Раздел 1
ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

ЛЕКЦИЯ 1

§ 1. Вероятностное описание состояний физических систем. Волновая функция

В классической механике состояние физической системы в произвольный момент времени t полностью определяется значениями n обобщенных координат и n обобщенных скоростей, где n — количество степеней свободы системы. При этом предполагается, что все эти $2n$ динамических переменных могут быть одновременно и точно измерены.

В квантовой механике описание состояний физических систем носит вероятностный характер. Мы не можем, вообще говоря, указать в момент времени t точных значений обобщенных координат $\xi = \left\{\xi_1,\, \xi_2,\, \ldots,\, \xi_n\right\} \equiv \left\{\xi_i\right\}_1^n$, характеризующих систему, а имеем дело лишь с плотностью их распределения $\rho(\xi,\, t)$. Зная $\rho(\xi,\, t)$, мы знаем вероятность того, что, измеряя в момент времени t переменную ξ в нашем состоянии, получим значение в интервале $(\xi,\, \xi + d\xi)$:

$$d\omega(\xi,\, t) = \rho(\xi,\, t)\, d\xi. \tag{1.1}$$

Состояния физических систем делятся на смешанные и чистые, причем последние можно рассматривать как частный случай смешанных состояний. Все свойства чистого состояния можно описать, задав некоторую комплексную функцию $\psi(\xi,\, t)$ — *волновую функцию*, зависящую от n обобщенных координат (динамических переменных) $\left\{\xi_i\right\}_1^n$ и времени t, которое не является динамической переменной и рассматривается как параметр. Волновая функция (ее называют также *амплитудой вероятности*) определяет плотность распределения динамических переменных ξ:

$$\rho(\xi,\,t) = |\psi(\xi,\,t)|^2. \tag{1.2}$$

Описание смешанных состояний сложнее, но мы пока не будем касаться этого вопроса, ограничившись в первых шести лекциях рассмотрением только чистых состояний (не говоря всякий раз, что выражение «состояние» подразумевает чистое состояние).

Полную вероятность принято нормировать на единицу:

$$\|\psi\|^2 \equiv \int |\psi(\xi,\,t)|^2\,d\xi = 1, \tag{1.3}$$

где интегрирование производится по всей области определения функции $\psi(\xi,\,t)$. Следовательно, волновая функция должна быть квадратично интегрируемой.

Положение о том, что только квадратично интегрируемые функции описывают реальные состояния физических систем, является важнейшим исходным положением квантовой механики. Однако в аппарате квантовой механики нередко используются и такие состояния, которые не описываются квадратично интегрируемыми функциями. Эти состояния играют вспомогательную роль, а их связь с реальными состояниями надо выяснять в каждом случае специально.

Множество всех квадратично интегрируемых комплексных функций вещественных переменных является линейным гильбертовым пространством, которое в математике обозначается символом L_2. Таким образом, в квантовой механике постулируется, что каждому состоянию системы сопоставляется некоторый элемент (вектор) пространства L_2. Скалярное произведение в этом пространстве вводится с помощью соотношения

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle \equiv \int \psi_1^*(\xi,\,t)\psi_2(\xi,\,t)\,d\xi, \tag{1.4}$$

где ψ_1, ψ_2 — любые элементы L_2; звездочка обозначает комплексное сопряжение. Это определение удовлетворяет всем аксиомам скалярного произведения, в частности

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \langle\psi_2|\psi_1\rangle^*. \tag{1.5}$$

Другие важные свойства пространства L_2 приведены в Дополнении 1.

Рассмотрим некоторые примеры квантово-механических систем.

1. Система k частиц. Эта система имеет $3k$ степеней свободы. В качестве обобщенных координат $\{\xi_i\}_1^{3k}$ можно выбрать пространственные координаты $\mathbf{r}_j$ этих частиц, т.е. $\{\xi_i\}_1^{3k} = \{\mathbf{r}_j\}_1^k$.

Волновая функция системы есть

$$\psi(\xi,\, t) = \psi(\mathbf{r}_1,\, \mathbf{r}_2,\, \ldots,\, \mathbf{r}_k,\, t).$$

2. Твердое тело. Эта система имеет 6 степеней свободы. В качестве обобщенных координат можно выбрать 3 координаты центра масс твердого тела $\{x_i\}_1^3$ и 3 угла Эйлера $\{\alpha_i\}_1^3$, характеризующих его ориентацию в пространстве. Волновая функция системы принимает вид

$$\psi(\xi,\, t) = \psi(x_1,\, x_2,\, x_3,\, \alpha_1,\, \alpha_2,\, \alpha_3,\, t).$$

§ 2. Физические величины в квантовой механике

Полное описание состояния физической системы в момент времени t состоит в указании вероятностей тех значений, которые могут быть получены в результате измерения всех независимых физических величин, характеризующих систему. В § 1 мы уже рассмотрели этот вопрос в отношении тех физических величин, которые являются аргументами волновой функции состояния. Теперь рассмотрим и другие физические величины.

