принадлежащие различным значениям энергии E_n. Система функций ψ_n является полной, и по ней может быть разложено общее решение уравнения (6.2).

Из примеров видно, что в стационарных состояниях энергия принимает значения, собственные для некоторого оператора. Забегая вперед, скажем, что определенные значения физической величины — это спектр собственных значений ее оператора.

§ 8. АКСИОМАТИКА КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

8.1. Математический аппарат квантовой механики. В каждой фундаментальной физической теории применяются свои специфические математические средства — математический аппарат. В классической механике это векторы и дифференциальные уравнения, в электродинамике добавляется векторный анализ. В квантовой механике математический аппарат заимствован из математической теории линейных самосопряженных операторов. (С элементами этой теории читатель познакомился в предыдущем параграфе.)

Применение математического аппарата в квантовой механике основано на нескольких постулированных утверждениях; опираясь на них, можно хотя бы в принципе решить все конкретные задачи. В данном параграфе рассматривается часть этих положений, далее по мере необходимости к ним добавится еще несколько постулатов.

Ниже даются такие формулировки, чтобы в дальнейшем их можно было использовать как для изучения одной частицы, так и системы частиц. (Однако в тексте параграфа слово «система» применяется главным образом к простейшему объекту — микрочастице, находящейся во внешнем потенциальном поле. Распространение всех понятий и законов на системы нескольких частиц обсуждается в главе V.)

Обратим внимание читателя на то, что изложение физических теорий, как правило, отличается от чисто дедуктивных математических построений: в них обычно не выделяется минимальный и полный перечень аксиом. Физика всегда апеллирует к опыту и опирается на оптимальную, т. е. наиболее удобную для практики, систему аксиом.

8.2. Операторы и допустимые значения физических величин. Мы уже видели на примере решения простейших задач квантовой механики, что энергия микросистем принимает *дискретные значения*, т. е. определенным образом *квантуется*. Это значит, что использовать для энергии и ряда других физических величин просто вещественные (действительные) числа или векторы, как это делалось в классической механике и электродинамике, нельзя: не все точки числовой оси для энергии допустимы (например, см. задачу о гармоническом осцилляторе). Связь между физической величиной и ее математической моделью устанавливается постулатом: *в квантовой механике основным физическим величинам сопоставляются линейные самосопряженные операторы.*

Обычно оператор обозначается той же буквой, что и величина в классической физике.

Исходным являются операторы координаты и импульса. *Посту-*

лируется, что оператор координаты x есть действие умножения на эту переменную:

$$\hat{x}=x.$$

Оператор проекции импульса $\hat{p}_x$ выражается формулой

$$\hat{p}_x=-ih\frac{\partial}{\partial x}. \tag{8.1}$$

Операторы других физических величин можно найти, руководствуясь простым правилом, вытекающим из принципа соответствия между классической и квантовой физикой: *соотношения между операторами физических величин такие же, как и между этими величинами в классической физике* (если в результате действий получается самосопряженный оператор).

Правило позволяет сразу написать формулы для операторов важнейших механических величин:

радиус-вектор

$$\hat{\vec{r}}=\vec{i}\hat{x}+\vec{j}\hat{y}+\vec{k}\hat{z}=\vec{r}, \tag{8.1-1}$$

импульс

$$\hat{\vec{p}}=\vec{i}\,\hat{p}_x+\vec{j}\,\hat{p}_y+\vec{k}\,\hat{p}_z=-i\hbar\nabla, \tag{8.1-2}$$

момент импульса

$$\widehat{\vec{L}}=[\hat{\vec{r}}\,\hat{\vec{p}}]=-i\hbar[\vec{r}\nabla], \tag{8.1-3}$$

кинетическая энергия

$$\widehat{T}=\frac{\hat{p}^2}{2m}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta, \tag{8.1-4}$$

потенциальная энергия

$$\widehat{U}=U(\vec{r},\,t)=U(x,\,y,\,z,\,t), \tag{8.1-5}$$

полная механическая энергия

$$\widehat{H}=\widehat{T}+\widehat{U}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+U(x,\,y,\,z,\,t). \tag{8.1-6}$$

Оператор полной энергии называется *оператором Гамильтона* или *гамильтонианом*. Он обозначается символом $\widehat{H}$, так как в общем случае это квантовый аналог классической функции Гамильтона. Далее мы увидим, что оператор Гамильтона играет особо важную роль, ибо его собственные функции оказываются волновыми функциями стационарных состояний. Кроме того, он входит в основное уравнение квантовой механики — уравнение Шредингера.

