ЛЕКЦИЯ 10

Теоремы Эренфеста. Волновые пакеты. Представление Гейзенберга

На прошлой лекции было получено выражение для оператора производной по времени:

$$\frac{d\hat{f}}{dt} = \hat{\dot{f}} = \frac{\partial \hat{f}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{f}]. \tag{10.1}$$

В нашем курсе рассматриваются величины, не зависящие от времени, поэтому первое слагаемое в (10.1) (частная производная по времени) равно нулю:

$$\frac{\partial \hat{f}}{\partial t} = 0.$$

Взяв среднее значение от обеих частей равенства (10.1) при этом условии, получим:

$$\frac{d\overline{f}}{dt} = \overline{\hat{\dot{f}}} = \frac{i}{\hbar}\overline{[\hat{H}, \hat{f}]}. \tag{10.2}$$

10.1. Теоремы Эренфеста

Будем для простоты рассматривать движение одной частицы. Гамильтониан в этом случае окажется равен:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x, y, z). \tag{10.3}$$

Пусть состояние таково, что в конфигурационном представлении вероятность найти частицу около некоторого среднего значения представлена на рисунке 10.1.

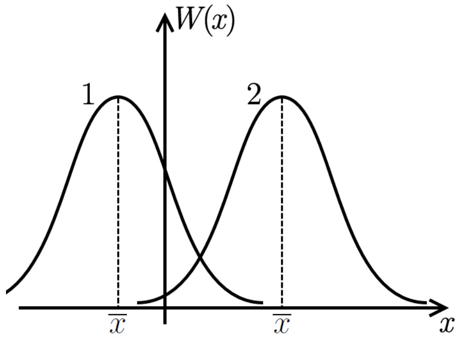

Рис. 10.1.

Среднее значение с течением времени может перемещаться (кривая (1) переходит в кривую (2)). Чтобы найти закон изменения среднего значения, возьмем

$$\hat{f} = \hat{x}.$$

Тогда, согласно (10.2),

$$\hat{\dot{x}} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{x}].$$

Оператор $\hat{x}$ коммутирует с потенциальной энергией $V(x, y, z)$ в гамильтониане (10.3). С компонентами импульса $\hat{p}_y^2$ и $\hat{p}_z^2$ оператор $\hat{x}$ также коммутирует. Однако с x-компонентой квадрата импульса оператор $\hat{x}$ коммутировать не будет, следовательно:

$$\hat{\dot{x}} = \frac{i}{\hbar}\left[\frac{\hat{p}_x^2}{2m}, \hat{x}\right].$$

Коммутатор

$$[p_x, x] = -i\hbar$$

известен.

Воспользуемся следующей формулой:

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

Следовательно,

$$[\hat{p}_x^2, \hat{x}] = [\hat{p}_x\hat{p}_x, \hat{x}] = \hat{p}_x[\hat{p}_x, \hat{x}] + [\hat{p}_x, \hat{x}]\hat{p}_x = -2i\hbar\hat{p}_x.$$

Отсюда видно, что

$$\dot{\hat{x}} = \frac{i}{\hbar}\frac{1}{2m}(-2i\hbar)\hat{p}_x = \frac{\hat{p}_x}{m},$$

следовательно, смещение среднего значения равно:

$$\frac{d\overline{x}}{dt} = \overline{\left(\frac{\hat{p}_x}{m}\right)} = \overline{\hat{V}_x}. \tag{10.4}$$

Полученное выражение аналогично выражению для классической частицы: изменение среднего значение равно среднему значению скорости. Найдем теперь производную оператора $\dot{\hat{x}}$. Оператор $\hat{p}_x$ коммутирует со всеми тремя компонентами импульса, но не коммутирует с потенциалом $V(x, y, z)$:

$$\dot{\hat{p}}_x = \frac{i}{\hbar}[V(x, y, z), \hat{p}_x]. \tag{10.5}$$

Найдем величину этого коммутатора, подействовав на состояние $|\Psi\rangle$.

