Л Е К Ц И Я 6

ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ

В картине Шредингера затруднительно сразу сказать, что такое сохраняющаяся физическая величина, так как операторы наблюдаемых обычно вообще от времени не зависят. Приходится исхитряться (см. ниже). А в картине Гейзенберга все ясно.

Если

$$\frac{d}{dt}\hat{F}_{\Gamma}(t) = \hat{0}, \quad \Rightarrow \quad \hat{F}_{\Gamma}(t) = \text{const},$$

то $\hat{F}$ - *интеграл движения* (точнее, интегралом движения является величина, описываемая этим оператором). Из уравнения Гейзенберга сразу следует необходимое и достаточное условие сохранения наблюдаемой *F*:

$$\frac{\partial \hat{F}_{\Gamma}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}_{\Gamma}, \hat{F}_{\Gamma}\right] = \hat{0}$$

Особенно просто все выглядит в наиболее типичном случае, когда

$$\underline{\frac{\partial \hat{F}_{ш}}{\partial t} = \hat{0} \Leftrightarrow \frac{\partial \hat{F}_{\Gamma}}{\partial t} = \hat{0}.}$$

В этом случае сохранение наблюдаемой *F* равнозначно коммутативности ее оператора с гамильтонианом, причем безразлично, в какой картине:

$$\frac{\partial \hat{F}}{\partial t} = \hat{0}: \left[\hat{H}_{\Gamma}, \hat{F}_{\Gamma}\right] = \hat{0} \Leftrightarrow \left[\hat{H}_{ш}, \hat{F}_{ш}\right] = \hat{0},$$

это условия сохранения.

Кстати, если

$$\frac{\partial \hat{H}_{ш}}{\partial t} = \hat{0}, \ \left[\hat{H}_{ш}, \hat{F}_{ш}\right] = \hat{0},$$

то

$$\hat{F}_{\Gamma} = \hat{F}_{ш}.$$

Важный частный случай:

- Если гамильтониан системы не зависит явно от времени, т.е. $\frac{\partial}{\partial t}\hat{H} = \hat{0}$, то энергия сохраняется.

Это очевидно, так как гамильтониан коммутирует сам с собой. Еще один важный результат:

- Если гамильтониан не зависит от времени, и величина *F* сохраняется, то она совместно измерима с энергией.

Это тоже очевидно, так как условие $\left[\hat{H}, \hat{F}\right] = \hat{0}$ как раз и равнозначно совместной измеримости наблюдаемых. В такой ситуации можно построить систему общих собственных векторов наблюдаемых *H* и *F*. Но собственные векторы $\hat{H}$ описывают стационарные состояния системы. Значит, стационарные состояния будут квалифицироваться еще и собственными значениями оператора $\hat{F}$. Идеальной является ситуация, когда мы умудримся построить полный набор сохраняющихся наблюдаемых. Тогда классификация стационарных состояний будет исчерпывающей. В частности, именно так классифицируются стационарные состояния атома водорода. Задаются: главное квантовое число (номер стационарного состояния, определяющий энергию), азимутальное квантовое число (орбитальный момент импульса), магнитное квантовое число (проекция орбитального момента импульса) и спиновое квантовое число (проекция спина). Но об этом подробнее потом, а сейчас так, для понимания важности обсуждаемых проблем.

Итак, в картине Гейзенберга скорость изменения фазовой величины *F* задает

$$\frac{d}{dt}\hat{F}_{\Gamma}(t)$$

А как в картине Шредингера? Ведем здесь *новый оператор*

$$\hat{\dot{F}} \equiv \frac{\partial \hat{F}_{ш}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}_{ш}, \hat{F}_{ш}\right],$$

