В самом деле, используя явный вид оператора:

$$p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

и вспоминая, что постоянная $\hbar$ имеет размерность энергии, умноженной на время, убеждаемся в справедливости сказанного.

Совпадают размерности правой и левой частей уравнения Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t} = \widehat{H}\psi,$$

если учесть, что оператор $\widehat{H}$ имеет размерность энергии. Что же касается размерности функции состояния, то она видна из исходного определения вероятности (2.1):

$$dW = |\psi|^2 dV.$$

Так как вероятность — величина безразмерная, то размерность ψ-функции — обратная величина корня квадратного из объема:

$$[\psi] = L^{-\frac{3}{2}}.$$

Например, в одномерном случае потенциальной ямы размерность найденной ранее функции состояний (5.7) определялась нормировочным коэффициентом: $C_n = \sqrt{\frac{2}{a}}$, $[\psi] = L^{-\frac{1}{2}}$.

Такая же размерность у функций состояния квантового осциллятора (см. формулу (6.17)). В случае свободной частицы функция состояния (3.22) имеет неопределенный коэффициент C, которому следует приписать размерность: $[C[= L^{-\frac{3}{2}}$.

Как правило, размерность ψ-функции и определяется ее нормировочным множителем; без него ψ-функция в процессе решения уравнения Шредингера часто оказывается безразмерной. Постоянный ее сомножитель определяется условием нормировки (2.5):

$$|N|^2 \int \tilde{\psi}^* \tilde{\psi}\, dV = 1.$$

Из этого же условия получается указанная выше размерность:

$$|N|^2 = L^{-3}.$$

§ 9. ИЗМЕНЕНИЕ СРЕДНИХ ЗНАЧЕНИЙ ФИЗИЧЕСКИХ ВЕЛИЧИН СО ВРЕМЕНЕМ И ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ

9.1. Изменение средних значений физических величин со временем. Из классической механики известно, какое важное значение имеют в ней законы изменения величины с течением времени. Достаточно напомнить формулу (см. ч. I, (9.1))

$$\frac{d\vec{p}}{dt}=\vec{F},$$

выражающую основное уравнение динамики материальной точки, или формулы (см. ч. I, (10.4), (12.1))

$$\frac{d}{dt}\vec{L}=\vec{M},\quad \frac{d}{dt}T=\vec{v}\vec{F},$$

дающие законы изменения момента импульса и кинетической энергии.

Естествен вопрос об описании изменений с течением времени физических величин в микромире. Поскольку в общем случае величина не имеет определенного значения, следует обратиться к ее среднему значению. Среднее значение величины зависит от времени, если состояние системы нестационарно или если в ее оператор входит время. Это видно из формулы (8.7)

$$\bar{a}(t)=\int \psi^*(x,\ t)\,\widehat{A}(x,\ t)\,\psi(x,\ t)\,dx,$$

где в обозначениях показана зависимость от времени оператора и волновой функции.

Найдем полную производную от $\bar{a}$ по t:

$$\frac{d\bar{a}}{dt}=\int\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\widehat{A}\psi+\psi^*\frac{\partial\widehat{A}}{\partial t}\psi+\psi^*\widehat{A}\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)dx. \tag{9.1}$$

Из уравнения Шредингера (8.3) следует, что

$$\frac{\partial\psi^*}{\partial t}=\frac{i}{\hbar}(\widehat{H}\psi)^*,\quad \frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{i}{\hbar}\widehat{H}\psi.$$

После подстановки выражений для производных от функции состояния в формулу (9.1) имеем

$$\frac{d\bar{a}}{dt}=\int\psi^*\frac{\partial\widehat{A}}{\partial t}\psi dx+\frac{i}{\hbar}\int\{(\widehat{H}\psi)^*\widehat{A}\psi-\psi^*\widehat{A}\widehat{H}\psi\}\,dx. \tag{9.2}$$

Оператор $\widehat{H}$ является самосопряженным. Поэтому

$$\int(\widehat{A}\psi)(\widehat{H}\psi)^*\,dx=\int\psi^*\widehat{H}\,(\widehat{A}\psi)\,dx,$$

и выражение (9.2) принимает окончательный вид

$$\frac{d\bar{a}}{dt}=\int\psi^*\left\{\frac{\partial\widehat{A}}{\partial t}+\frac{i}{\hbar}[\widehat{H},\ \widehat{A}]\right\}\psi dx \tag{9.3}$$

Найденное соотношение решает вопрос об изменении средних значений физических величин со временем. Из него, в частности, вытекает, что среднее значение постоянно, если равен нулю оператор:

$$\widehat{\dot{A}}=\frac{\partial\widehat{A}}{\partial t}+\frac{i}{\hbar}[\widehat{H},\ \widehat{A}]. \tag{9.4}$$

При независящем от времени операторе $\widehat{A}$ для сохранения величины достаточно, чтобы операторы $\widehat{H}$ и $\widehat{A}$ коммутировали. Поскольку оператор $\widehat{H}$ коммутирует сам с собой, то для сохранения средней энергии необходимо, чтобы $\frac{\partial \widehat{H}}{\partial t}=0$. Это выполняется в постоянных силовых полях.

