и обращается в нуль при $t_2 < t_1$;

$$K(2,\ 1) = 0 \quad \text{при } t_2 < t_1. \tag{29,16}$$

Дифференциальному уравнению (29,15) для функции Грина можно сопоставить интегральное уравнение

$$K(2,\ 1) = K_0(2,\ 1) - \frac{i}{\hbar}\int K_0(2,\ 3)\, U(3)\, K(3,\ 1)\, d^4x_3, \tag{29,17}$$

где $d^4x = dx\,dy\,dz\,dt$.

В интегральном уравнении $K_0(2, 1)$ считается известной функцией, а $K_0(2, 3)\,U(3)$ является его ядром. В этом легко убедиться, действуя на уравнение (29,17) оператором $\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t_2} - \hat{H}_0(\boldsymbol{r}_2)\right]$. Тогда получаем, учитывая (29, 7),

$$\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t_2} - \hat{H}_0(\boldsymbol{r}_2)\right]K(2,\ 1) = i\hbar\delta(t_2 - t_1)\,\delta(\boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_1) + U(2)\,K(2,\ 1).$$

Таким образом, мы снова приходим к уравнению (29,15).

Начальное условие (29,16) содержится в (29,17), поскольку

$$K_0(2,\ 1) = 0 \quad \text{при } t_2 < t_1.$$

Интегральная форма уравнения для амплитуды перехода (29,7) особенно удобна потому, что она позволяет получить $K(2, 1)$ в виде ряда последовательных приближений (см. § 58).

§ 30. Собственные значения и собственные функции операторов момента и квадрата момента

Построим теперь операторы, которые будут играть важную роль в дальнейшем изложении, — операторы проекций момента количества движения и квадрата момента количества движения. Заменяя по общему правилу в классическом определении момента количества движения механические величины квантовомеханическими операторами, находим:

$$\begin{aligned}
\hat{l}_x &= y\hat{p}_z - z\hat{p}_y = \frac{\hbar}{i}\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right),\\
\hat{l}_y &= z\hat{p}_x - x\hat{p}_z = \frac{\hbar}{i}\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right),\\
\hat{l}_z &= x\hat{p}_y - y\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right).
\end{aligned} \tag{30,1}$$

Совокупность операторов $\hat{l}_x$, $\hat{l}_y$ и $\hat{l}_z$ мы будем называть оператором момента количества движения $\hat{l}$. Последняя величина обладает всеми свойствами момента количества движения.

В частности, как мы покажем ниже, она подчиняется таким же законам сохранения, что и момент в классической механике.

Построим, далее, оператор квадрата момента количества движения

$$\hat{l}^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2. \tag{30,2}$$

Рассмотрим перестановочные соотношения для введенных операторов. Заметим прежде всего, что операторы проекций момента количества движения на разные оси координат не коммутируют между собой. Действительно, вычислим, например, коммутатор $\hat{l}_x\hat{l}_y - \hat{l}_y\hat{l}_x$. Пользуясь выражениями (30, 1), имеем

$$\hat{l}_x\hat{l}_y = -\hbar^2\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right) =$$
$$= -\hbar^2\left(y\frac{\partial}{\partial x} + yz\frac{\partial^2}{\partial z\,\partial x} - xy\frac{\partial^2}{\partial z^2} - z^2\frac{\partial^2}{\partial y\,\partial x} + xz\frac{\partial^2}{\partial y\,\partial z}\right).$$

С другой стороны, переставляя операторы, найдем

$$\hat{l}_y\hat{l}_x = -\hbar^2\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right) =$$
$$= -\hbar^2\left(zy\frac{\partial^2}{\partial x\,\partial z} - z^2\frac{\partial^2}{\partial x\,\partial y} - xy\frac{\partial^2}{\partial z^2} + x\frac{\partial}{\partial y} + xz\frac{\partial^2}{\partial z\partial y}\right).$$

Вычитая из верхнего равенства нижнее, окончательно получаем

$$\hat{l}_x\hat{l}_y - \hat{l}_y\hat{l}_x = \hbar^2\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) = i\hbar\hat{l}_z. \tag{30,3}$$

Производя циклическую перестановку координат x, y, z, получаем еще два равенства:

$$\begin{aligned} \hat{l}_y\hat{l}_z - \hat{l}_z\hat{l}_y &= i\hbar\hat{l}_x, \\ \hat{l}_z\hat{l}_x - \hat{l}_x\hat{l}_z &= i\hbar\hat{l}_y. \end{aligned} \tag{30,3'}$$

