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

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

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

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

§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:

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

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:

$$D(L)=\int_V \Psi^*\left(\hat{L}-\langle L\rangle\right)\Psi dV \quad . \tag{2}$$

перепишем эту формулу, заменив оператор $\left(\hat{L}-\langle L\rangle\right)^2$ на произведение операторов $\left(\hat{L}-\langle L\rangle\right)\cdot\left(\hat{L}-\langle L\rangle\right)$:

$$D(L)=\int_V \Psi^*\left(\hat{L}-\langle L\rangle\right)\cdot\left(\hat{L}-\langle L\rangle\right)\Psi dV \quad . \tag{3}$$

Воспользуемся самосопряженностью оператора $\hat{L}-\langle L\rangle$, полагая в формуле (3) §1 $u_1=\Psi$; $u_2=\left(\hat{L}-\langle L\rangle\right)\Psi$:

$$D(L)=\int_V \left(\hat{L}-\langle L\rangle\right)\Psi\left(\hat{L}-\langle L\rangle\right)^*\Psi^* dV=\int_V \left|\left(\hat{L}-\langle L\rangle\right)\Psi\right|^2 dV \quad . \tag{4}$$

Так как $\left|\left(\hat{L}-\langle L\rangle\right)\Psi\right|^2$ - вещественная неотрицательная величина, то $D(L)\geq 0$, как и должно быть в соответствии со смыслом этой величины.

Если физическая величина L имеет в данном состоянии частицы определённое значение, то среднее значение $\langle L\rangle$ совпадает с этим значением L и дисперсия равна нулю. Это имеет место только тогда, когда подынтегральная функция в (4) тождественно равна нулю:

$$\left|\left(\hat{L}-\langle L\rangle\right)\Psi\right|^2=0, \text{ или } \hat{L}\Psi=L\Psi \,. \tag{5}$$

Обратно, если выполняется условие (5), то дисперсия тождественно рана нулю. Условие (5) означает, что Ψ есть собственная функция оператора $\hat{L}$ соответствующая собственному значению L. Итак, чтобы величина L имела определённое значение в данном состоянии частицы, необходимо и достаточно, чтобы волновая функция этого состояния частицы была собственной функцией оператора $\hat{L}$.

Так как волновые функции должны удовлетворять некоторым дополнительным условиям (непрерывность, однозначность, обращение в нуль на бесконечности), решения уравнения (5) возможно не для всех L, а лишь для значений L, принадлежащих спектру собственных значений. Решая уравнение (5) необходимо не только определить собственные функции, но и найти значения L, при которых возможны решения, удовлетворяющие дополнительным условиям, т.е. найти спектр собственных значений.

Таким образом, в то время как в теории Бора, допустимые стационарные значения физических величин находились на основе искусственно введённых условий квантования, противоречащих законам электродинамики, в квантовой механике возможные определённые значения физических величин находятся по единому алгоритму как собственные значения соответствующих операторов.

Пример. Найти собственные значения квадрата импульса частицы, движущейся вдоль оси Ox по отрезку $[0,l]$ в поле с потенциальной энергией $U \equiv 0$. За пределы отрезка частица не выходит.

Решение. Известно (см. §2), что оператор x-вой составляющей импульса имеет вид:

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}. \qquad (6)$$

Соответственно, оператор квадрата импульса имеет вид:

$$\hat{p}_x^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}. \qquad (7)$$

Уравнение (5) в данном случае имеет вид:

$$-\hbar^2 \frac{d^2\Psi}{dx^2} = \ddot{p}_x^2\Psi\ . \qquad (8)$$

(В данном случае переменная одна, поэтому $\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = \frac{d^2\Psi}{dx^2}$).