Оператор (9.4) называется оператором *производной физической величины* по времени, что подчеркнуто в его обозначении.

Операторная формула (9.4) и выражает закон изменения величины во времени. Располагая оператором некоторой физической величины $\widehat{A}$ и функцией состояния системы ψ, можно вычислить производную от среднего значения этой величины, воспользовавшись оператором $\widehat{\dot{A}}$:

$$\frac{d\bar{a}}{dt}=\int \psi^* \widehat{\dot{A}} \psi dx. \tag{9.5}$$

Подведем итог. Для определения характера изменения физической величины с течением времени нужно построить, используя оператор Гамильтона и оператор данной величины, оператор производной, а для него найти среднее в соответствующем состоянии.

Характерно, что в квантовой механике исходными для всей теории были операторы импульса и координаты, отнюдь не связанные между собой классическим соотношением $\vec{p}=m\dot{\vec{r}}$. Располагая теперь правилом для построения операторов производных величин, нетрудно найти оператор $\hat{\dot{\vec{r}}}$, который можно назвать скоростью, а оператор $\hat{\ddot{\vec{r}}}$ — ускорением. Однако они определяются через оператор Гамильтона, а не непосредственным дифференцированием (практического значения в квантовой механике не имеют).

9.2. Уравнения движения в форме Гейзенберга. Формула (9.3) или эквивалентное ей операторное соотношение (9.4) выражают на математическом языке изменение физических величин — динамических переменных — со временем, и поэтому они называются *квантовыми уравнениями движения*. Если операторы физических величин не содержат времени, то равенство (9.4) принимает вид

$$\widehat{\dot{A}}=\frac{i}{\hbar}[\widehat{H}, \widehat{A}]. \tag{9.6}$$

Оно называется уравнением движения в форме Гейзенберга и может быть положено в основу квантовой механики при другой схеме ее изложения вместо уравнения Шредингера (см. приложение III).

Чтобы раскрыть смысл уравнений (9.6), запишем их для важнейших операторов координаты и импульса (для простоты возьмем одно измерение):

$$\hat{\dot{x}}=\frac{i}{\hbar}[\widehat{H}, \hat{x}], \tag{9.7}$$

$$\hat{\dot{p}}=\frac{i}{\hbar}[\widehat{H}, \hat{p}_x]. \tag{9.8}$$

Полученные уравнения могут быть сопоставлены с классическими уравнениями Гамильтона (см. ч. I, § 23, п. 3) — они называются квантовыми уравнениями Гамильтона. Поскольку в них фигурируют операторы, то для перехода к измеримым средним значениям физических величин $\dot{\bar{x}}$ и $\dot{\bar{p}}_x$ необходимо располагать конкретной функцией состояния и оператором Гамильтона.

Рассмотрим для примера движение микрочастицы в силовом поле $U(x, y, z)$. Как известно,

$$\widehat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+U(x, y, z).$$

Подставим этот гамильтониан в (9.7). Операторы $U(x, y, z)$, $\frac{\partial^2}{\partial y^2}$ и $\frac{\partial^2}{\partial z^2}$ коммутируют с оператором координаты $\hat{x}$. Поэтому нужно вычислить только коммутатор $\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2}, x\right]$:

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2}, x\right]\varphi=\frac{\partial^2}{\partial x^2}(x\varphi)-x\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2}=2\frac{\partial}{\partial x}\varphi,$$

или

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

Согласно уравнению (9.7) имеем окончательно

$$\hat{\dot{x}}=\frac{1}{m}\hat{p}_x. \tag{9.9}$$

Смысл соотношения (9.9) ясен: средняя скорость микрочастицы определяется отношением ее среднего импульса к массе, т. е. формула дает классическое определение импульса через скорость для средних значений.

