Л Е К Ц И Я 5

СООТНОШЕНИЯ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТЕЙ

В координатном представлении

$$\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}, \quad \hat{\mathbf{P}} = -i\hbar\nabla.$$

Коммутаторы этих операторов таковы :

$$\left[\hat{r}_k, \hat{p}_l\right] = i\hbar\delta_{kl}\hat{I}.$$

Очевидно, что коммутатор оператора координаты с «чужим» компонентом импульса (скажем, $\hat{x}$ с $\hat{p}_y$) равен нулю. Проверим, что

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar\hat{I} \qquad (\hat{y}, \hat{p}_y \text{ и } \hat{z}, \hat{p}_z \text{, аналогично }).$$

Имеем:

$$[\hat{x}, \hat{p}_x]\psi(x) = \hat{x}\,\hat{p}_x\,\psi - \hat{p}_x\,\hat{x}\,\psi = x\left\{-i\,\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}\right\} + i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(x\psi) =$$

$$= -i\hbar\,x\frac{\partial\psi}{\partial x} + i\hbar\,x\frac{\partial\psi}{\partial x} + i\hbar\,\psi = i\hbar\,\hat{I}\,\psi,$$

откуда в силу произвольности ψ и получаем, что надо.

Итак, коммутатор координаты со «своим» импульсом отличен от нуля. Это накладывает ограничения на дисперсии координаты и импульса в заданном состоянии, называемые *соотношениями неопределенностей*. Проведем общее рассмотрение для наблюдаемых A и B, записывая

$$\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = i\,\hat{C},$$

где $\hat{C} \neq \hat{0}$. Операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ эрмитовы, и множитель i введен для того, чтобы оператор $\hat{C}$ был также эрмитовым (сам коммутатор антиэрмитов). Введем операторы уклонения от среднего значения в заданном состоянии:

$$\Delta\hat{A} \equiv \hat{A} - \left\langle\hat{A}\right\rangle\hat{I}, \; \Delta\hat{B} \equiv \hat{B} - \left\langle\hat{B}\right\rangle\hat{I}.$$

Они эрмитовы и удовлетворяют тому же коммутационному соотношению:

$$\left[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\right] = i\,\hat{C}.$$

Дисперсией наблюдаемой A (аналогично B) в состоянии ψ называется

$$D_\psi(A) \equiv (\Delta A)^2 \underline{\underline{\mathrm{det}}} \left\langle(\Delta\hat{A})^2\right\rangle.$$

Задача - получить ограничения на дисперсии наблюдаемых A и B.

Образуем скалярное произведение $(\Delta\hat{A}\,\psi, \Delta\hat{B}\,\psi)$ и найдем его мнимую часть:

$$\mathrm{Im}(\Delta\hat{A}\,\psi, \Delta\hat{B}\,\psi) = 1/2i\{\,(\Delta\hat{A}\,\psi, \Delta\hat{B}\,\psi) - (\Delta\hat{A}\,\psi, \Delta\hat{B}\,\psi)^*\,\} =$$

$$= 1/2i\{(\Delta\hat{A}\,\psi, \Delta\hat{B}\,\psi) - (\Delta\hat{B}\,\psi, \Delta\hat{A}\,\psi)\} =$$

$= 1/2i\{(\psi, \Delta\hat{A}\,\Delta\hat{B}\;\psi)-(\psi, \Delta\hat{B}\,\Delta\hat{A}\;\psi)\} =$

$= 1/2i\,(\psi, \left[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\right]\psi) = 1/2i(\psi, \hat{C}\;\psi) = 1/2\langle C\rangle.$

Учтем теперь, что модуль мнимой части не больше модуля самого числа, а затем воспользуемся неравенством Коши - Буняковского:

$$|\,\mathrm{Im}(\Delta\hat{A}\,\psi, \Delta\hat{B}\,\psi)| \le |\,(\Delta\hat{A}\,\psi, \Delta\hat{B}\,\psi)| \le \sqrt{(\Delta\hat{A}\psi, \Delta\hat{A}\psi)}\cdot\sqrt{(\Delta\hat{B}\psi, \Delta\hat{B}\psi)} =$$

$$= \sqrt{\left\langle\left(\Delta\hat{A}\right)^2\right\rangle}\sqrt{\left\langle\left(\Delta\hat{B}\right)^2\right\rangle} = \sqrt{(\Delta A)^2}\sqrt{(\Delta B)^2} \equiv (\Delta A)(\Delta B).$$

