Наконец, выведем формулу, выражающую через $\hat{\mathbf{p}}$ оператор параллельного переноса в пространстве на любое конечное (а не только бесконечно малое) расстояние **a**. По определению такого оператора (назовем его $\hat{T}_{\mathbf{a}}$) должно быть

$$\hat{T}_{\mathbf{a}}\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}+\mathbf{a}).$$

Разлагая функцию $\psi(\mathbf{r}+\mathbf{a})$ в ряд Тэйлора, имеем

$$\psi(\mathbf{r}+\mathbf{a}) = \psi(\mathbf{r}) + \mathbf{a}\frac{\partial\psi(\mathbf{r})}{\partial\mathbf{r}} + \cdots$$

или, введя оператор $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$:

$$\psi(\mathbf{r}+\mathbf{a}) = \left[1 + \frac{i}{\hbar}\mathbf{a}\hat{\mathbf{p}} + \frac{1}{2}\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{a}\hat{\mathbf{p}}\right)^2 + \cdots\right]\psi(\mathbf{r}).$$

Выражение, стоящее в квадратных скобках, представляет собой оператор

$$\hat{T}_{\mathbf{a}} = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{a}\hat{\mathbf{p}}\right). \tag{15,13}$$

Это и есть искомый *оператор конечного смещения*.

§ 16. Соотношения неопределенности

Выведем правила коммутации между операторами импульса и координат. Поскольку результат последовательного дифференцирования по одной из переменных x, y, z и умножения на другую из них не зависит от порядка этих операций, то

$$\hat{p}_x y - y\hat{p}_x = 0, \quad \hat{p}_x z - z\hat{p}_x = 0 \tag{16,1}$$

и аналогично для $\hat{p}_y$, $\hat{p}_z$.

Для вывода правила коммутации $\hat{p}_x$ с x пишем

$$(\hat{p}_x x - x\hat{p}_x)\psi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(x\psi) + i\hbar x\frac{\partial\psi}{\partial x} = -i\hbar\psi.$$

Мы видим, что результат воздействия оператора $\hat{p}_x x - x\hat{p}_x$ сводится к умножению функции на $-i\hbar$; то же самое относится, конечно, к коммутации $\hat{p}_y$ с y и $\hat{p}_z$ с z. Таким образом имеем [1])

$$\hat{p}_x x - x\hat{p}_x = -i\hbar, \quad \hat{p}_y y - y\hat{p}_y = -i\hbar, \quad \hat{p}_z z - z\hat{p}_z = -i\hbar. \tag{16,2}$$

Все соотношения (16,1) и (16,2) можно записать вместе в виде

$$\hat{p}_i x_k - x_k\hat{p}_i = -i\hbar\delta_{ik}, \quad i, k = x, y, z. \tag{16,3}$$

---

[1]) Эти соотношения, открытые в матричной форме *Гейзенбергом* в 1925 г., послужили отправной точкой в создании квантовой механики.

Прежде чем перейти к выяснению физического смысла этих соотношений и следствий из них, напишем две полезные для дальнейшего формулы. Пусть $f(\mathbf{r})$ — некоторая функция координат, тогда

$$\hat{\mathbf{p}} f(\mathbf{r}) - f(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla f. \qquad (16,4)$$

Действительно,

$$(\hat{\mathbf{p}} f - f\hat{\mathbf{p}}) \psi = -i\hbar [\nabla (f\psi) - f\nabla\psi] = -i\hbar \psi \nabla f.$$

Аналогичное соотношение имеет место для коммутатора $\mathbf{r}$ с функцией оператора импульса:

$$f(\hat{\mathbf{p}}) \mathbf{r} - \mathbf{r} f(\hat{\mathbf{p}}) = -i\hbar \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}}. \qquad (16,5)$$

Его можно вывести так же, как (16,4), если производить вычисления в импульсном представлении, воспользовавшись для операторов координат выражением (15,12).

