

тату — результату 1, а в состоянии $\Psi_2(q)$ — к результату 2. Тогда принимается, что всякая линейная комбинация Ψ_1 и Ψ_2 , т. е. всякая функция вида $c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$ (c_1, c_2 — постоянные), описывает состояние, в котором то же измерение дает либо результат 1, либо результат 2. Кроме того, можно утверждать, что если нам известна зависимость состояний от времени, которая для одного случая дается функцией $\Psi_1(q, t)$, а для другого — $\Psi_2(q, t)$, то любая их линейная комбинация тоже дает возможную зависимость состояния от времени.

Эти утверждения составляют содержание так называемого *принципа суперпозиции состояний* — основного положительного принципа квантовой механики. Из него следует, в частности, что все уравнения, которым удовлетворяют волновые функции, должны быть линейными по Ψ .

Рассмотрим систему, состоящую из двух частей, и предположим, что состояние этой системы задано так, что каждая из частей описана полным образом¹⁾. Тогда можно утверждать, что вероятности координат q_1 первой части независимы от вероятностей координат q_2 второй части, и потому распределение вероятностей для системы в целом должно быть равно произведению вероятностей для ее частей. Это значит, что волновая функция $\Psi_{12}(q_1, q_2)$ системы может быть представлена в виде произведения волновых функций $\Psi_1(q_1)$ и $\Psi_2(q_2)$ ее частей:

$$\Psi_{12}(q_1, q_2) = \Psi_1(q_1)\Psi_2(q_2). \quad (2,3)$$

Если обе части не взаимодействуют друг с другом, то такое соотношение между волновыми функциями системы и ее частей сохранится и в будущие моменты времени:

$$\Psi_{12}(q_1, q_2, t) = \Psi_1(q_1, t)\Psi_2(q_2, t). \quad (2,4)$$

§ 3. Операторы

Рассмотрим некоторую физическую величину f , характеризующую состояние квантовой системы. Строго говоря, в нижеследующих рассуждениях следовало бы говорить не об одной величине, а сразу о целом полном их наборе. Однако все рассуждения от этого по существу не меняются, и в целях краткости и простоты мы говорим ниже всего лишь об одной физической величине.

Значения, которые может принимать данная физическая величина, называют в квантовой механике ее *собственными значе-*

¹⁾ Тем самым, конечно, дано и полное описание состояния системы в целом. Подчеркнем, однако, что обратное утверждение отнюдь не справедливо: полное описание состояния системы как целого еще не определяет, вообще говоря, полным образом состояний ее отдельных частей (см. также § 14).

ниями, а об их совокупности говорят как о *спектре* собственных значений данной величины. В классической механике величины пробегают, вообще говоря, непрерывный ряд значений. В квантовой механике тоже существуют физические величины (например, координаты), собственные значения которых заполняют непрерывный ряд; в таких случаях говорят о *непрерывном спектре* собственных значений. Наряду с такими величинами в квантовой механике существуют, однако, и другие, собственные значения которых образуют некоторый дискретный набор; в таких случаях говорят о *дискретном спектре*.

Будем считать сначала для простоты, что рассматриваемая величина f обладает дискретным спектром; случай непрерывного спектра рассматривается в § 5. Собственные значения величины f обозначим как f_n , где индекс n пробегает значения $0, 1, 2, 3, \dots$ Обозначим волновую функцию системы в состоянии, в котором величина f имеет значение f_n , посредством Ψ_n . Волновые функции Ψ_n называют *собственными функциями* данной физической величины f . Каждая из этих функций предполагается нормированной, так что

$$\int |\Psi_n|^2 dq = 1. \quad (3,1)$$

Если система находится в некотором произвольном состоянии с волновой функцией Ψ , то произведенное над нею измерение величины f даст в результате одно из собственных значений f_n . В соответствии с принципом суперпозиции можно утверждать, что волновая функция Ψ должна представлять собой линейную комбинацию тех из собственных функций Ψ_n , которые соответствуют значениям f_n , могущим быть обнаруженными с отличной от нуля вероятностью при измерении, произведенном над системой, находящейся в рассматриваемом состоянии. Поэтому в общем случае произвольного состояния функция Ψ может быть представлена в виде ряда

$$\Psi = \sum_n a_n \Psi_n, \quad (3,2)$$

где суммирование производится по всем n , а a_n — некоторые постоянные коэффициенты.