Сравнивая с предыдущим, мы и приходим к общему соотношению неопределенностей:

$$\Delta A\cdot\Delta B \ge 1/2\,|\langle C\rangle|.$$

В частности, для координаты и импульса $\hat{C} = \hbar\hat{I}$, а потому $\langle C\rangle = \hbar$, и получаем соотношение неопределенностей Гейзенберга:

$$\Delta x\Delta p_x \ge \hbar/2.$$

Ни в одном состоянии дисперсии координаты и импульса не могут обе быть нулями. Значит x и p_x совместно неизмеримы.

МАТРИЧНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ

Возьмем какой-то эрмитов оператор $\hat{A}$ и поставим задачу на собственные значения:

$$\hat{A}\,|\varphi_n\rangle = A_n|\varphi_n\rangle.$$

Допустим, что спектр - чисто дискретный. Это значит, что собственные векторы образуют ортонормированный базис:

$$(\varphi_n, \varphi_m) = \delta_{nm} \Leftrightarrow \langle\varphi_n|\varphi_m\rangle = \delta_{nm},$$

$$\sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| = \hat{I}\,.$$

Любой вектор $|\psi\rangle$ можно разложить по этому базису:

$$|\psi\rangle = \sum_n \psi_n|\varphi_n\rangle,$$

где дискретная последовательность коэффициентов Фурье

$$\psi_n = \langle\varphi_n|\psi\rangle$$

будет однозначно задавать состояние ψ. Расположим числа ψ_n в матрицу - столбец:

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ . \\ . \\ . \end{pmatrix}.$$

Она и представляет вектор состояния $|\psi\rangle$. Образуем эрмитово сопряженную матрицу, которая будет матрицей - строкой с компонентами

$$\tilde{\psi}_n = \langle\varphi_n|\psi\rangle^* = \langle\psi|\varphi_n\rangle = \psi^*_n.$$

Она будет представлять совектор $\langle\psi|$:

$$\langle\psi| = (\psi^*_1, \psi^*_2, \ldots).$$

С использованием условия полноты $\sum\limits_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| = \hat{I}$ скалярный квадрат запишется как

$$\langle\psi|\psi\rangle = \sum_n \langle\psi|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|\psi\rangle = \sum_n \psi^*_n\psi_n = \sum_n |\psi_n|^2 .$$

Если вектор $|\psi\rangle$ нормирован, т.е. $\langle\psi|\psi\rangle=1$, то сумма также равна 1, т.е. ряд сходится.

Рассмотрим теперь некоторый оператор $\hat{F}$,который действуя на $|\psi\rangle$ переводит его в $|\tilde{\psi}\rangle$:

$$|\tilde{\psi}\rangle = \hat{F}|\psi\rangle.$$

Умножая скалярно на $\langle\varphi_n|$ и пользуясь условием полноты, найдем:

$$\langle\varphi_n|\tilde{\psi}\rangle = \langle\varphi_n|\hat{F}\hat{I}|\psi\rangle = \sum_m \langle\varphi_n|\hat{F}|\varphi_m\rangle\langle\varphi_m|\psi\rangle,$$

или
$$\tilde{\psi}_n = \sum_m F_{nm}\psi_m,$$

где введена матрица оператора:

$$F_{nm} \equiv \langle\varphi_n|\hat{F}|\varphi_m\rangle.$$

Оператор $\hat{F}$ переводит $|\psi\rangle$ в $|\tilde{\psi}\rangle$, а матрица F_{nm} переводит компоненты ψ_n вектора $|\psi\rangle$ в компоненты $\tilde{\psi}_n$ вектора $|\tilde{\psi}\rangle$. Если оператор эрмитов, то и его матрица эрмитова:

$$F_{nm} = (F_{mn})^*.$$

Среднее значение оператора $\hat{F}$ в состоянии ψ теперь вычисляется так:

$$\langle F\rangle = \langle\psi\hat{I}|F|\hat{I}\psi\rangle = \sum_{n,m}\langle\psi|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|F|\varphi_m\rangle\langle\varphi_m|\psi\rangle = \sum_{n,m}\psi^*_n F_{nm}\psi_m ,$$