Для раскрытия уравнения (9.8) представим оператор Гамильтона в виде

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

Оператор p_x коммутирует с первым слагаемым — оператором кинетической энергии — и не коммутирует со вторым слагаемым — оператором потенциальной энергии:

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

Поэтому

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

Из уравнения (9.8) вытекает

$$\hat{\dot{p}}_x=-\frac{\partial U}{\partial x}. \tag{9.10}$$

Точно так же можно показать, что в трехмерном случае

$$\hat{\dot{\vec{p}}} = -\nabla U, \tag{9.11}$$

что соответствует второму закону Ньютона в операторной форме.

Итак, квантовые уравнения движения для координат и импульса привели нас к операторной форме основного уравнения динамики. Это одно из проявлений принципа соответствия: связь между операторами такая же, как между величинами в классической механике.

9.3. Уравнения Эренфеста. Переход от квантовых соотношений к классическим. Воспользуемся теперь найденными правилами вычисления производной по времени от среднего значения координаты и импульса. Согласно формулам (9.9) и (9.10) имеем

$$\dot{\bar{x}} = \frac{1}{m}\bar{p}_x, \tag{9.12}$$

$$\dot{\bar{p}}_x = -\overline{\frac{\partial U}{\partial x}}. \tag{9.13}$$

Соотношения (9.12) и (9.13) носят название теорем Эренфеста. Из них вытекает уравнение Ньютона для микрочастиц:

$$m\ddot{\bar{x}} = -\overline{\frac{\partial U}{\partial x}} = \bar{F}_x, \tag{9.14}$$

где F_x — проекция силы, действующей на частицу. Это некоторая функция координат точки пространства.

Если мы захотим практически использовать уравнение (9.14), то потребуется по заданной функции $U(x, y, z)$ найти среднее значение силы в некотором состоянии ψ. После этого должно определиться среднее значение ускорения, а по нему можно будет судить о кинематике некоторого среднего движения микрочастицы в силовом поле. Но этот путь непосредственно для описания движения микрочастицы не применяется. Дело в том, что в практически важных и интересных случаях состояний микрочастицы (стационарное состояние) среднее значение координаты частицы от времени не зависит, а уравнение (9.14) информации о движении не содержит. Смысл уравнения в другом: оно устанавливает связь между квантовым и классическим описаниями движения и соответствующими уравнениями.

П р и м е р 9.1. **Использование теорем Эренфеста.**

Рассмотрим переход от квантового уравнения (9.14) к основному закону классической механики в случаях, когда средние значения имеют смысл. Для этого представим себе, что волновая функция заметно отлична от нуля лишь в малой области пространства Δx. Как известно из § 4, п. 2, такое состояние описывается волновым пакетом. Значение $\bar{x}$ можно принять равным координате середины пакета. Если Δx мало, то

$$\bar{F}_x(x) \simeq F_x(\bar{x}). \tag{9.15}$$

Поскольку сила определяется градиентом потенциальной энергии, равенство (9.15) выполняется с достаточной точностью только в медленно и плавно изменяющихся полях. Наш случай тоже относится к плавным полям.

Если учесть соотношение (9.15), то на основании формулы (9.14) имеем

$$m\ddot{\bar{x}} = F_x(\bar{x}).$$

Это по форме уже классическое соотношение, так как при малом Δx пакет можно сопоставить материальной точке. Однако условие (9.15) еще недостаточно для перехода к классической механике, так как частица должна иметь определенный импульс.

Пакет образуется набором монохроматических волн с импульсами, лежащими в интервале $\bar{p}\pm\Delta p$. Если

$$\Delta p \ll \bar{p}, \tag{9.16}$$

то можно положить $p\approx\bar{p}$. Условие (9.16) заведомо выполняется, если кинетическая энергия достаточно велика, так как правую часть равенства можно сделать сколь угодно большой, увеличивая энергию частицы.

Таким образом, квантовое движение приобретает классические черты при переходе к большим энергиям в плавно изменяющихся силовых полях.

Вопрос разобран еще не до конца. С течением времени пакет расплывается, Δx растет и, вообще говоря, соответствие классической картине движения теряется.

Можно показать, что время, за которое ширина пакета удваивается, по порядку величины равно:

$$t\approx\frac{m\,(\Delta x)^2}{\hbar}, \tag{9.17}$$

где при вычислении нужно взять начальное значение Δx. Для частиц атомных размеров масса $m\sim10^{-27}$ кг, $\Delta x\sim10^{-10}$ м и формула (9.17) дает $t\sim10^{-13}$ с. В газе при нормальных условиях среднее время свободного пробега $\sim10^{-10}$ с, поэтому представление о молекулах газа как о классических корпускулах, вообще говоря, является неправомерным. Из соотношения (9.17) следует, что переход к классической механике есть переход к частицам достаточно большой массы.