$$[V(x, y, z), \hat{p}_x]\Psi = -[\hat{p}_x, V(x, y, z)]\Psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(V\Psi) + V\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi =$$
$$= i\hbar\frac{\partial V}{\partial x}\Psi + i\hbar V\frac{\partial \Psi}{\partial x} - i\hbar V\frac{\partial \Psi}{\partial x} = i\hbar\frac{\partial V}{\partial x}\Psi.$$

Следовательно, выражение (10.5) примет следующий вид:

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

Это означает, что изменение среднего значения импульса

$$\frac{d\overline{p}}{dx} = -\overline{\left(\frac{\partial V}{\partial x}\right)} \tag{10.6}$$

Это выражение также напоминает классическое уравнение движения: изменение импульса — среднее от производной потенциала по соответствующему направлению. Выражение (10.6) не совсем классическое. В классике

$$\frac{d\overline{p}_x}{dx} = -\frac{\partial V}{\partial \overline{x}},$$

поскольку в качестве центра движения частицы (см. рис. 10.1) берется величина $\overline{x}$.

В случае малых длин волны оба эти выражения примерно равны:

$$\overline{\left(\frac{\partial V}{\partial x}\right)} \simeq \frac{\partial V}{\partial \overline{x}}.$$

Выражения (10.4), (10.6) выражают суть теорем Эренфеста, заключающуюся в том, что изменение средних значений импульса и энергии похожи на классические.

10.2. Волновой пакет

Проиллюстрируем теоремы Эренфеста при свободном движении частицы. Волновая функция свободно движущейся частицы суть монохроматическая волна:

$$\Psi = Ce^{-i\omega t + ikx}, \tag{10.7}$$

где для свободной частицы:

$$\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m},$$

а k — волновой вектор.

Составим следующую комбинацию (пакет волн), проинтегрировав (10.7) по волновому вектору k (можно было бы интегрировать по энергии):

$$\tilde{\Psi} = C \int\limits_{k_0 - \frac{\Delta k}{2}}^{k_0 + \frac{\Delta k}{2}} e^{-i\omega t + ikx}\, dk.$$

Будем при этом считать, что

$$\Delta k \ll k_0. \tag{10.8}$$

Представим волновой вектор k в следующем виде:

$$k = k_0 + \xi, \qquad -\frac{\Delta k}{2} \leqslant \xi \leqslant \frac{\Delta k}{2}$$

и разложим ω вблизи некоторого значения k_0:

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m} = \frac{\hbar k_0^2}{2m} + \frac{\hbar k_0}{m}\xi + \frac{1}{2}\frac{\hbar}{m}\xi^2. \tag{10.9}$$

Это выражение можно было бы записать в следующем виде:

$$\omega = \omega_0 + \xi \left.\frac{\partial \omega}{\partial k}\right|_{k=k_0} + \frac{\xi^2}{2} \left.\frac{\partial^2 \omega}{\partial k^2}\right|_{k=k_0}$$

При выполнении условия (10.8), последнее слагаемое в (10.9) много меньше предпоследнего:

$$\frac{1}{2}\frac{\hbar}{m}\xi^2 \ll \frac{\hbar k_0}{m}\xi \quad \Leftrightarrow \quad \frac{1}{2}\xi \ll \hbar_0,$$

поскольку

$$\xi \ll k_0.$$

Казалось бы, этим слагаемым можно пренебречь. Однако это не всегда так. Дело в том, что в (10.7) величина ω умножается на t, поскольку t может быть большим.

В курсе теории поля подобная ситуация наблюдалась с дипольным приближением: величиной Δt в выражении

$$\sin \omega(T + \Delta t), \qquad \Delta t \ll T$$

пренебречь нельзя.