т.е.

$$\langle F\rangle = \sum_{n,m} F_{nm}\,\psi^*_n\,\psi_m.$$

Рассмотрим теперь другое представление, порожденное оператором $\hat{B}$:

$$\hat{B}|\varphi'_n\rangle = B_n|\varphi'_n\rangle,\ \langle\varphi'_n|\varphi'_m\rangle = \delta_{nm},\ \sum_n |\varphi'_n\rangle\langle\varphi'_n| = \hat{I}.$$

Векторы $|\psi\rangle$ в нем представляются другими волновыми функциями:

$$\psi'_n = \langle\varphi'_n|\psi\rangle,$$

а операторы $\hat{F}$ - другими матрицами:

$$F'_{nm} = \langle\varphi'_n|\hat{F}|\varphi'_m\rangle.$$

Но так как оба базиса - ортонормированные, то волновые функции и матрицы операторов в обоих представлениях связаны унитарным преобразованием:

$$\psi'_n = \sum_m U_{nm}\psi_m,\ F'_{nm} = \sum_{n',m'} U_{nn'}F_{n'm'}U^+_{m'm}.$$

Раньше мы формулировали эти утверждения на языке операторов.

Найдем шпур (след) матрицы оператора $\hat{F}$ в B -представлении:

$$SpF' \equiv \sum_n F'_{nn} = \sum_{n,m',n'} U_{nn'}F_{n'm'}U^+_{m'n} = \sum_{n,m',n'} U^+_{m'n}U_{nn'}F_{n'm'} =$$

$$= \sum_{m',n'} \delta_{m'n'}F_{n'm'} = \sum_{m'} F_{m'm'} = SpF, \quad (U^+U = I),$$

т.е. шпур матрицы инвариантен относительно унитарного преобразования - не зависит от выбора представления.

Задача на собственные значения оператора $\hat{F}$

$$\hat{F}|\psi\rangle = F|\psi\rangle$$

в матричном A-представлении ставится как

$$\sum_m F_{nm}\psi_m = F\psi_n \Leftrightarrow \sum_m (F_{nm}-F\delta_{nm})\psi_m = 0.$$

Система однородных линейных уравнений для определения ψ_m имеет нетривиальные решения при условии

$$\det\|F_{nm}-F\delta_{nm}\| = 0$$

Это *вековое* или характеристическое уравнение является алгебраическим. Его решения $F_1, F_2, \ldots F_k\ldots$ есть искомые собственные значения. Подставляя каждое из них в систему уравнений, найдем последовательности

F_1: $\psi^{(1)}_1, \psi^{(1)}_2, \ldots \psi^{(1)}_n, \ldots$

F_2: $\psi^{(2)}_1, \psi^{(2)}_2, \ldots \psi^{(2)}_n \ldots$

....

представляющие собственные векторы $|\psi^{(n)}\rangle$, т.е. являющиеся их волновыми функциями.

Если в качестве базисных векторов выбрать собственные векторы $|\psi_n\rangle$ оператора $\hat{F}$, то его матрица будет диагональной:

$$F_{nm} = \langle\psi_n|\hat{F}|\psi_m\rangle = \langle\psi_n|F_m|\psi_m\rangle = F_m\langle\psi_n|\psi_m\rangle = F_m\delta_{nm}$$

Таким образом, решение задачи на собственные значения оператора $\hat{F}$ равнозначна диагонализации его матрицы: находим$|\psi_n\rangle$, устанавливаем унитарное преобразование, связывающее $|\psi_n\rangle$ с $|\varphi_n\rangle$, и совершаем это унитарное преобразование над исходной матрицей F_{nm}. В результате и получим диагональную матрицу.

