Таким образом, мы получили интеграл, в котором по сравнению с первоначальным функции Ψ и Φ поменялись местами. Другими словами, оператор $\tilde{\hat{g}}\tilde{\hat{f}}$ есть оператор, транспонированный с $\hat{f}\hat{g}$, и мы можем написать

$$\widetilde{\hat{f}\hat{g}} = \tilde{\hat{g}}\tilde{\hat{f}}, \tag{4,4}$$

— оператор, транспонированный с произведением $\hat{f}\hat{g}$, есть произведение транспонированных множителей, написанных в обратном порядке. Взяв комплексно сопряженное от обеих сторон равенства (4,4), найдем, что

$$(\hat{f}\hat{g})^+ = \hat{g}^+\hat{f}^+. \tag{4,5}$$

Если каждый из операторов $\hat{f}$ и $\hat{g}$ — эрмитов, то $(\hat{f}\hat{g})^+ = \hat{g}\hat{f}$. Отсюда следует, что оператор $\hat{f}\hat{g}$ будет эрмитовым, только если множители $\hat{f}$ и $\hat{g}$ — коммутативны.

Отметим, что из произведений $\hat{f}\hat{g}$ и $\hat{g}\hat{f}$ двух некоммутативных эрмитовых операторов можно составить эрмитов же оператор — их *симметризованное произведение*

$$\frac{1}{2}(\hat{f}\hat{g} + \hat{g}\hat{f}). \tag{4,6}$$

Легко также убедиться в том, что разность $\hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f}$ есть «антиэрмитов» оператор (т. е. такой, для которого транспонированный оператор равен взятому с обратным знаком комплексно сопряженному). Он может быть сделан эрмитовым умножением на i; таким образом,

$$i(\hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f}) \tag{4,7}$$

есть тоже эрмитов оператор.

В дальнейшем мы будем иногда пользоваться для краткости обозначением

$$\{\hat{f}, \hat{g}\} = \hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f} \tag{4,8}$$

для так называемого *коммутатора* операторов. Легко убедиться в том, что имеет место соотношение

$$\{\hat{f}\hat{g}, \hat{h}\} = \{\hat{f}, \hat{h}\}\hat{g} + \hat{f}\{\hat{g}, \hat{h}\}. \tag{4,9}$$

Заметим, что если $\{\hat{f}, \hat{h}\} = 0$ и $\{\hat{g}, \hat{h}\} = 0$, то отсюда, вообще говоря, отнюдь не следует, что и $\hat{f}$ и $\hat{g}$ коммутативны.

§ 5. Непрерывный спектр

Все выведенные в § 3, 4 соотношения, описывающие свойства собственных функций дискретного спектра, без труда могут быть обобщены на случай непрерывного спектра собственных значений.

Пусть f — физическая величина, обладающая непрерывным спектром. Ее собственные значения мы будем обозначать просто той же буквой f без индекса, а соответствующие собственные функции будем обозначать Ψ_f. Подобно тому как произвольная волновая функция Ψ может быть разложена в ряд (3,2) по собственным функциям величины с дискретным спектром, она может быть также разложена — на этот раз в интеграл — и по полной системе собственных функций величины с непрерывным спектром. Такое разложение имеет вид

$$\Psi(q) = \int a_f \Psi_f(q)\, df, \tag{5,1}$$

где интегрирование производится по всей области значений, которые может принимать величина f.

Более сложным, чем в случае дискретного спектра, является вопрос о нормировке собственных функций непрерывного спектра. Требование равенства единице интеграла от квадрата модуля функции здесь, мы как увидим далее, невыполнимо. Вместо этого поставим себе целью пронормировать функции Ψ_f таким образом, чтобы $|a_f|^2\, df$ представляло собой вероятность рассматриваемой физической величине иметь в состоянии, описывающемся волновой функцией Ψ, значение в заданном интервале между f и $f + df$. Поскольку сумма вероятностей всех возможных значений f должна быть равна единице, то имеем

$$\int |a_f|^2\, df = 1 \tag{5,2}$$

(аналогично соотношению (3,3) для дискретного спектра).

Поступая в точности аналогично тому, как мы делали при выводе формулы (3,5), и используя те же соображения, пишем, с одной стороны,

$$\int \Psi\Psi^*\, dq = \int |a_f|^2\, df,$$

и, с другой стороны,

$$\int \Psi\Psi^*\, dq = \int\int a_f^* \Psi_f^* \Psi\, df\, dq.$$

Из сравнения обоих выражений находим формулу, определяющую коэффициенты разложения

$$a_f = \int \Psi(q) \Psi_f^*(q)\, dq, \tag{5,3}$$

в точности аналогичную (3,5).