Таким образом, мы приходим к выводу, что всякая волновая функция может быть, как говорят, разложена по собственным функциям любой физической величины. О системе функций, по которым можно произвести такое разложение, говорят как о *полной системе функций*.

Разложение (3,2) дает возможность определить вероятности обнаружения (путем измерений) у системы в состоянии с волновой функцией Ψ того или иного значения f_n величины f . Действительно, согласно сказанному в предыдущем параграфе, эти

вероятности должны определяться некоторыми билинейными по Ψ и Ψ^* выражениями и потому должны быть билинейными по a_n и a_n^* . Далее, эти выражения, разумеется, должны быть положительными. Наконец, вероятность значения f_n должна обращаться в единицу, если система находится в состоянии с волновой функцией $\Psi = \Psi_n$, и должна обращаться в нуль, если в разложении (3,2) волновой функции Ψ отсутствует член с данной Ψ_n . Единственной существенно положительной величиной, удовлетворяющей этому условию, является квадрат модуля коэффициента a_n . Таким образом, мы приходим к результату, что квадрат модуля $|a_n|^2$ каждого из коэффициентов разложения (3,2) определяет вероятность соответствующего значения f_n величины f в состоянии с волновой функцией Ψ . Сумма вероятностей всех возможных значений f_n должна быть равна единице; другими словами, должно иметь место соотношение

$$\sum_n |a_n|^2 = 1. \tag{3,3}$$

Если бы функция Ψ не была нормирована, то не имело бы места также и соотношение (3,3). Сумма $\sum_n |a_n|^2$ должна была бы при этом определяться некоторым выражением, билинейным по Ψ и Ψ^* и обращающимся в единицу при нормированном Ψ . Таковым является только интеграл $\int \Psi \Psi^* dq$. Таким образом, должно иметь место равенство

$$\sum_n a_n a_n^* = \int \Psi \Psi^* dq. \tag{3,4}$$

С другой стороны, умножив на Ψ разложение $\Psi^* = \sum_n a_n^* \Psi_n^*$ комплексно сопряженной с Ψ функции Ψ^* и проинтегрировав, получим

$$\int \Psi \Psi^* dq = \sum_n a_n^* \int \Psi_n^* \Psi dq.$$

Сравнивая это с (3,4), имеем

$$\sum_n a_n a_n^* = \sum_n a_n^* \int \Psi_n^* \Psi dq,$$

откуда находим следующую формулу, определяющую коэффициенты a_n разложения функции Ψ по собственным функциям Ψ_n :

$$a_n = \int \Psi \Psi_n^* dq. \tag{3,5}$$

Если подставить сюда (3,2), то получим

$$a_n = \sum_m a_m \int \Psi_m \Psi_n^* dq,$$

откуда видно, что собственные функции должны удовлетворять условиям

$$\int \Psi_m \Psi_n^* dq = \delta_{nm}, \quad (3.6)$$

где $\delta_{nm} = 1$ при $n = m$ и $\delta_{nm} = 0$ при $n \neq m$. О факте обращения в нуль интегралов от произведений $\Psi_m \Psi_n^*$ с $m \neq n$ говорят как о взаимной ортогональности функций Ψ_n . Таким образом, совокупность собственных функций Ψ_n образует полную систему нормированных и взаимно ортогональных (или, как говорят для краткости, — ортонормированных) функций.

Введем понятие о среднем значении \bar{f} величины f в данном состоянии. Соответственно обычному определению средних значений определим \bar{f} как сумму всех собственных значений f_n данной величины, умноженных каждое на соответствующую вероятность $|a_n|^2$

$$\bar{f} = \sum_n f_n |a_n|^2. \quad (3.7)$$

Запишем \bar{f} в виде выражения, которое бы содержало не коэффициенты разложения функции Ψ , а самую эту функцию. Поскольку в (3,7) входят произведения $a_n a_n^*$, то ясно, что искомое выражение должно быть билинейным по Ψ и Ψ^* . Введем некоторый математический оператор, который мы обозначим как \hat{f} ¹⁾, и определим следующим образом. Пусть $(\hat{f}\Psi)$ обозначает результат воздействия оператора \hat{f} на функцию Ψ . Мы определим \hat{f} так, чтобы интеграл от произведения $(\hat{f}\Psi)$ на комплексно сопряженную функцию Ψ^* был равен среднему значению \bar{f} :

$$\bar{f} = \int \Psi^* (\hat{f}\Psi) dq. \quad (3.8)$$

Легко видеть, что в общем случае оператор \hat{f} представляет собой некоторый линейный²⁾ интегральный оператор. Действительно, воспользовавшись выражением (3,5) для a_n , мы можем переписать определение (3,7) среднего значения в виде

$$\bar{f} = \sum_n f_n a_n a_n^* = \int \Psi^* \left(\sum_n a_n f_n \Psi_n \right) dq.$$