Связь между оператором и наблюдаемыми при измерениях значениями физической величины дается постулатом: *физическая величина может принимать те и только те значения, которые совпадают с собственными значениями ее оператора.*

Пример 8.1. **Собственные функции и собственные значения оператора импульса.**

Имеем уравнение

$$\hat{p}_x \varphi(x) = p_x \varphi(x),$$

или

$$-i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial x} = p_x \varphi.$$

Произведем разделение переменных:

$$\frac{d\varphi}{\varphi} = \frac{i}{\hbar} p_x dx.$$

Отсюда

$$\ln \varphi = \frac{i}{\hbar} p_x x + \ln C$$

и

$$\varphi = C e^{\frac{i}{\hbar} p_x x}.$$

Коэффициент C определяется условием нормировки на δ-функцию, после чего

$$\varphi = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} p_x x}. \tag{8.2}$$

Чтобы функции (8.2) были всюду ограничены, значения p_x должны быть действительными числами. Отсюда видно, что спектр оператора проекции импульса — это совокупность всех действительных чисел.

Пример 8.2. **Собственные функции и собственные значения оператора координаты x.**

Уравнение

$$\hat{x} \varphi_{x_0}(x) = x_0 \varphi_{x_0}(x)$$

не имеет решений среди обычных функций. Исходя из свойств δ-функции легко проверить выполнение символического равенства

$$x\delta(x - x_0) = x_0 \delta(x - x_0).$$

Действительно,

$$\int x \delta(x - x_0)\, dx = x_0 \int \delta(x - x_0)\, dx = x_0.$$

Поэтому собственные функции оператора x суть $\varphi_{x_0}(x) = \delta(x - x_0)$, где x_0 — любое действительное число.

Вид оператора импульса и операторов ряда других величин не зависит от свойств частиц и тех физических условий, в которых происходит их движение. Поэтому спектр этих операторов всегда один и тот же. Но вид оператора Гамильтона и его собственные значения различны для различных частиц и зависят от вида силового поля, действующего на частицы.

В связи с вопросом об операторах физических величин важно заметить, что не все физические величины представлены операторами. Такие характеристики микрочастицы, как масса, электрический заряд, важнейшие физические постоянные в нерелятивистской квантовой механике являются не операторами, а вещественными числами, входящими в формулы и уравнения в качестве параметров. Можно сказать, что *величина, построенная по принципу соответствия из операторов координат и импульса, сама есть оператор.* В противном случае (в нашем курсе за исключением не имеющейся в классической физике величины — спина микрочастицы) это число.

8.3. Описание состояния квантовой системы и его изменения со временем. Следующий постулат относится к функциям, которые мы ранее назвали волновыми или функциями состояния.

Наиболее полное описание состояния квантовой системы достигается заданием соответствующей этому состоянию волновой функции.

В ней заключена вся информация *о* системе. Функция состояния позволяет определить плотность вероятности для положения частицы (или совокупности частиц) в пространстве и ее изменение во времени. С помощью волновой функции осуществляется расчет возможных результатов физических экспериментов и измерений физических величин, определяются средние значения физических величин в заданном состоянии и извлекается другая информация. Изменение волновой функции со временем отражает эволюцию состояния квантовой системы под действием внешних сил.

Для определения функции состояния в каждом конкретном случае микросистемы и взаимодействия в ней или с внешними объектами постулируется основное уравнение.

Основным уравнением квантовой механики является уравнение Шредингера:

$$ih\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi. \tag{8.3}$$

Записанное в таком виде уравнение пригодно для любых квантовых объектов. В зависимости от того, изучается ли отдельная частица, атом или кристалл в целом — изменяется вид оператора Гамильтона $\hat{H}$, структура же уравнения остается одной и той же. С частным случаем уравнения Шредингера мы уже знакомились раньше. Подставляя в уравнение (8.3) гамильтониан (8.1—6), получаем уравнение (3.1).

Можно говорить об аналогии между основной задачей классической механики — по силовому полю с помощью второго закона Ньютона найти кинематическое уравнение движения материальной точки $\vec{r}=\vec{r}(t)$ — и основной задачей квантовой механики — по заданному гамильтониану системы с помощью уравнения Шредингера найти функцию состояния $\psi(\vec{r}, t)$.

Оператор Гамильтона характеризует микросистему с динамической стороны; его вид зависит от масс частиц, их электрических зарядов, взаимодействия между ними. Ему принадлежит особая роль в квантовой механике, ибо знание гамильтониана необходимо для составления основного уравнения. В принципе гамильтониан должен быть задан в конкретных задачах квантовой механики подобно тому, как задаются сила в классической механике при использовании уравнения второго закона Ньютона или же функции Лагранжа и Гамильтона при использовании соответствующих уравнений аналитической механики. В ряде случаев гамильтонианы строят по принципу соответствия, используя классические выражения и заменяя в них координаты и импульсы на соответствующие операторы.