Граничные условия в соответствии с условием задачи:

$$\Psi(0) = \Psi(l) = 0. \qquad (9)$$

Уравнение (8) является уравнением второго порядка с постоянными коэффициентами. Составим характеристическое уравнение

$$-\hbar^2\alpha^2 = p_x^2\ . \qquad (10)$$

Его корни:

$$\alpha = i\frac{|p_x|}{\hbar}\ . \qquad (11)$$

Общее решение уравнения (8) имеет вид:

$$\Psi(x) = A\sin\frac{|p_x|}{\hbar}x + B\cos\frac{|p_x|}{\hbar}x\ . \qquad (12)$$

Потребуем, чтобы функция $\Psi(x)$ удовлетворяла граничным условиям (9):

$$\Psi(0) = A\sin 0 + B\cos 0 = B = 0\ . \qquad (13а)$$

$$\Psi(l) = A\sin\frac{|p_x|}{\hbar}l = 0\ . \qquad (13б)$$

Если положить $A = 0$, то функция (12) обратится в тождественный нуль. Такое решение интереса не представляет, оно соответствует отсутствию частицы. Поэтому исходя из (13) полагаем

$$\sin\frac{|p_x|}{\hbar}l = 0\ ,$$

откуда

$$\frac{|p_x|}{\hbar} l = \pi n \,; \; |p_x| = \frac{\hbar \pi n}{l}$$

или

$$p_{x,n}^2 = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{l^2} \,. \qquad (14)$$

Значок n у p_x^2 поставлен для нумерации собственных значений p_x^2.

Результат (14) можно получить также непосредственно из гипотезы де Бройля. На ограниченном отрезке волна де Бройля должна быть стоячей волной с узлами на концах отрезка. Поэтому на длине l должно укладываться целое число полуволн:

$$\frac{\lambda}{2} n = l \,.$$

Отсюда

$$\lambda_n = \frac{2l}{n} \,. \qquad (15)$$

Подставляя это значение в соотношение де Бройля между импульсом и длиной волн, получим:

$$|p_{x,n}| = \frac{h}{\lambda} = \frac{2\pi \hbar n}{2l} = \frac{\pi \hbar n}{l} \,, \qquad (16)$$

что соответствует (14).

§5. Условие, при котором две динамические переменные могут иметь определённые значения (условие измеримости динамических величин)

Соотношение неопределённостей $\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar$, рассмотренное в предыдущем разделе, показывает, что координата и одноимённая проекция импульса, не могут одновременно иметь определённые значения.

Существуют и другие пары динамических переменных, которые не могут одновременно иметь определённые значения. В то же время существуют такие пары динамических переменных, которые могут одновременно (т.е. в одном и том же состоянии частицы) иметь определённые значения, например, две координаты, координата и неодноименная проекция импульса и др. Такие пары динамических переменных называются соизмеримыми, а пары динамических переменных, которые не могут иметь одновременно определённых значений - несоизмеримыми. Задача данного параграфа - найти общее условие (общий критерий) соизмеримости динамических переменных. Это условие определено следующей теоремой:

Для того, чтобы динамические переменные L и M были соизмеримы, необходимо и достаточно, чтобы их операторы коммутировали, т.е.

$$\hat{L}\hat{M} = \hat{M}\hat{L} \cdot \tag{1}$$

Доказательство необходимости. Дано, что динамические переменные L и M одновременно имеют определённые значения. Требуется доказать, что их операторы коммутируют. По условию существуют такие состояния частицы, волновые функции которых Ψ_n одновременно являются собственными функциями операторов L и M:

$$\hat{L}\Psi_n = L_n\Psi_n, \tag{2а}$$

$$\hat{M}\Psi_n = M_n\Psi_n. \tag{2б}$$

Подействуем на левую и правую части уравнения (2а) оператором $\hat{M}$, а на левую и правую части (2б) - оператором $\hat{L}$. Пользуясь линейностью операторов, получим:

$$\hat{M}\hat{L}\Psi_n = L_n\hat{M}\Psi_n = L_nM_n\Psi_n, \tag{3а}$$

$$\hat{L}\hat{M}\Psi_n = M_n\hat{L}\Psi_n = M_nL_n\Psi_n. \tag{3б}$$

Правые части равенств (3а) и (3б) равны, приравняем и их левые части:

$$\hat{M}\hat{L}\Psi_n = \hat{L}\hat{M}\Psi_n . \qquad (4)$$

Равенство (4) ещё не означает, что операторы $\hat{L}$ и $\hat{M}$ коммутируют, так как для доказательства коммутативности надо показать, что