Пренебречь этой величиной можно будет только в том случае, когда

$$\omega \Delta t \ll 1,$$

то есть изменение фазы мало по сравнению с единицей.

Последним членом в выражении (10.9) пренебрежем, считая, что

$$\frac{\hbar}{m}(\Delta k)^2 \cdot t \ll 1. \tag{10.10}$$

Интеграл (10.7) в этом случае легко вычислить:

$$\tilde{\Psi} = Ce^{-i\omega_0 t + ik_0 x} \int\limits_{-\frac{\Delta k}{2}}^{\frac{\Delta k}{2}} e^{i\xi\left(x - \frac{\partial\omega}{\partial t}_{k_0} t\right)}\, d\xi = Ce^{-i\omega_0 t + ik_0 x} \cdot 2 \cdot \frac{\sin\left\{\frac{\Delta k}{2} \cdot \left(x - \left.\frac{\partial\omega}{\partial k}\right|_{k_0} t\right)\right\}}{x - \left.\frac{\partial\omega}{\partial k}\right|_{k_0} t}.$$

Удобно ввести следующие обозначения:

$$\eta = x - \left.\frac{\partial\omega}{\partial k}\right|_{k_0} t,$$

тогда выражение для волновой функции $\tilde{\Psi}$ примет следующий вид:

$$\tilde{\Psi} = 2Ce^{-i\omega_0 t + ik_0 x} \cdot \frac{\sin\frac{\Delta k}{2}\eta}{\eta} \tag{10.11}$$

В выражении (10.11)

$$e^{-i\omega_0 t + ik_0 x}$$

есть волна, модулированная множителем

$$y = \frac{\sin\frac{\Delta k}{2}\eta}{\eta}. \tag{10.12}$$

График зависимости $y^2(\eta)$ представлен на рисунке 10.2. Максимум (10.12), очевидно, достигается при

$$\eta = 0 \quad \Rightarrow \quad x - \left(\frac{\partial\omega}{\partial k}\right)_0 t = 0. \tag{10.13}$$

Это означает, что центр пакета $\overline{x}$ перемещается равномерно со скоростью

$$\left.\frac{\partial\omega}{\partial k}\right|_{k_0} \tag{10.14}$$

равномерно. Величина (10.14) называется **групповой скоростью**.

Напомним, что **фазовая скорость** определяется из волновой части (10.11) и равна:

$$v_{\text{ф}} = \frac{\omega_0}{k_0}.$$

Групповая скорость, согласно (10.9), определяется следующим соотношением:

$$v_{\text{гр}} = \left.\frac{\partial\omega}{\partial k}\right|_{k_0} = \frac{\hbar k_0}{m} = \frac{p_0}{m},$$

где p_0 — центральный импульс.

Следовательно, центр пакета движется со скоростью, отвечающей скоростью частицы: групповая скорость равна скорости частицы. Фазовая скорость, очевидно, в два раза больше групповой скорости:

$$v_{\text{ф}} = \frac{\omega_0}{k_0} = 2v_{\text{гр}}.$$

Это соотношение позволяет наглядно убедиться в справедливости соотношения неопределенностей. Пусть

$$t = \text{const}.$$

В этом случае, согласно (10.13)

$$\Delta\eta = \Delta x \quad \Rightarrow \quad \frac{\Delta k}{2}\eta = \frac{\Delta k \Delta x}{2}.$$

Вероятность найти частицу при постоянном t оказывается равной нулю (см. рис. 10.2) в случае, когда

$$\frac{\Delta k \Delta\eta}{2} = \pi.$$

Падение вероятности в половину будет наблюдаться, когда

$$\frac{\Delta k \Delta\eta}{2} = \frac{\pi}{2}.$$

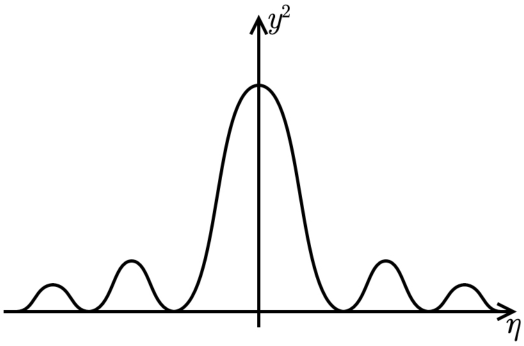

Рис. 10.2.