который *не* равен $\dot{\hat{F}}$, т.е. $\frac{d\hat{F}}{dt} = \hat{0}$, ибо чаще всего последняя величина в картине Шредингера есть просто 0. Для выяснения смысла нового оператора найдем скорость изменения среднего значения наблюдаемой *F* в состоянии ψ, пользуясь в промежуточных выкладках уравнением Шредингера:

$$\frac{d}{dt}\langle F\rangle_{\psi}(t) = \frac{d}{dt}(\psi_{ш}(t),$$

$$\hat{F}_{ш}\,\psi_{ш}(t)) = (\frac{\partial}{\partial t}\psi_{ш}, \hat{F}_{ш}\psi_{ш}) + (\psi_{ш}, \frac{\partial}{\partial t}\hat{F}_{ш}\psi) + (\psi_{ш}, \hat{F}_{ш}\frac{\partial}{\partial t}\psi_{ш}) =$$

$$= (1/i\hbar\;\hat{H}_{ш}\psi_{ш}, \hat{F}_{ш}\psi_{ш}) + (\psi_{ш}\frac{\partial}{\partial t}\hat{F}_{ш}\psi_{ш}) + (\psi_{ш}\hat{F}_{ш}\,1/i\hbar\;\hat{H}_{ш}\psi_{ш}) =$$

$$= -1/i\hbar\,(\psi_{ш}, \hat{H}_{ш}\hat{F}_{ш}\psi_{ш}) + (\psi_{ш}, \frac{\partial}{\partial t}\hat{F}_{ш}\psi_{ш}) + 1/i\hbar\,(\psi_{ш}, \hat{F}_{ш}\hat{H}_{ш}\psi_{ш}) =$$

$$= (\psi_{ш}, \frac{\partial}{\partial t}\hat{F}_{ш}\psi_{ш}) + i/\hbar\,(\psi_{ш}, \mathrm{X}\hat{H}_{ш}\;\hat{F}_{ш}\;]\;\psi_{ш}).$$

Таким образом,

$$\frac{d}{dt}\langle F\rangle_{\psi}(t) = (\psi_{ш}, \left\{\frac{\partial \hat{F}_{ш}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}_{ш}, \hat{F}_{ш}\right]\right\}\psi_{ш}) \equiv (\psi_{ш}, \hat{\dot{F}}_{ш}\psi_{ш}) = \rangle\hat{\dot{F}}_{ш}\langle_{\psi}(t).$$

В этом смысле оператор $\hat{\dot{F}}$ и описывает скорость изменения величины *F* - он задает скорость изменения ее среднего значения.

СВЯЗЬ ЗАКОНОВ СОХРАНЕНИЯ С СИММЕТРИЯМИ

Пусть

$$\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = \hat{0}$$

Рассмотрим эрмитов оператор $\hat{C}$ ($\hat{C}^{+} = \hat{C}$), такой, что

$$\frac{\partial \hat{C}}{\partial t} = 0, \quad \left[\hat{H}, \hat{C}\right] = \hat{0}.$$

Построим однопараметрическое семейство операторов

$$\hat{V}(a) = \mathrm{e}^{ia}\hat{C}.$$

Из эрмитовости $\hat{C}$ следует унитарность $\hat{V}(a)$:

$$\hat{V}^{+}\hat{V} = \mathrm{e}^{ia}\hat{C}\ \mathrm{e}^{-ia}\hat{C} = \hat{I}.$$

Из коммутативности $\hat{C}$ с $\hat{H}$ следует коммутативность $\hat{V}$ с $\hat{H}$:

$$\hat{H}\ \hat{V}(a) = \hat{V}(a)\hat{H},$$

откуда, умножая слева на $\hat{V}^{+}$ и используя унитарность, найдем

$$\hat{V}(a)\hat{H}\ \hat{V}(a) = \hat{H}.$$

Таким образом, после совершения унитарного преобразования гамильтониан остается неизменным:

$$\hat{H}' = \hat{H}.$$

Это и означает (собственно по определению), что в системе есть *симметрия*.