$$\hat{M}\hat{L}\Psi = \hat{L}\hat{M}\Psi ,$$

где Ψ - любая функция того класса функций, на которые действуют операторы , Ψ_n - собственные функции обоих операторов. Однако, мы можем разложить любую функцию Ψ по собственным функциям Ψ_n:

$$\Psi = \sum_n c_n \Psi_n .$$

Пользуясь равенством (4), получим:

$$\hat{M}\hat{L}\Psi = \hat{M}\hat{L}\sum_n c_n \Psi_n = \sum_n c_n \hat{M}\hat{L}\Psi_n =$$

$$= \sum_n c_n \hat{L}\hat{M}\Psi_n = \hat{L}\hat{M}\sum_n c_n \Psi_n = \hat{L}\hat{M}\Psi . \qquad (5)$$

Необходимость доказана.

Доказательство достаточности, мы рассмотрим не для общего случая, а для случая, когда собственные значения операторов $\hat{L}$ и $\hat{M}$ простые.

Дано, что операторы $\hat{L}$ и $\hat{M}$ коммутируют. Требуется доказать, что они имеют общую систему собственных функций. Пусть Ψ_n - собственные функции оператора $\hat{L}$, то есть

$$\hat{L}\Psi_n = L_n \Psi_n . \qquad (6)$$

Докажем, что Ψ_n являются также собственными функциями оператора $\hat{M}$. Для этого подействуем оператором $\hat{M}$ на левую и правую части уравнения (6). Пользуясь коммутативностью операторов и линейностью оператора $\hat{M}$, получим:

$$\hat{L}\left(\hat{M}\Psi_n\right)=L_n\left(\hat{M}\Psi_n\right). \qquad (7)$$

Отсюда мы видим, что $\hat{M}\Psi_n$ является собственной функцией оператора $\hat{L}$ при собственном значении L_n. Таким образом собственному значению L_n соответствуют две собственные функции оператора $\hat{L}$: Ψ_n и $\hat{M}\Psi_n$. Но по наложенному ограничению мы считаем собственные значения простыми. Это значит, что каждому собственному значению оператора $\hat{L}$ может соответствовать только одна линейно-независимая собственная функция, а полученные две функции должны быть линейно-зависимыми, т.е. отличаются постоянным множителем, который мы обозначим M_n:

$$\hat{M}\Psi_n = M_n\Psi_n. \qquad (8)$$

Равенство (8) означает, что Ψ_n - собственная функция оператора $\hat{M}$, т.е. собственные функции оператора $\hat{L}$ являются и собственными функциями $\hat{M}$. Теорема доказана.

Пример. Может ли потенциальная энергия $U(x,y,z)$ и проекция импульса p_x одновременно иметь определённые значения?

Решение. Оператор потенциальной является оператором умножения $\hat{U}=U(x,y,z)$. Оператор проекции импульса p_x имеет вид $\hat{p}_x=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$. Подействуем произведением этих операторов на произвольную функцию $\Psi(x,y,z)$ заданного класса функций:

$$\hat{p}_x \hat{U}\Psi = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\big(U(x,y,z)\Psi(x,y,z)\big) = \frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial U}{\partial x} + U\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi .$$

С другой стороны

$$\hat{U}\hat{p}_x \Psi = \frac{\hbar}{i} U(x,y,z)\frac{\partial \Psi}{\partial x} .$$

Отсюда видно, что вообще говоря

$$\hat{p}_x \hat{U} \neq \hat{U}\hat{p}_x ,$$

т.е. операторы не коммутируют и значит соответствующие величины не могут иметь одновременно определённых значений. Только в частном случае, когда U не зависит от x и следовательно $\frac{\partial U}{\partial x} = 0$ операторы коммутируют и величины p_x и $U(x,y,z)$ могут иметь определённые значения.

§6. Операторы основных динамических переменных и соотношения коммутативности между ними

Составим таблицу классических выражений и операторов основных динамических переменных частицы в декартовой системе координат.

