

§ 1. ВЗАИМОСВЯЗЬ КЛАССИЧЕСКОЙ И КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ. ОПЕРАТОРЫ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ. КОММУТАЦИОННЫЕ СООТНОШЕНИЯ

Согласно гипотезе Бора должна существовать теория высшего порядка по сравнению с классической механикой, которая включает в себя последнюю, справедливую для макроскопических объектов в качестве предельного случая. Этот предел реализуется для тех случаев, когда квантованием можно пренебречь (так называем предельный случай $\hbar \rightarrow 0$, $\hbar = 1.055 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с} = 1.055 \cdot 10^{-27} \text{ э} \cdot \text{см}^2 / \text{с}$). Эту теорию высшего порядка мы и называем сегодня *квантовой механикой*.

Существуют формальная аналогия между классической и квантовой механикой. Имеет место *принцип соответствия*. Его суть в следующем: выражения, связывающие между собой классические динамические переменные, могут быть перенесены в квантовую механику, однако связывать они будут эрмитовы операторы. Рассмотрим сначала формальную аналогию между классической и квантовой механикой, опираясь на принцип соответствия.

Как известно в классической механике динамические переменные (физические величины, например, координата, скорость, импульс, энергия)

$$F = F(q, p, t) \quad G = G(q, p, t)$$

представляют собой функции, зависящие от обобщенной координаты q , обобщенного импульса p и времени, определенные в фазовом пространстве.

Из любой пары таких переменных можно сконструировать третью переменную, которая является функцией, определенной в фазовой пространстве. Эта функция ничто иное как *скобка Пуассона*

$$\{F, G\} = \sum_{i=1}^s \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} \frac{\partial G}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i} \frac{\partial G}{\partial q_i} \right) \quad (1.1)$$

Непосредственно из определения скобки Пуассона вытекают следующие свойства:

$$\{A, A\} = 0, \quad (1.2)$$

$$\{A, \text{const}\} = 0 \quad (1.3)$$

$$\{A, B\} = -\{B, A\}, \quad (1.4)$$

$$\{A + B, C\} = \{A, C\} + \{B, C\}, \quad (1.5)$$

$$\{A, BC\} = \{A, B\}C + B\{A, C\} \quad (1.6)$$

$$(\text{тождество Якоби}) \quad \{\{A, B\}, C\} + \{\{B, C\}, A\} + \{\{C, A\}, B\} = 0. \quad (1.7)$$

Кроме того, из курса теоретической механики известно, что скобка Пуассона является каноническим инвариантом: она не зависит от того, какой конкретно набор канонических переменных используется для ее вычисления:

$$\{A, B\}_{q,p} = \{A, B\}_{Q,P} \quad (1.8)$$

Это справедливо, если наборы переменных (q, p) и (Q, P) связаны каноническим преобразованием, которое сохраняет форму уравнений Гамильтона, оставляя неизменными законы движения в новых переменных.

Задача 1.1. Вычислить скобки Пуассона для канонических переменных.

Решение. В гамильтоновой механике состояние системы описывается каноническими переменными: обобщенными координатами $\{q_i\}_{i=1}^s$ и сопряженными им обобщенными импульсами $\{p_i\}_{i=1}^s$. Рассмотрим три случая.

а) Скобка Пуассона для двух координат.

Подставим в выражение (1.1) $F = q_i \quad G = q_j$:

$$\{q_i, q_j\} = \sum_{k=1}^s \left(\frac{\partial q_i}{\partial q_k} \frac{\partial q_j}{\partial p_k} - \frac{\partial q_i}{\partial p_k} \frac{\partial q_j}{\partial q_k} \right) = \sum_{k=1}^s (\delta_{ik} \cdot 0 - 0 \cdot \delta_{jk}) = 0.$$

б) Скобка Пуассона для двух импульсов.

Подставим в выражение (1.1) $F = p_i \quad G = p_j$:

$$\{p_i, p_j\} = \sum_{k=1}^s \left(\frac{\partial p_i}{\partial q_k} \frac{\partial p_j}{\partial p_k} - \frac{\partial p_i}{\partial p_k} \frac{\partial p_j}{\partial q_k} \right) = \sum_{k=1}^s (0 \cdot \delta_{jk} - \delta_{ik} \cdot 0) = 0.$$

в) Скобка Пуассона для координат импульсов.

Подставим в выражение (1.1) $F = q_i \quad G = p_j$:

$$\{q_i, p_j\} = \sum_{k=1}^s \left(\frac{\partial q_i}{\partial q_k} \frac{\partial p_j}{\partial p_k} - \frac{\partial q_i}{\partial p_k} \frac{\partial p_j}{\partial q_k} \right) = \sum_{k=1}^s (\delta_{ik} \cdot \delta_{jk}).$$

$$\sum_{k=1}^s (\delta_{ik} \cdot \delta_{jk}) = \begin{cases} 1; i = j \\ 0; i \neq j. \end{cases}$$

$$\sum_{k=1}^s (\delta_{ik} \cdot \delta_{jk}) = \delta_{ij}.$$

$$\{q_i, p_j\} = \delta_{ij}.$$

Таким образом, мы получили так называемые фундаментальные скобки Пуассона:

$$\{q_i, q_j\} = 0; \quad \{p_i, p_j\} = 0; \quad \{q_i, p_j\} = \delta_{ij}. \quad \blacklozenge$$

Хотя, очевидно, что свойства (1.2) – (1.8) следуют напрямую из (1.1) можно пойти в обратную сторону и постулировать, что свойства (1.2) – (1.8) – это аксиомы некой алгебраической структуры, тогда с этой точки зрения (1.1) – это одна из конкретных реализаций этой структуры.

Введём специальный оператор $\hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F}$ (оператор принято обозначать буквой со «шляпкой» над ней), который называется *коммутатором* операторов $\hat{F}$ и $\hat{G}$ и обозначается $[\hat{F}, \hat{G}]$, т.е.:

$$[\hat{F}, \hat{G}] = \hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F}. \quad (1.9)$$

Для коммутирующих операторов

$$[\hat{F}, \hat{G}] = 0. \quad (1.10)$$

Как будет показано далее, коммутатор, как и скобки Пуассона в классической механике, является кососимметрической операцией и обладает теми же свойствами. Для перехода от скобок Пуассона к коммутатору необходимо классические динамические переменные заменить операторами и скобку Пуассона умножить на произведение мнимой единицы и постоянной Планка $i\hbar$:

$$[\hat{F}, \hat{G}] = i\hbar\{F, G\}. \quad (1.11)$$

Эта глубокая алгебраическая связь между коммутаторами и скобками Пуассона была открыта П.А.М. Дираком в 1925 году. В настоящее время эта процедура называется *процедурой канонического квантования* Дирака. Решение любой квантово-механической задачи должно начинаться с того, что мы должны выразить классическую величину F как функцию от декартовых координат r_i и обобщенных декартовых импульсов p_i (и времени) и заменить аргументы функции на соответствующие операторы, тем самым построив оператор $\hat{F}$

$$F(r_1, r_2, \dots, r_s, p_1, p_2, \dots, p_s, t) \rightarrow \hat{F}(\hat{r}_1, \hat{r}_2, \dots, \hat{r}_s, \hat{p}_1, \hat{p}_2, \dots, \hat{p}_s, t). \quad (1.12)$$