В квантовой механике постулируются следующие положения.

П о с т у л а т 1. Каждой физической величине F сопоставляется некоторый линейный эрмитов оператор $\widehat{F}$, действующий в пространстве L_2 (или в более широком пространстве, включающем L_2). Явный вид операторов основных физических величин постулируется. Физической величине G, которая является функцией другой физической величины F, сопоставляется оператор

$$\widehat{G} = \frac{1}{2}(G(\widehat{F}) + (G(\widehat{F}))^+); \tag{2.1}$$

крест обозначает эрмитово сопряжение.

Условимся о терминах и обозначениях.

Пусть ψ_1 и ψ_2 — произвольные элементы (векторы) в L_2. Оператор $\widehat{F}^+$ называется эрмитово сопряженным по отношению к оператору $\widehat{F}$, если выполняется равенство

$$\langle \psi_1 | \widehat{F}\psi_2 \rangle = \langle \widehat{F}^+ \psi_1 | \psi_2 \rangle. \tag{2.2}$$

Скалярное произведение векторов ψ_1 и $\widehat{F}\psi_2$ будем также записывать в форме

$$\langle \psi_1 | \widehat{F}\psi_2 \rangle \equiv \langle \psi_1 | \widehat{F} | \psi_2 \rangle. \tag{2.3}$$

О правой части этого соотношения мы говорим, что оператор $\widehat{F}$ взят «в обкладках» векторов ψ_1 и ψ_2. В новой форме условие (2.2) переписывается следующим образом:

$$\langle \psi_1 | \widehat{F} | \psi_2 \rangle = \langle \psi_2 | \widehat{F}^+ | \psi_1 \rangle^*. \tag{2.4}$$

Оператор $\widehat{F}$ называется эрмитовым, или самосопряженным, если в L_2 выполняется соотношение

$$\widehat{F} = \widehat{F}^+, \tag{2.5}$$

т. е. для любых ψ_1 и ψ_2 из L_2 справедливо

$$\langle \psi_1 | \widehat{F} | \psi_2 \rangle = \langle \psi_2 | \widehat{F} | \psi_1 \rangle^*. \tag{2.6}$$

Все необходимые сведения о линейных операторах и их свойствах приведены в Дополнении 2.

П о с т у л а т 2. Физическая величина F в любом квантово-механическом состоянии может принимать только те значения, которые принадлежат спектру ее оператора $\widehat{F}$.

В общем случае спектр оператора $\widehat{F}$ представляет собой совокупность точечного (дискретного) спектра $F_1, F_2, \ldots, F_n, \ldots$ и непрерывного спектра $\{f\}$. Каждое значение физической величины представлено в состоянии $\psi(\xi, t)$ с какой-то вероятностью, которая, вообще говоря, меняется со временем. Пусть $\rho(F_n)$ — вероятность того, что в состоянии $\psi(\xi, t)$ в момент времени t физическая величина F имеет значение F_n, пусть $\rho(f)$ — соответствующая плотность вероятности для окрестности точки f непрерывного спектра. Мы будем говорить, что совокупность значений $\rho(F_n)$ и $\rho(f)$ дает распределение физической величины F в состоянии $\psi(\xi, t)$. Очевидно условие, которому удовлетворяет это распределение:

$$\sum_n \rho(F_n) + \int \rho(f)\, df = 1. \tag{2.7}$$

Важнейшими характеристиками распределения физической величины в состоянии $\psi(\xi,\, t)$ являются ее среднее значение (математическое ожидание)

$$\overline{F} = \sum_n F_n \rho(F_n) + \int f \rho(f)\, df \tag{2.8}$$

и дисперсия (второй центральный момент)

$$D_F = \sum_n (F_n - \overline{F})^2 \rho(F_n) + \int (f - \overline{F})^2 \rho(f)\, df. \tag{2.9}$$

Как распределение $\rho(F_n)$, так и его моменты с течением времени, вообще говоря, изменяются.

П о с т у л а т 3 . Среднее значение физической величины F в состоянии $\psi(\xi,\, t)$ вычисляется по формуле

$$\overline{F} = \frac{\langle \psi | \widehat{F} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}. \tag{2.10}$$

Если волновая функция нормирована на единицу, то получаем

$$\overline{F} = \langle \psi | \widehat{F} | \psi \rangle. \tag{2.11}$$

Мы видим, что зависимость $\overline{F}$ от t определяется временной зависимостью волновой функции и оператора $\widehat{F}$.

Рассмотрим постулаты 1–3 подробнее.