Поскольку, как уже было сказано ранее, при фиксированном времени

$$\Delta\eta = \Delta x,$$

то вероятность окажется равной нулю при

$$\Delta x \Delta k \sim 2\pi.$$

А поскольку

$$\Delta x = \frac{\Delta p}{\hbar} \quad \Rightarrow \quad \Delta x \cdot \Delta p \sim 2\pi \cdot \hbar = h,$$

что совпадает с ранее полученным соотношением неопределенностей.

Из этих соотношений видно, что если волновой пакет имеет некоторый разброс волновых векторов Δk, то эффективная ширина этого пакета Δx связана разбросом волновых векторов соотношением неопределенностей.

Этот пример позволяет также получить соотношение неопределенностей между энергией и временем. На прошлой лекции было показано, что это соотношение совершенно другого типа, чем соотношение неопределенностей между импульсом и координатой частицы, поскольку время считается измеренным точно.

Под Δt понимается время, за которое существенно изменяется измеряемая величина, не коммутирующая с гамильтонианом. Пусть теперь

$$x = \text{const}.$$

В этом случае

$$\Delta\eta = \left(\frac{\partial\omega}{\partial t}\right)_0 \Delta t.$$

Через некоторую выделенную точку (см. рис. 10.3) большая часть пакета проходит за время:

$$\Delta k \frac{\Delta\eta}{2} \sim \pi \quad \Rightarrow \quad \left(\frac{\partial\omega}{\partial t}\right)_0 \Delta k \Delta t \sim 2\pi.$$

Поскольку

$$\frac{\partial\omega}{\partial k}\Delta k = \Delta\omega,$$

то

$$\Delta\omega\Delta t \sim 2\pi \quad \Rightarrow \quad \Delta E \Delta t \sim 2\pi\hbar = h,$$

где Δt — время, за которое волновой пакет изменятся на величину большую, чем дисперсия пакета.

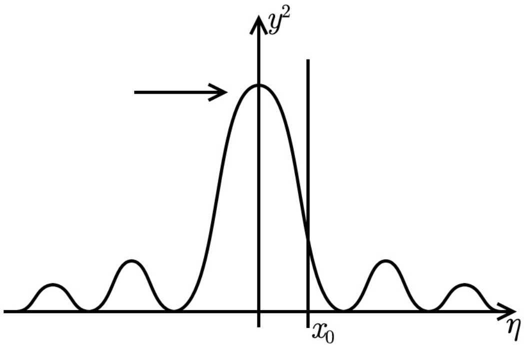

Рис. 10.3.

В нашем приближении форма волны со временем не меняется, поскольку это приближение было рассмотрено при условии (10.10). Если бы это условие не выполнялось, то форма волнового пакета могла бы измениться. Перепишем условие (10.10) следующим образом:

$$\frac{\hbar}{m}\Delta k \cdot t \ll \frac{1}{\Delta k} \simeq \Delta x, \tag{10.15}$$

где Δx — ширина пакета.

В левой части неравенства (10.15)

$$\frac{\hbar\Delta k}{m} = \frac{\Delta p}{m}, \qquad \frac{\Delta p}{m} = \Delta v,$$

где Δp — неопределенность импульса,
Δv — неопределенность скорости.

Таким образом, в волновом пакете импульс и, следовательно, скорость, меняются в некоторых пределах. Разные части пакета, движущиеся со скоростью в интервале Δv, расходятся.