Все те же операции можно проделать и в случае, когда спектр оператора $\hat{A}$ - *непрерывный*, но все надо понимать в обобщенном смысле. Базис образуют обобщенные собственные векторы:

$$\hat{A}\ |\chi_A\rangle = A|\chi_A\rangle,\ \langle\chi_A|\chi_B\rangle = \delta(A\text{-}B),\quad \int dA|\chi_A\rangle\langle\chi_A| = \hat{I}\ .$$

Волновая функция

$$\psi\ (\ A\ )= \langle\chi_A|\psi\rangle$$

есть «настоящая» функция, ибо зависит от непрерывного аргумента. Если оператор $\hat{F}$ переводит вектор $|\psi\rangle$ в $\left|\ \tilde{\psi}\right\rangle$, т.е.

$$\left|\ \tilde{\psi}\right\rangle\ = \hat{F}|\psi\rangle,$$

то для волновых функций имеем:

$$\tilde{\psi}\ (A) \equiv \langle\chi_A|\ \tilde{\psi}\ \rangle = \langle\chi_A|\hat{F}|\psi\rangle = \int\langle\chi_A|\hat{F}|\chi_{A'}\rangle\ \langle\chi_{A'}|\psi\rangle,$$

т.е.

$$\tilde{\psi}\ (A) = \int F(A,A')\psi\ (A')dA',$$

где

$$F(A,A') \equiv \langle\chi_A|\hat{F}|\chi_{A'}\rangle$$

ядро интегрального оператора $\hat{F}$.

Для произведения двух операторов

$$\hat{F}_1 = \hat{F}_2\hat{F}_3$$

получим

$$F_1(A,A') = \langle\chi_A|\hat{F}_2\hat{F}_3\ |\chi_{A'}\rangle = \langle\chi_A|\hat{F}_2|\chi_{A''}\rangle\ \langle\chi_{A''}|\hat{F}_3|\chi_{A'}\rangle\ dA'',$$

т.е. ядро произведения получается как свертка операторов-сомножителей:

$$F(A,A') = \int F(A,\ A')\ F(A'',A')dA'.$$

- . .- . - . - .

Рассмотрим уравнение Шредингера

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = \hat{H}\,|\psi\rangle,$$

которое для одной частицы во внешнем поле записывается как

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = \frac{\hat{P}^2}{2m}|\psi\rangle + V(\mathbf{r})|\psi\rangle.$$

В координатном представлении мы его уже получали:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r},t) = -\hbar^2/2\mathrm{m}\cdot\nabla^2\ \psi(\mathbf{r},t) + \hat{V}(\mathbf{r})\ \psi(\mathbf{r},t).$$

Найдем теперь уравнение Шредингера в импульсном представлении. Нам нужно найти действие оператора $\hat{H}$, т.е. $\hat{K} = \dfrac{\hat{P}^2}{2m}$ и $V(\mathbf{r})$ на волновую функцию $\tilde{\psi}(p)$, которая есть

$$\tilde{\psi}(\mathrm{p}) = \langle \chi_{\mathrm{p}} | \psi \rangle.$$

Для ядра оператора V имеем

$$W(\mathbf{p},\mathbf{p}') = \langle \chi_{\mathbf{p}} | \hat{V} | \chi_{\mathbf{p}'} \rangle = (\chi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}), V(\mathbf{r})\, \chi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r})),$$

где $\chi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$ - собственные функции оператора импульса в координатном представлении:

$$\chi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{pr}}.$$

Подстановка дает:

$$\mathrm{W}(\mathbf{p},\mathbf{p}') = \int d\mathbf{r} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{pr}} V(\mathbf{r}) e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}'\mathbf{r}},$$

т.е. ядро W получается из V путем преобразования Фурье:

$$\mathrm{W}(\mathbf{p},\mathbf{p}') = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{r} V(\mathbf{r}) e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\mathbf{r}}.$$

Для оператора кинетической энергии $\hat{K}$ имеем:

$$K(\mathbf{p},\mathbf{p}') = -\hbar^2/2\mathrm{m}\cdot(\chi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}),\nabla^2\chi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}')) = -\hbar^2/2\mathrm{m}\cdot \int d\mathbf{r} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{pr}} \nabla^2 e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}'\mathbf{r}} =$$

$$= -\hbar^2/2\mathrm{m}\cdot \frac{(-\mathbf{p}')^2}{\hbar^2} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{r} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\mathbf{r}} = \mathbf{p}^2/2\mathrm{m}\cdot\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}'):$$

т.е.

$$K(\mathbf{p},\mathbf{p}') = \mathbf{p}^2/2\mathrm{m}\cdot\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}').$$