1. Покажем, что из эрмитовости $\widehat{F}$ следует, что среднее значение $\overline{F}$ вещественно. Действительно, из (2.11) имеем

$$(\overline{F})^* = \langle \psi | \widehat{F} | \psi \rangle^* = \langle \psi | \widehat{F}^+ | \psi \rangle = \langle \psi | \widehat{F} | \psi \rangle,$$

т. е.

$$(\overline{F})^* = \overline{F}. \tag{2.12}$$

Отметим также, что построение (2.1) обеспечивает эрмитовость оператора (2.1).

2. Напомним, что число F называется *собственным значением* оператора $\widehat{F}$, если в области определения оператора D_F существует функция (вектор) $\psi \neq 0$, принадлежащая L_2, для которой выполняется равенство

$$\widehat{F}\psi = F\psi. \tag{2.13}$$

Функция ψ в таком случае называется собственной функцией (собственным вектором) оператора $\widehat{F}$, соответствующей собственному значению F. Как показывается в математике, совокупность всех собственных значений оператора образует *дискретный спектр*. Множество всех собственных функций эрмитова оператора F обозначим через $\{\varphi_n\}$, а множество собственных значений — через $\{F_n\}$:

$$\widehat{F}\varphi_n(\xi) = F_n\varphi_n(\xi). \tag{2.14}$$

Если уравнению (2.13) удовлетворяет ограниченная функция $\chi_f(\xi)$, не принадлежащая пространству L_2,

$$\widehat{F}\chi f(\xi) = f\chi_f(\xi), \tag{2.15}$$

то в этом случае, как показывается в математике, число f принадлежит *непрерывному спектру* оператора $\widehat{F}$. Соответствующая функция χ_f называется обобщенной собственной функцией, или функцией непрерывного спектра. Множество всех обобщенных собственных функций оператора $\widehat{F}$ обозначим через $\{\chi_f\}$, а множество точек непрерывного спектра — через $\{f\}$. Совокупность точечного и непрерывного спектров называется *полным спектром* оператора. В функциональном анализе доказывается, что полный спектр $\{F_n\}$, $\{f\}$ эрмитова оператора лежит на вещественной оси. Вещественность спектра оператора любой физической величины находится в соответствии с требованием вещественности результата любого ее измерения.

Может оказаться, что различным собственным функциям φ_n соответствует одно и то же собственное значение. Такое собственное значение называется *вырожденным*, а количество соответствующих линейно независимых собственных функций называется кратностью вырождения этого собственного значения. Аналогичное положение может быть и в случае непрерывного спектра.

Всегда можно считать (см. Дополнение 2), что собственные функции образуют ортонормированный набор

$$\langle\varphi_k|\varphi_l\rangle = \delta_{kl}. \tag{2.16}$$

В функциональном анализе показывается, что функции непрерывного спектра всегда можно считать удовлетворяющими условию

$$\int \chi_f^*(\xi)\chi_{f'}(\xi)\,d\xi = \delta(f - f'), \tag{2.17}$$

которое аналогично условию (2.16) ортонормированности собственных функций. (Свойства дельта-функции Дирака $\delta(x)$ приведены в Дополнении 4.) Кроме того, любая обобщенная собственная функция χ_f ортогональна любой собственной функции φ_n:

$$\langle \varphi_n | \chi_f \rangle = 0. \tag{2.18}$$

Важной особенностью оператора физической величины по сравнению с произвольным эрмитовым оператором является то, что множество всех его собственных функций $\{\varphi_n\}$ и обобщенных собственных функций $\{\chi_f\}$ удовлетворяет равенству

$$\sum_{\{F_n\}} \varphi_n(\xi)\varphi_n^*(\xi') + \int df \chi_f(\xi)\chi_f^*(\xi') = \delta(\xi - \xi'), \tag{2.19}$$

которое аналогично условию (Д1.6), выражающему полноту набора векторов в L_2. Соотношение (2.19) является критерием полноты набора векторов $\{\varphi_n\}$, $\{\chi_f\}$ в L_2. Любую функцию $\psi \in L_2$ можно однозначно представить в виде

$$\psi(\xi) = \sum_{\{F_n\}} a_n\varphi_n(\xi) + \int\limits_{\{f\}} df a_f \chi_f(\xi), \tag{2.20}$$

где суммирование производится по всем точкам дискретного спектра, а интегрирование — по всем точкам непрерывного спектра, причем в силу условий ортонормированности (2.16) и (2.17)

$$a_n = \langle \varphi_n | \psi \rangle, \quad a_f = \langle \chi_f | \psi \rangle. \tag{2.21}$$