Волновые функции — решения уравнения Шредингера — являются комплексными функциями вещественных переменных. Аргументы волновой функции — координаты частиц и время, причем

для многих действий над функциями время является параметром. Если силовое поле стационарно, то уравнение (8.3) допускает решения вида

$$\psi(x, y, z, t)=\varphi(x, y, z)\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et}.$$

Координатная часть функции состояния $\varphi(x, y, z)$ является собственной функцией гамильтониана, т. е. удовлетворяет уравнению

$$\widehat{H}\varphi_E=E\varphi_E. \tag{8.4}$$

Поэтому действительная величина E является полной энергией системы.

Уравнение (8.4) называется *стационарным* уравнением Шредингера. Подставляя в него гамильтониан (8.1), получаем уравнение (3.7), с помощью которого выше изучались стационарные состояния одной частицы в потенциальных полях простейшего вида.

Пример 8.3. **Собственные функции и собственные значения оператора Гамильтона для свободной частицы.**

Энергия свободной частицы описывается оператором: $\widehat{T}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$; следовательно, вместо (8.4) имеем

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

Решение этого уравнения найдено в гл. I, § 3, п. 5:

$$\varphi=Ce^{i\vec{k}\vec{r}},$$

где $k=\frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}$. Решение имеет смысл при всех положительных значениях E. Таким образом, φ — собственные функции оператора $\widehat{T}$ с непрерывным спектром (положительных) собственных значений: $0<E<\infty$.

Пример 8.4. **Собственные функции и собственные значении оператора Гамильтона для осциллятора.**

Оператор Гамильтона в данном случае имеет вид

$$\widehat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{m\omega^2x^2}{2}.$$

Уравнение (8.4) при подстановке в него этого оператора конкретизируется:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{m\omega^2x^2}{2}\psi=E\psi.$$

Но это уже решенное ранее уравнение (6.2); собственные функции оператора $\widehat{H}$ — умноженные на экспоненту полиномы Чебышева — Эрмита (6.16), а спектр его собственных значений определяется формулой (6.18): $E_n=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$, $n=0, 1, 2, \ldots$

Поскольку уравнение (8.4) есть уравнение в частных производных, то его конкретное решение ψ существенно зависит от граничных условий. Так, дискретный характер спектра энергии состояний во многих случаях определяется требованием затухания ψ-функции на бесконечности.

В случае нестационарного поля общее решение уравнения (8.3) есть некоторая функция времени. Для ее определения необходимо знание начального условия, т. е. вида волновой функции в на-

чальный момент времени. Дальнейшая эволюция состояния определяется уравнением Шредингера через найденную в процессе его решения зависимость: $\psi = \psi(t)$.

8.4. Вероятности отдельных значений физической величины. Состояние квантовой системы описывается волновой функцией, но это еще не говорит о том, какими значениями физических величин система характеризуется. До измерения такой информации не существует. Результат же измерения не всегда однозначен. Обнаружение на опыте того или иного значения физической величины в некоторых случаях является случайным событием. Тогда и говорят, что *величина не имеет определенного значения.* Однако можно теоретически заранее рассчитать вероятность или частоту появления данного значения при многократных измерениях, располагая функцией состояния. Она определяется постулатом: *вероятность того, что при измерении получится значение a_i физической величины A, равна квадрату модуля соответствующего коэффициента Фурье в разложении волновой функции в ряд или интеграл Фурье по собственным функциям оператора этой физической величины.*

Пусть ψ — волновая функция частицы. Чтобы рассчитать искомые вероятности, представим ее в виде ряда

$$\psi(x) = \sum_i C_i \varphi_i(x),$$

где φ_i — собственные функции оператора $\widehat{A}$, имеющего дискретный спектр. Тогда вероятность получения a_i есть

$$W_i = C_i^* C_i = |\int \varphi_i^* \psi \, dx|^2. \tag{8.5}$$

В случае непрерывного спектра волновая функция разлагается в интеграл Фурье. Если $\varphi(a, x)$ — собственная функция, то

$$\psi(x) = \int C(a) \varphi(a, x) \, da.$$

Поскольку теперь имеется непрерывное множество значений величины A, то в строгом смысле слова нельзя говорить о вероятностях отдельных значений. Речь идет только об элементарной вероятности $dW(a)$ попадания значения величины в интервал от a до $a + da$. По формуле теории вероятностей имеем

$$dW(a) = w(a) \, da.$$

Здесь плотность вероятности, или дифференциальная функция распределения вероятностей $w(a)$, равна квадрату модуля коэффициента $C(a)$:

$$w(a) = C^*(a) C(a) = |\int \varphi^*(a, x) \psi(x) \, dx|^2.$$

Нетрудно заметить, что определенного значения у величины нет, если функция состояния не является собственной для оператора этой величины. Особый случай возникает, если волновая функция совпадает с какой-нибудь собственной функцией оператора. Пусть $\widehat{A}\varphi_i = a_i \varphi_i$. Если $\psi(x) = \varphi_i(x)$, то $C_i = 1$, а все $C_{k \neq i} = 0$. Тогда при измерении получается только одно значение a_i. Следовательно,

частица находится в состоянии с *определенным* значением величины A.

