соответствующих величин приобретают вид:

$$\begin{aligned} &\hat{x}_i\hat{x}_k - \hat{x}_k\hat{x}_i = 0, \\ &\hat{p}_i\hat{p}_k - \hat{p}_k\hat{p}_i = 0, \\ &\hat{p}_i\hat{x}_k - \hat{x}_k\hat{p}_i = \frac{\hbar}{i}\delta_{ik} \qquad (i,\ k = 1,\ 2,\ 3). \end{aligned} \tag{25,10}$$

Мы воспользуемся этими равенствами для определения операторов координаты и импульса.

§ 26. Операторы и собственные функции координаты и импульса

Начнем с установления вида операторов в координатном представлении[1]). В этом представлении волновая функция, характеризующая состояние частицы, зависит от ее координат $\psi(x, y, z)$. Координаты x, y, z являются независимыми переменными. Поэтому отвечающие им операторы, в соответствии с выводами § 20 и § 22, сводятся к умножению на эти координаты

$$\hat{x}_i = x_i \qquad (i = 1,\ 2,\ 3). \tag{26,1}$$

Перестановочные соотношения (25,10) перепишем в виде

$$(\hat{p}_k x_k - x_k\hat{p}_k)\,\psi = \frac{\hbar}{i}\psi \qquad (k = 1,\ 2,\ 3), \tag{26,2}$$

$$(\hat{p}_i x_k - x_k\hat{p}_i)\,\psi = 0 \qquad (i \neq k), \tag{26,3}$$

$$(\hat{p}_i\hat{p}_k - \hat{p}_k\hat{p}_i)\,\psi = 0 \qquad (i,\ k = 1,\ 2,\ 3). \tag{26,4}$$

Уравнениям (26,2)—(26,4) можно удовлетворить произвольной функцией ψ, положив

$$\hat{p}_k = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_k} + \frac{\partial\alpha(x_1, x_2, x_3)}{\partial x_k}, \tag{26,5}$$

где $\alpha(x_1, x_2, x_3)$ — произвольная вещественная функция. Вещественность α требуется для эрмитовости оператора $\hat{p}_k$. Функцию α можно без ограничения общности результата положить равной нулю. Действительно, действие оператора (26,5) на произвольную функцию ψ переводит ее в функцию $\psi' = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial x_k} + \frac{\partial\alpha}{\partial x_k}\psi$. С другой стороны, если мы подействуем на функцию $e^{\frac{i}{\hbar}\alpha}\psi$ оператором $\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_k}$, то получим функцию $e^{\frac{i}{\hbar}\alpha}\psi'$. Следовательно, переход от оператора (26,5) к оператору $\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_k}$

[1]) См. В. А. Фок, Начала квантовой механики, Кубуч, 1932, стр. 32.

эквивалентен переходу от волновой функции ψ к функции $e^{\frac{i}{\hbar}\alpha}\psi$

$$\psi \to e^{\frac{i}{\hbar}\alpha}\psi,$$

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_k} + \frac{\partial \alpha}{\partial x_k} \to \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_k} = e^{\frac{i}{\hbar}\alpha}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_k} + \frac{\partial \alpha}{\partial x_k}\right)e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha}, \qquad (26,6)$$

так как

$$e^{\frac{i}{\hbar}\alpha}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_k} + \frac{\partial \alpha}{\partial x_k}\right)e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha}e^{\frac{i}{\hbar}\alpha}\psi = e^{\frac{i}{\hbar}\alpha}\psi' = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_k}\left(e^{\frac{i}{\hbar}\alpha}\psi\right).$$

Как мы увидим, в § 46 волновая функция всегда определена с точностью до некоторого так называемого унитарного преобразования, частным случаем которого является преобразование (26,6).

Операторы (26,5) и операторы

$$\hat{p}_k = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_k} \qquad (k = x,\ y,\ z)$$

имеют одинаковый спектр собственных значений. Поэтому, не ограничивая общности, можно вместо операторов (26,5) пользоваться операторами для проекций импульса, имеющими в координатном представлении вид (ср. § 20)

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}; \qquad \hat{p}_y = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}; \qquad \hat{p}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z} \qquad (26,7)$$

или, в векторной форме,

$$\hat{\boldsymbol{p}} = \frac{\hbar}{i}\nabla, \qquad (26,8)$$

где ∇ — оператор градиента.