Для вывода условия нормировки подставим теперь (5,1) в (5,3):

$$a_f = \int a_{f'} \left(\int \Psi_{f'} \Psi_f^*\, dq \right) df'.$$

Это соотношение должно иметь место при произвольных a_f и потому должно выполняться тождественно. Для этого необходимо прежде всего, чтобы коэффициент при $a_{f'}$ под знаком интеграла (т. е. интеграл $\int \Psi_{f'}\Psi_f^* \, dq$) обращался в нуль при всех $f' \neq f$. При $f' = f$ этот коэффициент должен обратиться в бесконечность (в противном случае интеграл по df' будет равен просто нулю). Таким образом, интеграл $\int \Psi_{f'}\Psi_f^* \, dq$ есть функция разности $f - f'$, обращающаяся в нуль при отличных от нуля значениях аргумента и в бесконечность при равном нулю аргументе. Обозначим эту функцию посредством $\delta(f' - f)$:

$$\int \Psi_{f'}\Psi_f^* \, dq = \delta(f' - f). \tag{5,4}$$

Способ обращения функции $\delta(f' - f)$ в бесконечность при $f' - f = 0$ определяется тем, что должно быть

$$\int \delta(f' - f) \, a_{f'} \, df' = a_f.$$

Ясно, что для этого должно быть

$$\int \delta(f' - f) \, df' = 1.$$

Определенная таким образом функция называется *δ-функцией* [1]). Выпишем еще раз определяющие ее формулы. Имеем

$$\delta(x) = 0 \text{ при } x \neq 0, \quad \delta(0) = \infty, \tag{5,5}$$

причем так, что

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) \, dx = 1. \tag{5,6}$$

В качестве пределов интегрирования можно написать любые другие, между которыми находится точка $x = 0$. Если $f(x)$ есть некоторая функция, непрерывная при $x = 0$, то

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) f(x) \, dx = f(0). \tag{5,7}$$

В более общем виде эта формула может быть написана как

$$\int \delta(x - a) f(x) \, dx = f(a), \tag{5,8}$$

где область интегрирования включает точку $x = a$, а $f(x)$ — непрерывна при $x = a$. Очевидно также, что δ-функция четна, т. е.

$$\delta(-x) = \delta(x). \tag{5,9}$$

[1]) Дельта-функция была введена в теоретическую физику *Дираком* (*P. A. M. Dirac*).

Наконец, написав

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(\alpha x)\, dx = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(y) \frac{dy}{|\alpha|} = \frac{1}{|\alpha|},$$

заключаем, что

$$\delta(\alpha x) = \frac{1}{|\alpha|} \delta(x), \tag{5,10}$$

где α — любая постоянная.

Формула (5,4) выражает собой правило нормировки собственных функций непрерывного спектра; она заменяет собой условие (3,6) дискретного спектра. Мы видим, что функции Ψ_f и $\Psi_{f'}$ с $f \neq f'$ по-прежнему ортогональны друг к другу. Интегралы же от квадратов $|\Psi_f|^2$ функций непрерывного спектра расходятся.

Функции $\Psi_f(q)$ удовлетворяют еще одному соотношению, сходному с (5,4). Для его вывода подставляем (5,3) в (5,1), что дает

$$\Psi(q) = \int \Psi(q') \left(\int \Psi_f^*(q') \Psi_f(q)\, df \right) dq',$$

откуда сразу заключаем, что должно быть

$$\int \Psi_f^*(q') \Psi_f(q)\, df = \delta(q - q'). \tag{5,11}$$

Аналогичное соотношение может быть, разумеется, выведено и для дискретного спектра, где оно имеет вид

$$\sum_n \Psi_n^*(q') \Psi_n(q) = \delta(q' - q). \tag{5,12}$$

Сравнив пару формул (5,1) и (5,4) с парой (5,3) и (5,11), мы видим, что, с одной стороны, функции $\Psi_f(q)$ осуществляют разложение функции $\Psi(q)$ с коэффициентами разложения a_f, а, с другой стороны, формулу (5,3) можно рассматривать как совершенно аналогичное разложение функции $a_f \equiv a(f)$ по функциям $\Psi_f^*(q)$, причем роль коэффициентов разложения играет $\Psi(q)$. Функция $a(f)$, как и $\Psi(q)$, вполне определяет состояние системы; о ней говорят как о волновой функции в *f-представлении* (а о функции $\Psi(q)$ — как о волновой функции в q-представлении). Подобно тому как $|\Psi(q)|^2$ определяет вероятность для системы иметь координаты в заданном интервале dq, так $|a(f)|^2$ определяет вероятность значений величины f в заданном интервале df. Функции же $\Psi_f(q)$ являются, с одной стороны, собственными функциями величины f в q-представлении и, с другой стороны, их комплексно сопряженные $\Psi_f^*(q)$ представляют собой собственные функции координаты q в f-представлении.

Пусть $\varphi(f)$ — некоторая функция величины f, причем такая, что φ и f связаны друг с другом взаимно однозначным образом. Каждую из функций $\Psi_f(q)$ можно тогда рассматривать и как собственную функцию величины φ. При этом, однако, необходимо изменить нормировку этих функций. Действительно, собственные функции $\Psi_\varphi(q)$ величины φ должны быть нормированы условием

$$\int \Psi_{\varphi(f')}\Psi^*_{\varphi(f)}\,dq = \delta[\varphi(f') - \varphi(f)],$$

между тем как функции Ψ_f нормированы условием (5,4). Аргумент δ-функции обращается в нуль при $f' = f$. При f', близком к f, имеем

$$\varphi(f') - \varphi(f) = \frac{d\varphi(f)}{df}(f' - f).$$

Ввиду (5,10) мы можем поэтому написать [1])

$$\delta[\varphi(f') - \varphi(f)] = \frac{1}{\left|\frac{d\varphi(f)}{df}\right|}\delta(f' - f). \tag{5,13}$$

Сравнение (5,13) с (5,4) показывает теперь, что функции Ψ_φ и Ψ_f связаны друг с другом соотношением

$$\Psi_{\varphi(f)} = \frac{1}{\sqrt{\left|\frac{d\varphi(f)}{df}\right|}}\Psi_f. \tag{5,14}$$

Существуют такие физические величины, которые обладают в некоторой области своих значений дискретным спектром, а в другой — непрерывным. Для собственных функций такой величины имеют, разумеется, место все те же соотношения, которые были выведены в этом и предыдущих параграфах. Надо только отметить, что полную систему функций образует совокупность собственных функций обоих спектров вместе. Поэтому разложение произвольной волновой функции по собственным функциям такой величины имеет вид

$$\Psi(q) = \sum_n a_n\Psi_n(q) + \int a_f\Psi_f(q)\,df, \tag{5,15}$$

где сумма берется по дискретному, а интеграл — по всему непрерывному спектру.

Примером величины, обладающей непрерывным спектром, является сама координата q. Легко видеть, что соответствующим ей оператором является простое умножение на q. Действительно,

---

[1]) Вообще, если $\varphi(x)$ есть некоторая однозначная функция (но обратная ей функция может быть неоднозначной), то имеет место формула

$$\delta[\varphi(x)] = \sum_i \frac{1}{|\varphi'(\alpha_i)|}\delta(x - \alpha_i), \tag{5,13a}$$

где α_i — корни уравнения $\varphi(x) = 0$.

поскольку вероятность различных значений координаты определяется квадратом $|\Psi(q)|^2$, то среднее значение координаты

$$\bar{q} = \int q\,|\Psi|^2\,dq \equiv \int \Psi^* q \Psi\,dq.$$

Сравнив это выражение с определением операторов согласно (3,8), мы видим, что [1])

$$\hat{q} = q. \tag{5,16}$$

Собственные функции этого оператора должны определяться, согласно общему правилу, уравнением $q\Psi_{q_0} = q_0\Psi_{q_0}$, где посредством q_0 временно обозначены конкретные значения координаты в отличие от переменной q. Поскольку это равенство может удовлетворяться либо при $\Psi_{q_0} = 0$, либо при $q = q_0$, то ясно, что удовлетворяющие условию нормировки собственные функции есть [2])

$$\Psi_{q_0} = \delta(q - q_0). \tag{5,17}$$

§ 6. Предельный переход

Квантовая механика содержит в себе классическую в качестве предельного случая. Возникает вопрос о том, каким образом осуществляется этот предельный переход.

В квантовой механике электрон описывается волновой функцией, определяющей различные значения его координаты; об этой функции нам известно пока лишь то, что она является решением некоторого линейного дифференциального уравнения в частных производных. В классической же механике электрон рассматривается как материальная частица, движущаяся по траектории, вполне определяющейся уравнениями движения. Взаимоотношение, в некотором смысле аналогичное взаимоотношению между квантовой и классической механикой, имеет место в электродинамике между волновой и геометрической оптикой. В волновой оптике электромагнитные волны описываются векторами электрического и магнитного полей, удовлетворяющими определенной системе линейных дифференциальных уравнений (уравнений Максвелла). В геометрической же оптике рассматривается распространение света по определенным траекториям — лучам. Подобная аналогия позволяет заключить, что предельный переход от кван-

---

[1]) В дальнейшем мы условимся для простоты обозначений писать везде операторы, сводящиеся к умножению на некоторую величину, просто в виде самой этой величины.

[2]) Коэффициенты разложения произвольной функции Ψ по этим собственным функциям равны $a_{q_0} = \int \Psi(q)\,\delta(q - q_0)\,dq = \Psi(q_0)$. Вероятность значений координаты в данном интервале dq_0 равна $|a_{q_0}|^2\,dq_0 = |\Psi(q_0)|^2\,dq_0$, как и должно было быть.