Иногда уже по виду волновой функции можно указать значение некоторой величины в данном состоянии. Так, волновая функция свободного движения e^{ikx} совпадает с собственной функцией оператора $\hat{p}_x$, если $k=\frac{p_x}{\hbar}$ (см. выражение (8.2)). Поэтому она описывает состояние с заданным импульсом.

Пример 8.5. **Нахождение вероятности значения величины в дискретном спектре.**

Задано состояние частицы в потенциальной яме следующей волновой функцией:

$$\psi=\sqrt{\frac{2}{3}}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi x}{a}e^{-\frac{i}{\hbar}E_1t}+\sqrt{\frac{1}{3}}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{2\pi x}{a}e^{-\frac{i}{\hbar}E_2t}$$

Коэффициенты разложения по ортонормированным функциям $\varphi_i=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi xi}{a}$, $i=1, 2, 3, \ldots$, есть $C_1=\sqrt{\frac{2}{3}}$, $C_2=\sqrt{\frac{1}{3}}$. Поэтому вероятность обнаружения значения энергии частицы $E_1=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$ составляет $\frac{2}{3}$, а значения $E_2=\frac{4\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$ составляет $\frac{1}{3}$ (см. формулу (5.8)).

Пример 8.6. **Нахождение вероятности значения величины в непрерывном спектре.**

Если функция состояния ψ не совпадает ни с одной собственной функцией оператора $\hat{p}_x$, то в данном состоянии импульс не имеет определенного значения. Запишем разложение волновой функции в интеграл Фурье по собственным функциям оператора $\hat{p}_x$:

$$\psi=\int\limits_{-\infty}^{\infty}C(p_x)\,e^{\frac{i}{\hbar}(p_xx-Et)}dp_x. \tag{8.6}$$

Таким образом, произвольное состояние одномерного движения представляется в виде линейной комбинации состояний с определенными значениями импульса. При измерении действие прибора на частицу выделит одну компоненту из суперпозиции состояний (8.6). Какую именно, заранее указать нельзя. Взаимодействие с измерительным прибором описывается только статистически. Коэффициент $C(p_x)$, с которым состояние с импульсом p_x входит в интеграл (8.6), рассматривается в качестве меры потенциальных возможностей для частицы проявить себя как объект с импульсом p_x.

Пример 8.7. **Вероятность значения координаты микрочастицы.**

Под общее правило нахождения вероятностей отдельных значений физических величин подпадает и определение вероятности для положения частицы. Собственные функции оператора x были найдены ранее, в § 8, п. 2. Если

$$\psi(x')=\int C(x)\,\delta(x-x')\,dx,$$

то

$$C(x)=\int\psi(x')\,\delta(x-x')\,dx'=\psi(x).$$

Тогда плотность вероятности для координаты x равна: $|C(x)|^2=|\psi(x)|^2$, что совпадает с определением плотности вероятности (2.2).

8.5. Вычисление средних значений физических величин. В случае, когда величина определенного значения не имеет, определяют

среднее значение достаточно большого числа измерений:

$$\bar{a}=\frac{\sum_{k=1}^{n} a_k}{n}.$$

Для вычисления среднего значения физической величины на основе теории достаточно знать функцию состояния частицы. (Предполагается, что вид оператора этой величины известен.) Если a_i — собственные значения оператора $\hat{A}$ и W_i — вероятности их обнаружения, то по теореме о среднем из теории вероятностей

$$\bar{a}=\sum_i W_i a_i.$$

(Для простоты рассматриваем случай дискретного спектра.) Используя формулу для расчета вероятностей (8.5), получаем

$$\bar{a}=\sum_i a_i C_i^* C_i=\sum_i a_i C_i \int \varphi_i \psi^* dx,$$

где ψ — волновая функция частицы, а φ_i — собственные функции оператора $\hat{A}$. Согласно (7.5)

$$\hat{A}\varphi_i=a_i\varphi_i,$$

поэтому

$$\bar{a}=\sum_i C_i \int \psi^* (a_i\varphi_i)\, dx=\sum_i C_i \int \psi^* (\hat{A}\varphi_i)\, dx.$$

Учитывая линейность оператора $\hat{A}$ и равенство $\psi=\sum_i C_i\varphi_i$, получаем

$$\sum_i C_i \int \psi^* (\hat{A}\varphi_i)\, dx=\int \psi^* (\hat{A}\sum_i C_i \varphi_i)\, dx=\int \psi^*\hat{A}\psi dx.$$

Итак,

$$\bar{a}=\int \psi^* (x)\, \hat{A}\psi (x)\, dx. \qquad (8.7)$$

Вычисление средних имеет важное значение при изучении микромира. Когда в рассматриваемом состоянии физическая величина не имеет определенного значения, среднее значение в какой-то мере характеризует состояние.