Важно отметить, что формулу (1.12) можно применять только в декартовых координатах. Если для решения задачи надо использовать другие координаты, например сферические, то в новых координатах переписывают уже оператор Гамильтона. Коммутаторы операторов получаются из (1.11). В общем случае, при использовании процедуры канонического квантования могут возникнуть неоднозначности, связанные с некоммутативностью операторов. В этом случае используют процедуру *симметризации*. Наконец, для квантования систем со связями необходимо использовать

модифицированную процедуру квантования тоже предложенную П.А.М. Дираком.

Процедура канонического квантования (1.11) уже сейчас, еще до введения понятия оператора, позволяет нам получить важные квантово-механические соотношения.

Задача 1.2. Используя процедуру канонического квантования, найти коммутаторы $[\hat{q}_i, \hat{q}_j]$; $[\hat{p}_i, \hat{p}_j]$; $[\hat{q}_i, \hat{p}_j]$.

Решение. Из решения задачи 1.1. имеем

$$\{q_i, q_j\} = 0; \quad \{p_i, p_j\} = 0; \quad \{q_i, p_j\} = \delta_{ij}.$$

Отсюда, применяя процедуру канонического квантования (1.11) немедленно получаем

$$[\hat{q}_i, \hat{q}_j] = 0; \quad [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0; \quad [\hat{q}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij}.$$

Таким образом, операторы координаты, как и операторы импульса коммутируют между собой, также оператор координаты и оператор проекции импульса на другую координату коммутируют, но оператор координаты и оператор проекции импульса не коммутируют, например, $[\hat{x}, \hat{y}] = 0$, $[\hat{p}_x, \hat{p}_y] = 0$, $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$. ♦

Полученные коммутаторы $[\hat{q}_i, \hat{q}_j] = 0$; $[\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0$; $[\hat{q}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij}$ называются фундаментальными коммутаторами и играют важнейшую роль в квантовой механике. Как мы увидим далее, равенство нулю коммутатора двух операторов физических величин – необходимое и достаточное условие для совместной измеримости этих величин. Отсюда следует крайне важный физический вывод, в эксперименте можно определить все координаты или импульсы или одновременно измерить координату и проекцию импульса на другую координату, но *невозможно* одновременно измерить, координату и проекцию импульса на эту же координату, что радикально отличается от классической механики.

Задача 1.3. Используя процедуру канонического квантования, получить уравнение Гейзенберга

$$i\hbar \frac{d\hat{F}}{dt} = i\hbar \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} + [\hat{F}, \hat{H}],$$

и уравнения Эренфеста

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \left\langle \frac{\partial H}{\partial p_x} \right\rangle, \quad \frac{d\langle p_x \rangle}{dt} = - \left\langle \frac{\partial H}{\partial x} \right\rangle.$$

Решение. Так как $F=F(q, p, t)$, то можем записать

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial q} \dot{q} + \frac{\partial F}{\partial p} \dot{p},$$

где точка над буквой обозначает производную по времени. Используя уравнения Гамильтона

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}; \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q},$$

перепишем исходное уравнение следующим образом

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \left(\frac{\partial F}{\partial q} \frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial F}{\partial p} \frac{\partial H}{\partial q} \right)$$

Выражение в скобках – это скобка Пуассона для F и H , так что

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \{F, H\}.$$

Используя процедуру канонического квантования, получаем

$$i\hbar \frac{\widehat{dF}}{dt} = i\hbar \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} + [\hat{F}, \hat{H}].$$

Теперь пусть $F=x$, тогда $\frac{dx}{dt} = \frac{\partial x}{\partial t} + \{x, H\}$,

$$\{x, H\} = \frac{\partial H}{\partial p_x}; \quad [x, H] = i\hbar \frac{\partial H}{\partial p_x}; \quad \frac{\partial \hat{x}}{\partial t} = 0,$$

и тогда, после усреднения получаем $\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \left\langle \frac{\partial H}{\partial p_x} \right\rangle$.

Пусть $F=p_x$, тогда $\frac{dp_x}{dt} = \frac{\partial p_x}{\partial t} + \{p_x, H\}$,

$$\{p_x, H\} = -\frac{\partial H}{\partial x}; \quad [p_x, H] = -i\hbar \frac{\partial H}{\partial x}; \quad \frac{\partial \hat{p}_x}{\partial t} = 0,$$

и тогда, после усреднения получаем $\frac{d\langle p_x \rangle}{dt} = -\left\langle \frac{\partial H}{\partial x} \right\rangle$. ♦

Таким образом видно, что средние значения координаты и импульса изменяются во времени по законам классической механики в случае когда дисперсии несущественны. Дисперсия физической величины F определяется формулой:

$$\langle (F)^2 \rangle = \langle (F - \langle F \rangle)^2 \rangle \equiv \langle F^2 \rangle - \langle F \rangle^2.$$

Можно утверждать, что в случае, когда дисперсии несущественны каноническое квантование гарантирует, что динамика квантовой системы в среднем точно совпадает с динамикой классической системы. При каноническом квантовании принцип соответствия удовлетворяется автоматически. Рассмотрим это утверждение более подробно, для этого запишем разложение функции $f(x)$ (x – декартова координата) в ряд Тейлора в окрестности среднего значения координаты $\langle x \rangle$:

$$f(x) = f(\langle x \rangle) + (x - \langle x \rangle) f'(\langle x \rangle) + \frac{1}{2} (x - \langle x \rangle)^2 f''(\langle x \rangle) + \dots,$$

так как $\langle x - \langle x \rangle \rangle = 0$; $\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \Delta x^2$, то

$$\langle f(x) \rangle = f(\langle x \rangle) + \frac{1}{2} \Delta x^2 f''(\langle x \rangle) + \dots$$

Если дисперсии малы, то можно пренебречь квадратичным и последующими членами

$$\langle f(x) \rangle \approx f(\langle x \rangle).$$

Именно это и отражают уравнения Эренфеста – малые дисперсии приводят к уравнениям для средних координат и импульса по форме совпадающих с классическими уравнениями.

Кроме рассмотренных задач, использование процедуры канонического квантования часто бывает удобно для расчета сложных коммутаторов, в этом случае может оказаться, что расчет скобки Пуассона оказывается проще, чем прямой расчет коммутатора.