Важно, что все рассуждения можно обратить. Если $\hat{V}$(a) - унитарное однопараметрическое преобразование, сохраняющее гамильтониан, то существует сохраняющаяся наблюдаемая, оператор которой находится как

$$\hat{C} = \frac{1}{i}\frac{\partial \hat{V}_a}{\partial a}\Big|_{a=0}.$$

Этот оператор эрмитов и коммутирует с гамильтонианом:

$$\hat{C}^{+} = \hat{C}, \ \left[\hat{H}, \hat{C}\right] = \hat{0}.$$

Пример. Рассмотрим систему с одной степенью свободы (координата x) и в качестве $\hat{C}$ возьмем оператор импульса:

$$\hat{C} = \hat{P} = -i\hbar\frac{d}{dx} \ \Rightarrow\ \hat{T}(a) = \mathrm{e}^{i/\hbar\,\hat{P}\,a} = \mathrm{e}^{a\mathrm{d}/\mathrm{d}x}.$$

Посмотрим, как он действует на волновую функцию:

$$\hat{T}(a)\psi(x) = \mathrm{e}^{a\mathrm{d}/\mathrm{d}x}\,\psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(a\frac{d}{dx})^{n}}{n!}\psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{a^{n}}{n!}\frac{d^{n}\psi(x)}{dx}.$$

Но справа стоит разложение функции $\psi(x+a)$ в ряд Тейлора по a. Таким образом, оператор $\hat{T}(a)$ есть оператор трансляции на a:

$$\hat{T}(a)\,\psi(x) = \psi(x+a).$$

Очевидно, что оператор $\hat{T}^+(a)$ есть оператор трансляции на $-a$:

$$\hat{T}^+(a)\,\psi(x) = \psi(x-a).$$

В результате рассматриваемого преобразования операторы $\hat{F}$ наблюдаемых переходят в

$$\hat{F}' = \hat{T}^+(a)\hat{F}\,\hat{T}(a).$$

Найдем $\hat{F}'$ в явном виде, считая, что $\hat{F} = \hat{F}(x)$. Имеем:

$$\hat{F}' = \psi(x)\hat{F}(x)\,\hat{T}(a)\,\psi(x) = \hat{T}^+(a)(\hat{F}(x)\,\psi(x+a)) \equiv \hat{T}^+(a)\varphi(x) =$$

$$= \varphi(x-a) = \hat{F}(x-a)\,\psi(x):$$

$$\hat{T}^+(a)\hat{F}(x)\,\hat{T}(a) = \hat{F}(x-a).$$

Если же $\hat{F} = \hat{F}(\hat{p})$, то он коммутирует с $\hat{T}(a)$, а потому не меняется:

$$\hat{T}^+(a)\hat{F}(\hat{p})\hat{T}(a) = \hat{F}(\hat{p}).$$

Обратные рассуждения (более важные) таковы. Пусть система трансляционно инвариантна. Это значит, что

$$\hat{H}' = \hat{T}^+(a)\hat{H}\,\hat{T}(a) = \hat{H}.$$

Так как

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(x),$$

то

$$\hat{H}' = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(x-a).$$

Инвариантность означает, что

$$U(x-a) = U(x),$$

т.е. потенциальная энергия не зависит от x. Она есть константа, которую можно положить равной нулю. Тем самым в данном случае результат получается достаточно тривиальным: трансляционно инвариантной является система, состоящая из одной свободной частицы. Сохраняющейся величиной будет

$$\hat{C} = \frac{1}{i}\frac{\partial\hat{T}(a)}{\partial a}\Big|_{a=0} = \hat{p},$$

что в данном случае приводит к закону сохранения импульса.

СВОБОДНАЯ КВАНТОВАЯ ЧАСТИЦА

Рассмотрим поведение свободной квантовой частицы в координатном представлении, где

$$\hat{\mathbf{P}} = -i\hbar\nabla, \quad \left[\hat{p}_j, \hat{p}_k\right] = \hat{0},$$

а гамильтониан имеет вид

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2\mu} = -\hbar^2/2\mu\nabla^2,$$

(μ - масса частицы). Гамильтониан не меняется при трансляциях (см. пример), а потому

$$\left[\hat{H}, \hat{p}_j\right] = 0,$$

и импульс сохраняется. В полный набор можно включить $\hat{H}$ и $\hat{\mathbf{P}}$ - всего четыре оператора. Но степеней свободы три. Дело просто в том, что не все четыре оператора независимы: $\hat{H}$ выражается через $\hat{\mathbf{P}}$.