Таким образом, левая часть (10.15)

$$\frac{\hbar}{m}\Delta k \cdot t = \Delta v \cdot t$$

есть не что иное, как расширение пакета.

Следовательно, условие (10.10) означает, что было взято время, при котором пакет не успел расшириться значительно:

$$\Delta v \cdot t \ll \Delta x.$$

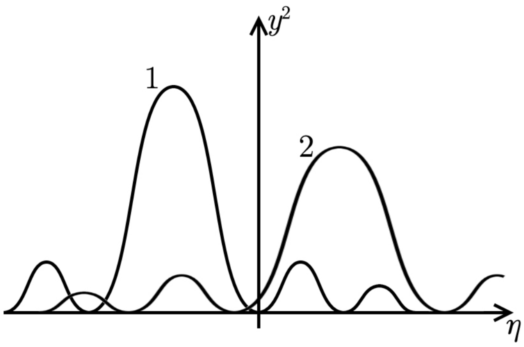

Рис. 10.4.

Если это условие нарушается, то волновой пакет увеличивает ширину (см. рис. 10.4). Если характерное расстояние L, на котором движется пакет, значительно больше длины волны:

$$L \gg \lambda,$$

то всегда можно выбрать такой размер пакета Δx, который будет меньше размера расстояния, на котором рассматривается движение пакета, но больше длины волны:

$$L \gg \Delta x \gg \lambda.$$

Размеры пакета, даже при его расширении, равны

$$\Delta v \cdot t,$$

поэтому если длина волны мала, то размеры пакета окажутся малыми по сравнению с расстоянием, которое проходит пакет. Считается, что

$$\Delta k \ll k_0. \qquad (10.16)$$

Поскольку

$$\frac{1}{k_0} = \lambda\!\!\!^{-}_0 = \frac{\lambda}{2\pi}, \qquad \Delta k \sim \frac{1}{\Delta x},$$

следовательно, соотношение (10.16) примет вид:

$$\frac{1}{k_0} \ll \frac{1}{k} \quad \Rightarrow \quad \Delta x \gg \lambda\!\!\!^{-},$$

то есть ширина пакета значительно больше длины волны.

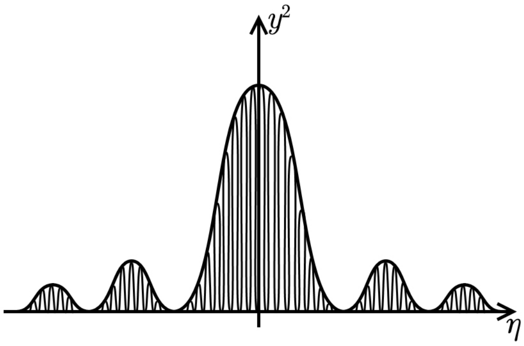

Рис. 10.5.

Рассматриваемый пакет состоит из многих длин волн, что является условием его движения как частицы (см. рис. 10.5).

Пример 10.1. Большие энергии при осуществлении термоядерной реакции нужны для того, чтобы преодолеть кулоновское отталкивание.

Идея осуществления термоядерной реакции при малых энергиях заключается в следующем: пусть к ядру дейтерия, вокруг которого вращается электрон, подлетает другой атом дейтерия (см. рис. 10.6). Оказавшись между двумя атомами дейтерия, электрон будет экранировать заряд, что приведет к сближению зарядов.

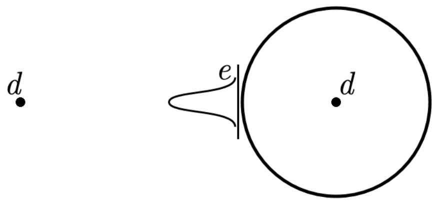

Рис. 10.6.

В свое время планировался эксперимент, основанный на этом явлении. Однако затем стало понятно, что волновой пакет электрона расширится за время гораздо меньшее, чем время сближения ядер друг с другом, что приведет к отсутствию экранирования. Эксперимент был отменен.

