, введя оператор $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$:

$$\psi(\mathbf{r}+\mathbf{a}) = \left[1 + \frac{i}{\hbar}\mathbf{a}\hat{\mathbf{p}} + \frac{1}{2}\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{a}\hat{\mathbf{p}}\right)^2 + \dots\right]\psi(\mathbf{r}).$$

Выражение, стоящее в квадратных скобках, представляет собой оператор

$$\hat{T}_{\mathbf{a}} = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{a}\hat{\mathbf{p}}\right). \tag{15,13}$$

Это и есть искомый *оператор конечного смещения.*

§ 16. Соотношения неопределенности

Выведем правила коммутации между операторами импульса и координат. Поскольку результат последовательного дифференцирования по одной из переменных x, y, z и умножения на другую из них не зависит от порядка этих операций, то

$$\hat{p}_x y - y\hat{p}_x = 0, \quad \hat{p}_x z - z\hat{p}_x = 0 \tag{16,1}$$

и аналогично для $\hat{p}_y$, $\hat{p}_z$.

Для вывода правила коммутации $\hat{p}_x$ с x пишем

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

Мы видим, что результат воздействия оператора $\hat{p}_x x - x\hat{p}_x$ сводится к умножению функции на $-i\hbar$; то же самое относится, конечно, к коммутации $\hat{p}_y$ с y и $\hat{p}_z$ с z. Таким образом имеем [1])

$$\hat{p}_x x - x\hat{p}_x = -i\hbar, \quad \hat{p}_y y - y\hat{p}_y = -i\hbar, \quad \hat{p}_z z - z\hat{p}_z = -i\hbar. \tag{16,2}$$

Все соотношения (16,1) и (16,2) можно записать вместе в виде

$$\hat{p}_i x_k - x_k\hat{p}_i = -i\hbar\delta_{ik}, \quad i, k = x, y, z. \tag{16,3}$$

---

[1]) Эти соотношения, открытые в матричной форме *Гейзенбергом* в 1925 г., послужили отправной точкой в создании квантовой механики.