В формулах (2.19) и (2.20) подразумевается, что каждому значению F_n или f может соответствовать несколько линейно независимых функций $\varphi_n(\xi)$ и $\chi_f(\xi)$. Соответствующие дополнительные индексы суммирования и интегрирования опущены, чтобы не загромождать формулы. Отметим, что a_n и a_f удовлетворяют условию нормировки

$$\sum_n |a_n|^2 + \int |a_f|^2 \, df = 1. \tag{2.22}$$

3. Третий постулат позволяет найти распределение вероятностей различных результатов измерений. Подставляя разложение (2.20) в (2.11), получаем

$$\overline{F} = \sum_{\{F_n\}} F_n |a_n|^2 + \int\limits_{\{f\}} f |a_f|^2 \, df. \tag{2.23}$$

Из (2.23) следует, что если F_n — невырожденное собственное значение, то $|a_n|^2$ есть $\rho(F_n)$ — вероятность того, что в результате измерения физической величины F в состоянии $\psi(\xi, t)$ будет получено значение F_n. Если же F_n — вырожденное собственное значение с кратностью вырождения N, то в сумме (2.23) имеется N слагаемых с одним и тем же значением F_n. Тогда вероятность того, что в результате измерения будет получено значение F_n, есть

$$\rho(F_n) = \sum |a_n|^2 \equiv \sum |\langle\varphi_n|\psi\rangle|^2, \tag{2.24}$$

где суммирование производится по всем тем значениям n, для которых F_n одинаково. Аналогично из (2.23) следует, что плотность вероятности получить в результате измерения значение, лежащее в окрестности точки непрерывного спектра f, есть

$$\rho(f) = \sum |a_f|^2 \equiv \sum |\langle\chi_f|\psi\rangle|^2, \tag{2.25}$$

где, как и в (2.24), суммирование учитывает вырождение. Таким образом, из постулата о среднем значении физической величины следует, что распределение вероятностей результатов измерений этой величины в некотором состоянии ψ определяется коэффициентами (2.21) разложения ψ по собственным функциям оператора этой физической величины.

Из определения среднего значения (2.10) следует, что среднее значение не изменяется при умножении вектора состояния ψ на любое комплексное число с единичным модулем вида $e^{i\delta}$ (δ — любое действительное число). Эта неоднозначность имеет принципиальный характер и не может быть устранена. Однако она несущественна, потому что, как следует из (1.1), (2.24) и (2.25), не отражается на распределениях физических величин в этом состоянии.

Таким образом, волновая функция состояния физической системы полностью характеризует результаты измерений всевозможных физических величин, т. е. дает полное описание состояния. Вероятностный характер этого описания отражает существо физических законов, которым подчиняются квантовомеханические системы.

§ 3. Операторы важнейших физических величин

В квантовой механике постулируется, что оператором пространственной координаты частицы $\mathbf{r} = \{x, y, z\}$ является оператор умножения на $\mathbf{r}$, т. е.

$$\widehat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}. \tag{3.1}$$

Оператором импульса частицы $\mathbf{p} = \{p_x, p_y, p_z\}$ является оператор

$$\widehat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla, \tag{3.2}$$

где $\nabla = \{\partial/\partial x, \partial/\partial y, \partial/\partial z\}$, а константа $\hbar$ выражается через постоянную Планка h:

$$\hbar = h/2\pi = 1{,}054 \times 10^{-27}\ \text{эрг} \cdot \text{с}. \tag{3.3}$$

Оператор $\widehat{A}\widehat{B}$ называется *произведением* операторов $\widehat{A}$ и $\widehat{B}$. Его областью определения является совокупность всех тех $\psi \in D_{\widehat{B}}$, для которых $\widehat{B}\psi \in D_{\widehat{A}}$. Оператор $\widehat{A}\widehat{B}$ переводит вектор ψ в вектор

$$\widehat{A}\widehat{B}\psi \equiv \widehat{A}(\widehat{B}\psi).$$

Операторы $\widehat{A}\widehat{B}$ и $\widehat{B}\widehat{A}$, вообще говоря, различны, так как может не иметь место равенство

$$\widehat{A}\widehat{B}\psi = \widehat{B}\widehat{A}\psi.$$

Более того, вообще говоря, операторы $\widehat{A}\widehat{B}$ и $\widehat{B}\widehat{A}$ могут иметь различные области определения.

Назовем оператор

$$[\widehat{A}, \widehat{B}] = \widehat{A}\widehat{B} - \widehat{B}\widehat{A} \tag{3.4}$$

коммутатором, если области определения операторов $\widehat{A}\widehat{B}$ и $\widehat{B}\widehat{A}$ совпадают. Если $[\widehat{A}, \widehat{B}] = 0$, то говорят, что операторы $\widehat{A}$ и $\widehat{B}$ коммутируют. Как мы увидим дальше, коммутаторы операторов физических величин играют важную роль в математическом аппарате квантовой механики.