Из соотношений (30,3) следует, что проекции момента количества движения частицы l_x, l_y, l_z не могут одновременно иметь определенные значения. Исключением является состояние, когда момент количества движения равен нулю, так как при этом $\bar{l}_x = \bar{l}_y = \bar{l}_z = 0$. В то же время операторы проекций $\hat{l}_x$, $\hat{l}_y$ и $\hat{l}_z$ коммутируют с оператором квадрата момента $\hat{l}^2$, т. е. имеют место соотношения

$$\left.\begin{aligned} \hat{l}_x\hat{l}^2 - \hat{l}^2\hat{l}_x &= 0, \\ \hat{l}_y\hat{l}^2 - \hat{l}^2\hat{l}_y &= 0, \\ \hat{l}_z\hat{l}^2 - \hat{l}^2\hat{l}_z &= 0. \end{aligned}\right\} \tag{30,4}$$

Эти соотношения легко доказываются с помощью (30,3). Докажем, например, первое из них. Из соотношения (30,3), умножая его соответственно справа и слева на $\hat{l}_y$, имеем

$$\hat{l}_x\hat{l}_y^2 = \hat{l}_y\hat{l}_x\hat{l}_y + i\hbar\hat{l}_z\hat{l}_y,$$
$$\hat{l}_y^2\hat{l}_x = \hat{l}_y\hat{l}_x\hat{l}_y - i\hbar\hat{l}_y\hat{l}_z.$$

Вычитаем из верхнего соотношения нижнее, получаем

$$\hat{l}_x\hat{l}_y^2 - \hat{l}_y^2\hat{l}_x = i\hbar(\hat{l}_z\hat{l}_y + \hat{l}_y\hat{l}_z).$$

Аналогичным образом,

$$\hat{l}_x\hat{l}_z^2 - \hat{l}_z^2\hat{l}_x = -i\hbar(\hat{l}_z\hat{l}_y + \hat{l}_y\hat{l}_z).$$

Учитывая также, что $\hat{l}_x\hat{l}_x^2 - \hat{l}_x^2\hat{l}_x = 0$, и складывая полученные равенства, находим

$$\hat{l}_x\hat{l}^2 - \hat{l}^2\hat{l}_x = 0.$$

Таким же образом доказываются и два оставшиеся соотношения (30,4). Из этих соотношений следует, что квадрат полного момента количества движения и одна из его проекций на произвольную ось могут одновременно иметь определенные значения.

Заметим, что правила коммутации, аналогичные (30,3), (30,3′), справедливы также для операторов момента количества движения и координаты, момента количества движения и импульса. Опуская простое доказательство, приведем два соотношения:

$$\begin{aligned} \hat{l}_x\hat{y} - \hat{y}\hat{l}_x &= i\hbar\hat{z}, \\ \hat{l}_x\hat{p}_y - \hat{p}_y\hat{l}_x &= i\hbar\hat{p}_z. \end{aligned} \tag{30,5}$$

Остальные четыре равенства получаются циклической перестановкой индексов. Соотношения (30,3), (30,4), (30,5) совпадают с соответствующими классическими выражениями при условии, конечно, что мы от коммутаторов перейдем к классическим скобкам Пуассона.

Определим, далее, возможные значения проекции момента количества движения на произвольно выбранное направление в пространстве и возможные значения квадрата момента (т. е. собственные значения этих операторов). При решении соответствующих уравнений для собственных функций и собственных значений удобно перейти к сферической системе координат.

Переход от декартовых координат x, y, z к переменным r, ϑ, φ в формулах (30,1), (30,2) производим по обычным правилам замены переменных. Опуская эти элементарные вычисления, приведем результат:

$$\hat{l}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}, \tag{30,6}$$

$$\hat{l}_x = \frac{\hbar}{i}\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \operatorname{ctg}\vartheta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right), \tag{30,7}$$

$$\hat{l}_y = \frac{\hbar}{i}\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta} - \operatorname{ctg}\vartheta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right), \tag{30,8}$$

$$\hat{l}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] = -\hbar^2\Delta_{\vartheta,\varphi}, \tag{30,9}$$

где $\Delta_{\vartheta,\varphi}$ — угловая часть оператора Лапласа, взятого в сферической системе координат.

Выбрав за ось z некоторое произвольное направление в пространстве, определим собственные функции и собственные значения оператора проекции момента на это направление. Уравнение для собственных функций и собственных значений оператора $\hat{l}_z$ имеет вид

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial\varphi} = l_z\psi. \tag{30,10}$$

Решением этого уравнения служит

$$\psi = \psi(r, \vartheta)\, e^{\frac{il_z}{\hbar}\varphi}, \tag{30,11}$$

где $\psi(r, \vartheta)$ — произвольная функция.