10.3. Эволюция состояния

Пусть в момент времени $t = 0$ известен вектор состояния $|\Psi_0\rangle$. Рассмотрим способ нахождения вектора состояния $|\Psi\rangle_t$ в момент времени

$$t \neq 0,$$

если гамильтониан $\hat{H}$ не зависит от времени.

Разложим состояние $|\Psi_0\rangle$ по собственным состояниям оператора Гамильтона:

$$\hat{H}|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle,$$

причем собственные вектора $|\varphi_n\rangle$ составляют полный базис.

В этом случае всегда можно разложить $|\Psi_0\rangle$ по этому базису:

$$|\Psi_0\rangle = \sum_n c_n|\varphi_n\rangle. \tag{10.17}$$

Зная коэффициенты c_n можно записать, что

$$|\Psi\rangle_t = \sum_n c_n e^{-\frac{iE_nt}{\hbar}}|\varphi_n\rangle. \tag{10.18}$$

Таким образом, чтобы найти вектор состояния $|\Psi\rangle$ в любой момент времени, надо разложить начальный вектор состояния $|\Psi_0\rangle$ по собственным состояниям энергии и домножить на соответствующий множитель.

Докажем, что соотношение (10.18) верное. Для состояния в произвольный момент времени должны выполняться два требования:

$$\begin{cases} i\hbar\dfrac{\partial|\Psi\rangle}{\partial t} = \hat{H}|\Psi\rangle \\ |\Psi\rangle_{t=0} = |\Psi\rangle_0 \end{cases} \tag{10.19}$$

Второе условие в (10.19) будет очевидно выполняться, поскольку:

$$t = 0 \quad \Rightarrow \quad e^{-\frac{iE_nt}{\hbar}} = 1$$

и выражение (10.18) переходит в (10.17).

Второе требование выполняется, поскольку стационарное состояние

$$|\Psi_n\rangle = e^{-\frac{iE_nt}{\hbar}}|\varphi_n\rangle$$

удовлетворяет первому соотношению в (10.19).

Поскольку

$$\hat{H}|\Psi_n\rangle = E_n|\Psi_n\rangle,$$

каждое слагаемое в (10.18) удовлетворяет уравнению Шредингера и, следовательно, вся сумма будет удовлетворять уравнению Шредингера.

Будем теперь искать вектор состояния $|\Psi\rangle$ в следующем виде:

$$|\Psi\rangle = \hat{U}(t)|\Psi_0\rangle. \tag{10.20}$$

Подставляя это выражение в уравнение Шредингера, получим:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi\rangle = \hat{H}|\Psi\rangle.$$

Поскольку в (10.20) от времени зависит только оператор $\hat{U}$, то

$$i\hbar\frac{d\hat{U}}{dt}|\Psi_0\rangle = \hat{H}\hat{U}|\Psi_0\rangle.$$

В силу произвольности $|\Psi_0\rangle$ должно выполняться равенство:

$$i\hbar\frac{d\hat{U}}{dt} = \hat{H}\hat{U}.$$

Если бы $\hat{H}$ и $\hat{U}$ были не операторами, а числами, то решение уравнения

$$i\hbar\frac{dU}{dt} = HU$$

имело бы следующий вид:

$$U = ce^{-\frac{iHt}{\hbar}} = e^{-\frac{iHt}{\hbar}},$$

где

$$c = 1,$$

поскольку при $t = 0$ величина U должна равняться единице.

Для операторов, соответственно:

$$\hat{U} = e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}. \tag{10.21}$$

Казалось бы, оператор не должен находиться в экспоненте. Однако, если разложить экспоненту по степеням, то получится некоторый операторный ряд, существование которого не кажется странным.

