Перестановочные соотношения и классические скобки Пуассона

Выражения (44) и (46) можно сопоставить с полной производной по времени ф-ции $f(t, \ldots, q_i, \ldots, p_i)$, зависящей явно от времени и от обобщённых классич. координат и импульсов системы, подчиняющихся *Гамильтона уравнениям*:

$$\frac{df}{dt}=\frac{\partial f}{\partial t}+\{H,\ f\}_{\text{кл}}, \qquad (47)$$

где $\{H,\ f\}_{\text{кл}}$ — классич. скобка Пуассона:

$$\{H,\ f\}_{\text{кл}}=\sum_i\left(\frac{\partial H}{\partial p_i}\cdot\frac{\partial f}{\partial q_i}-\frac{\partial H}{\partial q_i}\cdot\frac{\partial f}{\partial p_i}\right). \qquad (48)$$

Сравнение (44) с (47) указывает на то, что коммутатору $[\hat{H},\ \hat{f}]$ можно сопоставить классич. скобку Пуассона, умноженную на $-i\hbar$:

$$[\hat{H},\ \hat{f}]\longrightarrow -i\hbar\,\{H,\ f\}_{\text{кл}}. \qquad (49)$$

Обобщая (49) на произвольные величины f, g, можно рассматривать это соотношение как особую формулировку принципа соответствия: коммутатор операторов двух физ. величин в предельном случае, когда действие для системы $S\gg\hbar$, переходит с коэф. $-i\hbar$ в величину, равную классич. скобке Пуассона для этих величин,

$$[\hat{f},\ \hat{g}]\longrightarrow -i\hbar\,\{f,\ g\}_{\text{кл}}. \qquad (50)$$

Если физ. величине C, определяемой равенством $C=\{f,\ g\}_{\text{кл}}$, отвечает оператор $\hat{C}$, то обобщением (50) является соотношение

$$[\hat{f},\ \hat{g}]=-i\hbar\hat{C}. \qquad (51)$$

Соотношения коммутации (51) дают все известные перестановочные соотношения для механич. величин (координат, компонент импульса и момента). В представлении Гейзенберга они вместе с ур-нием (46) полностью описывают поведение физ. системы.

Симметрия гамильтониана и сохраняющиеся величины

Если оператор физ. величины не зависит явно от времени и коммутирует с гамильтонианом, то, согласно (44), её ср. значение не меняется со временем, а отвечающий ей гейзенбергов оператор не зависит от времени. В частности, если в нач. момент времени такая физ. величина принимала к.-л. своё собств. значение, то с течением времени система не выйдет из соответствующего собств. состояния. Существование таких сохраняющихся величин тесно связано с симметрией гамильтониана. Пусть гамильтониан системы $\hat{H}$ не меняется при нек-ром преобразовании системы, к-рое осуществляется с помощью оператора $\hat{O}$, действующего на векторы состояния. Тогда из равенства $\hat{H}'=\hat{H}$, где $\hat{H}'=\hat{O}\hat{H}\hat{O}^{-1}$ — гамильтониан, действующий на преобразованные векторы состояния системы, следует: $\hat{O}\hat{H}=\hat{H}\hat{O}$. Вследствие сохранения нормы вектора состояния при преобразованиях симметрии оператор $\hat{O}$ должен быть унитарен. Для преобразований симметрии, характеризуемых непрерывным изменением к.-л. параметра λ (такими являются, напр., сдвиги или повороты системы), унитарный оператор при бесконечно малом изменении параметра $\delta\lambda$ имеет вид:

$$\hat{O}=1+i\hat{K}\,\delta\lambda+0\,(\delta\lambda^2), \qquad (52)$$

где $\hat{K}$ — эрмитов оператор, и предполагается, что $\lambda=0$ отвечает тождеств. преобразованию. Условие $\hat{H}\hat{O}=\hat{O}\hat{H}$ сводится к коммутации с гамильтонианом оператора $\hat{K}$, $[\hat{H},\ \hat{K}]=0$, и, следовательно, к сохранению физ. величины, к-рой он может соответствовать. Для операции сдвига системы на бесконечно малый вектор $\delta\boldsymbol{a}$ волновая ф-ция системы частиц в конфигурац. пространстве преобразуется по закону

$$\psi(\ldots,\ \boldsymbol{r}_i,\ \ldots)\longrightarrow\psi(\ldots,\ \boldsymbol{r}_i+\delta\boldsymbol{a},\ \ldots)=$$
$$=\psi(\ldots,\ \boldsymbol{r}_i,\ \ldots)+\delta\boldsymbol{a}\sum_i\nabla_{\boldsymbol{r}_i}\psi(\ldots,\ \boldsymbol{r}_i,\ \ldots)$$

