Если оператор $\hat{F}$ зависит от $\hat{x}$ и $\hat{p}$, то аналогично (49,10) легко показать, что

$$\hat{F}_{\text{в}} = F(\hat{x}_{\text{в}}, \hat{p}_{\text{в}}). \qquad (49,23)$$

Итак, мы видим, что в представлении взаимодействия зависимость от времени волновой функции определяется оператором взаимодействия $\hat{H}'_{\text{в}}$, в то время как зависимость от времени, связанная с оператором $\hat{H}_0$ перенесена непосредственно на операторы.

§ 50. Линейный осциллятор (матричное представление)

В § 10 мы рассмотрели линейный гармонический осциллятор при помощи волнового уравнения Шредингера. Однако первоначально эта задача была исследована матричным методом[1]). Мы приведем здесь это решение. С одной стороны, оно служит хорошей иллюстрацией использования матричных методов, а с другой стороны, ряд полученных выражений понадобится нам в дальнейшем.

Будем исходить из известного выражения для гамильтониана системы

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2}. \qquad (50,1)$$

Здесь ω — «классическая частота осциллятора». Под операторами $\hat{p}$ и $\hat{x}$ в (50,1) понимаются некоторые матрицы, связь между которыми дается уравнениями (49,15). Задачу решаем в гейзенберговском энергетическом представлении. Тогда в соответствии с (49,9) имеем:

$$(x_H)_{nm} = x_{nm} e^{i\omega_{nm} t}. \qquad (50.2)$$

Здесь индексами m, n мы обозначаем уровни энергии исследуемой системы. Как следует из (49,15) и (50,1), оператор $\hat{x}_H$ удовлетворяет следующему уравнению движения:

$$\frac{\partial^2 \hat{x}_H}{\partial t^2} + \omega^2 \hat{x}_H = 0. \qquad (50,3)$$

Мы видим, что в гейзенберговском представлении уравнения движения имеют вид обычных уравнений движения классической механики. В последних, однако, классическая координата x заменена квантовомеханическим оператором $\hat{x}_H$. Соответственно для матричных элементов x_{nm} с учетом (50,2) получаем

$$\left(\omega^2 - \omega_{nm}^2\right) x_{nm} = 0. \qquad (50,4)$$

---

[1]) M. Born, W. Heisenberg, P. Iordan, Zeits. f. Physik **35**, 557 (1925).

Из (50,4) следует, что отличны от нуля лишь такие матричные элементы x_{nm}, для которых выполняется условие $\omega_{nm} = \pm\omega$ или $\frac{E_n - E_m}{\hbar} = \pm\omega$. Пронумеруем состояния таким образом, что $\omega_{n,\,n-1} = +\omega$, а $\omega_{n,\,n+1} = -\omega$. Следовательно,

$$x_{nm} = 0 \quad \text{при} \quad m \neq n \pm 1 \quad \text{и} \quad x_{nm} \neq 0 \quad \text{при} \quad m = n \pm 1. \qquad (50,5)$$

Матричные элементы $x_{n,\,n\pm 1}$ можно определить, исходя из соотношений коммутации

$$\hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p} = -i\hbar.$$

Раскроем это равенство

$$\sum_k (p_{nk}x_{km} - x_{nk}p_{km}) = -i\hbar\delta_{nm}.$$

Согласно (49,16) и (49,9) $p_{nk} = im\omega_{nk}x_{nk}$. Подставляя p_{nk} в последнее выражение и учитывая (50,5), имеем при $m = n$

$$x_{n,\,n+1}x_{n+1,\,n} - x_{n,\,n-1}x_{n-1,\,n} = \frac{\hbar}{2m\omega}.$$

При этом мы воспользовались тем, что $\omega_{nm} = -\omega_{mn}$, а вместо $\omega_{n,\,n-1}$ и $\omega_{n,\,n+1}$ подставили соответственно $+\omega$ и $-\omega$. Поскольку матрица координаты эрмитова, то $x_{nm} = x^*_{mn}$, и полученное соотношение перепишем в виде

$$|x_{n+1,\,n}|^2 - |x_{n,\,n-1}|^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}. \qquad (50,6)$$

Из (50,6) ясно, что квадраты модулей матричных элементов образуют арифметическую прогрессию, с разностью $\frac{\hbar}{2m\omega}$. Поскольку все члены прогрессии положительны, она должна начинаться с некоторого положительного члена, которому можно приписать индекс $n = 0$. При этом имеем, очевидно, $x_{1,\,0} \neq 0$, $x_{0,\,-1} \equiv 0$. Следовательно, из (50,6) вытекает равенство

$$|x_{1,\,0}|^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}.$$

Соответственно для произвольного целого положительного числа n находим

$$|x_{n,\,n-1}|^2 = \frac{n\hbar}{2m\omega}. \qquad (50,7)$$

Из (50,7) непосредственно получаем

$$x_{n,\,n-1} = \sqrt{\frac{n\hbar}{2m\omega}}\, e^{i\beta}; \quad x_{n-1,\,n} = \sqrt{\frac{n\hbar}{2m\omega}}\, e^{-i\beta}, \qquad (50,8)$$

где β — произвольный фазовый множитель. Воспользовавшись произволом в выборе β, можно положить его равным нулю. Для матричных элементов, зависящих от времени, соответственно получаем, учитывая (50,2),

$$(x_H)_{n,\,n-1} = \sqrt{\frac{n\hbar}{2m\omega}}\,e^{i\omega t}; \quad (x_H)_{n-1,\,n} = \sqrt{\frac{n\hbar}{2m\omega}}\,e^{-i\omega t}. \tag{50,9}$$