Волновая функция, являющаяся решением уравнения (30,10), должна удовлетворять условию однозначности. Поскольку φ — циклическая переменная, изменяющаяся от 0 до 2π, условие однозначности запишется в виде

$$\psi(\varphi) = \psi(\varphi + 2\pi)$$

или

$$e^{\frac{i}{\hbar}l_z\varphi} = e^{\frac{i}{\hbar}l_z(\varphi+2\pi)}.$$

Последнее условие выполняется, если $l_z = m\hbar$, где m — целое положительное или отрицательное число (включая и нуль). В дальнейшем оно будет называться магнитным квантовым числом.

Так как ось z не выделена какими-либо физическими условиями, тот же результат имеет место и для операторов $\hat{l}_x$ и $\hat{l}_y$.

Таким образом, проекция момента на произвольно выделенное направление в пространстве принимает целочисленные (в единицах $\hbar$) значения. При определенном значении проекции l_z две другие проекции момента не имеют никакого определенного значения. Это означает, что если в состоянии с заданным l_z производить измерения значений проекций l_x и l_y, то для последних может быть найдено любое возможное значение.

Собственная функция оператора $\hat{l}_z$, зависящая от угла φ и нормированная на единицу условием

$$\int_0^{2\pi} \psi_m^*(\varphi)\,\psi_{m'}(\varphi)\,d\varphi = \delta_{mm'},$$

имеет вид

$$\psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, e^{im\varphi}. \tag{30,12}$$

Определим теперь собственные значения и собственные функции оператора квадрата момента $\hat{l}^2$

$$\hat{l}^2\psi = l^2\psi. \tag{30,13}$$

Подставляя в (30, 13) выражение для $\hat{l}^2$, даваемое формулой (30, 9), получаем уравнение

$$\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\,\frac{\partial\psi}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} + \frac{l^2}{\hbar^2}\psi = 0. \tag{30,14}$$

Уравнение для собственных функций оператора $\hat{l}^2$ является широко известным уравнением для сферических функций [1]).

Уравнение (30,14) имеет решения, удовлетворяющие стандартным условиям, сформулированным в § 16 только при значениях $\frac{l^2}{\hbar^2} = l(l+1)$, где l — целое положительное число (включая и нуль). Квантовое число l получило название азимутального квантового числа. Таким образом, оператор квадрата момента имеет дискретный спектр собственных значений

$$l^2 = \hbar^2 l(l+1). \tag{30,15}$$

Решение уравнения (30,14) для собственных функций оператора квадрата момента имеет вид

$$\psi_{lm}(\vartheta,\ \varphi) = Y_{lm}(\vartheta,\ \varphi) = (-1)^k\sqrt{\frac{(l-|m|)!\,(2l+1)}{(l+|m|)!\,4\pi}}\,P_l^m(\cos\vartheta)\,e^{im\varphi}, \tag{30,16}$$

где m — целое число, принимающее значения $m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$ $\ldots, \pm l$; $k = m$ при $m \geqslant 0$ и $k = 0$ при $m < 0$.

Через P_l^m мы обозначили присоединенный полином Лежандра

$$P_l^m = \left(1-\xi^2\right)^{\frac{|m|}{2}}\frac{d^{|m|}}{d\xi^{|m|}}P_l(\xi) = \frac{1}{2^l l!}\left(1-\xi^2\right)^{\frac{|m|}{2}}\frac{d^{|m|+l}}{d\xi^{|m|+l}}\left(\xi^2-1\right)^l. \tag{30,17}$$

---

[1]) См., например, В. И. Смирнов, Курс высшей математики, т. III, ч. 2, Физматгиз, 1956, стр. 499; В. А. Фок, Начала квантовой механики, Кубуч, 1932, стр. 118.

Постоянный множитель в формуле (30,16) определяется из условия нормировки функций Y_{lm} на единицу

$$\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} Y_{lm}^*(\vartheta,\ \varphi)\, Y_{l'm'}(\vartheta,\ \varphi) \sin\vartheta\, d\vartheta\, d\varphi = \delta_{ll'}\delta_{mm'}. \qquad (30,18)$$

Из формул (30,15) и (30,16) следует, что каждому собственному значению квадрата момента отвечает $(2l+1)$ собственных функций Y_{lm} (отличающихся числом m). Таким образом, собственные значения квадрата момента являются вырожденными. Смысл указанного вырождения, а следовательно числа m, легко понять. Подействуем на волновую функцию Y_{lm} оператором $\hat{l}_z$. Тогда получим

$$\hat{l}_z Y_{lm}(\vartheta,\ \varphi) = \hbar m Y_{lm}(\vartheta,\ \varphi). \qquad (30,19)$$

Мы видим, что волновая функция Y_{lm} является одновременно собственной функцией операторов $\hat{l}_z$ и $\hat{l}^2$. Отсюда ясно, что квантовое число m, входящее в (30,16), характеризует величину проекции момента на ось z в данном состоянии, а волновая функция Y_{lm} описывает состояние с заданным полным моментом и его проекцией на ось z.