Покажем, что способы (10.18) и (10.21) аналогичны. Для этого подействуем оператором (10.21) на собственное состояние Гамильтониана $|\varphi_n\rangle$:

$$e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}|\varphi_n\rangle = \sum_k \left(-\frac{i}{\hbar}t\right)^k \frac{1}{k!}\hat{H}^k|\varphi_n\rangle = \sum_k \left(-\frac{i}{\hbar}t\right)^k \frac{1}{k!}E_n^k|\varphi_n\rangle.$$

В этом выражении несложно сумму свернуть обратно в экспоненту:

$$\sum_k \left(-\frac{i}{\hbar}t\right)^k \frac{1}{k!}E_n^k = e^{-\frac{iE_nt}{\hbar}} \quad \Rightarrow \quad |\Psi_n\rangle = e^{-\frac{iE_nt}{\hbar}}|\varphi_n\rangle,$$

в результате чего получим уже найденное ранее значение.

Оператор $\hat{U}$ называется **оператором эволюции**. Воспользовавшись оператором эволюции, можно записать изменение волновой функции со временем и решать соответствующие задачи.

10.4. Представление Гайзенберга

Среднее значение некоторой физической величины определяется следующим образом:

$$\overline{f} = \langle\Psi|\hat{f}|\Psi\rangle,$$

где, если $\hat{f}$ не зависит от времени, то зависимость от времени заключается в зависимости от времени векторов состояния.

Зависимость от времени векторов состояния можно перенести на зависимость операторов, поскольку

$$|\Psi\rangle = \hat{U}|\Psi_0\rangle, \qquad \langle\Psi| = \langle\Psi_0|\hat{U}^\dagger.$$

Следовательно, выражение для среднего значения примет вид:

$$\overline{f} = \langle\Psi_0|\hat{U}^\dagger\hat{f}\hat{U}|\Psi_0\rangle,$$

причем оператор эволюции $\hat{U}$ зависит от времени, а состояние $|\Psi_0\rangle$ не зависит от времени, то есть зависимость от времени действительно перенесена на операторы.

Оператором в представлении Гайзенберга называется величина:

$$\hat{f}_H = \hat{U}^\dagger \hat{f} \hat{U}.$$

Оператор $\hat{f}_H$ явно зависит от времени, поэтому производная оператора Гайзенберга состоит из суммы трех производных (по каждому из множителей):

$$\frac{d\hat{f}_H}{dt} = \left(\frac{\partial \hat{f}}{\partial t}\right)_H + \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{f}_H]. \tag{10.22}$$

Докажем соотношение (10.22):

$$\frac{d\hat{f}_H}{dt} = \left(\frac{\partial \hat{f}}{\partial t}\right)_H + \frac{\partial \hat{U}^\dagger}{\partial t}\hat{f}\hat{U} + \hat{U}^\dagger \hat{f}\frac{\partial \hat{U}}{\partial t}. \tag{10.23}$$

Поскольку

$$i\hbar\frac{\partial \hat{U}}{\partial t} = \hat{H}\hat{U},$$

то, перенося $i\hbar$ в левую часть, получим:

$$\frac{\partial \hat{U}}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\hat{U}, \qquad \frac{\partial \hat{U}^\dagger}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}\hat{U}^\dagger \hat{H}.$$

Подставляя эти выражения в (10.23), получим выражение (10.22). Таким образом, выражение для производной оператора Гайзенберга не отличается от производной оператора средней величины по времени.

Пусть в классической механике существует функция, зависящая от q, p:

$$f(q, p, t).$$

В классическом случае:

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial q}\dot{q} + \frac{\partial f}{\partial p}\dot{p}.$$

В уравнениях Гамильтона

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}, \qquad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}.$$

Следовательно, классическое выражение для производной примет вид:

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial q}\frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial f}{\partial p}\frac{\partial H}{\partial q} = \frac{\partial f}{\partial t} + \{H, f\}_{\text{кл}},$$

где, как известно из курса теоретической механики,

$$\{H, f\}$$

есть скобка Пуассона.