Определим с помощью матриц (50,8) уровни энергии системы E_n. Последние определяются как диагональные матричные элементы оператора $\hat{H}$. Из (50,1) следует, что

$$H_{nn} = \frac{1}{2m}\sum_k p_{nk}p_{kn} + \frac{m\omega^2}{2}\sum_k x_{nk}x_{kn}.$$

Подставляя $p_{mn} = im\omega_{mn}x_{mn}$, находим

$$H_{nn} = \frac{m}{2}\left[-\sum_k \omega_{nk}\omega_{kn}x_{nk}x_{kn} + \omega^2\sum x_{nk}x_{kn}\right].$$

Используя очевидные равенства $\omega_{nk} = -\omega_{kn}$; $x_{nk} = x_{kn}$, и учитывая, что матричные элементы x_{nm} отличны от нуля лишь при $m = n \pm 1$, получаем

$$H_{nn} = \frac{m}{2}\left(\sum_k \omega_{nk}^2 x_{nk}^2 + \omega^2\sum_k x_{nk}^2\right) = \frac{m}{2}\sum_k\left(\omega^2 + \omega_{nk}^2\right)x_{nk}^2 =$$

$$= \frac{m}{2}\left[\left(\omega^2 + \omega_{n,\,n-1}^2\right)x_{n,\,n-1}^2 + \left(\omega^2 + \omega_{n,\,n+1}^2\right)x_{n,\,n+1}^2\right].$$

Пользуясь (50,8) и $\omega_{n,\,n\pm1}^2 = \omega^2$, имеем окончательно

$$E_n = H_{nn} = m\omega^2\left(\frac{n\hbar}{2m\omega} + \frac{(n+1)\hbar}{2m\omega}\right) = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \tag{50,10}$$

что естественно совпадает с (10,13).

Вместо операторов $\hat{p}$ и $\hat{x}$ часто оказывается удобным ввести оператор $\hat{a}$ и сопряженный ему оператор $\hat{a}^+$, определяемые соотношениями

$$\begin{aligned} \hat{a} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,\hat{x} + \frac{i}{\sqrt{m\omega\hbar}}\,\hat{p}\right), \\ \hat{a}^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,\hat{x} - \frac{i}{\sqrt{m\omega\hbar}}\,\hat{p}\right). \end{aligned} \tag{50,11}$$

Из (50,8) следует, что операторы $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$ имеют следующие, отличные от нуля матричные элементы

$$(a^+)_{n,\,n-1} = (a)_{n-1,\,n} = \sqrt{n}, \tag{50,12}$$

а все остальные матричные элементы равны нулю. Мы видим, следовательно, что у оператора $\hat{a}^+$ отличны от нуля лишь матричные элементы, соответствующие переходу $n-1 \rightarrow n$, т. е. переходу с увеличением квантового числа n на единицу. У оператора $\hat{a}$ отличны от нуля матричные элементы, соответствующие переходу $n \rightarrow n-1$. В этой связи операторы и называются операторами соответственно поглощения и рождения возбуждения. Для операторов $\hat{a}^{+}$ и $\hat{a}$ имеют место, как это следует из (50,12), следующие перестановочные соотношения:

$$\hat{a}\hat{a}^{+} - \hat{a}^{+}\hat{a} = 1. \qquad (50,13)$$

Оператор $\hat{H}$, выраженный через операторы $\hat{a}$ и $\hat{a}^{+}$, имеет вид

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2}(\hat{a}^{+}\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^{+}) \qquad (50,14)$$

и с учетом (50,12) мы снова приходим к (50,10). Пользуясь матричным методом, можно также получить выражение для волновых функций осциллятора[1]).

§ 51. Матричные элементы оператора момента[2])

При исследовании свойств момента количества движения, проведенном в § 30 гл. III, мы исходили непосредственно из выражений (30,1) и (30,2) для операторов момента. В настоящем параграфе мы будем основываться только на перестановочных соотношениях (30,3), (30,3′). Оказывается, что такая постановка вопроса носит более общий характер. В частности, конкретные выражения для операторов (30,1) и (30,2) не могут быть использованы при исследовании свойств собственного момента количества движения — спина, который будет рассмотрен в гл. VIII. Между тем, перестановочные соотношения вида (30,3) остаются справедливыми и для собственного момента количества движения (см. § 60). Исследование свойств момента количества движения, основывающееся на соответствующих перестановочных выражениях, удобно проводить в матричной форме. Будем обозначать матрицы, отвечающие проекциям момента количества движения на оси x, y, z, через $\hat{J}_x$, $\hat{J}_y$, $\hat{J}_z$. Изменение обозначений связано с тем, что результаты, полученные в этом параграфе, будут справедливы не только для момента количества движения, связанного с пространственным движением, орбитального момента $\hat{\boldsymbol{l}} = \frac{\hbar}{i}(\boldsymbol{r} \times \nabla)$, но и для момента количества движения,

---

[1]) Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, Физматгиз, 1963, стр. 95.

[2]) Вопросы, затронутые в этом и следующих параграфах этой главы, более подробно рассмотрены в книгах Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, Физматгиз, 1963, стр. 111, и Е. Кондон и Г. Шортли, Теория атомных спектров, ИЛ, 1949.