

ДИФЕРЕНЦІУВАННЯ ОПЕРАТОРІВ ЗА ЧАСОМ

Введемо поняття похідної за часом від фізичної величини. Скористаємося визначенням середнього значення оператора фіз. величини

$$\overline{\frac{d\hat{A}}{dt}} = \frac{d}{dt}(\bar{A}).$$

(середнє значення від похідної дорівнює похідній від середнього значення)

$$\begin{aligned}(\psi, \frac{d\hat{A}}{dt} \psi) &= \frac{d}{dt}(\psi, \hat{A}\psi) = \frac{d}{dt} \int \psi^*(q, t) \hat{A} \psi(q, t) dq = \\ &= \int \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \hat{A} \psi + \psi^* \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \psi + \psi^* \hat{A} \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) dq;\end{aligned}$$

З хвильового (залежного від часу) РШ випливає, що

$$\begin{aligned}\frac{\partial \psi}{\partial t} &= \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \psi; \quad \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar} \hat{H} \psi^*. \\ \frac{d}{dt}(\bar{A}) &= \int \left(-\frac{1}{i\hbar} \hat{H} \psi^* \hat{A} \psi + \psi^* \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \psi + \psi^* \hat{A} \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \psi \right) dq.\end{aligned}$$

З урахуванням ермітовості оператора Гамільтона

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}(\bar{A}) &= \int \left(\psi^* \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \psi + \frac{i}{\hbar} \psi^* \hat{H} \hat{A} \psi - \frac{i}{\hbar} \psi^* \hat{A} \hat{H} \psi \right) dq = \\ &= \int \left(\psi^* \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \psi + \frac{i}{\hbar} \psi^* (\hat{H} \hat{A} - \hat{A} \hat{H}) \psi \right) dq = \\ &= \int \psi^* \left(\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}] \right) \psi dq.\end{aligned}$$

Знаходимо вираз для повної похідної за часом від оператора

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

У класичній механіці повна похідна від функції координат, імпульсів і часу обчислюється по формулі

$$\frac{dA(q, p, t)}{dt} = \frac{\partial A}{\partial t} + \{H, A\}; \quad \{H, A\} = -\sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial A}{\partial q_i} - \frac{\partial H}{\partial q_i} \frac{\partial A}{\partial p_i} \right).$$

Тут $\{H, f\}$ – це дужки Пуассона. Вже згадувалося, що комутатор – це квантовий аналог дужок Пуассона:

$$[\hat{H}, \hat{A}] \rightarrow \frac{\hbar}{i} \{H, A\}; \quad \hbar \rightarrow 0, \Rightarrow [\hat{H}, \hat{A}] \rightarrow 0.$$

Якщо оператор явно не залежить від часу, то повна похідна визначається комутатором гамільтоніана з даним оператором

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}].$$

Якщо оператор $\hat{A}$ комутує з гамільтоніаном, тобто

$[\hat{H}, \hat{A}] = 0$, те $\frac{d\hat{A}}{dt} = 0, \Rightarrow \bar{A} = \text{const.}$ Середнє значення фізичної величини не залежить від часу й залишається постійним. Якщо фізична величина A у даному стані має певне значення, то в усі моменти часу вона буде мати певне значення.

ГЕЙЗЕНБЕРГІВСЬКЕ ЗОБРАЖЕННЯ ОПЕРАТОРІВ

Введемо унітарний оператор $\hat{S} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t\right)$. Він має ті ж ВЗ, що й оператор $\hat{H}$: $\hat{H}\psi_n(q) = E_n\psi_n(q)$.

Отже, $\hat{S}\psi_n(q) = \exp\left(-\frac{iE_nt}{\hbar}\right)\psi_n(q)$. Довільний стан із ХФ $\Psi(q, t)$ можна розкласти в ряд Фур'є по ХФ стаціонарних станів

$$\Psi(q, t) = \sum_n C_n e^{-iE_nt/\hbar} \psi_n(q) = \sum_n C_n \hat{S}\psi_n(q) = \hat{S} \sum_n C_n \psi_n(q) = \Psi(q, 0).$$

Оператор $\hat{S}$ переводить $\Psi(q, 0)$ в $\Psi(q, t)$ Обернене перетворення

$$\Psi(q, 0) = \hat{S}^\dagger \Psi(q, t);$$

робить не залежною від часу ХФ. Додамо перетворення операторів за звичайним правилом унітарного перетворення й одержуємо перехід від зображення Шредінгера до зображення Гейзенберга

$$\Psi(q, 0) = \hat{S}^\dagger \Psi(q, t); \quad \hat{A}(t) = \hat{S}^\dagger \hat{A} \hat{S}.$$

$$\hat{A}(t) = \exp\left(\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right) \hat{A} \exp\left(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right).$$

Якщо оператор явно не залежить від часу (це й передбачається у виставі Шредінгера), то