Возьмем в качестве операторов полного набора $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$. Они имеют общие собственные функции

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

Каждая из них является собственной и для гамильтониана:

$$\hat{H}\phi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = -\hbar^2/2\mu\nabla^2 \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i/\hbar\, \mathbf{pr}} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(-\frac{\mathbf{p}^2}{\hbar^2}\right)\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i/\hbar\mathbf{pr}} = \mathbf{p}^2/2\mu\, \phi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$$

Таким образом, функции $\phi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$ описывают стационарные состояния частицы со значениями энергии

$$E = \mathbf{p}^2/2\mu.$$

Полная собственная функция гамильтониана, т.е. волновая функция стационарного состояния с зависимостью от времени, имеет вид

$$\psi(\mathbf{r},t) = e^{-i/\hbar\, Et}\psi(\mathbf{r}).$$

В нашем случае

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r},t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} e^{-i/\hbar\, p2}t/^{2\mu} \cdot e^{i/\hbar\, \mathbf{pr}}.$$

Можно взять и другой полный набор: $\hat{H}$ и $\hat{\mathbf{n}} = \hat{\mathbf{p}}/|\mathbf{p}|$ (единичный вектор в направлении импульса). Так как $|\hat{\mathbf{n}}| = 1$, то у него всего два независимых компонента. Добавляя гамильтониан, получим три оператора, как и должно быть. При таком выборе полного набора полные волновые функции стационарных состояний с учетом $|\mathbf{p}| = \sqrt{2\mu E}$ запишутся как

$$\psi_{E,\mathbf{n}}(\mathbf{r},t) = Ce^{-i/\hbar\, Et} e^{\frac{i}{\hbar}\sqrt{2\mu E}\mathbf{nr}}.$$

Константа C находится из условия нормировки, но в данном случае ее проще найти из условия полноты системы волновых функций.

Проведем эту достаточно утомительную выкладку. В абстрактном гильбертовом пространстве условие полноты записывается как

$$\int dE \int\limits_{|\mathbf{n}|=1} d\mathbf{n}\, |E,\mathbf{n}.t\rangle\, \langle E,\mathbf{n}.t| = \hat{I}\ .$$

Перейдем к координатному представлению, умножая это равенство слева на $\langle \mathbf{r}$,а справа на$|\mathbf{r}'\rangle$:

$$\int\limits_{|\mathbf{n}|=1} d\mathbf{n} \int \mathrm{d}E\, \langle \mathbf{r}|E\mathbf{n},t\rangle\, \langle E\mathbf{n},t|\mathbf{r}'\rangle\ =\ \langle \mathbf{r}\,|\mathbf{r}'\rangle.$$

Отсюда получаем:

$$\int dE \int\limits_{|\mathbf{n}|=1} d\mathbf{n} |C|^2\ e^{-\frac{i}{\hbar}\sqrt{2\mu E}\mathbf{n}\mathbf{r}}\ e^{\frac{i}{\hbar}\sqrt{2\mu E}\mathbf{n}\mathbf{r}'}\ =\ \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}').$$