Задача 1.4. Используя процедуру канонического квантования, доказать, что $[\hat{p}_x, f(\hat{x})] = -i\hbar \frac{\partial f}{\partial x}$ и $[\hat{x}, f(\hat{p}_x)] = i\hbar \frac{\partial f}{\partial p_x}$.

Решение. $\{p_x, f(x)\} = \frac{\partial p_x}{\partial x} \frac{\partial f(x)}{\partial p_x} - \frac{\partial p_x}{\partial p_x} \frac{\partial f(x)}{\partial x} = -\frac{\partial f}{\partial x}.$

По процедуре канонического квантования получаем,

$$[\hat{p}_x, f(\hat{x})] = i\hbar \{p_x, f(x)\} = -i\hbar \frac{\partial f}{\partial x}.$$

Действуя аналогично, докажем второе соотношение

$$\{x, f(p_x)\} = \frac{\partial x}{\partial x} \frac{\partial f(p_x)}{\partial p_x} - \frac{\partial p_x}{\partial x} \frac{\partial f(x)}{p_x} = \frac{\partial f}{\partial p_x},$$

$$[\hat{x}, f(\hat{p}_x)] = i\hbar \{x, f(p_x)\} = i\hbar \frac{\partial f}{\partial p_x}. \blacklozenge$$

Так как классическая механика является предельным случаем квантовой механики при $\hbar \rightarrow 0$ основное уравнение квантовой механики – уравнение Шредингера, должно переходить в классические уравнения движения. С другой стороны, по этой же причине можно от классических уравнений прийти к уравнению Шредингера.

Задача 1.5. Получить уравнение Шредингера, а также установить вид оператора импульса из уравнения Гамильтона – Якоби.

Решение. Уравнение Гамильтона – Якоби для частицы массой m в потенциале $U(r, t)$

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}(\nabla S)^2 + U(r, t) = 0,$$

где градиент действия $S(r, t)$ задает импульс: $p = \nabla S$, а частная производная по времени определяет энергию системы со знаком минус: $\frac{\partial S}{\partial t} = -E$. Для простоты будем рассматривать случай одномерного движения,

тогда в этом случае уравнение Гамильтона – Якоби принимает вид

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + U(x, t) = 0. \quad (1.13)$$

Введем вместо действия $S(x, t)$ новую функцию $\Psi(x, t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} S(x, t)\right)$.

Продифференцируем $\Psi(x, t)$ один раз по времени, получаем

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial t} \Psi. \quad (1.14)$$

Продифференцируем $\Psi(x, t)$ два раза по координате, получаем

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial x} \Psi, \quad (1.15)$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \Psi - \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 \Psi = \left(\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} - \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2\right) \Psi. \quad (1.16)$$

В силу того, что для классических систем $S \gg \hbar$, получаем

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 \Psi. \quad (1.17)$$

Подставим (1.17) и (1.14) в (1.13) и домножим на Ψ , в результате получим

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + U(x, t) \Psi. \quad (1.18)$$

Это и есть уравнение Шредингера для одномерного движения.

Теперь установим вид оператора импульса. Для одномерного движения

$p_x = \frac{\partial S}{\partial x}$, подставляя это выражение в (1.15), получаем

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = \frac{i}{\hbar} p_x \Psi.$$

Откуда в операторном смысле

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x},$$

или для случая трехмерного движения

$$\hat{p} = -i\hbar \nabla. \quad \blacklozenge$$

Теперь мы можем переписать (1.18) в следующем виде

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left(\frac{\hat{p}_x^2}{2m} + U(x, t) \right) \Psi. \quad (1.19)$$

Сумма в правой части – это оператор Гамильтона (оператор энергии) $\hat{H}$, окончательно получаем уравнение Шредингера в операторном виде.

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi. \quad (1.20)$$

Это основное уравнение квантовой механики. Его решение – *волновая функция* $\Psi(r, t)$ содержит всю информацию об исследуемой системе и позволяет рассчитать все интересующие исследователя физические свойства. Почему, однако, волновая функция выбирается в виде $\Psi(x, t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} S(x, t)\right)$? В 1924

году Луи де Бройль предположил, что с каждой частицей связана волна. В курсе теоретической механики было показано, что для свободной частицы с импульсом p и энергией E действие S имеет простой вид: $S = px - Et$. Если мы подставим это выражение в нашу экспоненту, получим:

$\Psi(x, t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} (px - Et)\right) = \exp(i(kx - \omega t))$, где $k = \frac{p}{\hbar}$, $\omega = \frac{E}{\hbar}$. Это не что иное

как знакомое нам из курса оптики выражение для плоской волны, бегущей в положительном направлении оси x . Именно такие волны описывают свободно движущиеся частицы.

Прежде чем перейти к изучению способов решения уравнения Шредингера необходимо изучить операторы и их свойства, чему и посвящена следующая часть данного параграфа.

Под оператором понимают правило, по которому одной функции ψ сопоставляется другая функция φ . Формально это можно записать в виде

$$\hat{F}\psi = \varphi.$$

Оператор принято обозначать буквой со «шляпкой» над ней. Например: $\hat{F}$, $\hat{G}$, $\hat{M}$, $\hat{x}$ и т.д.

Линейным оператором называется оператор, обладающий следующими свойствами:

$$\begin{aligned} 1. \quad \hat{F}(\psi + \varphi) &= \hat{F}\psi + \hat{F}\varphi, \\ 2. \quad \hat{F}(\alpha\psi) &= \alpha\hat{F}\psi, \end{aligned} \tag{1.21}$$

где ψ и φ – произвольные функции, а α – произвольное комплексное число.

Объектами применения операторов могут быть функции одной или нескольких переменных как непрерывных, так и прерывных, принимающих только определенные значения. Непрерывные переменные могут принимать либо все значения, либо меняться в определенном промежутке. Независимые переменные мы будем всегда предполагать вещественными, а функции, к которым применяются операторы, в общем случае считать комплексными. Под аргументом q функции $\psi(q)$, если это не оговорено особо, будем понимать одну или несколько непрерывных переменных. В случае одной переменной аргумент q часто будем обозначать посредством x .