Понятно, что если $\psi=\varphi_i$, то

$$\bar{a}=\int \psi^* (x)\, \hat{A}\psi (x)\, dx=a_i \int \varphi_i^*\varphi_i\, dx=a_i.$$

В заключение вопроса заметим следующее. В стационарном состоянии

$$\psi (x,\ t)=\varphi (x)\, e^{-iwt}.$$

Если оператор физической величины не содержит времени, то его собственные функции и собственные значения также не зависят от времени. Поэтому в стационарных состояниях распределение ве-

роятностей для значений рассматриваемой величины также оказывается стационарным, независящим от времени. Постоянно и среднее значение. Для доказательства достаточно подставить в выражения (8.5) и (8.7) волновую функцию стационарного состояния и учесть, что временные множители за счет комплексного сопряжения при умножении дают единицу.

Пример 8.8. **Вычисление среднего значения величины.**

Найдем среднее значенне координаты, энергни и импульса для частицы в потенциальной яме. Используя функцию состояния (5.7), соответствующне операторы и формулу (8.7), имеем

$$\bar{x}=\int_0^a\left(\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi nx}{a}\right)^2 x\,dx=\frac{a}{2},$$

$$\bar{E}=\int_0^a\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi nx}{a}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi nx}{a}\right)dx=\frac{\pi^2\hbar^2n^2}{2ma^2},$$

$$\bar{p}=\int_0^a\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi nx}{a}\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi nx}{a}\right)dx=0.$$

Истолкование результатов очевидно: по графикам плотности вероятности (см. рис. 5.2) усматривается нх снмметрия относительно средней точкн ямы, что и приводнт к найденному среднему значенню координаты. Энергия нмеет определенное значение, а импульс с равной вероятностью направлен н вправо, н влево.

Пример 8.9. **Обоснование выбора операторов координаты и импульса с помощью формулы среднего значения.**

Выбор нсходных операторов $\hat{x}$ и $\hat{p}_x$, определенный аксномамн (§ 8, п. 2), не является случайным. Он согласован со статнстической трактовкой функции состояния. В самом деле, выражение для среднего значения координаты

$$\bar{x}=\int w(x)\,x\,dx$$

можно записать в форме (8.7):

$$\bar{x}=\int\psi^*\hat{x}\psi\,dx,$$

откуда и вытекает, что $\hat{x}=x$.

Для получения оператора импульса разложим произвольную функцию состояния по плоским волнам (фиксируя момент времени):

$$\psi(x,\,t)=\int\varphi(p,\,t)\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}px}\,dp,$$

коэффицненты разложення обозначены через $\varphi(p,\,t)$. В соответствии с постулатом § 8, п. 4 величина $\varphi^*\varphi$ выражает плотность вероятности значений импульса в состоянии $\psi(x,\,t)$, поэтому можно найти среднее значение импульса:

$$\bar{p}=\int\varphi^*(p)\,\varphi(p)\,p\,dp. \tag{8.7а}$$

Так как параметры $\varphi(p)$ являются коэффицнентами разложения функцни $\psi(x)$ в ннтеграл Фурье, то они вычисляются по формуле

$$\varphi(p)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int\psi(x)\,e^{-\frac{i}{\hbar}px}\,dx. \tag{8.7б}$$

Подставляя значения $\varphi(p)$ нз соотношения (8.7б) в формулу (8.7а), после вычислений приходим к равенству

$$\bar{p}=\int\varphi^*(p)\,p\varphi(p)\,dp=\int\psi^*(x)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x)\,dx,$$

откуда и следует, что оператор импульса (проекция на ось Ox) выражается формулой

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}. \tag{8.8}$$

Таким образом, трактовка волновой функции, гипотеза де Бройля, принцип соответствия между классической и квантовой механикой определяют виды операторов в математическом формализме теории.