Легко проверить, что коммутатор операторов $\widehat{\mathbf{r}}$ и $\mathbf{p}$ имеет следующее значение:

$$[\widehat{r}_l, \widehat{p}_k] = i\hbar\delta_{lk}, \qquad l, k = (1, 2, 3). \tag{3.5}$$

Покажем, например, что

$$[\widehat{x}, \widehat{p}_x] = i\hbar. \tag{3.6}$$

Для произвольной дифференцируемой функции $\psi(\mathbf{r}) \in L_2$ имеем

$$[\widehat{x},\, \widehat{p}_x]\psi(\mathbf{r}) = -i\hbar\Big(x\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,\, y,\, z) - \frac{\partial}{\partial x}x\psi(x,\, y,\, z)\Big) =$$
$$= -i\hbar\Big(x\frac{\partial\psi}{\partial x} - \psi(x,\, y,\, z) - x\frac{\partial\psi}{\partial x}\Big) = i\hbar\psi(\mathbf{r}),$$

т. е.

$$[\widehat{x},\, \widehat{p}_x]\psi(\mathbf{r}) = -i\hbar\psi(\mathbf{r}),$$

что эквивалентно соотношению (3.6).

В качестве оператора физической величины $f(\mathbf{r},\, \mathbf{p})$ принимается согласно (2.1) оператор

$$\widehat{f} = \frac{1}{2}(f(\widehat{\mathbf{r}},\, \widehat{\mathbf{p}}) + f^{+}(\widehat{\mathbf{r}},\, \widehat{\mathbf{p}})). \tag{3.7}$$

Например, оператор *кинетической энергии* частицы с массой μ есть

$$\widehat{T} = \frac{\widehat{p}^2}{2\mu} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Big(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\Big). \tag{3.8}$$

Оператор *потенциальной энергии* частицы есть

$$\widehat{V} = V(\widehat{\mathbf{r}},\, t). \tag{3.9}$$

Тогда для оператора *полной энергии* частицы в потенциальном поле получаем

$$\widehat{H} = \widehat{T} + \widehat{V} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(\widehat{\mathbf{r}},\, t). \tag{3.10}$$

Оператор полной энергии системы называется гамильтонианом.

Легко видеть, что моменту импульса частицы $\mathbf{L} = [\mathbf{r} \times \mathbf{p}] = \{L_x,\, L_y,\, L_z\}$ следует сопоставить оператор

$$\begin{aligned}
\widehat{L}_x &= \widehat{y}\widehat{p}_z - \widehat{z}\widehat{p}_y = -i\hbar\Big(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\Big),\\
\widehat{L}_y &= \widehat{z}\widehat{p}_x - \widehat{x}\widehat{p}_y = -i\hbar\Big(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\Big),\\
\widehat{L}_z &= \widehat{x}\widehat{p}_y - \widehat{y}\widehat{p}_y = -i\hbar\Big(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\Big).
\end{aligned} \tag{3.11}$$

Эти соотношения можно записать более компактно в следующем виде:

$$\widehat{L}_i = \sum_{k,l=1}^{3} e_{ikl}\widehat{x}_k\widehat{p}_l = -i\hbar \sum_{k,l=1}^{3} e_{ikl}x_k\frac{\partial}{\partial x_l}, \tag{3.12}$$

где $\{x,\, y,\, z\} \equiv \{x_1,\, x_2,\, x_3\}$, e_{ikl} — антисимметричный единичный тензор третьего ранга с компонентой $e_{123} = 1$.

Все введенные операторы эрмитовы в пространстве L_2. Проверим, например, эрмитовость оператора импульса:

$$\begin{aligned}\langle\psi_1|\widehat{p}_x|\psi_2\rangle &= \int \psi_1^*(\mathbf{r})\Big(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\Big)\psi_2(\mathbf{r})\, d^3\mathbf{r} = \\ &= -i\hbar\left\{\int \psi_1^*(x,\, y,\, z)\big[\psi_2(x,\, y,\, z)\big]_{x=-\infty}^{+\infty} dy\, dz - \right. \\ &\quad \left. - \int \psi_2(x,\, y,\, z)\frac{\partial}{\partial x}\psi_1^*(x,\, y,\, z)\, dx\, dy\, dz\right\} = \\ &= \left(\int \psi_2^*(\mathbf{r})\Big(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\Big)\psi_1(\mathbf{r})\, d^3\mathbf{r}\right)^* = \langle\psi_2|\widehat{p}_x|\psi_1\rangle^*,\end{aligned}$$

так как $\lim\limits_{x\to\pm\infty} \psi(x,\, y,\, z) = 0$, если $\psi \in L_2$. Мы получили

$$\langle\psi_1|\widehat{p}_x|\psi_2\rangle = \langle\psi_2|\widehat{p}_x|\psi_1\rangle^*,$$

откуда в соответствии с определением (2.6) следует, что $\widehat{p}_x$ — эрмитов оператор.