Рассмотрим некоторые из возможных операторов. Оператор возведения в квадрат $\hat{Q}$, действуя на функцию ψ , даёт её квадрат ψ^2 :

$$\hat{Q}\psi = \psi^2. \tag{1.22}$$

Оператор дифференцирования $\hat{D} = \frac{d}{dx}$ действует на функцию $\psi(x)$ и даёт ее производную $\psi'(x)$:

$$\hat{D}\psi(x) = \frac{d}{dx}\psi(x) = \psi'(x). \tag{1.23}$$

Оператор инверсии $\hat{I}$ определяется равенством

$$\hat{I}\psi(x) = \psi(-x). \tag{1.24}$$

В квантовой механике радиусу-вектору частицы $\mathbf{r}$ ставится в соответствие оператор $\hat{\mathbf{r}}$:

$$\hat{\mathbf{r}}\psi(\mathbf{r}) = \mathbf{r}\psi(\mathbf{r}), \tag{1.25}$$

а обобщенному импульсу частицы $\mathbf{p}$ - оператор $\hat{\mathbf{p}}$:

$$\hat{\mathbf{p}}\psi(\mathbf{r}) = -i\hbar\nabla\psi(\mathbf{r}), \tag{1.26}$$

где i - мнимая единица, $\hbar$ - постоянная Планка, ∇ - дифференциальный оператор Гамильтона «набла»:

$$\nabla\psi(\mathbf{r}) = \frac{\partial\psi(\mathbf{r})}{\partial x}\mathbf{e}_x + \frac{\partial\psi(\mathbf{r})}{\partial y}\mathbf{e}_y + \frac{\partial\psi(\mathbf{r})}{\partial z}\mathbf{e}_z.$$

Здесь x, y, z - декартовы координаты частицы, а $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$ - орты осей x, y, z соответственно.

Из написанных соотношений следует, что оператор координаты $\hat{x} = x$, а оператор проекции обобщенного импульса $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$. Часто в дальнейшем, где это не может привести к недоразумению, обобщенный импульс будем называть просто импульсом.

Задача 1.6. Проверить линейность операторов (1.22)-(1.26).

Решение. Чтобы определить является оператор линейным или нет, необходимо проверить удовлетворяет ли он условиям (1.21). Проверяя линейность оператора возведения в квадрат $\hat{Q}$, подействуем им на сумму функций ψ и φ :

$$\hat{Q}(\psi + \varphi) = (\psi + \varphi)^2 = \psi^2 + \varphi^2 + 2\psi\varphi \neq \psi^2 + \varphi^2 = \hat{Q}\psi + \hat{Q}\varphi.$$

Таким образом, данный оператор линейным не является.

Все остальные операторы линейны. Действительно,

$$\hat{D}(\psi + \varphi) = \frac{d}{dx}\psi + \frac{d}{dx}\varphi = \hat{D}\psi + \hat{D}\varphi; \quad \hat{D}\alpha\psi = \frac{d}{dx}(\alpha\psi) = \alpha\frac{d}{dx}\psi = \alpha\hat{D}\psi;$$

$$\hat{I}(\psi(x) + \varphi(x)) = \psi(-x) + \varphi(-x) = \hat{I}\psi(x) + \hat{I}\varphi(x), \quad \hat{I}\alpha\psi(x) = \alpha\psi(-x) = \alpha\hat{I}\psi(x);$$

$$\hat{\mathbf{r}}(\psi + \varphi) = \mathbf{r}(\psi + \varphi) = \mathbf{r}\psi + \mathbf{r}\varphi = \hat{\mathbf{r}}\psi + \hat{\mathbf{r}}\varphi, \quad \hat{\mathbf{r}}(\alpha\psi) = \alpha\mathbf{r}\psi = \alpha\hat{\mathbf{r}}\psi;$$

$$\hat{\mathbf{p}}(\psi + \varphi) = -i\hbar\nabla(\psi + \varphi) = -i\hbar\nabla\psi - i\hbar\nabla\varphi = \hat{\mathbf{p}}\psi + \hat{\mathbf{p}}\varphi,$$

$$\hat{\mathbf{p}}(\alpha\psi) = -i\hbar\nabla(\alpha\psi) = \alpha(-i\hbar\nabla\psi) = \alpha\hat{\mathbf{p}}\psi. \quad \blacklozenge$$

Суммой двух операторов $\hat{F}$ и $\hat{G}$ называется оператор $\hat{F} + \hat{G}$, действующий на функцию ψ согласно правилу

$$(\hat{F} + \hat{G})\psi = \hat{F}\psi + \hat{G}\psi. \quad (1.27)$$

Задача 1.7. Доказать, что $\hat{F} + \hat{G} = \hat{G} + \hat{F}$.

Решение. Согласно определению (1.7), имеем:

$$(\hat{F} + \hat{G})\psi = \hat{F}\psi + \hat{G}\psi = \hat{G}\psi + \hat{F}\psi = (\hat{G} + \hat{F})\psi,$$

откуда следует, что

$$\hat{F} + \hat{G} = \hat{G} + \hat{F}. \quad \blacklozenge$$

Назовём произведением двух операторов их последовательное применение. Записывая $\hat{F}\hat{G}\psi$, мы понимаем, что на функцию ψ сначала действует оператор $\hat{G}$, а затем на результат действия оператора $\hat{G}$ действует оператор $\hat{F}$. В самом общем случае $\hat{G}\hat{F}\psi \neq \hat{F}\hat{G}\psi$. Если $\hat{G}\hat{F} = \hat{F}\hat{G}$, то говорят, что операторы $\hat{G}$ и $\hat{F}$ коммутируют.

Напомним, что специальный оператор $\hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F}$, который называется коммутатором операторов $\hat{F}$ и $\hat{G}$ и обозначается $[\hat{F}, \hat{G}]$, т.е.:

$$[\hat{F}, \hat{G}] = \hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F}.$$

Для коммутирующих операторов

$$[\hat{F}, \hat{G}] = 0.$$

Укажем основные свойства коммутаторов:

$$[\hat{A}, \hat{A}] = 0, \quad (1.28)$$

$$[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}], \quad (1.29)$$

$$[\hat{A} + \hat{B}, \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{B}, \hat{C}], \quad (1.30)$$

$$(тождество Якоби) \quad [[\hat{A}, \hat{B}], \hat{C}] + [[\hat{B}, \hat{C}], \hat{A}] + [[\hat{C}, \hat{A}], \hat{B}] = 0. \quad (1.31)$$

Как уже указывалось ранее, коммутатор, как и скобки Пуассона в классической механике, является кососимметрической операцией и обладает теми же свойствами.

Задача 1.8. Показать, что операторы координат коммутируют между собой.

Решение. Рассмотрим, например, коммутатор $[\hat{x}, \hat{y}]$ и подействуем им на функцию ψ . Получим:

$$[\hat{x}, \hat{y}]\psi = \hat{x}\hat{y}\psi - \hat{y}\hat{x}\psi = xy\psi - yx\psi = 0,$$

откуда заключаем, что $[\hat{x}, \hat{y}] = 0$. ♦

Задача 1.9. Показать, что операторы проекций импульса коммутируют между собой.

Решение. Для операторов, например, $\hat{p}_x$ и $\hat{p}_y$ имеем:

$$\begin{aligned} [\hat{p}_x, \hat{p}_y] \psi &= (\hat{p}_x \hat{p}_y - \hat{p}_y \hat{p}_x) \psi = -\hbar^2 \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \psi}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \right) = \\ &= -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial y} - \frac{\partial^2 \psi}{\partial y \partial x} \right). \end{aligned}$$

Поскольку смешанные производные $\frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial y}$ и $\frac{\partial^2 \psi}{\partial y \partial x}$ равны, то $[\hat{p}_x, \hat{p}_y] = 0$. ♦

Задача 1.10. Показать, что оператор координаты и оператор проекции импульса на другую координату коммутируют.