8.6. Коммутация операторов — условие существования определенных значений двух физических величин в одном и том же состоянии системы. Пусть заданы операторы двух физических величин $\widehat{A}$ и $\widehat{B}$. Достаточным условием для существования определенных значений их является наличие общей собственной функции, совпадающей с функцией состояния системы:

$$\widehat{A}\psi = a\psi, \tag{8.9}$$

$$\widehat{B}\psi = b\psi. \tag{8.10}$$

Выясним связь между операторами в этом случае. Действуя на обе части равенства (8.9) оператором $\widehat{B}$, а на (8.10) — оператором $\widehat{A}$, получим

$$\widehat{B}\widehat{A}\psi = ab\psi,$$

$$\widehat{A}\widehat{B}\psi = ba\psi.$$

Отсюда следует, что $\widehat{A}\widehat{B} = \widehat{B}\widehat{A}$, т. е. *операторы коммутируют.*

Коммутирующие операторы имеют общие собственные функции (см. § 7, п. 3), т. е. условие коммутации двух операторов также и необходимо для существования определенных значений соответствующих величин.

Итак, *если операторы коммутируют, то возможно существование одновременно измеримых точных значений соответствующих величин.*

Пример 8.10. **Коммутация оператора импульса и кинетической энергии.** Выполнением действий убеждаемся, что

$$\hat{p}\widehat{T} = \widehat{T}\hat{p},$$

откуда следует совместная измеримость этих двух величин. Так, в свободном состоянии у микрочастицы определенные значения имеют импульс и энергия.

Пример 8.11. **Вычисление коммутатора для координаты и импульса.** Коммутатор

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}x\right).$$

Поэтому

$$[\hat{x}, \hat{p}_x]\varphi = -i\hbar\left(x\frac{\partial\varphi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}x\varphi\right) = i\hbar\varphi.$$

Отсюда видно, что

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar,$$

операторы $\hat{x}$ и $\hat{p}_x$ *не коммутируют*. Значит, не существует состояний, в которых были бы вместе точно заданы координата x и проекция импульса p_x. (Это положение отражено также в соотношениях неопределенностей.)

Свойство коммутативности не является транзитивным. Если $\widehat{A}$ коммутирует с $\widehat{B}$ и $\widehat{C}$, то это не значит, что $\widehat{B}$ и $\widehat{C}$ коммутируют между собой. Поэтому несколько величин могут вместе иметь определенные

значения, если только операторы этих величин попарно коммутируют.

Пример 8.12. **Измерение трех величин.**

Из операторов $\hat{p}$, $\hat{T}$, $\hat{H}$ коммутируют между собой только $\hat{p}$ и $\hat{T}$. Для других пар коммутаторы не равны нулю. Поэтому состояний с определенными значениями импульса, кинетической энергии и полной энергии не существует, за исключением случая свободной частицы, когда $\hat{H}=\hat{T}$.

В квантовой теории используется понятие *полного набора* физических величин, которые для данной системы могут иметь одновременно определенные значения. Например, для свободного движения одной частицы — это импульс и энергия. Задание полного набора однозначно определяет волновую функцию системы. Это можно понять из следующих рассуждений. Волновая функция есть решение уравнения Шредингера. Последнее же представляет собой не одну, а целое семейство функций. Выбор из них делается с помощью заданного набора величин.

В полный набор не могут входить все величины, характеризующие состояния соответствующих классических систем. Существуют, например, состояния с заданными моментами импульса и полной энергией. Однако в таких состояниях нельзя указать точные значения для координат частицы, ее потенциальной энергии. Поэтому говорят, что полный набор охватывает не более половины тех параметров, которыми характеризуются состояния классических систем. Следует учесть, однако, что в квантовой физике имеются и такие величины, как, например, спин и четность, которые вообще не имеют аналогов в классической физике.

8.7. О связи математического аппарата квантовой механики с опытом и классической механикой. Аксиоматическое определение связи операторов с измеряемыми значениями физических величин, постулирование вида самих операторов и основного уравнения квантовой механики, выполненные выше, в § 7 и 8, могут привести к представлениям о каком-то произволе в этой теории, отрыве ее исходных положений от эксперимента. На самом деле это не так: в квантовой механике отталкиваются от экспериментальных фактов, как и в других разделах физики, хотя связь между измерением и символом физической величины здесь не такая непосредственная, как в классической физике.

Обсудим математическую природу физических величин несколько подробнее. Физическая величина есть количественная характеристика свойств физического объекта. В простейшем случае физические свойства исчерпываются положительными действительными числами. Таковы, например, масса, длина, объем тела. Величины: температура, теплота, смещение по траектории и др.— принимают положительные и отрицательные значения. Имеются также величины (ускорение, скорость, сила и др.) — векторные, и для каждого значения такой величины нужно получить при измерении три числа.

Сказанное позволяет заключить, что различные свойства физических объектов отображаются различными математическими средствами. При этом известных нам средств, используемых в макромире — чисел, векторов, тензоров,— для описания микромира оказывается недостаточно, и на сцену выходят операторы, сопоставляемые физическим величинам. Ранее говорилось, что любое измерение в микромире производится макроскопическим прибором (см. § 4, п. 4) и приводит, как и в макромире, к некоторому действительному числу. Числа, полученные при измерениях, становятся конкретными значениями скалярных величин, проекциями векторов, собственными значениями операторов с помощью тех или иных формул.