Подставляем все это в уравнение Шредингера в импульсном представлении:

$$i\hbar\frac{\partial\tilde{\psi}(\mathbf{p},t)}{\partial t} = \int H(\mathbf{p},\mathbf{p}')\psi(\mathbf{p}',t)d\mathbf{p}' = \int \{K(\mathbf{p},\mathbf{p}') + W(\mathbf{p},\mathbf{p}')\}\psi(\mathbf{p}',t)d\mathbf{p}'.$$

Получаем:

$$i\hbar\frac{\partial\tilde{\psi}(\mathbf{p},t)}{\partial t} = \int d\mathbf{p}'\left\{\frac{\mathbf{p}^2}{2m}\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}') + W(\mathbf{p},\mathbf{p}')\right\}\tilde{\psi}(\mathbf{p}',t),$$

т.е.

$$i\hbar\frac{\partial\tilde{\psi}(\mathbf{p},t)}{\partial t} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}\tilde{\psi}(\mathbf{p},t) + \int d\mathbf{p}' W(\mathbf{p},\mathbf{p}')\tilde{\psi}(\mathbf{p}',t),$$

где

$$W(\mathbf{p},\mathbf{p}') = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{r} V(\mathbf{r}) e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\mathbf{r}}.$$

В итоге получилось интегро-дифференциальное уравнение.

Если $V(\mathbf{r})$есть полином от r^2,т.е. включает сумму членов вида

$$V_n = a_n r^{2n},$$

то есть уравнение Шредингера сводится к дифференциальному. Действительно, в этом случае

$$W_n(\mathbf{p},\mathbf{p}') = \frac{a_n}{(2\pi\hbar)^3}\int d\mathbf{r}\, r^{2n} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\mathbf{r}} = \frac{a_n}{(2\pi\hbar)^3}\int d\mathbf{r} \left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_p\right)^{2n} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\mathbf{r}} =$$

$$= a_n\,(-\hbar^2\nabla^2{}_p)^n \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int d\mathbf{r}\, e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\mathbf{r}} = a_n(-\hbar^2\nabla^2{}_p)^n\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}');$$

$$\int W_n(\mathbf{p},\mathbf{p}')\ \tilde{\psi}(\mathbf{p}',t)d\mathbf{p}' = a_n(-\hbar^2\nabla^2{}_p)^n\int \delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\ \tilde{\psi}(\mathbf{p}',t)d\mathbf{p} = \mathrm{a_n}\,(-\hbar^2\nabla^2{}_p)^n\,\tilde{\psi}(\mathbf{p},t);$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\ \tilde{\psi}(\mathbf{p},t) = (\mathbf{p}^2/2m + a_n(-\hbar^2\nabla^2{}_p)^n)\ \tilde{\psi}(\mathbf{p},t).$$

Важный пример - изотропный гармонический осциллятор, с

$$V(\mathbf{r}) = \frac{k\hat{r}^2}{2} = \frac{m\omega^2 r^2}{2}\ \ (\omega^2 \equiv k/m).$$

В координатном представлении уравнение Шредингера записывается как

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r},t) = -\hbar^2/2\mathrm{m}\cdot\nabla^2\ \psi(\mathbf{r},t) + (m\ \omega^2\ r^2/2)\psi(\mathbf{r},t).$$

В импульсном представлении, учитывая, что $n = 1$ и $a = m\omega^2/2$, имеем:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\ \tilde{\psi}(\mathbf{p},t) = \mathrm{p}^2/2m\,\tilde{\psi}(\mathbf{p},t) - \hbar^2 m\omega^2/2\nabla^2\,\tilde{\psi}(\mathbf{p},t)$$

Уравнения с точностью до переобозначения констант идентичны, а значит идентичны и их решения. Но они, как функции в координатном и импульсном представлениях, должны быть связаны преобразованием Фурье. Поэтому, если не обращать внимания на константы, волновые функции изотропного гармонического осциллятора инвариантны относительно преобразования Фурье: сами функции и их фурье-образы практически совпадают. Таким свойством обладают функции Эрмита и только они, и мы предсказываем волновые функции стационарных состояний осциллятора.

КАРТИНЫ ШРЕДИНГЕРА И ГЕЙЗЕНБЕРГА

Зависимость от времени можно ввести в квантовую механику разными способами. Они называются разными картинами (представлениями).