Решение. Рассмотрим, например,

$$[\hat{x}, \hat{p}_y] \psi = \hat{x} \hat{p}_y \psi - \hat{p}_y \hat{x} \psi = -i\hbar \left(x \frac{\partial \psi}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial y} (x\psi) \right) = -i\hbar \left(x \frac{\partial \psi}{\partial y} - x \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) = 0,$$

следовательно, $[\hat{x}, \hat{p}_y] = 0$. ♦

Задача 1.11. Найти коммутатор $[\hat{x}, \hat{p}_x]$.

Решение. Действуя оператором $[\hat{x}, \hat{p}_x]$ на функцию ψ , находим:

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

,
или

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar. \quad \blacklozenge \quad (1.32)$$

Задача 1.12. Доказать тождество

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C}.$$

Решение. По определению

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{B}\hat{C}\hat{A}.$$

В правую часть равенства добавим и вычтем оператор $\hat{B}\hat{A}\hat{C}$. Получим

$$\begin{aligned} [\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] &= \hat{B}\hat{A}\hat{C} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} + \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{B}\hat{A}\hat{C} = \hat{B}(\hat{A}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}) + (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\hat{C} = \\ &= \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C}. \quad \blacklozenge \end{aligned}$$

Для многих (но далеко не для всех) операторов можно найти *обратные операторы*. Назовём оператор $\hat{F}^{-1}$ обратным оператору $\hat{F}$, если выполняются следующие равенства:

$$\hat{F}\hat{F}^{-1} = \hat{F}^{-1}\hat{F} = \hat{1}, \quad (1.33)$$

где $\hat{1}$ - *единичный оператор*, действие которого на произвольную функцию ψ оставляет её неизменной: $\hat{1}\psi = \psi$.

Задача 1.13. Найдите операторы обратные операторам а) сдвига $\hat{T}_a$: $\hat{T}_a\psi(x) = \psi(x+a)$ (a - вещественное число) и б) инверсии $\hat{I}$: $\hat{I}\psi(x) = \psi(-x)$.

Решение. а) Согласно (1.33), должно выполняться равенство

$$\hat{T}_a^{-1} \hat{T}_a \psi(x) = \psi(x).$$

Поскольку $\hat{T}_a \psi(x) = \psi(x+a)$, то $\hat{T}_a^{-1} \psi(x+a) = \psi(x)$, откуда следует, что $\hat{T}_a^{-1} = \hat{T}_{-a}$.

Легко проверить, что для найденного оператора $\hat{T}_a^{-1}$ выполняется первое из равенств цепочки (1.33). Действительно,

$$\hat{T}_a \hat{T}_a^{-1} \psi(x) = \hat{T}_a \psi(x-a) = \psi(x),$$

а значит $\hat{T}_a \hat{T}_a^{-1} = 1$.

б) Аналогично случаю а):

$$\hat{I}^{-1} \hat{I} \psi(x) = \hat{I}^{-1} \psi(-x) = \psi(x),$$

откуда заключаем, что $\hat{I}^{-1} = \hat{I}$. ♦

Об n -кратном произведении операторов говорят, как о возведении оператора в степень n :

$$\hat{F}^n = \underbrace{\hat{F} \dots \hat{F}}_{n \text{ раз}}.$$

Задача 1.14. Найти вид оператора $(\hat{x} + \hat{D})^2$.

Решение. Было бы грубой ошибкой работать с операторами как с обычными числами и утверждать, что искомый оператор имеет вид $x^2 + 2x \frac{d}{dx} + \frac{d^2}{dx^2}$. В данном случае оператор $(\hat{x} + \hat{D})$ действует на функцию $\psi(x)$ дважды:

$$\begin{aligned} \left(x + \frac{d}{dx}\right) \left(x + \frac{d}{dx}\right) \psi(x) &= \left(x + \frac{d}{dx}\right) \left(x\psi(x) + \frac{d\psi(x)}{dx}\right) = \\ &= (x^2 + 1)\psi(x) + 2x \frac{d\psi(x)}{dx} + \frac{d^2\psi(x)}{dx^2}. \end{aligned}$$

Таким образом, для данного оператора мы можем записать:

$$\left(x + \frac{d}{dx}\right)^2 = (x^2 + 1) + 2x \frac{d}{dx} + \frac{d^2}{dx^2}. \blacklozenge$$

Пусть функция $f(z)$ допускает разложение в ряд Тейлора в окрестности нуля, т.е.

$$f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n z^n,$$

где коэффициенты

$$c_n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{d^n f}{dz^n} \Big|_{z=0}.$$

Тогда оператор вида $f(\hat{F})$ следует понимать как оператор, равный

$$f(\hat{F}) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \hat{F}^n. \quad (1.34)$$

Задача 1.15. Найти явный вид оператора, $f(\hat{I}) = \exp(ia\hat{I})$, где a – действительная постоянная, а $\hat{I}$ – оператор инверсии.

Решение. В соответствии с определением (1.34) разложим экспоненту в ряд Тейлора:

$$f(\hat{I}) = \exp(ia\hat{I}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(ia)^n}{n!} \hat{I}^n. \quad (1.35)$$

Легко показать, что $\hat{I}^2 = \hat{1}$. Действительно, пользуясь определением (1.24), имеем:

$$\hat{I}^2 \psi(x) = \hat{I} \hat{I} \psi(x) = \hat{I} \psi(-x) = \psi(x).$$

Следовательно, все четные степени оператора $\hat{I}$ будут равны $\hat{1}$, а нечетные – $\hat{I}$.

С учетом этого, перепишем (1.35) в виде

$$f(\hat{I}) = \exp(ia\hat{I}) = \left(1 - \frac{a^2}{2!} + \frac{a^4}{4!} - \frac{a^6}{6!} + \dots\right) + i \left(a - \frac{a^3}{3!} + \frac{a^5}{5!} - \frac{a^7}{7!} + \dots\right) \hat{I}.$$

(Единичный оператор, который должен умножаться на первую скобку в правой части равенства для простоты записи опущен). В первой скобке справа данного равенства стоит разложение в ряд функции $\cos a$, а во второй скобке – функции $\sin a$.