Но не всякая величина, характеризующая микрочастицы, выражается опера-

тором. Записывая сами операторы, мы используем некоторые значения физических велнчин, играющих роль параметров в решаемых задачах. Таковы масса, заряд, момент инерцни частицы, физические постоянные — c, $\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}$, h и др., входящие в формулы операторов. Эти же параметры входят в уравнение Шредингера и вытекающие из него соотношения. Перечисленные сейчас велнчины находятся эксперимментально и имеют определенные значения.

Особо следует остановиться на координатах точки пространства и момента времени, являющихся аргументами функции состояния. Квантовая механика пользуется общей с другнми фундаментальнымн теориями моделью пространства — времени: пространство непрерывно, однородно, нзотропно, евклидово, время непрерывно и однородно (см. введение, ч. I, § 2). Система отсчета в квантовой теории ннерциальна. Это означает, что, задавая функцню состояння микрочастнцы, мы исходнм из точных значений координат x, y, z каждой точки пространства и момента времени t (разумеется, в пределах достигнутой при измерениях точностн). Иными словами, *координаты точки пространства* н *момента времени* в теории (нерелятивистской) имеют определенные значения.

Состояния с неопределенiями значениями величин обусловлены квантовым характером взаимодействия в микромире и отражены в соотношениях неопределенностей (4.8), подтверждающихся экспериментально (§ 4, п. 4). Микрочастица не имеет определенной координнаты в смысле воспронзводимости ее значення при повторенни измерений, оказываясь каждый раз в разных точках пространства с координатамн x, y, z. То же для импульса. Особенность координат микрочастицы и ее импульса как измеряемых илн рассчитываемых в теории величнн и отражена в том, что им сопоставлены операторы, а не непосредственно числа. Теория, следуя за опытом, не позволяет до опыта прнпнсать частице какие-то конкретные значения координат н импульса.

При всей кажущейся произвольности выбора операторов $\hat{x}$ н $\hat{p}_x$ в аксиоматике (см. § 8) их вид тесно связан с вероятностно-статистической трактовкой ψ-функции.

Если мы признаем, что координата мнкрочастицы принимает случайные значения, то положение частицы в пространстве определяется через плотность вероятностн:

$$w=\frac{dW}{dV},$$

являющуюся функцией координат точки пространства и описывающую механическое состояние частицы: $w(x, t)$ — различна в разных силовых полях, для разных систем и т. д.

Исходная и важнейшая аксиома квантовой механнки состоит в том, что силовое поле, или взаимодействие между частицами, определяет не функцию $w(x, y, z, t)$, а другую — $\psi(x, y, z, t)$, прнчем $w=\psi^*\psi$. Экспериментальное основание аксиомы дают опыты по днфракции микрочастиц: дифракционная картнна соответствует интерференции волн, а распределение интенснвности пропорционально квадрату их амплитуды, т. е. величине $w=|\psi|^2$. С этим обстоятельством (состояние задается не плотностью вероятности, а ψ-функцией) связаны многие принципиальные особенности квантовой механикн.

Статистическое толкование волновой функции в значительной мере предопределяет выбор оператора координаты. Если предположить, что поле (8.2) описывает состояния с определенным импульсом, то далее из тех же соображений находнтся и оператор импульса.

Очень важно для понимания многих вопросов усвонть, что благодаря соотношению неопределенностей импульс не определяется, как это было в макроскопической физике, через производную от координаты, т. е. через скорость. Формула $p_x=m\dot{x}$ не имеет места, потому что нет кинематнческого уравнения движения: $x=f(t)$. Отсюда следует, что измерение импульса в микромире не может производнться через измерение скорости, а должно выполняться другимн, независимыми от нзмерення координаты способами, напрнмер через связь нмпульса с энергией, с помощью закона сохранения импульса и т. д. (Что касается координаты точки пространства, то ее измерение в микромире не пересматривается.)

Сказанное выше о координнате и импульсе позволяет сделать вывод об особой

ролн координат и нмпульса как независимых переменных при описании состоянй микрочастиц. В нашем курсе функции состояний задаются в обычном пространстве с координатами x, y, z. Однако возможно их определение и в пространстве импульсов с координатами p_x, p_y, p_z (см. приложение III).

Выбор вида операторов других велнчин производнтся с помощью принципа соответствия. Предполагается, что в некотором предельном случае законы квантовой механикн допускают переход к законам классической механнки. Сами классические величины, такие, как энергня н момент нмпульса, есть не что иное, как средние значення соответствующнх квантово-механическнх величин. Прнцип соответствня требует того, чтобы связн между среднми значениямн квантово-механических величин совпадалн с нзвестными классическими соотношеннямн. Отсюда следует, что формулы, связывающие операторы соответствующнх велнчнн, повторяют классическне формулы (об этом подробнее говорится в § 9).

Таким образом, все велнчины, которые выражаются в классике через координаты и импульсы, оказываются операторами, причем внд нх легко устанавливается (см. § 8, п. 2).

В нашем курсе особняком стонт одна величина — спнн микрочастнцы. Он не связан с функцней состояния, не входнт в уравнение Шредингера (до § 13, п. 3). Поэтому спнн мы должны рассматривать как параметр микрочастнцы, подобный ее массе и заряду. В более полной релятивистской теории спнн определяется по функции состояння действием на нее оператора спнна (см. § 13, пп. 3 н 4). Ситуация со спнном позволяет понять, что существуют велнчнны, которые в нерелятнвистской теорни выступают как параметры, а в релятнвнстской являются операторами, ие содержащими координат и импульсов. К нним, например, относится оператор электрнческого заряда, других зарядов. Но этн операторы выходят за рамки данного пособня.

Классическая механнка есть предельный случай квантовой механики (см. § 9, п. 2). В то же время, учитывая роль классической физнки прн введенин исходных положений квантовой механнки, можно заключить, что обе теории имеют особую связь друг с другом. Обратим внимание на то, что все измерення производятся макроскопнческимн прнборами, далее, существен принцнп соответствия прн определенни внда снловых полей (операторы $U(\vec{r})$) н операторов ряда велнчин, такнх, как $\hat{T}$, $\hat{L}$, $\hat{H}$.

Что касается основного уравнения квантовой механнкн — уравнення Шредингера, то оно обладает большей общностью, нежели основные уравнения классической механики — уравнення Ньютона, Лагранжа, Гамильтона. Однако есть связь уравнения Шредингера с классической физикой: во-первых, через исторню открытия, а во-вторых, переходом к классическим уравненням (см. § 9).

8.8. К вопросу о размерностях в квантовой механике. Кратко остановимся на вопросе о размерностях величин и операторов. Известно, что каждая физическая величина может быть выражена классическими формулами через другие величины. Связь величины с основными величинами — длиной, массой, временем — выражают формулы размерности.

Но оператор обозначает действие на функцию, а не непосредственно на величину; поэтому неочевидно, какое отношение к нему имеет размерность. Однако если вспомнить уравнение (7.5) для собственных значений и собственных функций оператора, то из него видно, что размерность оператора должна совпадать с размерностью его собственных значений.

Так, например, для оператора импульса имеем

$$\hat{p}_x\psi = p_x\psi,$$

т. е.

$$[\hat{p}_x] = MLT^{-1}.$$

В самом деле, используя явный вид оператора:

$$p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

и вспоминая, что постоянная $\hbar$ имеет размерность энергии, умноженной на время, убеждаемся в справедливости сказанного.

Совпадают размерности правой и левой частей уравнения Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \widehat{H}\psi,$$

если учесть, что оператор $\widehat{H}$ имеет размерность энергии. Что же касается размерности функции состояния, то она видна из исходного определения вероятности (2.1):

$$dW = |\psi|^2 dV.$$

Так как вероятность — величина безразмерная, то размерность ψ-функции — обратная величина корня квадратного из объема:

$$[\psi] = L^{-\frac{3}{2}}.$$

Например, в одномерном случае потенциальной ямы размерность найденной ранее функции состояний (5.7) определялась нормировочным коэффициентом: $C_n = \sqrt{\frac{2}{a}}$, $[\psi] = L^{-\frac{1}{2}}$.

Такая же размерность у функций состояния квантового осциллятора (см. формулу (6.17)). В случае свободной частицы функция состояния (3.22) имеет неопределенный коэффициент C, которому следует приписать размерность: $[C] = L^{-\frac{3}{2}}$.

Как правило, размерность ψ-функции и определяется ее нормировочным множителем; без него ψ-функция в процессе решения уравнения Шредингера часто оказывается безразмерной. Постоянный ее сомножитель определяется условием нормировки (2.5):

$$|N|^2 \int \tilde{\psi}^* \tilde{\psi}\, dV = 1.$$

Из этого же условия получается указанная выше размерность:

$$|N|^2 = L^{-3}.$$

§ 9. ИЗМЕНЕНИЕ СРЕДНИХ ЗНАЧЕНИЙ ФИЗИЧЕСКИХ ВЕЛИЧИН СО ВРЕМЕНЕМ И ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ

9.1. Изменение средних значений физических величин со временем. Из классической механики известно, какое важное значение имеют в ней законы изменения величины с течением времени. Достаточно напомнить формулу (см. ч. I, (9.1))