9.4. Законы сохранения физических величин в квантовой механике. Как и в других разделах физики, в квантовой механике важнейшее значение имеют законы сохранения ряда динамических величин, характеризующих состояние микрочастицы или системы микрочастиц и изменение этого состояния. Таковы законы сохранения *энергии*, *импульса*, *момента импульса* — величин, имеющих универсальное применение во всей физике. В микромире к ним добавляется закон сохранения *четности* — величины, специфической для квантовой физики (и ряд других — см. [19]).

В классической механике и электродинамике законы сохранения получают, преобразуя основные уравнения теории — уравнения Ньютона, Максвелла. Из них получают законы изменения с течением времени импульса, момента импульса, энергии, а затем рассматривают специальные условия, при которых данные величины не изменяются во времени, т. е. сохраняются. Этими условиями служат замкнутость и изолированность изучаемой системы: в механике — тел, в электродинамике — поля и заряженных тел.

Аналогичен подход к законам сохранения во времени и в квантовой механике. Уравнение Шредингера привело нас к формуле (9.4) для оператора производной физической величины по времени:

$$\hat{\dot{A}}=\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}+\frac{i}{\hbar}[\hat{H},\hat{A}].$$

Применяя его для вычисления производной по времени от среднего значения величины, заключаем, что при условии $\hat{\dot{A}}=0$, $\bar{a}=\mathrm{const}$, среднее значение физической величины сохраняется во времени.

Рассмотрим условия сохранения определенного значения физической величины. Если функция состояния ψ, в котором находится система, совпадает с собственной функцией φ_i оператора $\widehat{A}$, то величина имеет определенное значение: a_i. Из формулы для среднего (8.7) в этом случае получаем $\bar{a}=a_i$. Если, кроме того, оператор (9.4) равен нулю, то определенное значение сохраняется. (Величина a_i является интегралом движения.)

Закон сохранения энергии. Оператор Гамильтона может зависеть от времени, но может и не зависеть от него. Во всех решенных ранее задачах встречались стационарные поля, для них $\frac{\partial \widehat{H}}{\partial t}=0$. Кроме того, очевидно, что $[\widehat{H}, \widehat{H}]=0$. Следовательно, $\dot{\widehat{H}}=0$, а $\bar{E}=\mathrm{const}$.

Если функция состояния системы в стационарном поле собственная для оператора Гамильтона, то энергия имеет определенное сохраняющееся значение. О таких состояниях уже говорилось ранее как о *стационарных.*

Энергия микрочастицы в стационарном поле сохраняется.

Понятно также, что оператор Гамильтона для свободной частицы не содержит времени: энергия свободной частицы — величина постоянная. Осталось рассмотреть весьма важный случай замкнутой системы частиц. Замкнутость означает учет всех взаимодействующих частиц, т. е. потенциальная энергия зависит от расстояний между ними (см. ч. I, § 14, п. 6), гамильтониан системы не содержит времени. Поэтому энергия замкнутой системы микрочастиц сохраняется.

Закон сохранения импульса. Оператор импульса частицы: $\hat{\vec{p}}=-i\hbar\nabla$ — не содержит времени и коммутирует с оператором Гамильтона для свободной частицы: $\widehat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$.

Следовательно, *импульс свободной микрочастицы сохраняется.*

Если частица находится в силовом поле, то оператор Гамильтона содержит координаты, на которые действует оператор импульса, т. е. $\hat{\vec{p}}$ и $\widehat{H}$ не коммутируют в общем случае. В силовом поле импульс не сохраняется.

Для замкнутой системы частиц доказывается (см. § 9, п. 6), что оператор импульса коммутирует с оператором Гамильтона — *импульс замкнутой системы микрочастиц сохраняется.*

Закон сохранения момента импульса. Оператор момента импульса для частицы:

$$\hat{\vec{L}}=-i\hbar[\vec{r}\nabla]$$

не содержит времени и коммутирует с оператором Гамильтона свободной частицы. Следовательно, *момент импульса свободной частицы сохраняется* (т. е. существуют состояния, в которых он постоянен наряду с энергией).

В общем случае в силовом поле момент импульса не сохраняется, однако, как и в классической механике, здесь имеют место важные частные случаи. В центрально-симметричном поле, например, момент сохраняется. (Особенности квантового случая по сравнению с классическим рассматриваются ниже, в главе IV.)

Оператор момента импульса для системы частиц коммутирует с оператором Гамильтона для замкнутой системы, поэтому *момент импульса замкнутой системы микрочастиц сохраняется* (см. § 9, п. 6).

Итак, законы сохранения энергии, импульса, момента импульса в квантовой механике по форме и содержанию аналогичны классическим.