§ 4. Состояния с определенными значениями физических величин

В § 2 было показано, как находится распределение физической величины F в произвольном состоянии ψ. А существуют ли такие состояния, для которых распределение стягивается в одну точку, и результат измерения величины может быть предсказан с достоверностью? Очевидно, что это те и только те состояния ψ, для которых дисперсия величины F равна нулю.

Дисперсия есть среднее значение величины $(F - \overline{F})^2$, которой в соответствии с общим правилом (2.1) следует сопоставить оператор

$$\widehat{D}_F = (F - \overline{F})^2. \tag{4.1}$$

Среднее значение этой величины в искомом состоянии есть

$$\overline{D}_F = \langle\psi|(F - \overline{F})^2|\psi\rangle = 0,$$

т. е.

$$\|(\widehat{F} - \overline{F})\psi\|^2 = 0.$$

Отсюда получаем

$$(\widehat{F} - \overline{F})\psi = 0,$$

т. е. искомыми являются состояния, которые описываются собственными векторами оператора $\widehat{F}$. Естественно, что в таких состояниях среднее значение равняется одному из собственных значений:

$$\overline{F} = F_n.$$

Существуют ли состояния, в которых несколько физических величин имеют определенные значения? Для ответа на этот вопрос важное значение имеет следующая теорема (Дополнение 5): необходимым и достаточным условием существования в L_2 общего полного набора собственных функций двух эрмитовых операторов $\widehat{A}$ и $\widehat{B}$ с чисто дискретными спектрами является коммутативность этих операторов. Следовательно, если операторы некоторых физических величин A и B с чисто дискретными спектрами коммутируют друг с другом, то в L_2 существует бесконечное множество линейно-независимых состояний φ_n, в каждом из которых обе эти величины имеют определенные значения:

$$\widehat{A}\varphi_n = A_n\varphi_n, \qquad \widehat{B}\varphi_n = B_n\varphi_n. \tag{4.2}$$

Что можно сказать о состояниях, в которых более двух физических величин имеют определенные значения? Сколько таких величин? Очевидно, что, вообще говоря, их столько, сколько существует взаимно коммутирующих операторов физических величин. Однако не все эти величины будут независимыми: может оказаться, что некоторые из них будут функциями других. Будем называть набор *независимых* физических величин *полным* для данной системы, если операторы всех этих величин коммутируют между собой, и этот набор не может быть расширен. Соответствующий набор эрмитовых операторов также называется *полным*.

§ 5. Соотношение неопределенностей

Обратимся теперь к случаю, когда два оператора физических величин не коммутируют между собой:

$$[\widehat{A},\, \widehat{B}] \neq 0. \tag{5.1}$$

Из теоремы, изложенной в предыдущем параграфе, следует, что состояний, в которых каждая из этих физических величин имеет какое-то определенное значение, нет; лишь как исключение такие состояния могут встретиться в результате «пересечения» бесконечных полных наборов собственных функций каждого из операторов $\widehat{A}$ и $\widehat{B}$. Другими словами, в любом состоянии по крайней мере одна из величин A и B имеет ненулевую дисперсию. В квантовой механике большое значение имеют соотношения, строго ограничивающие снизу произведения дисперсий физических величин, которым соответствуют некоммутирующие операторы. Примером такого соотношения является хорошо известное соотношение неопределенностей Гейзенберга для координаты и импульса частицы:

$$\Delta x \cdot \Delta p \geqslant \hbar/2. \tag{5.2}$$

Сейчас мы выведем соотношение неопределенностей в общем случае для двух произвольных некоммутирующих операторов, а затем получим из него соотношение (5.2).

Пусть A и B — две физические величины. Коммутатор их операторов всегда можно представить в виде (см. упражнение 1.4)

$$[\widehat{A},\, \widehat{B}] = i\widehat{C}, \tag{5.3}$$

где $\widehat{C}$ — некоторый эрмитов оператор ($\widehat{C}^+ = \widehat{C}$). Введем операторы

$$\Delta\widehat{A} = \widehat{A} - \overline{A}, \qquad \Delta\widehat{B} = \widehat{B} - \overline{B}, \tag{5.4}$$

где $\overline{A}$, $\overline{B}$ — средние значения A и B в состоянии ψ. Эти операторы удовлетворяют перестановочному соотношению:

$$[\Delta\widehat{A},\, \Delta\widehat{B}] = i\widehat{C}. \tag{5.5}$$

Дисперсии величин A и B в состоянии ψ представим в виде

$$\begin{aligned} D_A &= \langle\psi|(\Delta\widehat{A})^2|\psi\rangle = \|\Delta\widehat{A}\cdot\psi\|^2, \\ D_B &= \|\Delta\widehat{B}\cdot\psi\|^2. \end{aligned} \tag{5.6}$$