Находим и дифференциалы:

$$\mathrm{d}\mathbf{p} = p^2\mathrm{d}p\mathrm{d}\mathbf{n},\quad |\mathbf{n}| = 1;\quad \mathbf{p}^2/2\mu\ = E,\quad \mathrm{d}E=|\mathbf{p}|\mathrm{d}p/2\mu,\quad \mathrm{d}p=2\mu/p\ \mathrm{d}E.$$

$$\mathrm{d}\mathbf{p} = p^2 2\mu/p\cdot \mathrm{d}E\mathrm{d}\mathbf{n} = 2\mu p\mathrm{d}E\mathrm{d}\mathbf{n} = 2\mu\sqrt{2\mu E}\ \mathrm{d}E\mathrm{d}\mathbf{n} = (2\ \mu^{\ 3/2})E^{1/2}\mathrm{d}E\mathrm{d}\mathbf{n};$$

$$\mathrm{d}E\mathrm{d}\mathbf{n} = \mathrm{d}\mathbf{p}/(2\mu)^{3/2}\ E^{1/2}.$$

Переходим в интеграле к d$\mathbf{p}$ и к $\mathbf{p}$ в показателе экспоненты и вспоминаем условие нормировки обычных волн де Бройля:

$$\int \mathrm{d}\mathbf{p}/(2\mu)^{3/2} E^{1/2}\cdot|C|^2 \mathrm{e}^{-i\mathbf{p}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')/\hbar} = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = 1/(2\pi\hbar)^3 \int \mathrm{e}^{-i\mathbf{p}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')/\hbar}\mathrm{d}\mathbf{p} \Rightarrow$$

$$C = 2\mu^3 E)^{1/4}/(2\pi\hbar)^{3/2}.$$

Окончательно для нормированных волновых функций стационарных состояний имеем:

$$\psi_{E,\mathbf{n}}(\mathbf{r},t) = \frac{(2\mu^3 E)^{1/4}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et} e^{\frac{i}{\hbar}\sqrt{2\mu E}\mathbf{n}\mathbf{r}}\ .$$

ДВИЖЕНИЕ КВАНТОВОЙ ЧАСТИЦЫ В «АДДИТИВНОМ» ПОЛЕ

Пусть потенциальная энергия имеет вид

$V(\mathbf{r}) = V_1(x) + V_2(y) + V_3(z) \equiv V_1(r_1) + V_2(r_2) + V_3(r_3) = \sum_{j=1}^{3} V_j(r_j)$.

Тогда гамильтониан представляется в виде трех слагаемых

$$\hat{H} = \sum_j \hat{H}_j, \quad \hat{H}_j = -\hbar^2/2\mu \cdot \nabla^2_j + V_j(r_j).$$

Так как

$$[\nabla_j, V_k(r_k)] = \hat{0}, \; j \neq k,$$

то

$$[\hat{H}_j, \hat{H}_k] = \hat{0} \text{ при всех } j,k = 1,2,3,$$

а значит

$$[\hat{H}, \hat{H}_j] = \hat{0}.$$

В полный набор можно включить четыре оператора $\hat{H}$ и $\hat{H}_j$, но они зависимы. Независимых будет всего три интеграла движения. Выберем в качестве операторов полного набора $\hat{H}_j$, и будем параметризовать стационарные состояния их собственными значениями E_j.

Стационарное уравнение Шредингера

$$\hat{H}\,\psi_E(\mathbf{r}) = E\psi_E(\mathbf{r})$$

решаем методом разделения переменных:

$$\psi_E(\mathbf{r}) = \psi_1(r_1)\,\psi_2(r_2)\,\psi_3(r_3).$$

Подстановка дает:

$$\psi_2\,\psi_3\hat{H}_1\,\psi_1 + \psi_1\,\psi_3\hat{H}_2\,\psi_2 + \psi_1\,\psi_2\hat{H}_3\,\psi_3 = E\,\psi_1\,\psi_2\psi_3.$$

Отсюда, в силу независимости переменных r_j,

$$\sum_j \frac{1}{\psi_j}\hat{H}_j\psi_j = E \;\Rightarrow\; 1/\psi_j\hat{H}_j\,\psi_j = E_j,$$