9.5. Связь законов сохранения с инвариантностью оператора Гамильтона относительно преобразований симметрии. Покажем, что законы сохранения физических величин связаны со свойствами симметрии пространства и времени. Здесь и далее *под симметрией понимается неизменность свойств пространства при сдвигах, поворотах, отражениях, приводящая к инвариантности некоторых величин и выражений относительно соответствующих преобразований координат.*

В основном уравнении квантовой механики — уравнении Шредингера — система представлена через оператор Гамильтона. Поэтому симметрия системы проявляется в инвариантности гамильтониана относительно каких-либо преобразований координат и времени.

Рассмотрим некоторое преобразование координат:

$$\vec{r} \to \vec{r}', \tag{9.18}$$

выражающее либо перемещение системы как целого в пространстве — сдвиг, либо поворот, либо отражение в зеркале. Его удобно записать на операторном языке так:

$$\vec{r}' = \hat{S}\vec{r}. \tag{9.19}$$

Обратное преобразование выражается оператором $\hat{S}^{-1}$. Последнее означает, что

$$\vec{r} = \hat{S}^{-1}\vec{r}'.$$

Пусть состояние системы описывалось до перемещения функцией $\psi(\vec{r})$. Произведем преобразование (9.19), которое изменит и $\vec{r}$, и вид ψ. Но если существует соответствующая симметрия пространства, то в точку $\vec{r}'$ перейдет значение волновой функции, ранее бывшее в точке $\vec{r}$. Поэтому новая волновая функция $f(\vec{r}')$ удовлетворяет равенству

$$f(\vec{r}') = f(\hat{S}\vec{r}) = \psi(\vec{r}). \tag{9.20}$$

Введем оператор $\hat{R}$, изменяющий вид функции в рассматриваемом преобразовании:

$$\hat{R}\psi(\vec{r}) = f(\vec{r}), \tag{9.21}$$

где $\hat{R}$ может быть оператором преобразования для сдвига, поворота и отражения системы в зеркале.

Докажем, что если гамильтониан инвариантен относительно преобразования (9.19), то оператор $\hat{R}$ коммутирует с оператором Гамильтона. Согласно формулам (9.20) и (9.21)

$$\hat{R}\psi(\vec{r}) = \psi(\hat{S}^{-1}\vec{r}). \tag{9.22}$$

Введем обозначение $\vec{r}'' = \hat{S}^{-1}\vec{r}$ для результата преобразования в равенстве (9.22). Тогда для произвольной функции φ имеем

$$(\hat{R}\hat{H})\varphi = \hat{R}(\hat{H}\varphi) = \hat{H}(\vec{r}'')\,\varphi(\vec{r}''),$$
$$(\hat{H}\hat{R})\varphi = \hat{H}(\hat{R}\varphi) = \hat{H}(\vec{r})\,\varphi(\vec{r}'').$$

Если $\hat{H}(\vec{r}) = \hat{H}(\vec{r}'')$, т. е. преобразование $\hat{S}$ не изменяет гамильтониан, то правые части равенств совпадают. Следовательно, $\hat{R}\hat{H} = \hat{H}\hat{R}$. Утверждение доказано.

Если оператор физической величины не зависит от времени и коммутирует с гамильтонианом, то эта физическая величина сохраняется. Коммутативность операторов $\hat{R}$ и $\hat{H}$ означает наличие закона сохранения величины R. Чтобы указать ее физический смысл, нужно задать явный вид оператора $\hat{R}$.

Во многих случаях конечное преобразование координат можно представить как совокупность последовательных бесконечно малых преобразований. Рассмотрим, например, бесконечно малый сдвиг — трансляцию системы в пространстве:

$$\vec{r}\,'=\vec{r}+\delta\vec{r}.$$

Обратное преобразование:

$$\vec{r}=\vec{r}\,'-\delta\vec{r}.$$

С точностью до членов второго порядка малости:

$$\psi(\hat{S}^{-1}\vec{r})=\psi(\vec{r}-\delta\vec{r})\approx\psi(\vec{r})-\delta\vec{r}\,\nabla\psi.$$

Согласно соотношению (9.22)

$$\hat{R}\psi(\vec{r})=\psi(\vec{r})-\delta\vec{r}\,\nabla\psi.$$

Отсюда

$$\hat{R}=1-\delta\vec{r}\,\nabla.$$

Это оператор бесконечно малого смещения (сдвига или трансляции) в пространстве.