Покажем, что нормы векторов $\Delta\widehat{A}\cdot\psi$ и $\Delta\widehat{B}\cdot\psi$ удовлетворяют следующему неравенству:

$$\|\Delta\widehat{A}\cdot\psi\|\times\|\Delta\widehat{B}\cdot\psi\|\geqslant\frac{1}{2}|\langle\psi|\widehat{C}|\psi\rangle|. \tag{5.7}$$

Действительно, для любых двух векторов выполняются соотношения

$$\begin{gathered}\|f\|\times\|g\|\geqslant|\langle f\mid g\rangle|,\\ |\langle f|g\rangle|\geqslant|\operatorname{Im}|\langle f\mid g\rangle|.\end{gathered} \tag{5.8}$$

С другой стороны, имеем

$$\operatorname{Im}\langle\Delta\widehat{A}\cdot\psi|\Delta\widehat{B}\cdot\psi\rangle=\frac{1}{2i}(\langle\Delta\widehat{A}\cdot\psi|\Delta\widehat{B}\cdot\psi\rangle-\langle\Delta\widehat{A}\cdot\psi|\Delta\widehat{B}\cdot\psi\rangle^*)=$$
$$=\frac{1}{2i}(\langle\psi|\Delta\widehat{A}\cdot\Delta\widehat{B}|\psi\rangle-\langle\psi|\Delta\widehat{B}\cdot\Delta\widehat{A}|\psi\rangle^*)=\frac{1}{2}\langle\psi|\widehat{C}|\psi\rangle=\frac{1}{2}\overline{C},$$

где $\overline{C}$ — вещественное число, так как оператор $\widehat{C}$ эрмитов.

Таким образом,

$$D_A\cdot D_B\geqslant(\overline{C}/2)^2, \tag{5.9}$$

т. е. произведение дисперсий любых двух физических величин A и B в произвольном состоянии в любой момент времени ограничено снизу числом $(\overline{C})^2/4$. Неравенство (5.9) называется *соотношением неопределенностей* для величин A и B.

Особенно интересны случаи, когда коммутатор есть некоторая (чисто мнимая) константа, отличная от нуля:

$$[\widehat{A},\,\widehat{B}]=iK,\qquad K\neq0; \tag{5.10}$$

тогда

$$D_A\cdot D_B\geqslant\frac{1}{4}K^2>0,\quad\text{т. е.}\quad D_A>0,\quad D_B>0. \tag{5.11}$$

Следовательно, в этом случае в L_2 не только не существует состояний, в которых величины A и B имели бы одновременно определенные значения, но даже не существует состояний, в которых хотя бы одна из них имела определенное значение.

Примером таких величин являются координата x и импульс p_x частицы. Согласно (3.6), коммутатор операторов $\widehat{x}$ и $\widehat{p}_x$ есть

$$[\widehat{x},\,\widehat{p}_x]=i\hbar. \tag{5.12}$$

Следовательно,

$$D_x \cdot D_{p_x} \geqslant \frac{1}{4}\hbar^2 > 0, \tag{5.13}$$

т. е. в L_2 не существует состояний, в которых координата частицы и соответствующая компонента ее импульса могут иметь одновременно исчезающие дисперсии. При этом чем точнее локализована некоторая координата частицы, тем больше минимальная неопределенность соответствующей компоненты ее импульса, и наоборот.

Вводя обозначения

$$\Delta x \equiv (D_x)^{1/2}, \qquad \Delta p \equiv (D_{p_x})^{1/2},$$

можем записать (5.13) в форме (5.2).

Упражнения к лекции 1

1.1. Пусть $\widehat{A}$, $\widehat{B}$, $\widehat{C}$, …, $\widehat{F}$ — некоторые линейные операторы.

Доказать соотношение (Д2.8)

$$(\widehat{A}\widehat{B}\widehat{C}\ldots\widehat{F})^+ = \widehat{F}^+\ldots\widehat{C}^+\widehat{B}^+\widehat{A}^+.$$

1.2. Найти операторы, эрмитово сопряженные следующим операторам:

а) d/dx, б) xd/dx, в) $\widehat{p_x}d/dx$, г) $x\widehat{p}_x$.

1.3. Доказать унитарность оператора $e^{i\widehat{A}}$, если $\widehat{A}$ — эрмитов оператор.

1.4. Показать, что коммутатор любых двух эрмитовых операторов $\widehat{A}$ и $\widehat{B}$ всегда может быть представлен в виде

$$[\widehat{A},\, \widehat{B}] = i\widehat{C},$$

где $\widehat{C}$ — некоторый эрмитов оператор.

