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

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

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

$$m\ddot{\bar{x}} = -\frac{\overline{\partial U}}{\partial x}. \tag{31,10}$$

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

$$\dot{\bar{F}} = 0. \tag{32,1}$$

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

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

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:

1) ее оператор не зависит от времени явно;

2) этот оператор коммутирует с оператором Гамильтона.

Зная операторы различных квантовомеханических величин и оператор Гамильтона, можно найти законы сохранения.

Нахождение законов сохранения в квантовой механике столь же существенно для исследования движения системы, как и в классической механике. Как и в классической механике[1]), законы сохранения импульса и момента количества движения тесно связаны со свойствами однородности и изотропии пространства. Так, из изотропии пространства следует, что гамильтониан замкнутой системы или системы в поле сил с центральной симметрией не должен изменяться при произвольном бесконечно малом повороте. Математически это выражается в том, что гамильтониан $\hat{H}$ должен коммутировать с оператором поворота $\hat{W}$. Но оператор поворота на малый угол вокруг некоторой оси (например оси z), как мы знаем (см. § 30), связан простым образом с оператором проекции момента количества движения на эту ось. Поэтому следствием коммутации оператора $\hat{W}_z$ с гамильтонианом $\hat{H}$ является коммутация с гамильтонианом оператора $\hat{l}_z$, откуда и вытекает закон сохранения этой величины. То обстоятельство, что мы рассматривали поворот лишь на малый угол, несущественно, поскольку поворот на конечный угол можно разбить на совокупность малых поворотов.

Итак, мы видим, что сохранение момента количества движения связано с изотропией пространства.

Аналогичным образом легко видеть, что сохранение импульса связано с однородностью пространства. Действительно, из однородности пространства следует, что оператор сдвига не должен изменять гамильтониан замкнутой системы, т. е. должен коммутировать с ним. Но так как оператор сдвига $\hat{R}$ связан с оператором соответствующей проекции импульса (см. § 26), то мы сразу приходим к закону сохранения импульса.

Закон сохранения энергии замкнутой системы или системы в стационарных внешних полях можно связать с произвольностью выбора начала отсчета времени (однородность во времени). Это означает, что законы движения системы не должны зависеть от выбора начала отсчета времени.

Введем оператор трансляции на малый интервал времени δt, $\hat{\mathscr{T}}(\delta t)$, определяемый соотношением

$$\hat{\mathscr{T}}(\delta t)\,\psi(x,\ t)=\psi(x,\ t+\delta t). \qquad (32,3)$$

[1]) См., например, Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, Механика, Физматгиз, 1958, стр. 23.

Раскладывая функцию $\psi(x, t+\delta t)$ в ряд по малому интервалу δt и ограничиваясь членами первого порядка малости, получим

$$\hat{\mathscr{T}}(\delta t)\,\psi(x,\ t)=\left(1+\delta t\frac{\partial}{\partial t}\right)\psi(x,\ t).$$

Отсюда следует, что оператор $\hat{\mathscr{T}}(\delta t)$ имеет вид

$$\hat{\mathscr{T}}(\delta t)=1+\delta t\frac{\partial}{\partial t}. \tag{32,4}$$

Требование независимости законов движения системы от выбора начала отсчета времени выражается коммутацией оператора $\hat{\mathscr{T}}(\delta t)$ с гамильтонианом системы

$$\hat{\mathscr{T}}(\delta t)\,\hat{H}=\hat{H}\hat{\mathscr{T}}(\delta t). \tag{32,5}$$

Используя для $\hat{\mathscr{T}}(\delta t)$ выражение (32,4), мы можем переписать соотношение (32, 5) в виде

$$\frac{\partial\hat{H}}{\partial t}=0. \tag{32,6}$$

Но равенство (32,6) и выражает закон сохранения энергии. Действительно, оператор $\hat{H}$ заведомо коммутирует сам с собой и условие $\hat{\dot{H}}=0$, означающее закон сохранения энергии, сводится к (32,6).

Существованию интеграла движения отвечает простое свойство волновой функции. Если оператор $\hat{I}$ отвечает некоторой сохраняющейся величине, то наряду с волновой функцией ψ уравнению Шредингера будет удовлетворять и волновая функция

$$\psi'=e^{i\alpha\hat{I}}\psi, \tag{32,7}$$

где α — произвольное вещественное число, а оператор $e^{i\alpha\hat{I}}$ понимается в смысле разложения в степенной ряд

$$e^{i\alpha\hat{I}}=1+i\alpha\hat{I}+\frac{(i\alpha)^2}{2}\hat{I}^2+\ \ldots$$

Действительно, подставляя ψ' в уравнение Шредингера, находим

$$i\hbar\frac{\partial\psi'}{\partial t}=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\,e^{i\alpha\hat{I}}\psi=\hat{H}e^{i\alpha\hat{I}}\,\psi. \tag{32,8}$$

Но поскольку $\hat{I}$, как оператор сохраняющейся величины, удовлетворяет условию коммутации

$$\hat{I}\,\hat{H}-\hat{H}\hat{I}=0,\qquad \frac{\partial I}{\partial t}=0,$$

имеем

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(e^{i\alpha\hat{l}}\psi\right)=e^{i\alpha\hat{l}}\frac{\partial\psi}{\partial t},\qquad \hat{H}e^{i\alpha\hat{l}}\psi=e^{i\alpha\hat{l}}\hat{H}\psi$$

и уравнение (32,8) удовлетворяется непосредственно.

Рассмотрим некоторые простые примеры. Начнем со случая свободной частицы. Гамильтониан при этом будет иметь вид

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\left(\hat{p}_x^2+\hat{p}_y^2+\hat{p}_z^2\right).$$

Очевидно, что

$$[\hat{H},\ \hat{p}_x]=[\hat{H},\ \hat{p}_y]=[\hat{H},\ \hat{p}_z]=0.$$

Следовательно,

$$\dot{\hat{p}}_x=\dot{\hat{p}}_y=\dot{\hat{p}}_z=0. \tag{32,7}$$

Если свободная частица в какой-то начальный момент находилась в состоянии с заданным импульсом, то это значение импульса сохраняется во времени.

В качестве другого примера рассмотрим частицу, движущуюся в поле, создаваемом бесконечной однородной плоскостью (плоскость xy). Потенциальная энергия частицы в таком поле зависит только от расстояния до плоскости $U=U(|z|)$, так что гамильтониан имеет вид

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+U(|z|).$$

С таким гамильтонианом коммутируют операторы $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{l}_z$. Это означает, что при движении в поле однородной плоскости (xy) сохраняются компоненты импульса частицы p_x и p_y и z-я компонента момента количества движения l_z.

§ 33. Четность

Рассмотренные выше законы сохранения — закон сохранения энергии, импульса и момента количества движения являются квантовомеханическими аналогами законов сохранения классической механики. Оказывается, однако, что в квантовой механике существуют и законы сохранения, не имеющие классического аналога. Один из таких законов тесно связан со свойствами пространства и имеет весьма общий характер. Именно, гамильтониан замкнутой системы не должен изменяться при следующих преобразованиях координат:

1) трансляции начала координат на произвольный отрезок;

2) повороте на произвольный угол;

3) преобразовании инверсии в начале координат, т. е. замене $x_i \to -x_i$, при которой знаки всех координат изменяются на обратные.