Таким образом, в явном виде

$$\exp(ia\hat{I}) = \cos a + i(\sin a)\hat{I}. \quad \blacklozenge$$

Эрмитово-сопряженным линейному оператору $\hat{F}$ называется оператор $\hat{F}^+$, для которого выполняется равенство:

$$\int \varphi^*(q) \hat{F} \psi(q) dq = \int \left(\hat{F}^+ \varphi(q) \right)^* \psi(q) dq, \quad (1.36)$$

где интегрирование производится по всей области изменения переменных q . Символом dq обозначен элемент объема области интегрирования, а звездочкой помечены комплексно-сопряженные величины*. Функции $\psi(q)$ и $\varphi(q)$ в (1.36) должны стремиться к нулю при стремлении переменных q (всех сразу, или хотя бы одной из них) к бесконечности. Отметим, что при этом сам оператор $\hat{F}$ может действовать на функции (в частности, иметь собственные функции – см. далее) и не стремящиеся к нулю на бесконечности.

Условие эрмитова сопряжения оператора часто записывают также в виде

$$\int \varphi^*(q) \hat{F} \psi(q) dq = \left(\int \psi^*(q) \hat{F}^+ \varphi(q) dq \right)^*,$$

где учтено, что правую часть равенства (1.9) можно представить как

$$\int \left(\hat{F}^+ \varphi(q) \right)^* \psi(q) dq = \left(\int \psi^*(q) \hat{F}^+ \varphi(q) dq \right)^*.$$

Если оператор $\hat{F}$ совпадает со своим эрмитово-сопряженным оператором, т.е.

$$\hat{F} = \hat{F}^+,$$

то он называется *эрмитовым* или *самосопряженным*.

Задача 1.16. Найти эрмитово-сопряженный оператор для оператора дифференцирования $\hat{D} = \frac{d}{dx}$.

Решение. Рассмотрим для нашего оператора интеграл, стоящий в левой части равенства (1.36) и проинтегрируем его по частям:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi^*(x) \hat{D} \psi(x) dx &= \int_{-\infty}^{\infty} \varphi^*(x) \frac{d\psi(x)}{dx} dx = \left[\varphi^*(x) \psi(x) \right]_{-\infty}^{\infty} - \\ &- \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \frac{d\varphi^*(x)}{dx} dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left(-\hat{D} \varphi(x) \right)^* \psi(x) dx. \end{aligned} \quad (1.37)$$

* Некоторые сведения о комплексных числах изложены в приложении 2.

В выражении (1.37) учтено, что в силу стремления функций $\varphi(x)$ и $\psi(x)$ к нулю на бесконечности, подстановка обращается в нуль. Сравнивая (1.37) с (1.36), приходим к заключению, что оператор $\hat{D}^+ = -\hat{D} = -\frac{d}{dx}$. ♦

Тем самым, оператор дифференцирования $\hat{D}$ не является эрмитовым. Однако отметим, что с помощью абсолютно аналогичных рассуждений, можно доказать эрмитовость оператора $i\frac{d}{dx}$. Отсюда, в частности, следует, что операторы $\hat{p}_x, \hat{p}_y$ и $\hat{p}_z$, а, следовательно, и оператор $\hat{\mathbf{p}}$ эрмитовы.

Задача 1.17. Покажите, что $(c\hat{F})^+ = c^* \hat{F}^+$, где c - произвольное комплексное число.

Решение. Данное равенство следует из определения (1.36) и следующей цепочки равенств:

$$\begin{aligned} \int \left((c\hat{F})^+ \varphi(q) \right)^* \psi(q) dq &= \int \varphi^*(q) (c\hat{F}) \psi(q) dq = c \int \varphi^*(q) \hat{F} \psi(q) dq = \\ &= c \int \left(\hat{F}^+ \varphi(q) \right)^* \psi(q) dq = \int \left(c^* \hat{F}^+ \varphi(q) \right)^* \psi(q) dq. \end{aligned}$$

Сравнивая два крайних интеграла, видим, что $(c\hat{F})^+ = c^* \hat{F}^+$. ♦

Задача 1.18. Доказать, что для произведения операторов $\hat{F}\hat{G}$

$$(\hat{F}\hat{G})^+ = \hat{G}^+ \hat{F}^+. \quad (1.38)$$

Для доказательства воспользуемся определением эрмитова сопряжения (1.36). С одной стороны, имеем:

$$\int \varphi^*(q) (\hat{F}\hat{G}) \psi(q) dq = \int \left((\hat{F}\hat{G})^+ \varphi(q) \right)^* \psi(q) dq. \quad (1.39)$$

С другой стороны, можно записать

$$\begin{aligned} \int \varphi^*(q) (\hat{F}\hat{G}) \psi(q) dq &= \int \varphi^*(q) \hat{F} (\hat{G}\psi(q)) dq = \int \left(\hat{F}^+ \varphi(q) \right)^* \hat{G}\psi(q) dq = \\ &= \int \left(\hat{G}^+ \hat{F}^+ \varphi(q) \right)^* \psi(q) dq. \end{aligned} \quad (1.40)$$

Поскольку левые части (1.39) и (1.40) одинаковы, то приравнивая их правые части, получаем равенство (1.38). ♦

Задача 1.19. Доказать, что для некоммутирующих эрмитовых операторов $\hat{F}$ и $\hat{G}$ выполняется равенство:

$$[\hat{F}, \hat{G}] = i\hat{D}, \quad (1.41)$$

где $\hat{D}$ – тоже эрмитов оператор.

Решение. Из (1.41) следует, что оператор

$$\hat{D} = -i[\hat{F}, \hat{G}].$$

Докажем теперь, что этот оператор эрмитов:

$$\begin{aligned} \hat{D}^+ &= \left(-i[\hat{F}, \hat{G}]\right)^+ = i[\hat{F}, \hat{G}]^+ = i\left\{(\hat{F}\hat{G})^+ - (\hat{G}\hat{F})^+\right\} = \\ &= i(\hat{G}\hat{F} - \hat{F}\hat{G}) = -i[\hat{F}, \hat{G}] = \hat{D}. \end{aligned}$$

Здесь мы воспользовались результатами задач 1.17 и 1.18. ♦

Задача 1.20. Пусть $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$, причем операторы $\hat{A}, \hat{B}$ коммутируют

со своим коммутатором т.е. $[\hat{A}, \hat{C}] = 0, [\hat{B}, \hat{C}] = 0$. Доказать, что

$$[\hat{A}, \hat{B}^n] = in\hat{C}\hat{B}^{n-1}.$$

Решение. Поскольку $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A} + i\hat{C}$, имеет место цепочка равенств

$$\begin{aligned} \hat{A}\hat{B}^n &= \hat{A}\underbrace{\hat{B}\hat{B}\hat{B}\dots\hat{B}}_n = (\hat{B}\hat{A} + i\hat{C})\underbrace{\hat{B}\hat{B}\hat{B}\dots\hat{B}}_{n-1} = \hat{B}\hat{A}\underbrace{\hat{B}\hat{B}\hat{B}\dots\hat{B}}_{n-1} + i\hat{C}\hat{B}^{n-1} = \hat{B}(\hat{B}\hat{A} + i\hat{C})\underbrace{\hat{B}\hat{B}\hat{B}\dots\hat{B}}_{n-2} \\ &+ i\hat{C}\hat{B}^{n-1} = \hat{B}\hat{B}\hat{A}\underbrace{\hat{B}\hat{B}\hat{B}\dots\hat{B}}_{n-2} + 2i\hat{C}\hat{B}^{n-1} = \dots = \hat{B}^n\hat{A} + ni\hat{C}\hat{B}^{n-1}. \end{aligned}$$

Отсюда сразу получаем, что $[\hat{A}, \hat{B}^n] = in\hat{C}\hat{B}^{n-1}$. ♦

Оператор $\hat{U}$ называется унитарным, если

$$\hat{U}\hat{U}^+ = \hat{U}^+\hat{U} = \hat{1}.$$

Преобразование, при котором функции ψ сопоставляется функция $\varphi = \hat{U}^+\psi$, а оператору $\hat{A}$ – оператор $\hat{a} = \hat{U}^+\hat{A}\hat{U}$, называется унитарным преобразованием.