где

$$\sum_{j=1}^{3} E_j = E.$$

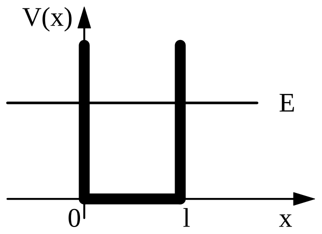
Получаем отдельные уравнения

$$\hat{H}_j\psi_j = E_j\psi_j \Rightarrow$$

$$-\hbar^2/2\mu d^2/dr_j\psi_j(r_j) + V_j(r_j)\,\psi_j(r_j) = E_j\psi_j(r_j).$$

ЧАСТИЦА В БЕСКОНЕЧНОЙ ПРЯМОУГОЛЬНОЙ ЯМЕ

Рассмотрим поведение квантовой частицы в бесконечной прямоугольной потенциальной яме



$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 \le x \le l \\ \infty, & x < 0,\ x > l \end{cases}.$$

Стационарное уравнение Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\,\psi(x)$$

имеет в качестве решения $\psi(x) = 0$ вне ямы. Поэтому нужно решать задачу на интервале $0 < x < l$, где

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\psi''(x) = E\psi(x)$$

с граничными условиями

$$\psi(0) = 0, \quad \psi(l) = 0.$$

Вводя обозначение

$$2\mu E/\hbar^2 = k^2$$

запишем уравнение Шредингера как

$$\psi''(x) + k^2\psi(x) = 0.$$

Общее решение уравнения имеет вид

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}.$$

Если $E < 0$, то k чисто мнимо, и обозначим его как $i\gamma$. Тогда

$$\psi(x) = Ae^{-\gamma x} + Be^{\gamma x}.$$

Граничные условия дают

$$A + B = 0, \quad Ae^{-\gamma l} + Be^{\gamma l} = 0,$$

откуда

$$A\mathrm{sh}(\gamma l) = 0.$$

Отсюда или A=0, и ψ=0, или γ=0, и все равно ψ=0. Поэтому значения энергии могут быть только положительными.

Пусть это так. Тогда граничные условия дадут

$$A + B = 0, \quad Ae^{ikl} + Be^{-ikl} = 0,$$

откуда

$$A\sin(kl) = 0.$$

Так как $A \neq 0$, то $\sin(kl) = 0$, откуда $kl = \pi n$, где $n = \pm1, \pm2, \ldots$. Для энергии

$$E = \hbar^2 k^2/2\mu = \hbar^2/2\mu \cdot (\pi n/l)^2,$$

т.е. получаем *дискретный* энергетический спектр

$$E_n = \pi^2\hbar^2/2\mu l^2 \cdot n^2.$$

Волновые функции стационарных состояний теперь запишутся как

$$\psi_n(x) = A\sin k_n x,$$

причем вырождения нет, так как числам n и $-n$ отвечают волновые функции, различающиеся только знаком, а значит описывающие одно состояние. Таким образом, спектр не только дискретный и *простой*. Константу A находим из условия нормировки:

$$1 = (\psi_n, \psi_n) = \int_0^l |\psi_n(x)|^2 dx = |A|^2 \int_0^l Sin^2 kx dx = \frac{|A|^2}{2} \int_0^l (1 - \cos 2kx)\, dx =$$
$$= |A|^2 l/2 \quad \Rightarrow \quad A = (2/l)^{1/2}$$

и окончательно для нормированных волновых функций стационарных состояний имеем:

$$\psi_n(x) = (2/l)^{1/2} \sin \pi n/l \cdot x.$$

Для движения свободной частицы мы имели

$$\phi_p(x) = 1/(2\pi\hbar)^{1/2} e^{i/\hbar\, px}.$$

Это есть обобщенная волновая функция. Так как квадрат ее модуля есть константа, то частицу с равной вероятностью можно найти в любой точке прямой. Это соответствует *инфинитному* движению частицы. В нашем случае получилась обычная волновая функция, равная нулю вне интервала $(0,l)$. Это значит, что мы можем найти ее только внутри ямы, что соответствует *финитному* движению. В этом принципиальная разница между двумя рассмотренными случаями.