Сравнивая с (3,8), мы видим, что результат воздействия оператора \hat{f} на функцию Ψ имеет вид

$$(\hat{f}\Psi) = \sum_n a_n f_n \Psi_n. \quad (3.9)$$

¹⁾ Мы условимся обозначать везде операторы буквами со шляпкой.

²⁾ Линейным называется оператор, обладающий свойствами: $\hat{f}(\Psi_1 + \Psi_2) = \hat{f}\Psi_1 + \hat{f}\Psi_2$, $\hat{f}(a\Psi) = a\hat{f}\Psi$, где Ψ_1, Ψ_2 — произвольные функции, а a — произвольная постоянная.

Если подставить сюда выражение (3,5) для a_n , то мы найдем, что \hat{f} есть интегральный оператор вида

$$(\hat{f}\Psi) = \int K(q, q') \Psi(q') dq', \quad (3,10)$$

где функция $K(q, q')$ (так называемое ядро оператора) есть

$$K(q, q') = \sum_n f_n \Psi_n^*(q') \Psi_n(q). \quad (3,11)$$

Таким образом, каждой физической величине в квантовой механике приводится в соответствие определенный линейный оператор.

Из (3,9) видно, что если функцией Ψ является одна из собственных функций Ψ_n (так что все a_n , кроме одного, равны нулю), то в результате воздействия на нее оператора \hat{f} эта функция просто умножается на соответствующее собственное значение f_n ¹⁾:

$$\hat{f}\Psi_n = f_n \Psi_n. \quad (3,12)$$

Таким образом, собственные функции данной физической величины \hat{f} являются решениями уравнения

$$\hat{f}\Psi = f\Psi,$$

где f — постоянная, а собственные значения — это те значения постоянной f , при которых написанное уравнение имеет решения, удовлетворяющие требуемым условиям. Как мы увидим ниже, вид операторов для различных физических величин может быть определен из прямых физических соображений, и тогда указанное свойство операторов дает возможность находить собственные функции и собственные значения посредством решения уравнений $\hat{f}\Psi = f\Psi$.

Как собственные значения вещественной физической величины, так и ее средние значения во всяком состоянии — вещественны. Это обстоятельство накладывает определенное ограничение на свойства соответствующих операторов. Приравняв выражение (3,8) комплексно ему сопряженному, получим соотношение

$$\int \Psi^* (\hat{f}\Psi) dq = \int \Psi (\hat{f}^*\Psi^*) dq, \quad (3,13)$$

где \hat{f}^* обозначает оператор, комплексно сопряженный с \hat{f} ²⁾. Для произвольного линейного оператора такое соотношение,

¹⁾ Ниже мы будем везде, где это не может привести к недоразумению, опускать скобки в выражении $(\hat{f}\Psi)$, причем оператор предполагается действующим на написанное вслед за ним выражение.

²⁾ По определению, если для оператора \hat{f} имеем $\hat{f}\psi = \varphi$, то комплексно сопряженным оператором \hat{f}^* будет оператор, для которого имеет место $\hat{f}^*\psi^* = \varphi^*$.

вообще говоря, не имеет места, так что оно представляет собой некоторое ограничение, накладываемое на возможный вид операторов \hat{f} . Для произвольного оператора \hat{f} можно указать, как говорят, *транспонированный* с ним оператор $\tilde{\hat{f}}$, определяемый так, чтобы

$$\int \Phi (\hat{f}\Psi) dq = \int \Psi (\tilde{\hat{f}}\Phi) dq, \quad (3,14)$$

где Ψ, Φ — две различные функции. Если выбрать в качестве функции Φ сопряженную с Ψ функцию Ψ^* , то сравнение с (3,13) показывает, что должно быть

$$\tilde{\hat{f}} = \hat{f}^*. \quad (3,15)$$

Операторы, удовлетворяющие этому условию, называют *эрмитовыми*¹⁾. Таким образом, операторы, соответствующие в математическом аппарате квантовой механики вещественным физическим величинам, должны быть эрмитовыми.

