4.6. Переход к классическим уравнениям движения

Рассмотрим уравнение (121) для оператора координаты $\hat{x}$: $\hat{x}$ не зависит от t явно, поэтому первое слагаемое в (121) $\left(\frac{\partial \hat{x}(t)}{\partial t}\right)_Г = 0$, остаётся.

$$\frac{d\hat{x}_Г(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{x}_Г(t), \hat{H}_Г(t)\right]. \tag{123}$$

Обратим внимание, что при выводе (121) мы получали выражение $\hat{U}^+\hat{A}_ш\hat{H}\hat{U} - \hat{U}^+\hat{H}\hat{A}_ш\hat{U} = \left(\hat{U}^+\hat{A}_ш\hat{U}\right)\left(\hat{U}^+\hat{H}\hat{U}\right) - \left(\hat{U}^+\hat{H}\hat{U}\right)\left(\hat{U}^+\hat{A}_ш\hat{U}\right) = \left[\hat{A}_Г, \hat{H}_Г\right]_-$, равное коммутатору оператора физической величины $\hat{A}_Г$ и гамильтониана $\hat{H}_Г$ в гейзенберговском представлении. Но, с другой стороны, это равно

$$\hat{U}^+\left(\hat{A}_ш\hat{H} - \hat{H}\hat{A}_ш\right)\hat{U} = \hat{U}^+[\hat{A}_ш, \hat{H}]\hat{U} = [\hat{A}_ш, \hat{H}]_Г \; -$$

т. е. коммутатор, сам являющийся оператором, можно вычислить в привычном шрёдингеровском представлении, а затем уже перейти к гейзенберговскому представлению, умножая на операторы эволюции слева и справа, так что (123) переходит в этом случае в соотношение

$$\frac{d\hat{x}_Г(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{x}_ш, \hat{H}_ш]_Г. \tag{123′}$$

Вычислим коммутатор в (123′): $\left[\hat{x}, \hat{H}\right] = \left[\hat{x}, \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + U\right] =$

$$= \frac{1}{2m}[\hat{x}, \hat{\vec{p}}^2] + [\hat{x}, U] = -\frac{\hbar^2}{2m}[x, \nabla^2] = -\frac{\hbar^2}{2m}[x, \frac{\partial^2}{\partial x^2}] = \frac{\hbar^2}{2m}2\frac{\partial}{\partial x} = \frac{i\hbar}{m}\hat{p}_x,$$

$$[\hat{x}, \hat{H}] = \frac{i\hbar}{m}\hat{p}_x. \tag{124}$$

Подставим (124) в (123): $\frac{d\hat{x}_Г(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\frac{i\hbar}{m}\left(\hat{p}_x\right)_Г$,

$$\frac{d\hat{x}_Г(t)}{dt} = \frac{\left(\hat{p}_x\right)_Г}{m}. \tag{125}$$

Рассмотрим средние значения операторов в (125). Согласно (122′) п.4.5 $\frac{d}{dt}\left\langle \hat{A} \right\rangle = \left\langle \frac{d}{dt}\hat{A} \right\rangle \Rightarrow$ для (125) справедливо

$$\left\langle \frac{d\hat{x}_Г(t)}{dt} \right\rangle = \left\langle \frac{\left(\hat{p}_x\right)_Г}{m} \right\rangle \Rightarrow \frac{d\left\langle \hat{x}_Г(t) \right\rangle}{dt} = \frac{\left\langle \left(\hat{p}_x\right)_Г \right\rangle}{m}.$$

Но из п.4.4, (118), мы знаем, что средние значения операторов не зависят от представления, так что можно записать в шрёдингеровском представлении

$$\frac{d\left\langle \hat{x}_ш(t) \right\rangle}{dt} = \frac{\left\langle \left(\hat{p}_x\right)_ш \right\rangle}{m},$$

или

$$\frac{d\overline{x}}{dt}=\frac{\overline{p}_x}{m}, \tag{126}$$

что совпадает, с одним из классических уравнений движения в гамильтоновой форме: $\dfrac{dx}{dt}=\dfrac{\partial H}{\partial p_x}$, если $H=\dfrac{\vec{p}^{\,2}}{2m}+U(\vec{r})$. При этом мы сопоставляем средние значения координаты и импульса в квантовой механике с классическими координатами и импульсами, $\overline{x}_{кв}=x_{кл}$, $\overline{p}_{x\ кв}=p_{кл}$.

Рассмотрим, аналогично (123), уравнение для изменения импульса:

$$\frac{d\,\hat{\mathrm{p}}_{x\,Г}(t)}{dt}=\frac{1}{i\hbar}[\hat{\mathrm{p}}_{x\,Г}(t),\hat{\mathrm{H}}_{Г}(t)], \tag{127}$$

$$[\hat{\mathrm{p}}_{x\,ш},\hat{\mathrm{H}}_{ш}]=[\hat{\mathrm{p}}_x,\frac{\hat{\mathrm{p}}_x{}^2}{2m}+U(\vec{r})]=[\hat{\mathrm{p}}_x,U(\vec{r})]=-i\hbar[\frac{\partial}{\partial x},U(\vec{r})]=-i\hbar\frac{\partial U(\vec{r})}{\partial x}.$$