9.6. Связь законов сохранения импульса, момента импульса и энергии со свойствами пространства и времени. Пусть преобразование координат есть сдвиг на отрезок $\vec{a}$:

$$\vec{r}\,'=\vec{r}+\vec{a}. \qquad (9.23)$$

Вследствие однородности пространства состояние замкнутой системы не должно изменяться при сдвиге. Это обусловливает выполнение равенства (9.20).

Как будет показано в дальнейшем, оператор Гамильтона для системы частиц имеет вид

$$\hat{H}=\sum_{i=1}^{N}\frac{\hat{\vec{p}}_i^{\,2}}{2m_i}+U(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\ldots,\vec{r}_N), \qquad (9.24)$$

где $\hat{\vec{p}}_i$ — операторы импульсов отдельных частиц, $\vec{p}_i=-i\hbar\nabla_i$, $\nabla_i=\vec{i}\frac{\partial}{\partial x_i}+\vec{j}\frac{\partial}{\partial y_i}+\vec{k}\frac{\partial}{\partial z_i}$, а $U(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\ldots,\vec{r}_N)$ — потенциальная энергия их взаимодействия. Все известные типы взаимодействия между частицами таковы, что потенциальная энергия зависит только от расстояния между частицами. Поэтому оператор (9.24) не меняет вида, если сделать замену переменных (9.23).

Оператор бесконечно малого смещения $\hat{R}$ в данном случае имеет вид

$$\hat{R}=1-\delta\vec{a}\sum_{i=1}^{N}\nabla_i=1-\frac{i}{\hbar}\,\delta\vec{a}\hat{\vec{p}},$$

где

$$\hat{\vec{p}}=\sum_{i=1}^{N}\hat{\vec{p}}_i \qquad (9.25)$$

— оператор импульса системы.

Из коммутативности оператора импульса (9.25) с оператором Гамильтона (9.24) следует закон сохранения импульса замкнутой системы.

Может показаться, что операторы $\hat{\vec{p}}$ и $\hat{H}$ не коммутируют вследствие наличия в гамильтониане слагаемого, соответствующего потенциальной энергии. Но это не так. Для системы из двух частиц $U(\vec{r}_1,\vec{r}_2)=U(r)$, где $r=\sqrt{(x_2-x_1)^2+(y_2-y_1)^2+(z_2-z_1)^2}$. Найдем коммутатор $[\hat{p}_x, U]$:

$$[p_x,U]\varphi=-i\hbar\left[\left(\frac{\partial}{\partial x_1}+\frac{\partial}{\partial x_2}\right),\ U\right]\varphi=-i\hbar\left\{\left(\frac{\partial}{\partial x_1}+\frac{\partial}{\partial x_2}\right)U\varphi-\right.$$

$$\left.-U\left(\frac{\partial\varphi_1}{\partial x_1}+\frac{\partial\varphi}{\partial x_2}\right)\right\}=-i\hbar\frac{dU}{dr}\left(\frac{\partial r}{\partial x_1}+\frac{\partial r}{\partial x_2}\right)\varphi.$$

В результате получаем нуль, так как $-\frac{\partial r}{\partial x_1}=\frac{\partial r}{\partial x_2}$.

Вывод закона сохранення импульса с учетом однородности пространства раскрывает в определенном отношеннн природу импульса: нмпульс можно ввести как величину, сохраняющуюся в снлу однородности пространства.

При повороте системы вокруг некоторой оси на бесконечно малый угол $\delta\varphi$ всякая точка смещается на отрезок

$$\delta\vec{r}=[\delta\vec{\varphi}\vec{r}].$$

В этом случае

$$\widehat{R}=1-[\delta\vec{\varphi}\vec{r}]\,\nabla\,.$$

Используя свойства смешанного пронзведения векторов, получаем

$$\widehat{R}=1-\delta\vec{\varphi}\,[\vec{r}\nabla\,]=1-\frac{i}{\hbar}\,\delta\vec{\varphi}\,\widehat{\vec{L}},$$

где $\widehat{L}$ — оператор момента импульса частицы.

Состояние замкнутой системы, а значит, и ее гамильтониан не изменяются при поворотах вокруг осн вследствие изотропии пространства; следовательно, оператор $\widehat{R}$ коммутнрует с $\widehat{H}$, что прнводит к коммутации $\widehat{L}$ н $\widehat{H}$. Отсюда вытекает закон сохранення момента импульса.

Математическая стороиа вопроса о наличии ннтегралов двнження мало нзменится, еслн вместо координат речь пойдет о каком-нибудь параметре, входящем в гамнльтониан. В частиостн, таким параметром является время.

