С частным случаем подобного разложения (разложения по плоским волнам) мы уже встречались в § 3. Условие полноты в случае сплошного спектра записывается аналогично (19,4)

$$\int \psi_F^*(x')\,\psi_F(x)\,dF = \delta(x - x'). \tag{19.7}$$

§ 20. Квантовомеханические величины и операторы

Мы можем теперь перейти к обсуждению основного постулата квантовой механики, устанавливающего связь между реальными физическими величинами, характеризующими свойства квантовомеханических систем, и математическим аппаратом квантовой механики.

В классической механике состояние системы определяется совокупностью координат и импульсов (или величин, выражающихся через них), входящих в уравнение движения. Все величины, характеризующие состояние системы, называют механическими величинами. В квантовой механике величины, играющие аналогичную роль будут называться квантовомеханическими величинами. Их также часто именуют физическими величинами или динамическими переменными.

На примерах, разобранных выше, были выяснены некоторые свойства квантовых систем. К ним относятся в первую очередь:

1) наличие соотношения неопределенности между значениями канонически сопряженных физических величин (таких, как, например, координата и импульс);

2) существование дискретного и непрерывного спектров значений физических величин (например, энергии квантового осциллятора и свободной частицы);

3) существование суперпозиции квантовых состояний (например, суперпозиции состояний свободной частицы);

4) непрерывный переход от понятий квантовой механики к понятиям классической механики при переходе к системам, в которых можно считать постоянную Планка бесконечно малой величиной, а квантовые числа — бесконечно большими (принцип соответствия).

Первая и вторая особенности квантовомеханических величин как раз соответствуют свойствам линейных операторов — их некоммутативности и существованию спектра собственных значений. Поэтому естественно высказать следующее основное допущение: «каждой квантовомеханической величине F соответствует некоторый линейный эрмитовый оператор $\hat{F}$. Спектр собственных значений оператора $\hat{F}$ представляет спектр возможных (измеряемых) значений этой величины».

Собственная функция $\psi_F(x)$ оператора $\hat{F}$ представляет волновую функцию системы в состоянии, в котором величина, изображаемая оператором $\hat{F}$, имеет данное определенное значение F.

Требование эрмитовости оператора связано, очевидно, с вещественностью значений реальных физических величин, тогда как требование линейности связано с принципом суперпозиции. Совершенно ясно, что высказанное утверждение приобретет конкретный смысл лишь после того, как оно будет дополнено указанием на то, как именно может быть найден оператор, отвечающий данной квантовомеханической величине. Если бы такой рецепт был известен, то сформулированный постулат позволил бы определить спектр возможных значений этой величины. Справедливость основного постулата может быть установлена только согласием между выводами квантовой механики и опытом.

Для определения вида линейных операторов, отвечающих определенным квантовомеханическим величинам — квантовомеханических операторов, необходимо воспользоваться принципом соответствия. Именно естественно допустить, что между квантовомеханическими операторами, описывающими движение частиц в квантовой механике, имеют место те же соотношения, что и между их «оригиналами» — величинами классической механики. Так, например, оператор полной энергии $\hat{H}$ связан с операторами кинетической энергии $\hat{T}$ и потенциальной энергии $\hat{U}$ соотношением

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U}. \tag{20,1}$$

В свою очередь оператор $\hat{T}$ равен

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m}, \tag{20,2}$$

где $\hat{p}$ — оператор импульса, и т. п.

Этими соотношениями мы, в сущности, уже пользовались в предыдущей главе при получении уравнения Шредингера. Если квантовомеханические операторы связаны между собой обычными соотношениями классической механики, то достаточно получить выражение для одного оператора, чтобы построить затем полную систему операторов квантовой механики. Предельный переход к классической механике при $\hbar \to 0$ будет обеспечен автоматически, если только исходный оператор выбран правильно, с учетом этого условия. Такой подход представляется вполне правдоподобным, хотя и не строгим. В дальнейшем будет изложен другой, более последовательный метод построения операторов.

В качестве исходных операторов можно выбрать операторы координаты и импульса.

Оператор координаты $\hat{r}$, как и всякий оператор, отвечающий независимой переменной, сводится к умножению на эту переменную, т. е.

$$\hat{x} = x; \quad \hat{y} = y; \quad \hat{z} = z. \tag{20,3}$$

Для установления вида оператора импульса $\hat{p}$ можно воспользоваться тем, что свободная частица описывается уравнением Шредингера (6,5)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi = E\psi.$$

С другой стороны, это уравнение можно в силу сказанного выше написать как

$$\frac{1}{2m}\left(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2\right)\psi = E\psi.$$

Отсюда следует, что операторы $\hat{p}_x$, $\hat{p}_y$, $\hat{p}_z$ могут быть выбраны в виде

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}; \quad \hat{p}_y = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}; \quad \hat{p}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z}; \quad \hat{p} = \frac{\hbar}{i}\nabla. \tag{20,4}$$

Таким образом, оператор компоненты импульса сводится к дифференцированию по соответствующей координате. Множитель i обеспечивает эрмитовость оператора $\hat{p}$. Прежде чем перейти к построению операторов, отвечающих квантовомеханическим величинам, более последовательным методом, рассмотрим два принципиальных вопроса: вопрос о смысле собственных функций операторов и о возможности одновременного измерения двух квантовомеханических величин.

§ 21. Волновая функция и вероятность результатов измерений

Пусть $\hat{F}$ представляет некоторый квантовомеханический оператор, для которого можно написать:

$$\hat{F}\psi_n = F_n\psi_n.$$

Для определенности будем считать, что оператор $\hat{F}$ имеет дискретный спектр собственных значений F_n и каждому из них отвечает одна собственная функция ψ_n (спектр невырожденный). Поскольку собственные функции ψ_n образуют полную систему функций, волновую функцию ψ можно разложить в ряд

$$\psi = \sum_n c_n\psi_n. \tag{21,1}$$