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{A}(t)}{dt} &= \frac{i\hat{H}}{\hbar} \exp\left(\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right) \hat{A} \exp\left(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right) - \exp\left(\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right) \hat{A} \frac{i\hat{H}}{\hbar} \exp\left(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right) = \\ &= \frac{i}{\hbar} \hat{H} \exp\left(\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right) \hat{A} \exp\left(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right) - \exp\left(\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right) \hat{A} \exp\left(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right) \hat{H} = \\ &= \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}(t)], \end{aligned}$$

Отримуємо **рівняння руху оператора фізичної величини**

$$\frac{d\hat{A}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}(t)].$$

Отже, у зображенні Шредінгера основне рівняння квантової механіки – це залежне від часу РШ, а у зображенні Гейзенберга – це рівняння руху для оператора. Запишемо рівняння руху для операторів координати й імпульсу. Нам потрібно знайти комутатори $[\hat{H}, \hat{x}_i]$, $[\hat{H}, \hat{p}_i]$, де $\hat{H} = \hat{H}(\hat{p}, \hat{x})$ – довільна функція узагальнених координат і імпульсів.

Функцію від оператора треба розуміти як степеневий ряд. Для обчислення комутатора $[\hat{H}, \hat{x}_i]$ розкладання беремо у вигляді $\hat{H}(\hat{p}, \hat{x}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{\partial^n H}{\partial p_i^n} p_i^n$ й враховуємо, що комутатор

$$[\hat{p}_k^n, \hat{x}_i] = n(-i\hbar) \delta_{ik} \hat{p}_k^{n-1}$$

Далі

$$[\hat{H}, \hat{x}_i] = -i\hbar \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(n-1)!} \frac{\partial^{n-1}}{\partial p_i^{n-1}} \left(\frac{\partial H}{\partial p_i} \right) p_i^{n-1} = -i\hbar \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{p}_i};$$

Аналогічно

$$[\hat{H}, \hat{p}_i] = i\hbar \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(n-1)!} \frac{\partial^{n-1}}{\partial x_i^{n-1}} \left(\frac{\partial H}{\partial x_i} \right) x_i^{n-1} = i\hbar \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{x}_i};$$

Рівняння руху

$$\dot{\hat{x}}_i = \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{p}_i}; \quad \dot{\hat{p}}_i = -\frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{x}_i}.$$

У гейзенбергівському зображенні вся залежність від часу переноситься на оператори. Наприклад, обчислення середніх значень

$$\begin{aligned} \bar{A} &= \int \psi^*(q, t) \hat{A} \psi(q, t) dq = \int \left(\hat{S} \psi(q, 0) \right)^\dagger \hat{A} \hat{S} \psi(q, 0) dq = \\ &= (\hat{S} \psi, \hat{A} \hat{S} \psi) = (\psi, \hat{S}^\dagger \hat{A} \hat{S} \psi) = (\psi, \hat{A}(t) \psi). \end{aligned}$$

Теорема Ернфеста. Якщо $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\hat{r})$, похідні за часом від операторів

координати й імпульсу (вони ж рівняння руху відповідних операторів у гейзенбергівському зображенні) приймають вигляд

$$\dot{\hat{x}}_i = \frac{\hat{p}_i}{m}; \quad \dot{\hat{p}}_i = -\frac{\partial U}{\partial \hat{x}_i}.$$

Усереднення за часом дає теорему Ернфеста

$$\dot{\bar{x}}_i = \frac{\bar{p}_i}{m}; \quad \dot{\bar{p}}_i = -\frac{\partial \bar{U}}{\partial \bar{x}_i}.$$

З них можна отримати **рівняння руху** для середніх значень координат у **формі Ньютона**

$$\begin{aligned} m\ddot{\bar{x}}_i &= -\frac{\partial \bar{U}}{\partial \bar{x}_i}; \quad m\ddot{\bar{x}}_i = \bar{F}_i; \\ m\ddot{\bar{r}} &= \bar{\vec{F}}. \end{aligned}$$

ІНТЕГРАЛИ РУХУ (ЗАКОНИ ЗБЕРЕЖЕННЯ)

Повна похідна за часом від оператора

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

Якщо $\frac{d\hat{A}}{dt} = 0$, то $\bar{A} = \text{const}$. Якщо при цьому оператор явно не залежить від часу, тобто $\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} = 0$, то дорівнює нулю комутатор $[\hat{H}, \hat{A}] = 0$. Крім того, імовірність отримати при вимірюванні дане значення A_n теж не залежить від часу

$$W(A_n) = |C_n(t)|^2 = |C_n(0)|^2.$$

Фізична величина зберігається, тобто є інтегралом руху, якщо

$$\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} = 0, [\hat{H}, \hat{A}] = 0.$$

Збереження імпульсу, моменту імпульсу, енергії тісно зв'язані із властивостями симетрії простору й часу.