До сих пор мы пользовались *картиной Шредингера*, в которой считается, что всю зависимость от времени несут векторы состояния (волновые функции), а в операторы наблюдаемых она может входить лишь в исключительных случаях (например, в гамильтониан системы, находящейся в нестационарных внешних условиях). Основным динамическим уравнением в картине Шредингера является *уравнение Шредингера*.

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi_ш(t)\rangle = \hat{H}_ш\,|\psi_ш(t)\rangle.$$

Оно позволяет связать вектор состояния $|\psi_ш(t)\rangle$ в произвольный момент времени t с вектором состояния $|\psi_ш(t_0)\rangle$, заданным в начальный момент t_0. Ведем *оператор эволюции* $\hat{U}(t,t_0)$ определением

$$|\psi_ш(t)\rangle = \hat{U}(t,t_0)|\psi_ш(t_0)\rangle.$$

Так как нормировка векторов не должна меняться во времени, имеем:

$$1 = \langle\psi_ш(t_0)|\psi_ш(t_0)\rangle = \langle\psi_ш(t)|\psi_ш(t)\rangle = \langle\psi_ш(t_0)\,\big|\hat{U}^+(t,t_0)\hat{U}(t,t_0)\,|\,\psi_ш(t_0)\rangle,$$

т.е. $\hat{U}(t,t_0)$ должен быть унитарным оператором:

$$\hat{U}^+(t,t_0)\hat{U}(t,t_0) = I\ .$$

Если гамильтониан $\hat{H}$ не зависит явно от времени (стационарные внешние условия), то оператор эволюции может быть выписан в явном виде:

$$\hat{U}(t,t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_ш(t-t_0)}$$

Тогда

$$|\psi_ш(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_ш(t-t_0)}.$$

Дифференцируя это соотношение по времени, найдем::

$$\frac{\partial}{\partial t}|\psi_ш(t)\rangle = -i/\hbar\cdot\hat{H}_ш e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_ш(t-t_0)} = -i/\hbar\cdot\hat{H}_ш|\psi_ш(t)\rangle \quad\Rightarrow\quad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\,\psi_ш(t)\rangle = \hat{H}_ш|\psi_ш(t)\rangle,$$

т.е. получим уравнение Шредингера, как и должно быть.

Перейдем теперь к *картине Гейзенберга*, совершая унитарное преобразование

$$|\psi_г(t)\rangle = \hat{U}^+(t,t_0)|\psi_ш(t)\rangle = \hat{U}^+(t,t_0)\ \hat{U}(t,t_0)|\psi_ш(t_0)\rangle =$$

$$= \hat{I}\,|\psi_ш(t_0)\rangle = |\psi_ш(t_0)\rangle$$

т.е.

$$|\psi_г(t)\rangle = |\psi_ш(t_0)\rangle = |\psi_г(t_0)\rangle \equiv |\psi_г\rangle.$$

Таким образом, в картине Гейзенберга векторы состояний *не меняются во времени*: один и тот же вектор описывает состояние системы во все моменты времени.

Но теперь вся зависимость от времени перекидывается на операторы наблюдаемых, унитарное преобразование которых дает

$$\hat{F}_г(t) = \hat{U}^+(t,t_0)\,\hat{F}_ш\,\hat{U}(t,t_0)\ .$$

При унитарном преобразовании средние значения наблюдаемых не меняются. Их в разных картинах можно записать как

$$\langle F\rangle\,(t) = \langle\psi_ш(t)\,|\hat{F}_ш|\psi_ш(t)\,\rangle =$$

$$= \langle\psi_г|\hat{U}^+(t,t_0)\,\hat{F}_ш\,\hat{U}(t,t_0)|\psi_г\rangle = \langle\psi_г|\hat{F}_г(t)\,|\psi_г\rangle.$$

Таким образом, зависимость от времени средних значений не зависит от выбора картины, а именно она-то и является самой главной.