Это выражение, как видно, аналогично производной оператора по времени и для представления Гайзенберга, и для представления Шредингера. В классическом пределе коммутатор операторов $\hat{H}$ и $\hat{f}$ переходит в скобку Пуассона для соответствующих физических величин:

$$\frac{i}{\hbar}[\hat{H},\hat{f}] \to \{H,f\}$$

Обобщив это выражение для любых операторов, можно потребовать выполнение следующего соотношения: если существуют величины f и g, соответствующие операторам $\hat{f}$ и $\hat{g}$, то

$$[\hat{g},\hat{f}] = -i\hbar\widehat{\{g,f\}}.$$

Из принципа соответствия видно, что из классической механики можно получить условие коммутации величин. Зная это условие коммутации, можно, как было показано ранее, найти энергию и волновые функции системы. Такой подход в точности соответствует подходу Гайзенберга.

Шредингер построил волновую механику и доказал ее тождественность с матричной механикой. Докажем несколько простых утверждений.

Утверждение 10.1. Собственные значения оператора Гайзенберга $\hat{f}_H$ совпадают с собственными значениями оператора Шредингера $\hat{f}$.

□ Пусть в представлении Шредингера

$$\hat{f}|\Psi\rangle = f|\Psi\rangle. \tag{10.24}$$

Тогда, поскольку

$$\hat{U}\hat{U}^\dagger = 1,$$

умножив выражение (10.24) слева на $\hat{U}^\dagger$, получим:

$$\hat{U}^\dagger\hat{f}\hat{U}\hat{U}^\dagger|\Psi\rangle = \hat{f}_H\hat{U}^\dagger|\Psi\rangle = f\hat{U}^\dagger|\Psi\rangle.$$

Следовательно, собственные значения операторов Гайзенберга и Шредингера совпадают, что и требовалось доказать. ■

Утверждение 10.2. Вид перестановочных соотношений между операторами Гайзенберга и операторами Шредингера не меняется.

□ Пусть есть коммутатор

$$i\hat{C} = [\hat{f},\hat{g}] = \hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f}, \qquad \hat{C}^\dagger = \hat{C}, \tag{10.25}$$

то есть оператор $\hat{C}$ — эрмитов.

Как уже было показано ранее,

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

Умножив (10.25) слева на $\hat{U}^\dagger$, а справа на $\hat{U}$, получим:

$$\hat{U}^\dagger\hat{f}\hat{U}\,\hat{U}^\dagger\hat{g}\hat{U} - \hat{U}^\dagger\hat{g}\hat{U}\,\hat{U}^\dagger\hat{f}\hat{U} = \hat{f}_H\hat{g}_H - \hat{g}_H\hat{f}_H = \hat{U}^\dagger[\hat{f},\hat{g}]\hat{U} = i\hat{U}^\dagger\hat{C}\hat{U} = i\hat{C}_H.$$

Таким образом, вид перестановочных соотношений не меняется, что и требовалось доказать. ■

Представление Гайзенберга удобно с некоторой точки зрения. Пусть есть некоторая классическая система, например — электромагнитное поле. Заменив входящие в уравнения Максвелла физические величины на операторы Гайзенберга, и установив, пользуясь принципом соответствия, перестановочные соотношения, получим теорию Максвелла в квадратичном представлении.

Удобно переходить от операторов Гайзенберга к классической механике, заменяя зависящие от времени величины на соответствующие им операторы, также зависящие от времени.

Если оператор в представлении Шредингера $\hat{f}$ коммутирует с гамильтонианом $\hat{H}$:

$$[\hat{f}, \hat{H}] = 0,$$

то величина $\hat{f}$ сохраняется.

В случае операторов Гайзенберга $\hat{f}_H$ также будет коммутировать с гамильтонианом:

$$[\hat{f}_H, \hat{H}] = 0,$$

то есть оператор Гайзенберга $\hat{f}_H$ будет постоянным.