Рассмотрим какие пары из перечисленных операторов коммутируют, а какие не коммутируют. Очевидно, операторы x, y, z, $U(x,y,z)$ попарно коммутируют, так как это операторы умножения и их произведения представляют собой простые произведения функций. Очевидно, также, попарно коммутируют проекции импульсов ввиду независимости смешанных производных от порядка дифференцирования:

$$\hat{p}_x \hat{p}_y = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial y \partial x} = \hat{p}_y \hat{p}_x . \qquad (1)$$

Каждая координата коммутирует с не одноименными проекциями импульса, так как координату можно выносить за знак производной по другой независимой переменной:

$$\hat{p}_y x\Psi = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}(x\Psi) = x\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\Psi}{\partial y} = x\hat{p}_y\Psi\,. \qquad (2)$$

Рассмотрим коммутатор координаты и одноимённой проекции импульса

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

$$= \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial\Psi}{\partial x} - \Psi - x\frac{\partial\Psi}{\partial x}\right) = -\frac{\hbar}{i}\Psi = -\frac{\hbar\cdot i^2}{i\cdot i^2}\Psi = i\hbar\Psi\,.$$

Отсюда

$$[\hat{x}\hat{p}_x] = [\hat{y}\hat{p}_y] = [\hat{z}\hat{p}_z] = i\hbar\,. \qquad (3)$$

Эта некоммутативность операторов находит своё выражение в соотношении неопределённостей

$$\Delta x\cdot\Delta p_x \geq \hbar\,;\ \Delta y\cdot\Delta p_y \geq \hbar\,;\ \Delta z\cdot\Delta p_z \geq \hbar\,.$$

Оператор любой проекции импульса коммутирует с оператором кинетической энергии, но не коммутирует с оператором потенциальной энергии, а значит не коммутирует с оператором полной энергии.

Координаты наоборот коммутируют с потенциальной энергией, но не коммутируют с оператором кинетической энергии, а значит и с оператором полной энергии.

Покажем, что проекции момента импульса друг с другом не коммутируют, например:

$$[\hat{L}_x\hat{L}_y] = (y\hat{p}_z - z\hat{p}_y)(z\hat{p}_x - x\hat{p}_z) - (z\hat{p}_x - x\hat{p}_z)(y\hat{p}_z - z\hat{p}_y)\,.$$

При перемножении операторов соединим попарно такие произведения, которые отличаются только порядком сомножителей. Подставлять явные выражения операторов проекций импульса нет необходимости.

$$\left[\hat{L}_x \hat{L}_y\right] = \left(y\hat{p}_z z\hat{p}_x - z\hat{p}_x y\hat{p}_z\right) - \left(y\hat{p}_z x\hat{p}_z - x\hat{p}_z\right) -$$
$$-\left(z\hat{p}_y z\hat{p}_x - z\hat{p}_x z\hat{p}_y\right) + \left(z\hat{p}_y x\hat{p}_z - x\hat{p}_z z\hat{p}_y\right).$$

Произведения операторов во второй и третьей скобках коммутируют, поэтому эти коммутаторы равны нулю. Произведения операторов в первой и четвёртой скобках содержат некоммутирующие операторы z и $\hat{p}_z$, поэтому эти коммутаторы не обращаются в нуль. Учитывая коммутативность координат с операторами неодноимённых проекций импульса выносим из первой скобки $y\hat{p}_x$, а из четвёртой - $x\hat{p}_y$:

$$\left[\hat{L}_x \hat{L}_y\right] = y\hat{p}_x\left(\hat{p}_z z - z\hat{p}_z\right) + x\hat{p}_y\left(\hat{p}_z z - z\hat{p}_z\right) =$$
$$= -y\hat{p}_x\left[z\hat{p}_z\right] + x\hat{p}_y\left[z\hat{p}_z\right].$$

Учитывая (3) и выражение для оператора $\hat{L}_z$ (см. Таблицу 1), получаем:

$$\left[\hat{L}_x \hat{L}_y\right] = i\hbar\left(x\hat{p}_y - y\hat{p}_x\right) = i\hbar\hat{L}_z. \qquad (4)$$

Аналогично

$$\left[\hat{L}_y \hat{L}_z\right] = i\hbar\hat{L}_x; \quad \left[\hat{L}_z \hat{L}_x\right] = i\hbar\hat{L}_y.$$