В картине Гейзенберга уравнения Шредингера нет, так как векторы состояний постоянны. Основные динамические уравнения формулируются для операторов. Чтобы получить их, найдем сначала уравнение, которому подчиняется оператор эволюции и сопряженный ему. Имеем:

$$|\psi_{ш}(t)\rangle = \hat{U}(t,t_0)|\psi_{ш}(t_0)\rangle.$$

Дифференцируем по времени:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi_{ш}(t)\rangle = i\hbar\frac{d}{dt}\hat{U}(t,t_0)|\psi_{ш}(t_0)\rangle.$$

С другой стороны, согласно уравнению Шредингера,

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi_{ш}(t)\rangle = \hat{H}_{ш}|\psi_{ш}(t_0)\rangle = \hat{H}_{ш}\hat{U}(t,t_0|\psi_{ш}(t_0)\rangle.$$

Сравнение дает уравнение

$$i\hbar\frac{d}{dt}\hat{U}(t,t_0) = \hat{H}_{ш}\hat{U}(t,t_0),$$

к которому нужно добавить очевидное начальное условие

$$\hat{U}(t_0,t_0) = \hat{I}.$$

Переходя к сопряженному уравнению с учетом эрмитовости $\hat{H}$ найдем

$$-i\hbar\frac{d}{dt}\hat{U}^{+}(t,t_0) = \hat{U}^{+}(t,t_0)\hat{H}_{ш}$$

Гамильтониан в КГ имеет вид

$$\hat{H}_{г} = \hat{U}^{+}(t,t_0)\hat{H}_{ш}\hat{U}(t,t_0).$$

Если

$$\left[\hat{H}_{ш,}\hat{U}\right] = \hat{0},$$

то мы выносим $\hat{H}_{ш}$ налево и пользуемся унитарностью $\hat{U}^{+}\hat{U} = \hat{I}$. Тогда получим

$$\hat{H}_{г}(t) = \hat{H}_{ш} \equiv \hat{H}.$$

Это справедливо, в частности, когда $\hat{H}_{ш}$ не зависит от времени и (см. выше)

$$\hat{U}(t,t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{ш}(t-t_0)}.$$

Очевидно, что в этом случае $\left[\hat{H}_{ш},\hat{U}\right] = \hat{0}$.

Теперь, пользуясь уравнениями для $\hat{U}$ и $\hat{U}^{+}$, мы можем получить динамические уравнения для операторов наблюдаемых в картине Гейзенберга:

$$\hat{F}_{г}(t) = \hat{U}^{+}(t,t_0)\hat{F}_{ш}\hat{U}(t,t_0).$$

Дифференцируем по времени:

$$\frac{d}{dt}\hat{F}_{\text{г}}(t) =$$

$$= \frac{d}{dt}\left\{\hat{U}^{+}\hat{F}_{ш}\hat{U}\right\} = \frac{d\hat{U}^{+}}{dt}\hat{F}_{ш}\hat{U} + \hat{U}^{+}\frac{\partial\hat{F}_{ш}}{\partial t}\hat{U} + \hat{U}^{+}\hat{F}_{ш}\frac{d\hat{U}}{dt} =$$

$$= \frac{1}{-i\hbar}\hat{U}^{+}\hat{H}_{ш}\hat{F}_{ш}\hat{U} + \hat{U}^{+}\frac{\partial\hat{F}_{ш}}{\partial t}\hat{U} + \hat{U}^{+}\hat{F}_{ш}\frac{1}{i\hbar}\hat{H}_{ш}\hat{U} =$$

$$= \hat{U}^{+}\frac{\partial\hat{F}_{ш}}{\partial t}\hat{U} + \frac{i}{\hbar}\hat{U}^{+}\left[\hat{H}_{ш}, \hat{F}_{ш}\right]\hat{U}\,.$$

В итоге получаем *уравнения Гейзенберга* - динамические уравнения в картине Гейзенберга:

$$\frac{d}{dt}\hat{F}_{\text{г}}(t) = \frac{\partial\hat{F}_{\tilde{A}}}{\partial t}(t) + \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}_{\tilde{A}}(t), \hat{F}_{\tilde{A}}(t)\right],$$

где по определению

$$\frac{\partial\hat{F}_{\partial}}{\partial t}(t) \equiv \hat{U}^{+}(t,t_0)\frac{\partial\hat{F}_{ш}}{\partial t}\hat{U}(t,t_0)\,.$$

Картина Шредингера хороша при практической работе (уравнения для векторов состояний в определенном представлении становятся дифференциальными уравнениями для обычных функций - волновых функций). Картина Гейзенберга с этой точки зрения хуже (уравнения для операторов), но она хороша при общих размышлениях. В частности, позволяет с легкостью обсудить законы сохранения.