Задача 1.21. Доказать, что унитарное преобразование сохраняет коммутационные соотношения.

Решение. Пусть $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{C}$. В случае унитарного преобразования оператору $\hat{A}$ ставится в соответствие оператор $\hat{a} = \hat{U}^+\hat{A}\hat{U}$, оператору $\hat{B}$ – оператор $\hat{b} = \hat{U}^+\hat{B}\hat{U}$ и оператору $\hat{C}$ – оператор $\hat{c} = \hat{U}^+\hat{C}\hat{U}$. Вычисляя коммутатор $[\hat{a}, \hat{b}]$, имеем:

$$[\hat{a}, \hat{b}] = \hat{U}^+ \hat{A} \hat{U} \hat{U}^+ \hat{B} \hat{U} - \hat{U}^+ \hat{B} \hat{U} \hat{U}^+ \hat{A} \hat{U} = \hat{U}^+ \hat{A} \hat{B} \hat{U} - \hat{U}^+ \hat{B} \hat{A} \hat{U} = \hat{U}^+ \hat{C} \hat{U} = \hat{c},$$

что и требовалось доказать. ♦

Задачи для самостоятельного решения

- 1.22.** Доказать свойства скобок Пуассона (1.2)-(1.7).
- 1.23.** Доказать соотношение (1.11) между скобкой Пуассона и коммутатором.
- 1.24.** Для классического углового момента $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ вычислить скобки Пуассона $\{L_i, L_j\}, \{L_i, x_j\}, \{L_i, p_j\}, \{L_i, L^2\}, \{L_i, \mathbf{r}^2\}, \{L_i, \mathbf{p}^2\}$, где i, j декартовы компоненты углового момента. Вычислить коммутаторы между соответствующими операторами.
- 1.25.** Используя процедуру канонического квантования, вычислить коммутатор $[\hat{p}_x, f(r)]$, где $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$.
- 1.26.** Найти закон движения для одномерного квантового гармонического осциллятора, используя процедуру канонического квантования.
- 1.27.** Существует ли оператор, обратный оператору дифференцирования $\hat{D} = \frac{d}{dx}$?
- 1.28.** Доказать свойства коммутаторов (1.28)-(1.31).
- 1.29.** Найти:
- $\left(\frac{d}{dx} + x\right)^3$;
 - $(\hat{A} - \hat{B})(\hat{A} + \hat{B})$;
- 1.30.** Рассчитать $[\hat{x}, \hat{p}_x^2], [\hat{x}^2, \hat{p}_x], [\hat{x}^2, \hat{p}_x^2]$.
- 1.31.** Рассчитать $[\hat{p}_x, f(\hat{x})], [\hat{x}, f(\hat{p}_x)]$.
- 1.32.** Рассчитать $[\hat{T}_a, \hat{x}], [\hat{T}_a, \hat{p}_x]$.
- 1.33.** Найти связь между операторами трансляции $\hat{T}_a$ и импульса $\hat{p}_x$.
- 1.34.** Доказать, что, если два эрмитовых оператора $\hat{F}$ и $\hat{G}$ коммутируют, то их произведение также является эрмитовым.
- 1.35.** Показать, что, если операторы $\hat{F}$ и $\hat{G}$ являются эрмитовыми операторами, то таким же будет и оператор

$$\hat{S} = \frac{1}{2}(\hat{F}\hat{G} + \hat{G}\hat{F}).$$

1.36. Показать, что классической динамической величине $x^2 p_x$ соответствует эрмитов оператор $\frac{(\hat{x}^2 \hat{p}_x + \hat{x} \hat{p}_x \hat{x} + \hat{p}_x \hat{x}^2)}{3}$.

1.37. Показать, что оператор $-\frac{d^2}{dx^2}$ является эрмитовым.

1.38. Доказать, что $\hat{F}^{++} = \hat{F}$.

1.39. Доказать, что для эрмитова оператора $\hat{F}$ оператор $e^{i\hat{F}}$ будет унитарным.

1.40. Доказать, что произведение унитарных операторов также будет унитарным оператором.

1.41. Останется ли эрмитов оператор $\hat{F}$ эрмитовым после унитарного преобразования?

1.42. (*) Пусть операторы $\hat{A}, \hat{B}$ коммутируют со своим коммутатором. Доказать, что

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{-\frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}]} e^{\hat{A}} e^{\hat{B}}.$$

Указание. Рассмотреть функцию $f(\lambda) = e^{\lambda \hat{A}} e^{\lambda \hat{B}}$, далее найти $\frac{df}{d\lambda}$ и решить получившиеся дифференциальное уравнение.

1.43. (*) Доказать тождество Беккера – Кэмпбела – Хаусдорфа

$$e^{\hat{A}} \hat{B} e^{-\hat{A}} = \hat{B} + [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2!} [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \frac{1}{3!} [\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]] + \dots$$

Указание. Рассмотреть функцию $f(\lambda) = e^{\lambda \hat{A}} \hat{B} e^{-\lambda \hat{A}}$ и найти ее производные.

Ответы к задачам для самостоятельного решения

$$1.24. \begin{cases} \{L_i, L_j\} = \sum_k \varepsilon_{ijk} L_k; \{L_i, x_j\} = \sum_m \varepsilon_{ijm} x_m; \{L_i, p_j\} = \sum_n \varepsilon_{ijn} p_n; \{L_i, L^2\} = \{L_i, r^2\} = \{L_i, p^2\} = 0, \\ [\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} \hat{L}_k; [\hat{L}_i, \hat{x}_j] = i\hbar \sum_m \varepsilon_{ijm} \hat{x}_m; [\hat{L}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \sum_n \varepsilon_{ijn} \hat{p}_n; [\hat{L}_i, \hat{L}^2] = [\hat{L}_i, \hat{r}^2] = [\hat{L}_i, \hat{p}^2] = 0, \end{cases}$$

где ε_{imn} - тензор (символ) Леви – Чевиты (Приложение 1).

$$1.25. [\hat{p}_x, f(r)] = -i\hbar \frac{df}{dr} \frac{x}{r}.$$

$$1.26. \hat{x}(t) = \hat{x}(0) \cos(\omega t) + \frac{\hat{p}(0)}{m\omega} \sin(\omega t); \hat{p}(t) = \hat{p}(0) \cos(\omega t) - m\omega \hat{x}(0) \sin(\omega t).$$

1.27. Нет.