Введем оператор $\hat{\tau}$ смещения во временн на интервал τ:

$$t'=\hat{\tau}t=t+\tau.$$

Оператор, действующий на функцню ψ прн сдвиге во времени, обозначим через $\widehat{T}$. В соответствии с выраженнем (9.22) нмеем

$$\widehat{T}\psi=\psi\,(t-\tau).$$

Найдем конкретный внд оператора $\widehat{T}$ для сдвига на бесконечно малый промежуток времени $\delta\tau$:

$$\widehat{T}=1-\delta\tau\,\frac{\partial}{\partial t}.$$

Если воспользоваться уравнением Шредингера (8.3), то можно выразить из него оператор $\frac{\partial}{\partial t}$, после чего получим

$$\widehat{T}=1+\frac{i}{\hbar}\,\delta\tau\widehat{H}.$$

Если оператор $\widehat{H}$ не зависит от времени, то операторы $\widehat{T}$ н $\widehat{H}$ коммутируют. Для замкнутой снстемы оператор Гамильтона не зависит от временн, энергия сохраняется.

Существенно, что энергня как физнческая величнна связана с однородностью времени, ибо ее сохранение обусловлено однородностью времени.

9.7. Четность и закон сохранения четности. Кроме однородности и изотропности, имеется еще один вид симметрии пространства; соответствующую ему операцию нельзя свести к совокупности бесконечно малых преобразований координат. Речь идет об операции *инверсии*, заключающейся в изменении знака всех трех координат x, y и z:

$$\vec{r}\to\vec{r}\,'=-\vec{r},\tag{9.26}$$

или

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

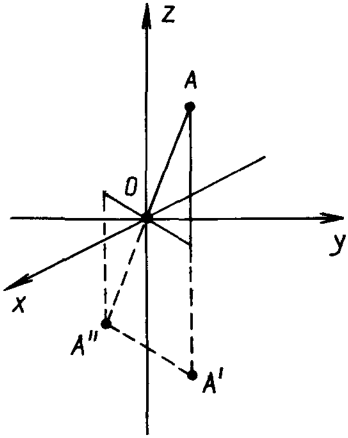

Рис 9 1

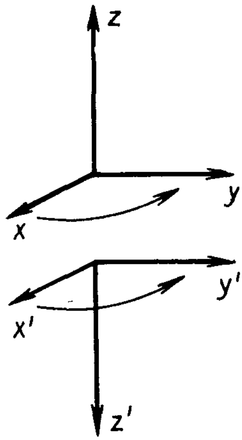

Рис 9 2.

Операцию инверсии можно провести в два этапа, комбинируя отражение в зеркале и поворот на угол 180°. На рисунке 9.1 точка A при отражении в зеркале, поверхность которого совпадает с плоскостью xOy, переходит в точку A'. Если совершить еще и поворот вокруг оси Oz, то точка A' совместится с точкой A'', координаты которой связаны с координатами точки A преобразованием инверсии. Поэтому симметрия систем относительно инверсии непосредственно связана с симметрией относительно отражения в зеркале — с симметрией «правого» и «левого».

Всякое преобразование координат можно трактовать двояко: как следствие перемещения системы (при неизменных осях координат) и как следствие изменения положения осей координат (при этом физическая система остается неподвижной). До сих пор мы использовали только первый способ. Однако второй способ эквивалентен первому. При нем преобразование (9.26) рассматривается как изменение направления осей координат: правая декартова система координат переходит в левую. Это показано на рисунке 9.2.

Предположим, что состояние физической системы не изменяется при инверсии. Пусть до преобразования она описывалась волновой функцией $\psi(\vec{r})$. Волновая функция $f(\vec{r}')$, описывающая систему после преобразования, должна удовлетворять равенству

$$\psi(\vec{r}) = f(\vec{r}') = f(-\vec{r}). \qquad (9.27)$$

Введем оператор, изменяющий вид функции при изменении знака у координат, и назовем его оператором инверсии:

$$\widehat{P}\psi(\vec{r}) = f(\vec{r})$$

Согласно равенству (9.27) имеем

$$\widehat{P}\psi(\vec{r}) = f(\vec{r}) = \psi(-\vec{r}). \qquad (9.28)$$

Если оператор $\widehat{P}$ коммутирует с гамильтонианом, то существует закон сохранения некоторой физической величины, которая получила название *четность*. Для указанной коммутации оператор Гамильтона системы должен быть инвариантным относительно инверсии координат, а это его свойство вытекает из предположения, что состояние физической системы не изменяется при инверсии.