Соотношения (16,1) и (16,2) показывают, что координата частицы вдоль одной из осей может иметь определенное значение одновременно с компонентами импульса по двум другим осям; координата же и компонента импульса вдоль одной и той же оси не существуют одновременно. В частности, частица не может находиться в определенной точке пространства и в то же время иметь определенный импульс $\mathbf{p}$.

Предположим, что частица находится в некоторой конечной области пространства, размеры которой вдоль трех осей порядка величины Δx, Δy, Δz. Пусть, далее, среднее значение импульса частицы есть $\mathbf{p}_0$. Математически это означает, что волновая функция имеет вид $\psi = u(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{p}_0\mathbf{r}/\hbar}$, где $u(\mathbf{r})$ — функция, заметно отличная от нуля только в указанной области пространства.

Разложим функцию ψ по собственным функциям оператора импульса (т. е. в интеграл Фурье). Коэффициенты $a(\mathbf{p})$ этого разложения определяются интегралами (15,10) от функций вида $u(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{p}_0-\mathbf{p})\mathbf{r}/\hbar}$. Для того чтобы такой интеграл был заметно отличен от нуля, периоды осциллирующего множителя $e^{i(\mathbf{p}_0-\mathbf{p})\mathbf{r}/\hbar}$ должны быть не малыми по сравнению с размерами Δx, Δy, Δz области, в которой отлична от нуля функция $u(\mathbf{r})$. Это значит, что $a(\mathbf{p})$ будет заметно отличным от нуля лишь для значений $\mathbf{p}$ таких, что $(p_{0x} - p_x)\Delta x/\hbar \lesssim 1$, ... Поскольку $|a(\mathbf{p})|^2$ определяет вероятность различных значений импульса, то интервалы значений p_x, p_y, p_z, в которых $a(\mathbf{p})$ отлично от нуля, — не что иное, как те интервалы значений, в которых могут оказаться компоненты импульса частицы в рассматриваемом состоянии. Обозначая эти интервалы посредством Δp_x, Δp_y, Δp_z, имеем таким образом

$$\Delta p_x \Delta x \sim \hbar, \quad \Delta p_y \Delta y \sim \hbar, \quad \Delta p_z \Delta z \sim \hbar. \qquad (16,6)$$

Эти *соотношения неопределенности* были установлены *Гейзенбергом* в 1927 г.

Мы видим, что чем с большей точностью известна координата частицы (т. е. чем меньше Δx), тем больше неопределенность Δp_x в значении компоненты импульса вдоль той же оси, и наоборот. В частности, если частица находится в некоторой строго определенной точке пространства ($\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0$), то $\Delta p_x = \Delta p_y = \Delta p_z = \infty$. Это значит, что все значения импульса при этом равновероятны. Наоборот, если частица имеет строго определенный импульс $\mathbf{p}$, то равновероятны все ее положения в пространстве (это видно и непосредственно из волновой функции (15,8), квадрат модуля которой не зависит вовсе от координат).

Если характеризовать неопределенности координат и импульсов средними квадратичными флуктуациями

$$\delta x = \sqrt{\overline{(x-\bar{x})^2}}, \quad \delta p_x = \sqrt{\overline{(p_x-\bar{p}_x)^2}},$$

то можно дать точную оценку наименьшего возможного значения их произведения (*H. Weyl*).

Рассмотрим одномерный случай — пакет с волновой функцией $\psi(x)$, зависящей только от одной координаты; предположим для простоты, что средние значения x и p_x в этом состоянии равны нулю. Исходим из очевидного неравенства

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left| \alpha x\psi + \frac{d\psi}{dx} \right|^2 dx \geqslant 0,$$