1.29. а) $\frac{d^3}{dx^3} + 3x \frac{d^2}{dx^2} + (2x^2 + x + 3) \frac{d}{dx} + (x^2 + x + 1);$

б) $\hat{A}^2 - \hat{B}^2 + [\hat{A}, \hat{B}];$

1.30. $2i\hbar \hat{p}_x, 2i\hbar x, 2i\hbar (\hat{x} \hat{p}_x + \hat{p}_x \hat{x}).$

1.31. $-i\hbar \frac{\partial f}{\partial x}, i\hbar \frac{\partial f}{\partial p_x}.$

1.32. $-a \hat{T}_a, \quad 0.$

1.33. $\hat{T}_a = e^{\left(\frac{i}{\hbar} a \hat{p}_x\right)}.$

1.41. Да.

ПРИЛОЖЕНИЕ 1. УГЛОВОЙ МОМЕНТ И СИМВОЛ ЛЕВИ-ЧЕВИТЫ

В классической механике угловым моментом называется вектор $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ с компонентами

$$\begin{aligned}L_x &= yp_z - zp_y, \\L_y &= zp_x - xp_z, \\L_z &= xp_y - yp_x.\end{aligned}\tag{П1.1}$$

Будем использовать наборы индексов (1,2,3) и (x,y,z) в зависимости от удобства ($L_x = L_1$, $L_y = L_2$, $L_z = L_3$). Выбрав набор (1,2,3) три уравнения (П.1.1) объединяются в одно

$$L_i = \sum_{m,n} \varepsilon_{imn} x_m p_n.$$

Здесь ε_{imn} - тензор (символ) Леви-Чевиты:

$$\varepsilon_{imn} = \begin{cases} +1, & \text{если } (i,m,n) \text{ циклическая перестановка } (1,2,3), \\ -1, & \text{если } (i,m,n) \text{ нециклическая перестановка } (1,2,3), \\ 0, & \text{как минимум два индекса совпадают.} \end{cases}$$

Таким образом символ Леви-Чевиты равен 1 для перестановок (123), (231), (312), равен -1 для перестановок (132), (321), (213), равен 0 например для случая (311).

Свойства символа Леви-Чевиты

а) $\varepsilon_{imn} = -\varepsilon_{min}$ (антисимметричность),

б) $\varepsilon_{ijk} \varepsilon_{imn} = \delta_{jm} \delta_{kn} - \delta_{jn} \delta_{km}$ (связь с символом Кронекера).

ПРИЛОЖЕНИЕ 2. КОМПЛЕКСНЫЕ ЧИСЛА

Используемые в квантовой механике волновые функции в общем случае комплекснозначны. Поэтому вспомним свойства комплексных чисел.

Вводится мнимая единица i , квадрат которой равен -1 . Число $z = x + iy$ называется комплексным числом. Число x носит название действительной части числа и обозначается $\operatorname{Re} z$, число y носит название мнимой части числа и обозначается $\operatorname{Im} z$. Комплексному

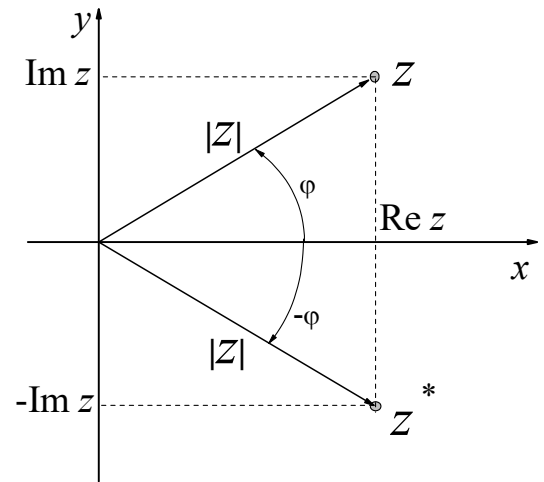


Рис. П1.1.

числу соответствует вектор на комплексной плоскости, по осям которой откладываются действительная и мнимая части числа (рис. П1.1). Модуль этого вектора равен $\sqrt{x^2 + y^2}$ и называется модулем комплексного числа $|z|$. Угол φ между осью x и вектором называется аргументом числа z : $\varphi = \arg z$; $\operatorname{tg} \varphi = \frac{\operatorname{Im} z}{\operatorname{Re} z}$.

Для произведения двух комплексных чисел имеем:

$$z_1 z_2 = (x_1 + iy_1)(x_2 + iy_2) = (x_1 x_2 - y_1 y_2) + i(x_2 y_1 + x_1 y_2).$$

Комплексное число $z^* = x - iy$ называется комплексным сопряжённым числу $z = x + iy$. Очевидно, что $|z^*| = |z|$, а $\arg z^* = -\arg z$. Произведение

$$zz^* = (x + iy)(x - iy) = x^2 + y^2 = |z|^2.$$

Равенство $|z|^2 = z^2$ справедливо только для действительных чисел. Для комплексных чисел в общем случае $|z|^2 \neq z^2$. Отметим, что для произведения или частного двух комплексных чисел $(z_1 z_2)^* = z_1^* z_2^*$, $(z_1 / z_2)^* = z_1^* / z_2^*$.

Действительная и мнимая части комплексного числа выражаются через его модуль и аргумент:

$$\operatorname{Re} z = |z| \cos \varphi, \quad \operatorname{Im} z = |z| \sin \varphi.$$

Используя формулу Эйлера для комплексной экспоненты

$$e^{i\varphi} = \cos \varphi + i \sin \varphi,$$

можем записать комплексное число z в виде

$$z = |z| e^{i\varphi}$$

Для комплексно сопряжённого числа $z^* = |z| e^{-i\varphi}$.

Если вектор вращается в комплексной плоскости с частотой ω , то его проекции на действительную и мнимую оси изменяются во времени как

$$\operatorname{Re} z = \cos \omega t, \quad \operatorname{Im} z = \sin \omega t,$$

что позволяет описывать вращение с помощью комплексной экспоненты $e^{i\omega t}$.

Волну, бегущую вдоль оси x с волновым вектором k , тоже удобно описывать, используя комплексную экспоненту $e^{-i\omega t + ikx}$. Для стоячих волн, напротив, удобнее использовать функции $\sin \omega t$ и $\cos \omega t$.