Резюмируя, мы можем сказать, что величина квадрата полного момента количества движения определяется по формуле (30,15) азимутальным квантовым числом l, пробегающим ряд целочисленных значений. При фиксированном значении квадрата момента проекция момента на произвольно ориентированную ось z может принимать $(2l+1)$ значений, от $-l$ до $+l$ (в единицах $\hbar$). Никакие другие значения проекции момента при заданном l невозможны. Так как ось z ориентирована совершенно произвольно, то, естественно, и проекции момента на оси x и y при заданном l также принимают значения от $-l$ до $+l$. При $l=0$ проекция момента на любую ось также равна нулю. Это есть единственное состояние, когда проекции момента на разные оси одновременно имеют определенное значение. Волновая функция Y_{lm} при этом $(l=0)$ сводится к постоянной, которая является собственной функцией всех операторов $\hat{l}_x$, $\hat{l}_y$, $\hat{l}_z$.

Заметим, что собственное значение квадрата полного момента $l^2 = \hbar^2 l(l+1)$ всегда больше квадрата максимальной проекции момента, равной $\hbar^2 l^2$. Если бы эти величины совпадали, то это означало бы, что в состоянии, в котором проекция момента на некоторую ось имеет максимальное значение, две другие проекции равны нулю. Последнее, однако, невозможно, так как при определенном значении одной из проекций момента две другие не могут иметь никаких определенных значений, хотя бы и нулевых.

Покажем, наконец, что оператор момента количества движения связан с оператором бесконечно малого поворота системы вокруг начала координат. Действительно, повернем систему координат на малый угол $\delta\varphi$, например вокруг оси z. Старые и новые координаты точки связаны соотношениями

$$\begin{aligned} x' &= x + y\,\delta\varphi, & x &= x' - y'\,\delta\varphi, \\ y' &= -x\,\delta\varphi + y, & y &= x'\,\delta\varphi + y', \\ z' &= z, & z &= z'. \end{aligned}$$

Следовательно, при повороте волновая функция $\psi(x, y, z)$, выраженная через новые переменные, имеет вид

$$\begin{aligned} \psi(x,\ y,\ z) &= \psi(x' - y'\,\delta\varphi,\ y' + x'\,\delta\varphi,\ z') = \\ &= \psi(x',\ y',\ z') - y'\,\delta\varphi\frac{\partial\psi}{\partial x'} + x'\,\delta\varphi\frac{\partial\psi}{\partial y'} = \\ &= \left[1 + \delta\varphi\left(x'\frac{\partial}{\partial y'} - y'\frac{\partial}{\partial x'}\right)\right]\psi(x',\ y',\ z') = \\ &= \left(1 + \frac{i}{\hbar}\,\delta\varphi\hat{l}_{z'}\right)\psi(x',\ y',\ z') = \hat{W}_{z'}\psi(x',\ y',\ z'). \end{aligned}$$

Оператор $\hat{W}$ естественно назвать оператором поворота. Мы нашли, что оператор $\hat{W}_z$ поворота на малый угол $\delta\varphi$ вокруг оси z связан с оператором $\hat{l}_z$ соотношением

$$\hat{W}_z = 1 + \frac{i}{\hbar}\,\delta\varphi\hat{l}_z. \tag{30,20}$$

Такая же связь, конечно, имеет место и для любой другой оси.

§ 31. Дифференцирование операторов по времени

Построим теперь оператор $\hat{\dot{F}}$, отвечающий производной по времени от квантовомеханической величины, описываемой оператором $\hat{F}$. Совершенно ясно, что обычное определение производной от функции неприменимо к квантовомеханической величине, описываемой оператором $\hat{F}$. Для определения понятия производной мы вновь воспользуемся аналогией с классической механикой. Как известно, в классической механике производная по времени от некоторой механической величины F может быть выражена через классическую скобку Пуассона

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + [H,\ F],$$

где H — функция Гамильтона.