Покажем, что оператор каждой проекции момента количества движения коммутирует с оператором квадрата момента количества движения, например:

$$\left[\hat{L}_x \hat{L}^2\right] = \hat{L}_x\left(\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2\right) - \left(\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2\right)\hat{L}_x =$$
$$= \hat{L}_x^3 - \hat{L}_x^3 + \hat{L}_x\hat{L}_y^2 - \hat{L}_y^2\hat{L}_x + \hat{L}_x\hat{L}_z^2 + \hat{L}_z^2\hat{L}_x =$$
$$= \left(\hat{L}_x\hat{L}_y\right)\hat{L}_y - \hat{L}_y\left(\hat{L}_y\hat{L}_x\right) + \left(\hat{L}_x\hat{L}_z\right)\hat{L}_z - \hat{L}_z\left(\hat{L}_z\hat{L}_x\right).$$

На основании соотношений коммутативности (4), имеем:

$$\hat{L}_x\hat{L}_y = \hat{L}_y\hat{L}_x + i\hbar\hat{L}_z; \quad \hat{L}_y\hat{L}_x = \hat{L}_x\hat{L}_y - i\hbar\hat{L}_z;$$

$$\hat{L}_x\hat{L}_z = \hat{L}_z\hat{L}_x - i\hbar\hat{L}_y\,;\;\; \hat{L}_z\hat{L}_x = \hat{L}_x\hat{L}_z + i\hbar\hat{L}_y\,.$$

Подставляя эти выражения в (5), получаем:

$$\left[\hat{L}_x\hat{L}^2\right] = \left(\hat{L}_y\hat{L}_x + i\hbar\hat{L}_z\right)\hat{L}_y - \hat{L}_y\left(\hat{L}_x\hat{L}_y - i\hbar\hat{L}_z\right) +$$

$$+\left(\hat{L}_z\hat{L}_x - i\hbar\hat{L}_y\right)\hat{L}_z - \hat{L}_z\left(\hat{L}_x\hat{L}_z + i\hbar\hat{l}_y\right) =$$

$$= \hat{L}_y\hat{L}_x\hat{L}_y - \hat{L}_y\hat{L}_x\hat{L}_y + i\hbar\left(\hat{L}_y\hat{L}_z + \hat{L}_z\hat{L}_y\right) +$$

$$+\hat{L}_z\hat{L}_x\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{L}_x\hat{L}_z - i\hbar\left(\hat{L}_y\hat{L}_z + \hat{L}_z\hat{L}_y\right) = 0\,.$$

Таблица 1.

Координаты частицы	x, y, z .
Операторы координаты частицы	$\hat{x} = x,\ \hat{y} = y,\ \hat{z} = z$
Проекции импульса	$\hat{p}_x, \hat{p}, \hat{p}_z$
Операторы проекции импульса	
	$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x},\ \hat{p}_y = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y},\ \hat{p}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z}$
Импульс (вектор) и его оператор	$\vec{p} = p_x\vec{i} + p_y\vec{j} + p_z\vec{k}$
	$\hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i}\nabla$
Потенциальная энергия	$U = U(x, y, z)$
Оператор потенциальной энергии	$\hat{U} = U(x, y, z)$
Кинетическая энергия	$T = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m}$
Оператор кинетической энергии	$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$

Полная энергия (функция Гамильтона) и её оператор

$$H=\frac{p_x^2+p_y^2+p_z^2}{2m}+U(x,y,z)$$

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+U(x,y,z)$$

Момент импульса $\vec{L}=[\vec{r},\vec{p}]$

Оператор момента импульса $\hat{\vec{L}}=\frac{\hbar}{i}[\vec{r},\nabla]$

Проекции момента импульса и их операторы

$$L_x=yp_z-zp_y \qquad \hat{L}_x=\frac{\hbar}{i}\left(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y}\right)$$

$$L_y=zp_x-xp_z \qquad \hat{L}_y=\frac{\hbar}{i}\left(z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z}\right)$$

$$L_z=xp_y-yp_x \qquad \hat{L}_z=\frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

Квадрат момента импульса и его оператор

$$L^2=L_x^2+L_y^2+L_z^2$$

$$\hat{L}^2=-\hbar^2\left\{\left(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y}\right)^2+\left(z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z}\right)^2+\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)^2\right\}.$$