Формально можно рассматривать также и комплексные физические величины, т. е. величины, собственные значения которых комплексны. Пусть f есть такая величина. Тогда можно ввести комплексно сопряженную с ней величину f^* , собственные значения которой комплексно сопряжены с собственными значениями f . Оператор, соответствующий величине f^* , обозначим посредством \hat{f}^+ . Его называют *сопряженным* оператору \hat{f} и его необходимо, вообще говоря, отличать от комплексно сопряженного оператора \hat{f}^* . Действительно, по определению оператора \hat{f}^+ , среднее значение величины f^* в некотором состоянии Ψ есть

$$f^* = \int \Psi^* \hat{f}^+ \Psi dq.$$

С другой стороны, имеем

$$(\hat{f})^* = \left[\int \Psi^* \hat{f} \Psi dq \right]^* = \int \Psi \hat{f}^* \Psi^* dq = \int \Psi^* \tilde{\hat{f}} \Psi dq.$$

Приравняв оба выражения, найдем, что

$$\hat{f}^+ = \tilde{\hat{f}}, \quad (3,16)$$

откуда ясно, что \hat{f}^+ , вообще говоря, не совпадает с \hat{f}^* . Условие (3,15) можно написать теперь в виде

$$\hat{f} = \hat{f}^+, \quad (3,17)$$

т. е. оператор вещественной физической величины совпадает со своим сопряженным (эрмитовы операторы называют также *само-сопряженными*).

¹⁾ Для линейного интегрального оператора вида (3,10) условие эрмитовости означает, что ядро оператора должно быть таким, чтобы $K(q, q') = K^*(q', q)$.

Покажем, каким образом можно непосредственно доказать взаимную ортогональность собственных функций эрмитова оператора, соответствующих различным собственным значениям. Пусть f_n, f_m — два различных собственных значения вещественной величины f , а Ψ_n, Ψ_m — соответствующие им собственные функции:

$$\hat{f}\Psi_n = f_n\Psi_n, \quad \hat{f}\Psi_m = f_m\Psi_m.$$

Умножив обе стороны первого из этих равенств на Ψ_m^* , а равенство, комплексно сопряженное второму, — на Ψ_n и, вычтя эти произведения почленно друг из друга, получим

$$\Psi_m^*\hat{f}\Psi_n - \Psi_n\hat{f}^*\Psi_m^* = (f_n - f_m)\Psi_n\Psi_m^*.$$

Проинтегрируем обе части этого равенства по dq . Поскольку $\hat{f}^* = \hat{f}$, то в силу (3,14) интеграл от левой части равенства обращается в нуль, так что получим

$$(f_n - f_m) \int \Psi_n\Psi_m^* dq = 0,$$

откуда, ввиду $f_n \neq f_m$, следует искомое свойство ортогональности функций Ψ_n и Ψ_m .

Мы все время говорим здесь только об одной физической величине f , между тем как следовало бы говорить, как было отмечено в начале параграфа, о полной системе одновременно измеримых физических величин. Тогда мы нашли бы, что каждой из этих величин f, g, \dots соответствует свой оператор \hat{f}, \hat{g}, \dots . Собственные функции Ψ_n соответствуют состояниям, в которых все рассматриваемые величины имеют определенные значения, т. е. соответствуют определенным наборам собственных значений f_n, g_n, \dots и являются совместными решениями системы уравнений

$$\hat{f}\Psi = f\Psi, \quad \hat{g}\Psi = g\Psi, \dots$$

§ 4. Сложение и умножение операторов

Если \hat{f} и \hat{g} — операторы, отвечающие двум физическим величинам f и g , то сумме $\hat{f} + \hat{g}$ отвечает оператор $\hat{f} + \hat{g}$. Смысл сложения различных физических величин в квантовой механике, однако, существенно различен в зависимости от того, измеримы ли эти величины одновременно или нет. Если величины f и g одновременно измеримы, то операторы \hat{f} и \hat{g} имеют совместные собственные функции, которые являются в то же время и собственными функциями оператора $\hat{f} + \hat{g}$, а собственные значения последнего оператора равны суммам $f_n + g_n$.

Если же величины f и g не могут иметь одновременно определенных значений, то смысл их суммы $\hat{f} + \hat{g}$ более ограничен.