Воспользуемся теперь не координатным, а импульсным представлением, в котором волновая функция зависит от трех проекций импульса: p_x, p_y, p_z. Отвечающие им операторы сводятся к умножению на величины p_x, p_y, p_z. Оператор координаты в этом представлении находится на основании тех же соотношений коммутации и оказывается равным

$$\hat{x} = i\hbar\frac{\partial}{\partial p_x}; \qquad \hat{y} = i\hbar\frac{\partial}{\partial p_y}; \qquad \hat{z} = i\hbar\frac{\partial}{\partial p_z}, \qquad (26,9)$$

или

$$\hat{\boldsymbol{r}} = i\hbar\left(\boldsymbol{i}\frac{\partial}{\partial p_x} + \boldsymbol{j}\frac{\partial}{\partial p_y} + \boldsymbol{k}\frac{\partial}{\partial p_z}\right) \equiv i\hbar\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}}.$$

Пользуясь (26,7), легко установить перестановочные соотношения оператора $\hat{\boldsymbol{p}}$ и произвольной функции $U(x, y, z)$

$$\hat{\boldsymbol{p}}U - U\hat{\boldsymbol{p}} = \frac{\hbar}{i}\nabla U. \qquad (26,10)$$

Аналогичным образом вычисляется коммутация оператора $\hat{\boldsymbol{r}}$ с произвольной функцией $f(p_x, p_y, p_z)$

$$\hat{\boldsymbol{r}}f - f\hat{\boldsymbol{r}} = i\hbar \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{p}}. \tag{26,11}$$

Уравнения для собственных функций и собственных значений операторов $\hat{p}_x$, $\hat{p}_y$, $\hat{p}_z$ имеют вид

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial \psi_{p_x}}{\partial x} = p_x \psi_{p_x}, \quad \frac{\hbar}{i}\frac{\partial \psi_{p_y}}{\partial y} = p_y \psi_{p_y}, \quad \frac{\hbar}{i}\frac{\partial \psi_{p_z}}{\partial z} = p_z \psi_{p_z}. \tag{26,12}$$

Выпишем решение первого уравнения:

$$\psi_{p_x} = a(y, z)\, e^{\frac{i}{\hbar} p_x x},$$

где $a(y, z)$ — произвольная функция. Аналогичные решения имеются и для функций ψ_{p_y} и ψ_{p_z}. Функции ψ_{p_x}, ψ_{p_y}, ψ_{p_z} удовлетворяют необходимым требованиям, в частности условию конечности (см. § 16) при любых вещественных значениях p_x, p_y, p_z. Таким образом, оператор импульса имеет сплошной спектр собственных значений. Волновая функция

$$\psi_p = A e^{\frac{i}{\hbar} \boldsymbol{pr}}, \tag{26,13}$$

где A — постоянная, является собственной функцией операторов $\hat{p}_x$, $\hat{p}_y$, $\hat{p}_z$ и описывает состояние с заданным импульсом $\boldsymbol{p}$. В таком состоянии может находиться свободно двигающаяся частица. Этот вывод находится в полном соответствии с результатом § 2.

Постоянная A определяется из условия нормировки. Так как оператор импульса обладает сплошным спектром, то его собственные функции удобно нормировать на δ-функцию. Найдем сначала нормировочный коэффициент A в случае одномерного движения.

Полагая $\int \psi^*_{p_x} \psi_{p'_x}\, dx = \delta(p_x - p'_x)$ и учитывая (III, 5), получаем $A = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}$, так что окончательно

$$\psi_{p_x} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} e^{\frac{i}{\hbar} p_x x}. \tag{26,14}$$

В трехмерном случае для волновой функции (26, 13) соответственно имеем

$$\psi_p = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar} \boldsymbol{pr}}. \tag{26,15}$$

Иногда оказывается более удобным другой способ нормировки плоских волн, именуемый нормировкой в «ящике». Зададим волновую функцию в произвольно большом, но конечном объеме V. В качестве нормировочного объема выберем куб с длиной ребра L и центром в начале координат. Потребуем, чтобы на стенках куба волновые функции (26,12) удовлетворяли условию периодичности, т. е. в соответствующих точках противоположных граней куба волновые функции принимали бы одинаковые значения. При этих условиях вектор импульса уже не изменяется непрерывным образом, а пробегает дискретный набор значений

$$p_x = \frac{2\pi\hbar}{L} n_x; \qquad p_y = \frac{2\pi\hbar}{L} n_y; \qquad p_z = \frac{2\pi\hbar}{L} n_z, \tag{26,16}$$

где n_x, n_y, n_z — положительные или отрицательные целые числа, включая нуль. Выбирая ребро куба L достаточно большим, можно сделать расстояние между соседними собственными значениями вектора импульса сколь угодно малыми. Нормировочный коэффициент, определяемый из условия

$$|A|^2 \int\limits_{L^3} \left| e^{\frac{i}{\hbar} pr} \right|^2 dV = 1,$$

равен $A = \frac{1}{L^{3/2}}$. Соответственно волновая функция при такой нормировке имеет вид

$$\psi_p = \frac{1}{L^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar} pr} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{\frac{i}{\hbar} pr}. \tag{26,17}$$

В §§ 12 и 13 мы нормировали волновые функции вида (26,13), задавая плотность потока вероятности j_0. Действительно, в этом состоянии согласно (7, 6)

$$j_0 = |A|^2 \frac{p}{m}. \tag{26,18}$$

Полагая, например, $A = 1$, получаем

$$j_0 = \frac{p}{m} = v, \tag{26,19}$$

т. е. при такой нормировке плотность потока вероятности численно равна скорости частицы. Если же $A = \frac{1}{\sqrt{v}}$, то это соответствует нормировке на единичную плотность потока вероятности и т. д.

