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 $\psi_n$ (спектр невырожденный). Поскольку собственные функции $\psi_n$ образуют полную систему функций, волновую функцию $\psi$ можно разложить в ряд

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

На основании принципа суперпозиции мы можем заключить, что состояние системы, описываемое волновой функцией $\psi$, может быть представлено в виде суперпозиции состояний с определенными значениями $F_n$ физической величины $F$.

Амплитуда $c_m$ в разложении (21,1) показывает, с каким весом в состоянии $\psi$ представлено состояние $\psi_m$. Иными словами, амплитуда $c_m$ характеризует вероятность того, что при измерениях величины $F$, производимых над системой, находящейся в состоянии с волновой функцией $\psi$, будет обнаружено значение, равное $F_m$. В квантовой механике принимается, что указанная вероятность равна квадрату модуля амплитуды разложения $|c_m|^2$. Таким образом, если мы хотим найти вероятность того, что при измерениях, производимых над системой в состоянии $\psi$, для физической величины $F$ будет найдено значение $F_m$, следует разложить волновую функцию $\psi$ по собственным функциям оператора $\hat{F}$. Квадрат модуля соответствующей амплитуды разложения $|c_m|^2$ дает искомую вероятность. Если величина $F$ изменяется непрерывно (сплошной спектр), то можно говорить о вероятности того, что при измерении будет получено значение $F$, лежащее в интервале между $F$ и $F + dF$. Соответствующая вероятность дается выражением

$$dW = |c(F)|^2 dF. \tag{21,2}$$

Так, при разложении $\psi$ по плоским волнам (см. § 3) квадрат модуля соответствующей амплитуды разложения дает вероятность того, что при измерении получится некоторое заданное значение импульса.

Вероятности измерений заданных значений величины $F$, определенные, как это указано выше, удовлетворяют соотношениям:

$$\left.\begin{aligned} \sum_n |c_n|^2 = 1, \\ \int |c(F)|^2 dF = 1 \end{aligned}\right\} \tag{21,3}$$

(при условии, что волновая функция $\psi$ является квадратично-интегрируемой, а собственные функции оператора $\hat{F}$ нормированы условием (18,7) или (18,12)).

Докажем в виде примера последнее из этих соотношений. Пользуясь (19,5) и (19,6), получаем

$$\int c^*(F) c(F)\, dF = \int c^*(F)\, dF \int \psi_F^*(x) \psi(x)\, dV =$$
$$= \int \psi(x)\, dV \int c^*(F) \psi_F^*(x)\, dF = \int \psi(x) \psi^*(x)\, dV = 1. \tag{21,4}$$

Совокупность амплитуд $c_n$ (или $c(F)$ в случае сплошного спектра) полностью определяет волновую функцию $\psi$. Поэтому задание амплитуд разложения волновой функции по собственным функциям какого-либо оператора эквивалентно заданию самой волновой функции.

В связи с этим часто применяется следующая терминология. Волновая функция $\psi(x)$ называется волновой функцией, заданной в координатном представлении ($x$-представлении); совокупность всех амплитуд $c(F)$ называют волновой функцией в $F$-представлении. В этом смысле соотношения (19,5) и (19,6) следует считать совершенно симметричными. Соотношение (19,5) выражает разложение волновой функции $\psi$, взятой в координатном представлении, по собственным функциям $\psi_F(x)$ оператора $\hat{F}$, взятым также в $x$-представлении. Амплитуды разложения $c(F)$ представляют волновую функцию в $F$-представлении. С другой стороны, соотношение (19,6) выражает разложение волновой функции $c(F)$, взятой в $F$-представлении, по функциям $\psi_F^*(x)$, которые имеют смысл собственных функций оператора координаты, взятых в $F$-представлении (ср. (48,19)). Амплитуды разложения $\psi(x)$ представляют собой волновую функцию в $x$-представлении. Мы будем говорить также, что некоторый оператор $\hat{D}$ задан в $F$-представлении, если он воздействует на функцию, заданную в $F$-представлении, например, $\hat{D}c(F) = b(F)$. С этой точки зрения, сформулированное нами утверждение, что $|c(F)|^2 dF$ равно вероятности обнаружить систему в состоянии с заданным значением $F$, становится почти очевидным. Действительно, $|\psi(x)|^2 dx$ есть вероятность того, что координата частицы лежит в интервале $dx$. Ввиду равноправия $x$- и $F$-представлений $|c(F)|^2 dF$ естественно трактовать как вероятность того, что измерение величины $F$ приведет к ее значению, лежащему в интервале между $F$ и $F + dF$.

## § 22. Средние значения

Предположим, что состояние системы описывается волновой функцией $\psi(x)$, которая не является собственной функцией оператора $\hat{F}$, отвечающего квантовомеханической величине $F$. Как мы уже выяснили выше, это означает, что в данном состоянии величина $F$ не имеет определенного значения. При измерениях, производимых над системой, может с известной вероятностью получиться любое собственное значение $F_n$. В связи с этим естественно попытаться найти среднее значение величины $F$ в данном состоянии. Под средним мы, как всегда, понимаем математическое ожидание (среднее арифметическое) данной величины.