Однорідність простору (еквівалентність усіх точок простору) для замкненої системи) означає, що гамільтоніан системи не змінюється при нескінченно малому зсуві, тобто

$$[\hat{H}, \hat{T}_{\delta x}] = 0, \quad \hat{T}_{\delta x} = 1 + \frac{i}{\hbar} \delta x \hat{p}_x, \quad [\hat{H}, \hat{p}_x] = 0.$$

Одночасно вимірні енергія й імпульс системи (**закон збереження імпульсу для замкненої системи**):

$$[\hat{H}, \hat{p}_i] = 0, \quad [\hat{H}, \hat{p}] = 0.$$

Збереження у квантовій механіці означає, що не міняється з часом середнє значення й імовірність вимірювання не залежить від часу.

Ізотропія простору (еквівалентність усіх напрямків у просторі) для замкненої системи означає комутацію гамільтоніана й оператора нескінченно малого повороту

$$[\hat{H}, \hat{W}_{\delta \varphi}] = 0, \quad \hat{W}_{\delta \varphi} = 1 + \frac{i}{\hbar} \delta \varphi \hat{L}_z, \quad [\hat{H}, \hat{L}_z] = 0.$$

Одночасно вимірні енергія й кутовий момент (він же момент імпульсу) системи:

$$[\hat{H}, \hat{L}_z] = 0, \quad [\hat{H}, \hat{L}^2] = 0.$$

Одночасно вимірні енергія й кутовий момент замкненої системи (**закон збереження моменту імпульсу для замкненої системи**)

Однорідність (незалежність) ходу часу означає, що для замкненої системи й системи в постійному зовнішньому полі можна довільним образом вибирати початок відліку часу. Енергія не залежить від вибору початку відліку за часом.

Оператор нескінченно малого зсуву в часі «конструємо» за аналогією з операторами нескінченно малої трансляції й нескінченно малого повороту

$\hat{U}(\delta t) = 1 + \delta t \frac{\partial}{\partial t}$. Очевидно, що якщо подіємо цим оператором на довільну функцію

$$\begin{aligned}\hat{U}(\delta t)\psi(q,t) &= \left(1 + \delta t \frac{\partial}{\partial t}\right)\psi(q,t) = \psi(q,t) + \delta t \frac{\partial \psi(q,t)}{\partial t} = \\ &= \psi(q,t + \delta t);\end{aligned}$$

Знайдемо комутатор цього оператора з гамільтоніаном

$$\begin{aligned}[\hat{H}, \hat{U}]\psi(q,t) &= \hat{H}\left(1 + \delta t \frac{\partial}{\partial t}\right)\psi(q,t) - \left(1 + \delta t \frac{\partial}{\partial t}\right)\hat{H}\psi(q,t) = \\ &= \cancel{\hat{H}\psi(q,t)} + \delta t \frac{\partial \psi(q,t)}{\partial t} - \cancel{\hat{H}\psi(q,t)} - \delta t \frac{\partial \hat{H}\psi(q,t)}{\partial t} = \\ &= \cancel{\delta t \frac{\partial \psi(q,t)}{\partial t}} - \delta t \frac{\partial \hat{H}}{\partial t}\psi(q,t) - \cancel{\delta t \frac{\partial \psi(q,t)}{\partial t}} = -\delta t \frac{\partial \hat{H}}{\partial t}\psi(q,t). \\ [\hat{H}, \hat{U}] &= -\delta t \frac{\partial \hat{H}}{\partial t}\end{aligned}$$

Якщо $\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0$, то комутатор $[\hat{H}, \hat{U}] = 0$.

Повна похідна за часом від оператора Гамільтона

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

Якщо оператор Гамільтона явно не залежить від часу, то $\bar{H} = E = \text{const}$.

Це і є закон збереження енергії.

Нагадаємо: закон збереження імпульсу – наслідок однорідності простору для замкненої системи, закон збереження моменту імпульсу – наслідок ізотропії простору. Закон збереження енергії – наслідок незалежності ходу (однорідності) часу для системи в постійному зовнішньому полі.

Приклади знаходження законів збереження (розібрати приклади самостійно!)

Вільна частинка (3 ступеня свободи). Є стани з певною енергією й певними значеннями всіх трьох компонентів імпульсу (плоскі хвилі)

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2); \quad [H, p_i] = 0, i = 1, 2, 3 \text{ or } x, y, z.$$

Зберігаються одночасно: p_x, p_y, p_z ; $E_p = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)$ – одночасно зберігаються три компоненти імпульсу й повна (вона ж кінетична) енергія.

У вільної частинки є також стану з певною енергією й певним моментом імпульсу (сферичні хвилі)

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} = \frac{1}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta\varphi} \right]; \quad [H, L_z] = 0, [H, \vec{L}^2] = 0.$$

Зберігаються одночасно енергія й момент імпульсу, квантові числа E, l, m .

Якщо потенційна енергія залежить тільки від однієї координати, наприклад, z , $H = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + U(z)$, то зберігаються p_y, p_z, L_z .