Легко видеть, что операторы $\hat{p}_x$, $\hat{p}_y$, $\hat{p}_z$ простым образом связаны с операторами бесконечно малого сдвига соответственно по осям x, y, z. Действительно, сдвинем нашу систему или, что эквивалентно, начало координат вдоль оси x на расстояние Δx. Тогда старые и новые координаты связаны соотношением

$$x' = x - \Delta x, \quad y' = y, \quad z' = z.$$

Выразим функцию $\psi(x, y, z)$ через новые координаты x', y', z'. Соответственно получим, ограничиваясь первым членом разложения в ряд

$$\psi(x,\ y,\ z) = \psi(x' + \Delta x,\ y',\ z') = \psi(x',\ y',\ z') + \frac{\partial\psi}{\partial x'}\Delta x = \\ = \left(1 + \Delta x \frac{\partial}{\partial x'}\right)\psi(x',\ y',\ z').$$

Оператор $\left(1 + \Delta x \frac{\partial}{\partial x'}\right)$ естественно назвать оператором сдвига на расстояние Δx вдоль оси x. Обозначим этот оператор через $\hat{R}_{x'}$ так, что

$$\psi(x,\ y,\ z) = \hat{R}_{x'}\psi(x',\ y',\ z'). \tag{26,20}$$

Мы видим, что оператор сдвига $\hat{R}_x$ связан с оператором соответствующей проекции импульса $\hat{p}_x$

$$\hat{R}_x = 1 + \frac{i}{\hbar}\Delta x \hat{p}_x. \tag{26,21}$$

Вид оператора импульса $\hat{p}_x$ можно было бы получить также, исходя из выражения для оператора $\hat{R}_x$ [1]).

Выпишем уравнение для собственных функций и собственных значений оператора координаты в координатном же представлении

$$\hat{x}\psi_{x_0}(x) = x_0\psi_{x_0}(x). \tag{26,22}$$

Здесь x_0 — некоторое конкретное значение координаты x. Оператор $\hat{x}$ в своем собственном представлении сводится к умножению на x. При этом из уравнения (26,22) следует, что

$$\psi_{x_0}(x) = 0 \quad \text{при} \quad x \neq x_0.$$

Кроме того, функции $\psi_{x_0}(x)$ должны удовлетворять условию ортогональности и нормировки

$$\int \psi^*_{x_0}(y)\,\psi_{x'_0}(x)\,dx = \delta(x_0 - x'_0).$$

Из этих соотношений вытекает, что функция $\psi_{x_0}(x)$ имеет вид (см. приложение III)

$$\psi_{x_0}(x) = \delta(x - x_0). \tag{26,23}$$

---

[1]) См. Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, Физматгиз, 1963, стр. 61. Аналогичное заключение относится и к операторам проекции импульса на оси y и z.

Аналогичным образом запишутся собственные функции операторов $\hat{y}$ и $\hat{z}$. Так как операторы проекций координат $\hat{x}$, $\hat{y}$, $\hat{z}$ коммутируют между собой, их величины измеримы одновременно. Соответственно, если система обладает тремя степенями свободы, три проекции координат x, y, z могут быть выбраны в качестве величин, образующих полный набор. Волновая функция, описывающая состояние с тремя заданными координатами x_0, y_0, z_0, имеет вид

$$\psi_{r_0}(\boldsymbol{r}) = \delta(x - x_0)\,\delta(y - y_0)\,\delta(z - z_0) = \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0). \tag{26,24}$$

Аналогичным образом напишется и собственная функция оператора импульса в импульсном же представлении.

§ 27. Оператор Гамильтона

Важнейшим оператором квантовой механики является оператор полной энергии $\hat{H}$. Как и в классической механике, он слагается из операторов кинетической и потенциальной энергии. Построим, прежде всего, оператор кинетической энергии частицы. Кинетическая энергия связана с импульсом частицы в нерелятивистском приближении, которым мы сейчас только и интересуемся, обычным соотношением

$$T = \frac{p^2}{2m} = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m}. \tag{27,1}$$

Заменяя в этом соотношении импульс частицы $\boldsymbol{p}$ на оператор $\hat{\boldsymbol{p}}$, получим оператор $\hat{T}$, который назовем оператором кинетической энергии (см. также § 20)

$$\hat{T} = \frac{1}{2m}\hat{\boldsymbol{p}}^2 = \frac{1}{2m}\left(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2\right) \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta. \tag{27,2}$$

Оператор кинетической энергии, очевидно, коммутирует с оператором импульса.

Перейдем теперь к оператору полной энергии $\hat{H}$. Поскольку потенциальная энергия зависит только от координат x, y, z, отвечающий ей оператор в координатном представлении просто совпадает с функцией $U(x, y, z)$. Соответственно имеем:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(x, y, z). \tag{27,3}$$

Поскольку в формуле (27, 3) оператор полной энергии выражен через оператор импульса (но не оператор скорости), он представляет квантовомеханический оператор Гамильтона, часто именуемый гамильтонианом. Выражение для гамильтониана может быть легко обобщено на случай, когда частица движется