Совокупность амплитуд c_n (или $c(F)$ в случае сплошного спектра) полностью определяет волновую функцию ψ. 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 ψ, 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 $|c(F)|^2dF$ равно вероятности обнаружить систему в состоянии с заданным значением F, становится почти очевидным. Действительно, $|\psi(x)|^2dx$ есть вероятность того, что координата частицы лежит в интервале dx. Ввиду равноправия x- и F-представлений $|c(F)|^2dF$ 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.

Рассмотрим ансамбль, т. е. большое число совершенно одинаковых экземпляров системы. Каждая из этих систем описывается одной и той же волновой функцией ψ. Будем производить измерение величины F в каждой из систем. Среднее значение, полученное в совокупности этих измерений, мы и будем именовать средним значением величины F. По общим формулам теории вероятностей (см. § 3 ч. III) мы можем написать:

$$\overline{F} = \sum_n W_n F_n, \tag{22,1}$$

где W_n — вероятность получить при измерении величины F собственое значение F_n. Используя выражения для вероятностей W_n, полученные нами в предыдущем параграфе, имеем для случая дискретного спектра

$$\overline{F} = \sum_n |c_n|^2 F_n \tag{22,2}$$

или, если оператор $\hat{F}$ обладает сплошным спектром,

$$\overline{F} = \int |c(F)|^2 F\,dF. \tag{22,3}$$

Эти формулы можно преобразовать так, чтобы вместо амплитуд разложения волновой функции по собственным функциям оператора $\hat{F}$ они содержали непосредственно волновую функцию $\psi(x)$ (преобразовать в координатное или любое другое представление). Для определенности предположим, что оператор $\hat{F}$ обладает дискретным спектром (в случае непрерывного спектра формулы преобразования выводятся аналогичным образом). Используя выражение для амплитуд (19,2), получаем:

$$\overline{F} = \sum_n c_n^* c_n F_n = \sum_n c_n F_n \int \psi_n(x)\psi^*(x)\,dV.$$

Так как собственные функции $\psi_n(x)$ удовлетворяют уравнению

$$\hat{F}\psi_n(x) = F_n\psi_n(x),$$

то последнее соотношение можно переписать в виде

$$\overline{F} = \sum_n c_n \int \psi^* \hat{F}\psi_n\,dV = \int dV \psi^* \hat{F} \sum_n c_n\psi_n.$$

Учитывая (21,1), получаем окончательно

$$\overline{F} = \int \psi^* \hat{F}\psi\,dV. \tag{22,4}$$

Отметим, что это выражение должно быть написано в несколько более общем виде, если волновая функция ψ не нормирована на единицу. В этом случае

$$\overline{F}=\frac{\int \psi^* \hat{F}\psi \, dV}{\int \psi^*\psi \, dV}. \tag{22,5}$$

Если волновая функция ψ является собственной функцией оператора $\hat{F}$ $\hat{F}\psi = F_m\psi$, то величина F имеет вполне определенное значение, равное собственному значению F_m. При этом, как и следовало ожидать, среднее значение величины F совпадает с этим собственным значением $\overline{F} = F_m$.

Соотношение (22,4) может быть исходным при подборе оператора, отвечающего данной физической величине. Так, из него сразу следует, что в координатном представлении оператор координаты сводится к умножению на эту координату.

Действительно, исходя из физического смысла волновой функции, мы можем написать выражение для среднего значения координаты в виде

$$\bar{x} = \int |\psi|^2 x \, dV = \int \psi^* x \psi \, dV. \tag{22,6}$$

Сравнивая это выражение с (22,4), мы видим, что оператор координаты $\hat{x}$ сводится к умножению на координату x. Аналогичным образом, если мы имеем произвольную функцию от координат $U(x, y, z)$, то ее среднее значение дается выражением

$$\overline{U(x,\ y,\ z)} = \int |\psi|^2 U(x,\ y,\ z)\, dV = \int \psi^* U \psi \, dV. \tag{22,7}$$

Из этого выражения следует, что оператор произвольной функции от координат, взятый в координатном же представлении, сводится к умножению на эту функцию. Это, конечно, отвечает сделанному нами ранее утверждению. Вообще оператор, отвечающий физической величине F, в своем собственном F-представлении сводится к умножению на величину F. Это общее утверждение легко пояснить так же, как мы сделали на примере координаты. Среднее значение величины F, полученное с помощью функций $c(F)$, т. е. волновой функции в F-представлении, дается формулой

$$\overline{F} = \int |c(F)|^2 F \, dF = \int c^*(F) F c(F) \, dF.$$

С другой стороны, общее выражение для среднего через оператор $\hat{F}$, взятый в F-представлении, должно иметь вид

$$\overline{F} = \int c^*(F) \hat{F} c(F) \, dF.$$

Сравнивая эти выражения, мы видим, что оператор $\hat{F}$ в своем собственном представлении сводится к умножению на F.