Подставляя этот коммутатор в (127), имеем, подобно (125),

$$\frac{d\,\hat{\mathrm{p}}_{x\,Г}(t)}{dt}=\frac{-i\hbar}{i\hbar}\left(\frac{\partial U(\vec{r})}{\partial x}\right)_Г,$$

а переходя к средним значениям, получаем, как и в уравнении для x,

$$\frac{d\langle\hat{\mathrm{p}}_x\rangle}{dt}=-\left\langle\frac{\partial U}{\partial x}\right\rangle, \tag{128}$$

что совпадает с классическим уравнением движения Ньютона и со вторым уравнением движения в гамильтоновой формулировке:

$\dfrac{d\,p_x}{dt}=-\dfrac{\partial H}{\partial x}$, при $H=\dfrac{\vec{p}^{\,2}}{2m}+U(\vec{r})$ это уравнение имеет вид $\dfrac{d\,p_x}{dt}=-\dfrac{\partial U(\vec{r})}{\partial x}$.

Однако чтобы (128) совпадало по форме с последним уравнением, требуется выполнение равенства:

$$\left\langle\frac{\partial U}{\partial x}\right\rangle=\frac{\partial U(\langle x\rangle)}{\partial\langle x\rangle}, \tag{129}$$

что справедливо при медленно меняющихся внешних полях.

Итак, квантовомеханические гейзенберговские уравнения движения для операторов координаты и импульса

$$\frac{d\hat{\mathrm{x}}_Г(t)}{dt}=\frac{1}{i\hbar}[\hat{\mathrm{x}}_ш,\hat{\mathrm{H}}_ш]_Г,\quad \frac{d\,\hat{\mathrm{p}}_{x\,Г}(t)}{dt}=\frac{1}{i\hbar}[\hat{\mathrm{p}}_{x\,Г}(t),\hat{\mathrm{H}}_Г(t)] \tag{130}$$

приводят к уравнениям для средних значений координаты и импульса, по форме совпадающим с гамильтоновыми уравнениями классической механики

$$\frac{dx}{dt}=\frac{\partial H}{\partial p_x},\ \frac{d\,p_x}{dt}=-\frac{\partial H}{\partial x} \tag{131}$$

при больших кинетических энергиях частиц (см. обсуждение ниже) и плавно меняющихся внешних полях.

На самом деле для строгого перехода к классике мы должны более внимательно рассмотреть возможность отождествления квантовых величин с классическими.

Помимо условий, при которых $\left\langle \frac{\partial U}{\partial x} \right\rangle \approx \frac{\partial U(\langle x \rangle)}{\partial \langle x \rangle}$, нужно ещё учесть условия, при которых $T_{кл} = \frac{\langle p_x \rangle^2}{2m} \approx \frac{\langle \hat{p}_x{}^2 \rangle}{2m} = \langle \hat{T}_{кв} \rangle$.

Преобразуем выражение для $\langle \hat{T}_{кв} \rangle$:

$$\langle \hat{T}_{кв} \rangle = \frac{\langle \hat{p}_x{}^2 \rangle}{2m} = \frac{\langle \hat{p}_x{}^2 \rangle}{2m} - \frac{\langle \hat{p}_x \rangle^2}{2m} + \frac{\langle \hat{p}_x \rangle^2}{2m} = \frac{\langle \Delta p_x{}^2 \rangle}{2m} + T_{кл} > T_{кл}.$$

Здесь мы использовали формулу для среднеквадратичного отклонения физической величины A:

$$\langle \Delta A^2 \rangle \equiv \left\langle (A - \langle A \rangle)^2 \right\rangle \equiv \overline{(A - \bar{A})^2} = \langle \ A^2 \ \rangle - \langle A \rangle^2 \Rightarrow \frac{\langle \Delta \hat{p}_x{}^2 \rangle}{2m} = \frac{\langle \hat{p}_x{}^2 \rangle}{2m} - \frac{\langle \hat{p}_x \rangle^2}{2m}.$$

Полученная формула для $\langle \hat{T}_{кв} \rangle$ показывает, что квантовомеханическая средняя кинетическая энергия всегда больше, чем $T_{кл}$.

Для $\langle \hat{T}_{кв} \rangle \approx T_{кл}$ должно выполняться условие $\frac{\langle \Delta p_x{}^2 \rangle}{2m} << T_{кл} = \frac{\langle p_x{}^2 \rangle}{2m}$, что выполняется при больших кинетических энергиях частиц. Однако условие малости $\langle \Delta p_x{}^2 \rangle$ не может рассматриваться независимо от требования малости неопределённости координаты $\langle \Delta x^2 \rangle$, которое необходимо для выполнения условия (129), медленно меняющихся внешних полей.

Неопределённости импульса и координаты связаны соотношением неопределённостей Гейзенберга $\langle \Delta p_x{}^2 \rangle \langle \Delta x^2 \rangle \geq \hbar^2 / 4$ п.3.3.3, (или (61), $\overline{\Delta x^2}\ \overline{\Delta p_x{}^2} \geq \hbar^2 / 4$).

Таким образом, несмотря на очевидную аналогию квантовых и классических уравнений движения, не так просто точно определить условия, при которых происходит переход от квантовых к классическим уравнениям движения.