1.5. Показать, что произведение двух эрмитовых операторов $\widehat{A}$ и $\widehat{B}$ всегда можно представить в виде

$$\widehat{A}\widehat{B} = \widehat{C} + \widehat{D},$$

где $\widehat{C}$ — эрмитов оператор, а $\widehat{D}$ удовлетворяет соотношению $\widehat{D}^+ = -\widehat{D}$. Найти $\widehat{C}$ и $\widehat{D}$.

1.6. Волновая функция основного состояния атома водорода имеет вид

$$\psi(\mathbf{r}) = A\exp(-r/a),$$

где $a = \hbar^2/\mu e^2$, μ — масса электрона, e — его заряд, A — нормировочная константа. Определить A и найти среднее значение потенциальной энергии взаимодействия электрона с ядром

$$V = -e^2/r$$

в этом состоянии.

1.7. Доказать перестановочные соотношения:

а) $[\widehat{L}_x, \widehat{L}_y] = i\hbar\widehat{L}_z$,

б) $[\widehat{L}_i, \widehat{L}_k] = i\hbar\sum\limits_l e_{ikl}\widehat{L}_l$,

в) $[\widehat{L}_i, \widehat{\mathbf{L}}^2] = 0$,

г) $[\widehat{L}_i, \widehat{r}_k] = i\hbar\sum\limits_l e_{ikl}\widehat{r}_l$,

д) $[\widehat{L}_i, \widehat{p}_k] = i\hbar\sum\limits_l e_{ikl}\widehat{p}_l$,

е) $[\widehat{\mathbf{L}}^2, \widehat{r}_i] = 2i\hbar[(\widehat{\mathbf{r}}\widehat{\mathbf{p}})\widehat{r}_i - \widehat{\mathbf{r}}^2\widehat{p}_i]$,

ж) $[\widehat{\mathbf{L}}^2, p_i] = 2i\hbar[\widehat{\mathbf{p}}^2\widehat{r}_i - (\widehat{\mathbf{p}}\widehat{\mathbf{r}})\widehat{p}_i]$.

1.8. Упростить следующие коммутаторы:

а) $[\widehat{p}_x, f(x, y, z)]$, б) $[\widehat{p}_x, x^n]$, в) $[x, \widehat{T}]$, г) $[\widehat{p}_x, [f(x, y, z), \widehat{p}_x]]$.

1.9. Показать, что операторы квадрата момента количества движения $\widehat{\mathbf{L}}^2$ и его проекции на оси x, y, z в сферических координатах имеют вид

$$\widehat{\mathbf{L}}^2 = -\hbar^2\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right),$$

$$\widehat{L}_x = i\hbar\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \operatorname{ctg}\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right),$$

$$\widehat{L}_y = -i\hbar\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \operatorname{ctg}\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right),$$

$$\widehat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}.$$

1.10. Показать, что собственные значения и собственные функции оператора $\widehat{L}_z$ в сферических координатах имеют вид

$$L_z = m\hbar,$$
$$\psi_m(\varphi) = A\exp(im\varphi),$$

где $m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$ Найти нормировочную константу.

1.11. Найти собственные значения и собственные функции оператора $\widehat{L}_z^2$.

ЛЕКЦИЯ 2

§ 6. Уравнение Шредингера

Мы выяснили, как, зная волновую функцию состояния $\psi(\xi, t)$, определить распределения различных физических величин в этом состоянии. Однако до сих пор остался открытым вопрос о том, в каких же состояниях $\psi \in L_2$ может находиться данная физическая система. В квантовой механике постулируется, что она может находиться в тех и только тех состояниях, волновые функции которых удовлетворяют условию

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\xi, t)}{\partial t} = \widehat{H}\psi(\xi, t), \tag{6.1}$$

где $\widehat{H}$ — гамильтониан данной системы. Это условие представляет собой линейное однородное дифференциальное уравнение относительно волновой функции $\psi(\xi, t)$. Оно называется *уравнением Шредингера*, или *волновым уравнением*. Вместе с начальным условием уравнение Шредингера однозначно определяет состояние системы в любой момент времени.

Пусть $\psi_1(\xi, t)$ и $\psi_2(\xi, t)$ — два произвольных уравнения Шредингера. Ввиду его линейности и однородности любая линейная комбинация этих функций

$$\psi(\xi, t) = \alpha\psi_1(\xi, t) + \beta\psi_2(\xi, t)$$

является решением. Следовательно, произвольная линейная комбинация волновых функций любых состояний системы является волновой функцией некоторого возможного состояния этой системы. Это утверждение называется *принципом суперпозиции состояний*.