($\boldsymbol{r}_i$ — координаты i-й частицы). Т. о., оператор бесконечно малого сдвига имеет вид:

$$\hat{O}_{\delta\boldsymbol{a}}=1+\delta\boldsymbol{a}\sum_i\nabla_{\boldsymbol{r}_i}=1+\frac{i}{\hbar}\,\hat{\boldsymbol{P}}\,\delta\boldsymbol{a}, \qquad (53)$$

где $\hat{\boldsymbol{P}}=\sum_i\hat{\boldsymbol{p}}_i=\sum_i(-i\hbar\nabla_{\boldsymbol{r}_i})$ — оператор полного импульса системы частиц. Если рассматриваемая система замкнута, а потенциалы взаимодействия между частицами зависят лишь от расстояния между ними, то её гамильтониан не меняется при сдвиге, и, следовательно, компоненты импульса, коммутируя с гамильтонианом, согласно (52), (53), сохраняются. Это находится в полном соответствии с законом сохранения импульса в классич. механике. При операции пространств. поворота на бесконечно малый угол $\delta\varphi$ вокруг оси, направление к-рой задаётся единичным вектором $\boldsymbol{\nu}$, координаты частиц системы преобразуются по закону:

$$\boldsymbol{r}_i\longrightarrow\boldsymbol{r}_i+\delta\boldsymbol{r}_i,\quad \delta\boldsymbol{r}_i=[\delta\boldsymbol{\varphi}\,\boldsymbol{r}_i],\quad \delta\boldsymbol{\varphi}=\boldsymbol{\nu}\delta\varphi,$$

и оператор поворота имеет вид:

$$\hat{O}_{\delta\varphi}=1+\delta\boldsymbol{\varphi}\sum_i\left[\boldsymbol{r}_i\nabla_{\boldsymbol{r}_i}\right]=1+\frac{i}{\hbar}\,\delta\boldsymbol{\varphi}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}, \qquad (54)$$

где $\hat{\boldsymbol{L}}$ — оператор полного орбит. момента системы:

$$\hat{\boldsymbol{L}}=\sum_i\hat{\boldsymbol{l}}_i,\quad \hat{\boldsymbol{l}}_i=[\hat{\boldsymbol{r}}_i\hat{\boldsymbol{p}}_i]. \qquad (55)$$

Для замкнутой системы частиц, взаимодействующих по центр. закону, гамильтониан не меняется при поворотах, и поэтому компоненты момента, коммутируя с гамильтонианом, должны сохраняться. То же относится к компонентам момента отд. частицы, находящейся в центр. поле.

Если гамильтониан системы не меняется лишь при сдвиге вдоль к.-л. одного направления или поворота вокруг к.-л. одной определ. оси, то будут сохраняться соответственно проекция импульса на это направление или проекция момента на выделенную ось.

Законы сохранения возникают не только для непрерывных симметрий гамильтониана. Так, для частицы, находящейся в периодич. поле, что является хорошей моделью движения электрона в кристалле, гамильтониан не меняется при сдвигах на векторы, кратные периодам решетки, и коммутирует с операторами соответствующих сдвигов. Это приводит к существованию особой сохраняющейся в периодич. поле величины — *квазиимпульса* (значения к-рого, в отличие от обычного импульса, определены лишь с точностью до векторов *обратной решётки*). Аналогичным образом для гамильтониана, периодически зависящего от времени, может быть определена величина *квазиэнергии*. Наличие у гамильтониана дискретных симметрий приводит в К. м. к сохранению ряда мультипликативных физ. величин, к-рые (в отличие от аддитивных импульса и момента) не имеют аналогов в классич. механике. Так, если гамильтониан системы инвариантен относительно отражения пространств. координат частиц: $\boldsymbol{r}_i\to-\boldsymbol{r}_i$, то он коммутирует с оператором пространств. инверсии $\hat{P}$, определяемым соотношением:

$$\hat{P}\psi(\ldots,\ \boldsymbol{r}_i,\ \ldots)=\psi(\ldots,\ -\boldsymbol{r}_i,\ \ldots). \qquad (56)$$

Поскольку операция $\hat{P}^2$ является тождеств. преобразованием, собств. значения $\hat{P}^2$ равны 1, т. е. собств. значения оператора $\hat{P}$ должны быть равными $P=\pm1$ (верхний знак отвечает чётным, нижний — нечётным вол-