где α — произвольная вещественная постоянная. При вычислении этого интеграла замечаем, что

$$\int x^2 |\psi|^2 dx = (\delta x)^2,$$

$$\int \left(x \frac{d\psi^*}{dx}\psi + x\psi^* \frac{d\psi}{dx} \right) dx = \int x \frac{d|\psi|^2}{dx} dx = -\int |\psi|^2 dx = -1,$$

$$\int \frac{d\psi^*}{dx}\frac{d\psi}{dx} dx = -\int \psi^* \frac{d^2\psi}{dx^2} dx = \frac{1}{\hbar^2}\int \psi^* \hat{p}_x^2 \psi\, dx = \frac{1}{\hbar^2}(\delta p_x)^2,$$

и получаем

$$\alpha^2 (\delta x)^2 - \alpha + \frac{(\delta p_x)^2}{\hbar^2} \geqslant 0.$$

Для того чтобы этот квадратичный (по α) трехчлен был положительным при любых значениях α, его дискриминант должен быть отрицательным. Отсюда получаем неравенство

$$\delta x\, \delta p_x \geqslant \frac{\hbar}{2}. \tag{16,7}$$

Наименьшее возможное значение произведения равно $\hbar/2$.

Это значение достигается в волновых пакетах, описываемых функциями вида

$$\psi = \frac{1}{(2\pi)^{1/4}\sqrt{\delta x}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_0 x - \frac{x^2}{4(\delta x)^2}\right), \tag{16,8}$$

где p_0 и δx — постоянные. Вероятности различных значений координаты в таком состоянии

$$|\psi|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\delta x} \exp\left(-\frac{x^2}{2(\delta x)^2}\right),$$

т. е. распределены вокруг начала координат (среднее значение $\bar{x} = 0$) по закону Гаусса со средней квадратичной флуктуацией δx. Волновая функция в импульсном представлении

$$a(p_x) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) e^{-ip_x x/\hbar} dx.$$

Вычисление интеграла приводит к выражению вида

$$a(p_x) = \mathrm{const}\cdot\exp\left(-\frac{(\delta x)^2 (p_x - p_0)^2}{\hbar^2}\right).$$

Распределение вероятностей значений импульса, $|a(p_x)|^2$, тоже является гауссовым вокруг среднего $\bar{p}_x = p_0$ и со средней квадратичной флуктуацией $\delta p_x = \hbar/2\delta x$, так что произведение $\delta p_x \delta x$ имеет как раз значение $\hbar/2$.

Наконец, выведем еще одно полезное соотношение. Пусть f и g — две физические величины, операторы которых удовлетворяют правилу коммутации

$$\hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f} = -i\hbar\hat{c}, \tag{16,9}$$

где $\hat{c}$ — оператор некоторой физической величины c. В правой стороне равенства введен множитель $\hbar$ в соответствии с тем, что в классическом пределе (т. е. при $\hbar \to 0$) все вообще операторы физических величин сводятся к умножению на эти величины и коммутативны друг с другом. Таким образом, в «квазиклассическом» случае можно в первом приближении правую сторону равенства (16,9) считать равной нулю. В следующем же приближении можно заменить оператор $\hat{c}$ оператором простого умножения на величину c. Тогда получится

$$\hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f} = -i\hbar c.$$

Это равенство в точности аналогично соотношению $\hat{p}_x x - x\hat{p}_x = -i\hbar$ с той лишь разницей, что вместо постоянной $\hbar$ в нем стоит величина $\hbar c$ [1]). В связи с этим мы можем заключить по аналогии с соотношением $\Delta x\,\Delta p_x \sim \hbar$, что в квазиклассическом случае для величин f, g имеет место соотношение неопределенности

$$\Delta f\,\Delta g \sim \hbar c. \tag{16,10}$$

В частности, если одной из величин является энергия ($f \equiv H$), а оператор другой (g) не зависит явно от времени, то, согласно (9,2), $c = \dot{g}$ и соотношение неопределенности в квазиклассическом случае

$$\Delta E\,\Delta g \sim \hbar \dot{g}. \tag{16,11}$$

---

[1]) Классическая величина c есть скобка Пуассона величин f и g (см. примечание на стр. 44).