Для определения допустимых значений четности запишем уравнение для собственных функций и собственных значений оператора инверсии:

$$\widehat{P}\varphi(\vec{r})=p\varphi(\vec{r}) \tag{9.29}$$

Применяя оператор $\widehat{P}$ к обеим частям соотношения (9.29), получим

$$\widehat{P}^2\varphi(\vec{r})=p^2\varphi(\vec{r}). \tag{9.30}$$

Но согласно определению оператора инверсии (9.28) последовательное применение его к любой функции дважды даст исходную функцию:

$$\widehat{P}(\widehat{P}\varphi(\vec{r}))=\widehat{P}\varphi(-\vec{r})=\varphi(\vec{r}). \tag{9.31}$$

Сравнивая уравнения (9.30) и (9.31), находим, что $p^2=1$, а $p=\pm 1$ — собственные значения оператора инверсии: $+1$ и -1. *Эти два числа и принимаются за значения новой физической величины — четности состояния микрочастицы или системы микрочастиц.*

Если функция состояния не изменяется при инверсии осей, то состояние четное, а четность равна $+1$; если изменяет знак — нечетное, четность -1.

В отличие от аддитивных сохраняющихся величин, рассмотренных ранее, четность — величина мультипликативная, т. е. четность системы равна произведению четностей ее частей. Это становится понятным, если, забегая вперед, сообщить, что функция состояния системы невзаимодействующих частиц равна произведению одночастичных функций:

$$\psi(x_1, x_2)=\varphi_1(x_1)\,\varphi_2(x_2).$$

Если $\widehat{P}$ и $\widehat{H}$ коммутируют, то существуют состояния с определенной энергией и определенной четностью. В качестве примера укажем на найденные ранее состояния гармонического осциллятора и частицы в прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками: четность стационарных состояний имеет определенное, не изменяющееся во времени значение — плюс или минус единица.

Все гамильтонианы электромагнитных взаимодействий не изменяются при пространственной инверсии, поэтому справедлив закон сохранения четности замкнутой системы при электромагнитных взаимодействиях в ней.

Мы рассмотрели четность состояния микрочастиц, обусловленную пространственным движением, описываемым волновой функцией. Однако результаты анализа многочисленных экспериментов — реакций с элементарными частицами — на основании закона сохранения четности заставляют приписывать элементарным частицам собственные (внутренние) значения четности, не связанные с движением частиц в пространстве. Так, например, электронам, нейтронам, протонам следует приписать внутреннюю четность $+1$, а пи-мезонам и позитронам — четность -1. Фотоны же могут иметь ту и другую четность.

В классической физике понятие о четности состояния не рассматривается в связи с тем, что изменение направления осей координат не приводит в силу применяемого там способа описания движений и взаимодействий к новой сохраняющейся величине. В квантовой механике понятие о четности возникает в связи с описанием состояния с помощью ψ-функции, а закон сохранения четности наряду с законами сохранения энергии, импульса, момента импульса оказывается связанным с фундаментальными свойствами пространства.

Рассматривая условный выбор либо «правой», либо «левой» систем, нет никаких оснований ожидать, что от этого выбора могут зависеть свойства изучаемых физических объектов — замкнутых систем микрочастиц. Однако возможен и другой взгляд на преобразования инверсии: можно предположить, что существуют два вида пространства — «правое» и «левое», не эквивалентные друг другу; связь между ними отражена в формулах инверсии осей координат. В таком случае гамильтонианы необязательно коммутируют с оператором инверсии и четность может не сохраняться. В 1956 г. было обнаружено, что процессы распада ядер и элементарных частиц, происходящие за счет слабого взаимодействия, происходят с нарушением закона сохранения четности. В настоящее время экспериментально подтверждено, что четность сохраняется в электромагнитных и сильных взаимодействиях и не сохраняется в слабых. Но до сих пор не вполне ясно, обусловлено ли нарушение закона сохранения четности только фундаментальными свойствами пространства и времени или связано с другими причинами.

Методические указания и рекомендации

1. В третьей главе объединены, по существу, два различных вопроса: математический аппарат и общие теоремы квантовой механики, изложенные на его основе.

По теории операторов кратко сообщаются самые необходимые сведения. Их можно при желании расширить, пользуясь литературой (например, [3], [5], [11]).

Важную роль играют аксиомы или постулаты квантовой механики, так как они устанавливают соответствие между идеальными математическими и реальными физическими объектами — функциями и операторами, с одной стороны, и системами микрочастиц, измеримыми величинами, физическими явлениями — с другой. Необходимо подчеркнуть модельный характер применяемых для математического описания реальных систем функций состояния, операторов величин и разобрать отображение реальных объектов на математические.

Непосредственная связь физической величины с числовым