

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

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

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

### § 31. Дифференцирование операторов по времени

Построим теперь оператор  $\hat{F}$ , 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.

Переходя от классических величин к квантовомеханическим операторам и от классической скобки Пуассона к квантовой, получим выражение для оператора  $\hat{F}$

$$\dot{\hat{F}} = \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} + [\hat{H}, \hat{F}]. \quad (31,1)$$

Если оператор  $\hat{F}$  не зависит от времени явно, то оператор  $\dot{\hat{F}}$  имеет вид

$$\dot{\hat{F}} = [\hat{H}, \hat{F}] = \frac{i}{\hbar} (\hat{H}\hat{F} - \hat{F}\hat{H}). \quad (31,2)$$

Из свойств квантовых скобок Пуассона сразу следуют выражения для производной от суммы  $\hat{F}$  и произведения  $\hat{L}$  двух операторов  $\hat{D}$  и  $\hat{R}$

$$\begin{aligned} \dot{\hat{F}} &= \dot{\hat{D}} + \dot{\hat{R}}, \\ \dot{\hat{L}} &= \dot{\hat{D}}\hat{R} + \hat{D}\dot{\hat{R}}. \end{aligned} \quad (31,3)$$

С помощью формулы (31,1) для производной от квантового оператора можно найти выражение для производной по времени от среднего значения величины  $F$ .

Дифференцируя выражение (22, 4) для среднего, находим

$$\dot{\bar{F}} = \int \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \hat{F} \psi dV + \int \psi^* \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \psi dV + \int \psi^* \hat{F} \frac{\partial \psi}{\partial t} dV.$$

Выразим производные  $\frac{\partial \psi}{\partial t}$  и  $\frac{\partial \psi^*}{\partial t}$  через волновые функции с помощью уравнения Шредингера и уравнения с ним сопряженного. Тогда имеем

$$\begin{aligned} \dot{\bar{F}} &= \int \psi^* \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \psi dV - \frac{i}{\hbar} \int \psi^* \hat{F} (\hat{H}\psi) dV + \frac{i}{\hbar} \int (\hat{H}^* \psi^*) \hat{F} \psi dV, \\ &\int (\hat{H}^* \psi^*) \hat{F} \psi dV = \int (\hat{F}\psi) \hat{H}^* \psi^* dV, \end{aligned}$$

так как интеграл не изменяется при перестановке подынтегральных функций.

Из эрмитовости оператора  $\hat{H}$  следует, что

$$\int (\hat{F}\psi) \hat{H}^* \psi^* dV = \int \psi^* \hat{H} \hat{F} \psi dV.$$

Окончательно получаем

$$\dot{\bar{F}} = \int \psi^* \left( \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} (\hat{H}\hat{F} - \hat{F}\hat{H}) \right) \psi dV. \quad (31,4)$$

Сравнивая полученное выражение с определением среднего от производной  $\dot{\bar{F}}$ , мы приходим к важному равенству

$$\dot{\bar{F}} = \overline{\dot{F}}. \quad (31,5)$$

В виде примера определим операторы  $\hat{x}$  и  $\hat{p}_x$ . Поскольку операторы координаты и импульса явно от времени не зависят, имеем

$$\begin{aligned} \hat{x} &= [\hat{H}, \hat{x}], \\ \hat{p}_x &= [\hat{H}, \hat{p}_x]. \end{aligned} \quad (31,6)$$

В такой форме операторные уравнения (31,6) аналогичны классическим уравнениям Гамильтона. Раскроем коммутаторы, стоящие в правых частях равенств (31,6), предполагая при этом, что гамильтониан имеет вид

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) + U(x, y, z, t).$$

Учитывая, что операторы координаты и импульса равны

$$\hat{x} = x, \quad \hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x},$$

получаем

$$[\hat{H}, \hat{x}] = \frac{i}{2m\hbar} (\hat{p}_x^2 x - x \hat{p}_x^2),$$

поскольку  $x$  и  $U(x, y, z, t)$  коммутируют.

Вычисляя коммутатор операторов  $\hat{p}_x^2$  и  $x$ , найдем

$$\begin{aligned} \hat{p}_x^2 x - x \hat{p}_x^2 &= -\hbar^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} x - x \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) = -\hbar^2 \left( x \frac{\partial^2}{\partial x^2} + 2 \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) = \\ &= -2\hbar^2 \frac{\partial}{\partial x} = -2i\hbar \hat{p}_x. \end{aligned}$$

Окончательно получаем:

$$\hat{x} = [\hat{H}, \hat{x}] = \frac{1}{m} \hat{p}_x. \quad (31,7)$$

Мы видим, что оператор скорости  $\hat{x}$  связан с оператором импульса  $p_x$  таким же соотношением, каким в классической механике связаны между собой эти величины. Найдем оператор  $\hat{p}_x$

$$[\hat{H}, \hat{p}_x] = \frac{i}{\hbar} (U \hat{p}_x - \hat{p}_x U) = -\frac{\partial U}{\partial x}.$$

Итак, имеем

$$\hat{p}_x = -\frac{\partial U}{\partial x}. \quad (31,8)$$

Мы получили операторное уравнение движения в форме уравнения Ньютона. Уравнения (31,7), (31,8) можно написать также для средних значений соответствующих величин

$$\overline{\dot{x}} = \dot{\bar{x}} = \frac{1}{m} \bar{p}_x, \quad \overline{\dot{p}_x} = \dot{\bar{p}}_x = -\frac{\partial \bar{U}}{\partial x}. \quad (31,9)$$

Последние соотношения носят название теорем Эренфеста. Выражая  $\dot{\bar{p}}_x$  через  $\ddot{\bar{x}}$ , находим

$$m\ddot{\bar{x}} = -\frac{\partial \bar{U}}{\partial x}. \quad (31,10)$$

В такой форме это уравнение очень близко по внешнему виду к уравнению Ньютона классической механики.

### § 32. Интегралы движения

Предположим, что оператор  $\hat{F}$  не зависит от времени явно и коммутирует с оператором Гамильтона  $\hat{H}$ . В этом случае, согласно (31,2) оператор производной по времени равен нулю, и из соотношения (31,5) вытекает, что среднее значение величины  $F$  не изменяется во времени

$$\dot{\bar{F}} = 0. \quad (32,1)$$

Постоянна во времени также вероятность того, что при измерении  $F$  мы получим какое-то возможное значение  $F_n$  этой величины. Действительно, эта вероятность дается квадратом модуля  $|c_n(t)|^2$  коэффициента разложения волновой функции  $\psi(x, t)$ , описывающей состояние системы в момент времени  $t$ , по собственным функциям оператора  $\hat{F}$ . Поскольку, однако, оператор  $\hat{F}$  коммутирует с оператором  $\hat{H}$ , оба оператора имеют общие собственные функции  $\psi_n(x, t) = \psi_n(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}$  (см. § 23). Разложение  $\psi(x, t)$  по собственным функциям оператора  $\hat{F}$  можно представить в виде

$$\psi(x, t) = \sum_n c_n(0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \psi_n(x) = \sum_n c_n(t) \psi_n(x). \quad (32,2)$$

Следовательно,

$$|c_n(t)|^2 = |c_n(0)|^2 = \text{const.}$$

Такие величины в квантовой механике, так же как и в механике классической, принято именовать интегралами движения. Из сказанного ясно, что квантовомеханическая величина является интегралом движения, если: