$$u(x)=\frac{a_1}{2}+\sum_{n=1}^{\infty}(a_n\cos nx+b_n\sin nx). \tag{23}$$

Ряд (22) является обобщением ряда Фурье (23) по тригонометрическим функциям. Чтобы найти коэффициенты ряда (22) умножим его на одну из функций $u_k^*(x)$ и проинтегрируем почленно по области определения функций $u_k(x)$:

$$\int u_k^*(x)\Psi(x)dx=\sum_n c_n\int u_k^*(x)u_k(x)dx. \tag{24}$$

в силу свойства ортонормированности в правой части только член с $n=k$ отличен от нуля, поэтому:

$$c_k=\int u_k^*(x)\Psi(x)dx. \tag{25}$$

Разложение (22) можно сравнить с разложением вектора по единичным ортогональным векторам. Функции $u_k(x)$ играют роль ортов векторного пространства, а коэффициенты c_k аналогичны проекциям вектора на орты.

§3. Средние значения динамических переменных. Изображение динамических переменных операторами

Из статистического толкования волн де Бройля следует, что состояние элементарной частицы в данный момент времени, в отличие от классической материальной точки, нельзя характеризовать определёнными значениями координат и проекций импульса. Заранее невозможно предсказать каков будет результат измерения указанных величин. Можно лишь указать какова вероятность того, что частица окажется в заданном элементе объёма и будет иметь координаты и проекции импульсов в заданных промежутках. Значения других динамических переменных, являющихся функциями координат и импульсов, вообще говоря также нельзя точно определить и точно предсказать какой будет результат измерения данной динамической переменной. Поэтому динамические переменные в квантовой механике должны рассматриваться как случайные величины и описываться методами теории вероятностей. Существуют, однако, частные, но очень важные случаи, когда динамические переменные имеют определённые значения. Эти случаи будут рассмотрены отдельно.

Из теории вероятностей известно, что случайные величины можно охарактеризовать числовыми характеристиками, среди которых наиболее важными являются математическое ожидание и дисперсия. В данном параграфе мы должны установить выражение математического ожидания. Наиболее просто устанавливается математическое ожидание величины, зависящей только от координат. Известно, что математическое ожидание дискретной случайной величины L, принимающей значения L_i с вероятностями p_i выражается формулой:

$$\langle L\rangle = \sum_i L_i p_i \,. \tag{1}$$

Разобьем объём V, в котором может находиться частица, на элементы ΔV_i и в каждом элементе выберем точку M_i. Вероятность попадания частицы в элемент ΔV_i записывается как

$$p_i = f(M_i)\Delta V_i,$$

где $f(M_i)$ - плотность вероятности. Тогда формула (1) примет вид:

$$\langle L\rangle \approx \sum_i L(M_i) f(M_i)\Delta V_i \,. \tag{2}$$

Переходя к пределу при $\max \Delta V_i \to 0$, получим

$$\langle L\rangle = \iiint_V L(\vec{r}) f(\vec{r}) dV \,. \tag{3}$$

Как известно из предыдущего раздела плотность вероятности обнаружения частицы равна квадрату модуля волновой функции:

$$f(\vec{r}) = \|\Psi\|^2 = \Psi^*(\vec{r})\Psi(\vec{r}). \qquad (4)$$

Подставляя (4) в (3) и переставляя сомножители, получим:

$$\langle L \rangle = \iiint_V \Psi^*(\vec{r}) L^*(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) dV. \qquad (5)$$

(Сомножители переставлены ради того, чтобы вид этой формулы соответствовал виду формулы в более общем случае).

Лишь немногие динамические переменные зависят только от координат. К числу таких переменных относится потенциальная энергия.

Большинство динамических переменных зависит как от координат, так и от проекций импульса, либо только от проекций импульса. Теоретический вывод выражения математического ожидания для этого случая очень сложен. Поэтому в курсах квантовой механики формула математического ожидания даётся как постулат, который проверяется затем по следствиям. В отличие от постулатов математики постулаты квантовой механики не очевидны. Чтобы пояснить постулат о математическом ожидании, мы подойдём к нему исходя из простого частного случая, то есть пользуясь методом индукции.

Известно, что состояние частицы с определённым импульсом описывается плоской волной де Бройля

$$\Psi(\vec{r}, t) = A \exp i \frac{p_x x + p_y y + p_z z - Et}{\hbar}. \qquad (6)$$

Если частица локализована в объёме V, то нормировочная константа A равна $1/\sqrt{V}$. В этом случае

$$\iiint \Psi^* \Psi dV = 1. \qquad (7)$$

Умножим равенство (7) на одну из проекций импульса, например на p_x. Учитывая, что в этом частном случае среднее значение $\langle p_x \rangle$ совпадает с точным значением p_x можно написать:

$$\langle p_x \rangle = p_x = \iiint \Psi^* \hat{p}_x \Psi dV . \tag{8}$$

Произведение $p_x \Psi(\vec{r}, t)$ может быть записано на основании (6) как $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial x}$. Поэтому (8) переписывается в виде:

$$\langle p_x \rangle = \iiint_V \Psi^* (\vec{r}, t) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial x} dV . \tag{9}$$

Сделаем предположение, что формула (9) верна не только для свободной частицы, состояние которой описывается волновой функцией (6), но и для частицы в любом состоянии. Сравнивая с формулой (5) видим, что роль величины $L(\vec{r})$ играет в случае проекции импульса p_x оператор $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$. Формулы, аналогичные (9) могут быть написаны и для проекций p_y и p_z. Таким образом составляющим импульса p_x, p_y, p_z сопоставляются операторы $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}$, а вектору $\vec{p}$ оператор $\frac{\hbar}{i} \nabla$, где ∇ - (“набла”) оператор

$$\nabla = \vec{i} \frac{\partial}{\partial x} + \vec{j} \frac{\partial}{\partial y} + \vec{k} \frac{\partial}{\partial z} .$$

Переходя к следующему шагу обобщений сформулируем следующий постулат.

Чтобы вычислить математическое ожидание динамической переменной $L(x, y, z, p_x, p_y, p_z)$, зависящей от координат и проекций импульсов частицы, следует сопоставить динамической переменной L оператор

$$\hat{L} = L\left(x, y, z, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z}\right), \qquad (10)$$

заменив в классическом выражении величины L проекции импульсов операторами $\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z}$ и вычислить затем математическое ожидание величины L по формуле:

$$\langle L \rangle = \iiint\limits_V \Psi^*(\vec{r},t)\hat{L}\Psi(\vec{r},t)dV. \qquad (11)$$

Значение оператора в квантовой механике не ограничивается задачей определения математических ожиданий. В следующих параграфах на основе операторов, изображающих динамические переменные, мы рассмотрим другие вопросы.

Средние значения динамических переменных должны быть, конечно, вещественными величинами, хотя волновые функции могут быть комплексными. Легко видеть, что если оператор $\hat{L}$ эрмитовый, то $\langle L \rangle$ вещественно. Действительно, рассмотрим

$$\langle L \rangle^* = \iiint\limits_V \Psi\hat{L}^*\Psi^* dV. \qquad (12)$$

Полагая в формуле (3) предыдущего параграфа $u_1 = u_2 = \Psi$ видим, что $\langle L \rangle = \langle L \rangle^*$, то есть $\langle L \rangle$ вещественно. Таким образом, требование эрмитовости операторов, изображающих динамические переменные, выражает требование вещественности их средних значений.

Подставим в (12) разложение волновой функции $\Psi(\hat{r},t)$ по собственным функциям оператора $\hat{L}$ $\Psi_n(\vec{r},t)$:

$$\Psi(\vec{r},t)=\sum_n c_n \Psi_n(\vec{r},t), \qquad (13)$$

а также разложение комплексно-сопряженной функции

$$\Psi^*(\vec{r},t)=\sum_m c_m^* \Psi_m^*(\vec{r},t). \qquad (13а)$$

Внося оператор $\hat{L}$ под знак суммы, перемножая суммы и интегрируя почленно, получим:

$$\langle L\rangle = \iiint_V \sum_m c_m^* \Psi_m^* \hat{L} \sum_n c_n \Psi_n dV =$$

$$= \iiint_V \sum_m c_m^* \Psi_m^* \sum_n c_n \hat{L}\Psi_n dV = \sum_{m,n} c_m^* c_n \iiint_V \Psi_m^* \hat{L}\Psi_n dV. \qquad (14)$$

Так как собственными функциями оператора $\hat{L}$ являются Ψ_n, то $\hat{L}\Psi_n = L_n \Psi_n$, где L_n - собственные значения оператора $\hat{L}$.

Внесём L_n за знак интеграла и воспользуемся ортонормированностью функций Ψ_n: $\iiint_V \Psi_m^* \Psi_n dV = \delta_{mn}$. При этом получим:

$$\langle L\rangle = \sum_{m,n} c_m^* c_n L_n \delta_{mn}. \qquad (15)$$

В этой двойной сумме отличны от нуля только члены с $m = n$, следовательно, мы получаем:

$$\langle L\rangle = \sum_m c_m^* c_m L_m = \sum_m |c_m|^2 L_m. \qquad (16)$$

Из условия нормировки функции Ψ вытекает:

$$\int \Psi^* \Psi dV = \int \sum_m c_m^* \Psi_m^* \sum_n c_n \Psi_n dV =$$

$$= \sum_{m,n} c_m^* c_n \int \Psi_m^* \Psi_n dV = \sum_{m,n} c_m^* c_n \delta_{mn} = \sum_m |c_m|^2 = 1. \qquad (17)$$

сравнивая (16) с (1) мы видим, что собственные значения оператора $\hat{L}$ являются допустимыми значениями случайной величины L, а квадраты модулей коэффициентов разложения волновой функции Ψ в ряд Фурье по собственным функциям являются вероятностями этих значений.

Если волновая функция Ψ совпадает с одной из собственных функций Ψ_n, то разложение (13) содержит только один член с $m = n$ и $|c_m|^2 = 1$.

Это означает, что в данном частном случае при измерении величины L мы с вероятностью, равной единице, получим значение L_m. Другими словами физическая величина имеет определенное значение, если волновая функция $\Psi(\vec{r}, t)$, описывающая состояние частицы, является собственной функцией оператора физической величины. При этом собственное значение оператора является определённым значением физической величины. В следующем параграфе мы придём к этому заключению другим путём.

<u>**Пример**</u>. Частица движется вдоль оси Ox на отрезке $[0, l]$. Её состояние описывается волновой функцией $\Psi(x) = A\sin\frac{\pi x}{l}$. Найти нормировочный множитель A, среднюю координату частицы $\langle x \rangle$, среднюю кинетическую энергию $\langle T \rangle$.

<u>**Решение**</u>. Множитель A находится из условия

$$\int_0^l \Psi^2 dx = 1;$$

$$A^2\int_0^l \sin^2\frac{\pi x}{l}dx = A^2\int_0^l \frac{1-\cos\dfrac{2\pi x}{l}}{2}dx =$$

$$=\frac{A^2}{2}\left(x-\frac{l}{2\pi}\sin\frac{2\pi x}{l}\right)\Bigg|_0^l=\frac{A^2 l}{2}=1\,.$$

Откуда $A=\sqrt{\dfrac{2}{l}}$.

$$\langle x\rangle=\int_0^l x\Psi^2 dx=\frac{2}{l}\int_0^l x\sin\frac{\pi x}{l}dx=\left|u=x,\ dv=\sin\frac{\pi x}{l}dx\right|=$$

$$=\frac{2}{l}\left\{x=\frac{1}{2}\left(x-\frac{l}{2\pi}\sin\frac{2\pi x}{l}\right)\right\}\Bigg|_0^l-\frac{1}{2}\int_0^l\left(x-\frac{l}{2\pi}\sin\frac{2\pi x}{l}\right)dx=$$

$$=\frac{2}{l}\left\{\frac{l^2}{2}-\frac{1}{2}\left(\frac{x^2}{2}-\frac{l^2}{4\pi^2}\cos\frac{2\pi x}{l}\right)\Bigg|_0^l\right\}$$

$$=\frac{2}{l}\left(\frac{l^2}{2}-\frac{l^2}{4}-\frac{l^2}{8\pi^2}+\frac{l^2}{8\pi^2}\right)=\frac{l}{2}\,.$$

Средняя координата находится в середине отрезка $[0,l]$.

В данном случае частица движется только по оси Ox , поэтому оператор кинетической энергии имеет вид:

$$\hat{T}=\frac{1}{2m}\hat{p}_x^2=\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\right)^2=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\,.$$

$$\langle T\rangle=\int_0^l \Psi^*\hat{T}\Psi dx=-\frac{\hbar^2}{2m}\int_0^l \Psi^*\frac{d^2\Psi}{dx^2}dx=$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{2}{l}\int_0^l \sin\frac{\pi x}{l}\frac{d^2}{dx^2}\sin\frac{\pi x}{l}dx=$$

$$=\frac{\hbar^2}{ml}\cdot\left(\frac{\pi}{l}\right)^2\int_0^l \sin^2\frac{\pi x}{l}dx=\frac{\hbar^2\pi^2}{ml^3}\int_0^l \frac{1-\cos\frac{2\pi x}{l}}{2}dx=$$

$$=\frac{\hbar^2\pi^2}{ml^3}\cdot\frac{1}{2}\left(x-\frac{l}{2\pi}\sin\frac{2\pi x}{l}\right)\Bigg|_0^l=\frac{\hbar^2\pi^2}{ml^3}\cdot\frac{l}{2}=\frac{\hbar^2\pi^2}{2ml^2}.$$

§4. Дисперсия физической величины. Условие, при котором физическая величина имеет определённое значение

Дисперсия случайной величины - это числовая характеристика случайной величины, характеризующая разброс значений случайной величины. В теории вероятностей дисперсия определяется как математическое ожидание квадрата отклонения случайной величины от её математического ожидания:

$$D(L)=\left\langle \left(L-\langle L\rangle\right)^2\right\rangle. \tag{1}$$

Применим эту формулу к динамической переменной L. Оператором величины $l-\langle L\rangle$ является $\hat{L}-\langle L\rangle$. Подставляя в формулу (11) предыдущего параграфа вместо оператора $\hat{L}$ оператор $\hat{L}-\langle L\rangle$, получим: