ГЛАВА V

ДАЛЬНЕЙШЕЕ ПОСТРОЕНИЕ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ И СПЕКТРЫ

* *

§ 30. Операторный метод

1. *Операторный метод* широко распространен в большинстве исследований квантовой механики, а потому необходимо сообщить краткие сведения о нем. Это тем более необходимо для того, чтобы дать законченную форму связи символов квантовой механики с реально наблюдаемыми величинами.

Под *оператором* понимают символ, который при действии на функцию некоторых переменных дает новую функцию тех же переменных. Примерами такого действия могут служить умножение на x или на какую-либо функцию $f(x)$. Рассматриваемые с этой точки зрения символы x и $f(x)$ являются операторами. Для отличия от чисел их обозначают через $\hat{x}$ и $\hat{f}(x)$, т. е. ставят шляпку над x и $f(x)$. Другим примером оператора может служить дифференцирование по x, т. е. $\frac{\partial}{\partial x}$, $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$, ...

Операторы можно складывать. Под *суммой операторов* $\hat{A}+\hat{B}$ понимают такой оператор, действие которого на любую функцию $f(x)$ дает результат $\hat{A}f(x) + \hat{B}f(x)$. Под *произведением операторов* $\hat{A}\hat{B}$ понимают оператор, результат действия которого на любую функцию $f(x)$ равен $\hat{A}[\hat{B}f(x)]$. Здесь функция $f(x)$ сначала подвергается действию оператора $\hat{B}$, а затем на полученный результат действует оператор $\hat{A}$. Частным случаем произведения операторов является произведение оператора $\hat{A}$ на число λ, т. е. либо $\lambda\hat{A}$, либо $\hat{A}\lambda$, ибо всякое число можно рассматривать как частный случай оператора. В алгебре операторов не всегда соблюдается коммутативный закон относительно умножения. Это значит, что не всегда $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$. Если такое равенство соблюдается, то говорят, что операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ *коммутируют* друг с другом. Иначе их называют *коммутирующими операторами*. В противном случае операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ *не коммутируют* и называются *некоммутирующими* или антикоммутирующими. Примером некоммутирующих операторов могут служить умножение на x и дифференцирование по x. Действительно,

$$\left(x\frac{\partial}{\partial x}\right)f = x\frac{\partial f}{\partial x}, \quad \left(\frac{\partial}{\partial x}x\right)f = \frac{\partial}{\partial x}(xf) = f + x\frac{\partial f}{\partial x},$$

так что

$$\frac{\partial}{\partial x}x - x\frac{\partial}{\partial x} = 1. \tag{30.1}$$

Эти определения позволяют по заданным операторам $\hat{A}$ и $\hat{B}$ строить другие операторы $\hat{L}(\hat{A}, \hat{B})$, являющиеся их функциями. Определение это имеет смысл только для *целых рациональных функций* операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$. Достаточность такого ограничения в этом построении связана с тем, что именно при таком ограничении в классической физике определяют новые физические величины через другие, ранее введенные физические величины.

Сложение и умножение операторов производится по обычным алгебраическим правилам сложения и умножения чисел. Единственное отличие состоит в том, что при умножении операторов не всегда можно переставлять порядок сомножителей. Например, всегда

$$(\hat{A}+\hat{B})^2=(\hat{A}+\hat{B})(\hat{A}+\hat{B})=\hat{A}^2+\hat{B}\hat{A}+\hat{A}\hat{B}+\hat{B}^2.$$

В общем виде было бы неправильно писать

$$(\hat{A}+\hat{B})^2=\hat{A}^2+2\hat{A}\hat{B}+\hat{B}^2.$$

Такая формула верна только тогда, когда операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ коммутируют между собой, ибо при $\hat{B}\hat{A}=\hat{A}\hat{B}$ она получается из предыдущей. Но в случае некоммутирующих операторов эта формула неверна, ибо в этом случае $\hat{B}\hat{A}\neq\hat{A}\hat{B}$.

Оператор $\hat{A}$ называется *линейным*, если для любых двух функций f и φ и любых постоянных λ и μ соблюдается соотношение

$$\hat{A}(\lambda f+\mu\varphi)=\lambda\hat{A}f+\mu\hat{A}\varphi.$$

В квантовой механике применяются только линейные операторы. В противном случае нарушался бы *принцип суперпозиции состояний*.

2. Предположим теперь, что многократно производится измерение координаты x частицы, причем частица, поскольку это позволяет опыт, всякий раз приводится в *одинаковые макроскопические условия*. Тогда состояние частицы в этих опытах можно характеризовать волновой функцией $\Psi(x)$, которую мы ради простоты будем считать функцией только одной пространственной координаты x. Среднее значение координаты, которое будет найдено в результате измерений, можно записать в виде

$$\langle x\rangle=\int x\Psi^*\Psi\,dx,$$

ибо $\Psi^*\Psi\,dx$ есть вероятность того, что частица будет обнаружена в интервале x, $x+dx$. При этом необходимо оговорить, что функция $\Psi(x)$ всюду конечна, отлична от нуля в ограниченной области пространства и нормирована к единице, т. е.

$$\int\Psi^*\Psi\,dx=1, \tag{30.2}$$

где интегрирование производится по всему пространству, в котором Ψ отлична от нуля. Выражение для среднего значения $\langle x\rangle$ мы предпочитаем записать в виде

$$\langle x\rangle = \int \Psi^* \hat{x} \Psi \, dx. \tag{30.3}$$

Совершенно так же вычисляется среднее значение функции $f(x)$, т. е. по формуле

$$\langle f(x)\rangle = \int \Psi^*(x)\, \hat{f}(x)\, \Psi(x)\, dx, \tag{30.4}$$

в которой $\hat{f}(x)$ рассматривается как оператор.

Если состояние Ψ меняется во времени, то формула (30.4) дает среднее значение для определенного момента времени. В этом случае в функции $\Psi(x, t)$ следует время t рассматривать как *параметр*, т. е. при взятии интеграла его следует считать постоянным.

3. Как же вычислять по волновой функции $\Psi(x)$ средние значения импульса частицы или средние значения целых рациональных функций от импульса? Будем предполагать, что в каждый момент времени функция $\Psi(x)$ всюду конечна и отлична от нуля в ограниченной области пространства, а потому может быть нормирована согласно формуле (30.2). В целях математического упрощения применим искусственный прием. Заменим истинную волновую функцию $\Psi(x)$ другой периодической функцией $\Phi(x)$ с периодом l, так что при любом x $\Phi(x+l) = \Phi(x)$. Функция $\Psi(x)$ отлична от нуля только на небольшом участке где-то в середине интервала $0 < x < l$ (основного периода). В этом интервале обе функции $\Psi(x)$ и $\Phi(x)$ совпадают. Вне интервала $0 < x < l$ функция $\Psi(x)$ обращается в нуль. Поэтому из нормировки (30.2) следует нормировка для функции $\Phi(x)$:

$$\int_0^l \Phi^*(x)\, \Phi(x)\, dx = 1. \tag{30.5}$$

Указанная замена не может существенно отразиться на явлениях, протекающих в рассматриваемое время в рассматриваемой нами области пространства. Действительно, различие между функциями $\Phi(x)$ и $\Psi(x)$ относится только к достаточно удаленным областям пространства, которые не могут оказать существенное влияние на протекание изучаемого нами явления. В пределе, когда $l \to \infty$, небольшие искажения явлений, вызванные заменой Ψ на Φ, совсем исчезают.

Периодическую функцию $\Phi(x)$ разложим в ряд Фурье:

$$\Phi(x) = \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} c_n e^{ik_n x}, \tag{30.6}$$

где

$$k_n = (2\pi/l)\, n. \tag{30.7}$$

Чтобы определить коэффициент c_m этого ряда, надо обе части (30.6) умножить на $e^{-ik_m x}$ и проинтегрировать по x от 0 до l. При этом

$$\int_0^l e^{i(k_n - k_m)x}\, dx = \begin{cases} l, & \text{если } n = m, \\ \dfrac{1}{i(k_n - k_m)} e^{i(k_n - k_m)x}\Big|_0^l = 0, & \text{если } n \neq m, \end{cases}$$

так как

$$e^{i(k_n - k_m)l} = e^{i2\pi(n-m)} = 1 = e^0.$$

С учетом этого получаем

$$c_m = \frac{1}{l}\int_0^l \Phi(x)\, e^{-ik_m x}\, dx = \frac{1}{l}\int_0^l \Psi(x)\, e^{-ik_m x}\, dx. \tag{30.8}$$

С учетом того же условия нормировка приводится к виду

$$\int_0^l \Phi^*\Phi\, dx = \int_0^l \Psi^*\Psi\, dx = l\sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} |c_n|^2 = 1. \tag{30.9}$$

Выведем еще одну вспомогательную формулу. Имеем

$$\int_0^l \Phi^* \frac{\partial}{\partial x}\Phi\, dx = \int_0^l \sum_m \sum_n c_m^* c_n e^{-ik_m x} \frac{\partial}{\partial x} e^{ik_n x}\, dx =$$

$$= i\int_0^l \sum_m \sum_n c_m^* c_n k_n e^{i(k_n - k_m)x}\, dx,$$

или после перестановки порядка суммирования и интегрирования

$$\int_0^l \Phi^* \frac{\partial}{\partial x}\Phi\, dx = i\sum_m \sum_n c_m^* c_n k_n \int_0^l e^{i(k_n - k_m)x}\, dx.$$

Входящий сюда интеграл уже был вычислен выше. Воспользовавшись вычисленным значением, получим

$$-i\int_0^l \Phi^* \frac{\partial}{\partial x}\Phi\, dx = l\sum |c_n|^2 k_n. \tag{30.10}$$

4. До сих пор мы не обращали внимания на зависимость функции Ψ, а с ней и функции Φ, от времени t. Наши вычисления, в сущности, относились к функциям $\Psi(x, t)$ и $\Phi(x, t)$ при фиксированном значении t, — время t рассматривалось как па-

раметр. Временная зависимость определится из требования, чтобы функции Ψ и Φ удовлетворяли временному уравнению Шредингера (21.5). Такому условию удовлетворяет функция

$$\Phi(x,\ t) = \sum_n c_n e^{i(k_n x - \omega_n t)}, \tag{30.11}$$

где частоты ω_n определяются законом дисперсии $\omega_n = \omega_n(k_n)$ по формуле (19.6). Этот ряд представляет собой разложение функции $\Phi(x,\ t)$ по плоским волнам де Бройля [1]).

Волне де Бройля $e^{i(k_n x - \omega_n t)}$ соответствует импульс $p_n = \hbar k_n$. Значения импульса дискретны. Но эта дискретность искусственная и получилась в результате замены истинной волновой функции $\Psi(x,\ t)$ на вспомогательную периодическую функцию $\Phi(x,\ t)$. *Истинные значения импульса непрерывны.* И действительно, чем длиннее взять период l, тем меньше расстояние между соседними значениями дискретного спектра импульса. В пределе, когда $l \to \infty$, это расстояние стремится к нулю, так что фактически импульс становится величиной, меняющейся непрерывно. Измерение импульса в состоянии $\Phi(x,\ t)$ дает одно из значений p_n. Вероятность этого значения, в силу условия нормировки (30.9), равна $l|c_n|^2$. Поэтому среднее значение импульса, которое получится в результате измерения, будет равно

$$\langle p\rangle = \sum l\,|c_n|^2 p_n, \tag{30.12}$$

или в силу соотношения (30.10)

$$\langle p\rangle = \int_0^l \Phi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \Phi\, dx.$$

Теперь можно выполнить предельный переход к $l \to \infty$ и получить формулу

$$\langle p\rangle = \int \Psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \Psi\, dx, \tag{30.13}$$

в которой всякая неопределенность, связанная с введением вспомогательной функции Φ, исчезла. При этом интегрирование распространяется уже по всему бесконечному пространству, так как большие значения x не вносят никакого вклада в интеграл.

---

[1]) Произвольную функцию $\Phi(x,\ t)$, периодичную по x, можно разложить в ряд Фурье по x, коэффициенты которого будут функциями t. Распространено ошибочное мнение, что это и есть разложение по плоским волнам де Бройля. Ошибка состоит в том, что периодическая функция $\Phi(x,\ t)$ не может быть произвольной, а должна удовлетворять уравнению Шредингера (21.5). Это накладывает ограничения на коэффициенты разложения как функции времени t.

Рассуждая аналогичным образом, можем без труда получить для произвольного целого положительного n

$$\langle p^n \rangle = \int \Psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)^n \Psi \, dx, \tag{30.14}$$

а для целой рациональной функции импульса

$$\langle F(p) \rangle = \int \Psi^* F(\hat{p}) \Psi \, dx, \tag{30.15}$$

где через $\hat{p}$ обозначен оператор

$$\hat{p} \equiv \hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \tag{30.16}$$

называемый *оператором импульса*, точнее — оператором проекции импульса $\hat{p}_x$.

5. Квантовая механика постулативно обобщает полученные результаты на любые физические величины, являющиеся функциями координат и импульсов. Иначе говоря, она полагает

$$\langle F(x, p) \rangle = \int \Psi^*(x) F(\hat{x}, \hat{p}) \Psi(x) \, dx. \tag{30.17}$$

Здесь $F(x, p)$ — целая рациональная функция координат и импульсов, как она определяется классически, а $F(\hat{x}, \hat{p})$ — соответствующий ей оператор. Формула (30.17) и может быть положена в основу введения операторов в квантовую механику. Заметим, что поскольку мы располагаем операторами $\hat{x}$ и $\hat{p}$ в прямоугольных координатах, при нахождении оператора $F(\hat{x}, \hat{p})$ надо исходить из соответствующей классической формулы также в прямоугольных координатах или в векторной форме.

Нелишне подчеркнуть, что под x и p в формуле (30.17) нельзя понимать значения координаты x и импульса p, полученные в результате одного и того же измерения. Такое понимание противоречит принципу неопределенностей Гейзенберга. Под x и p следует понимать координату и импульс в классическом смысле. Квантовая механика заменяет эти величины операторами $\hat{x}$ и $\hat{p}$ и вводит новые операторы $F(\hat{x}, \hat{p})$. Оператор $F(\hat{x}, \hat{p})$ получается в результате применения к $\hat{x}$ и $\hat{p}$ тех же операций сложения и умножения, с помощью которых в классической физике по значениям x и p находится значение функции $F(x, p)$. Здесь *нет еще никакой статистичности, свойственной квантовой* механике. Статистичность появляется при переходе к формуле (30.17), ибо она дает только среднее значение функции $F(x, p)$, а не ее истинное значение (которое в квантовой механике, вообще говоря, может не иметь никакого смысла из-за невозможности характеризовать состояние частицы одновременным заданием x и p). Полученне оператора $F(\hat{x}, \hat{p})$ из классической функции $F(x, p)$ обусловливает, наряду с другими соображениями, тесную связь между классической и квантовой механиками. По-

лучается парадоксальное утверждение, что обоснование квантовой механики *принципиально невозможно* без механики классической, хотя квантовая механика и является более общей теорией, в которой классическая механика содержится как предельный частный случай. Этот предельный случай получается из квантовой механики, когда постоянная Планка $\hbar$ пренебрежимо мала по сравнению со всеми величинами той же размерности, играющими роль в рассматриваемом явлении.

Все полученные результаты выведены для одномерного случая. Это сделано только в целях простоты и сокращения записи формул. Но эти результаты без труда обобщаются и на трехмерный случай. Так, оператором трехмерного импульса частицы является символический вектор

$$\hat{\boldsymbol{p}} = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x}\boldsymbol{i} + \frac{\partial}{\partial y}\boldsymbol{j} + \frac{\partial}{\partial z}\boldsymbol{k}\right) = -i\hbar\nabla, \tag{30.18}$$

а формула для среднего значения такого импульса принимает вид

$$\langle \boldsymbol{p} \rangle = \int \Psi^* (-i\hbar\nabla)\Psi\, dV, \tag{30.19}$$

где интегрирование производится по всему пространству V, а функция Ψ предполагается нормированной к единице:

$$\int \Psi^*\Psi\, dV = 1. \tag{30.20}$$

Таким образом, всякой классической величине $F(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p})$ квантовая механика сопоставляет оператор $F(\hat{\boldsymbol{r}}, \hat{\boldsymbol{p}})$, получающийся заменой классических величин $\boldsymbol{r}$ и $\boldsymbol{p}$ на соответствующие операторы $\hat{\boldsymbol{r}}$ и $\hat{\boldsymbol{p}}$. При этом связь с реально наблюдаемыми величинами устанавливается статистически с помощью формулы

$$\langle F(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p})\rangle = \int \Psi^* F(\hat{\boldsymbol{r}}, \hat{\boldsymbol{p}})\Psi\, dV. \tag{30.21}$$

6. Поставим теперь вопрос, не существует ли таких состояний, что при измерении величины L, соответствующей оператору $\hat{L}$, всегда получается определенное значение L. Легко видеть, что такому условию удовлетворяют волновые функции, являющиеся решениями уравнения

$$\hat{L}\Psi = L\Psi. \tag{30.22}$$

Действительно, в этом случае

$$\langle L\rangle = \int \Psi^*\hat{L}\Psi\, dx = \int \Psi^* L\Psi\, dx = L\int \Psi^*\Psi\, dx = L,$$

т. е. среднее значение $\langle L\rangle$ всегда равно L. А это возможно тогда и только тогда, когда результат каждого измерения равен L. Мы доказали достаточность условия (30.22). Немного сложнее до-

казывается и его необходимость, но на этом мы не будем останавливаться.

Функции Ψ, удовлетворяющие уравнению (30.22), называются *собственными функциями* оператора $\hat{L}$, а числа L — его *собственными значениями*. В квантовой механике принимается, что *при измерении физической величины могут получиться (с той или иной вероятностью) только собственные значения соответствующего ей оператора*. Так как физические величины *существенно вещественны*, то операторы $\hat{L}$ физических величин должны быть такими, чтобы их собственные значения были также *вещественными*. Но мы не будем углубляться в обсуждение условий, при которых это требование выполняется.

Уравнение (30.22) является обобщением на случай любых физических величин правила квантования энергии, рассмотренного в предыдущей главе. Чтобы убедиться в этом, найдем оператор $\hat{H}$, соответствующий полной энергии частицы. Согласно изложенному такой оператор представляется суммой операторов кинетической и потенциальной энергий, т. е.

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \hat{U} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U. \tag{30.23}$$

Следовательно, (30.22) переходит в

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U\right)\psi = \mathscr{E}\psi.$$

Это уравнение Шредингера (21.7) для стационарных состояний. Таким образом, сокращенно его можно записать в символической форме

$$\hat{H}\psi = \mathscr{E}\psi, \tag{30.24}$$

отличающейся от (30.22) только обозначениями. Общее уравнение Шредингера (21.5) для нестационарных состояний также можно записать символически:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi. \tag{30.25}$$

Для полноты заметим, что *уравнение* (30.25) *справедливо не только в случае потенциальных сил, но и в случае, когда силы потенциалом не обладают* (например, магнитные силы). Требуется только, чтобы соответствующие классические уравнения могли быть записаны в форме *уравнений Гамильтона*. В этом случае $\hat{H}$ называют *оператором Гамильтона* или *гамильтонианом*. Если силы потенциальны, то гамильтониан тождественно совпадает с оператором энергии.

Приведем второй пример на применение уравнения (30.22). Найдем собственные функции и собственные значения оператора импульса. Ограничиваясь одномерным случаем, положим

$L = \hat{p} = -i\hbar\,\partial/\partial x$ и получим

$$-i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial x} = p\Psi.$$

Отсюда

$$\Psi = C(t)\,e^{ipx/\hbar} = C(t)\,e^{ikx}.$$

Чтобы удовлетворить общему уравнению Шредингера (30.25), следует положить $C(t) = Ce^{-i\omega t}$, т. е.

$$\Psi = Ce^{i(kx-\omega t)}. \tag{30.26}$$

Таким образом, собственными функциями оператора импульса являются плоские волны де Бройля. Параметр p может принимать любые значения, т. е. спектр собственных значений оператора $\hat{p}$ непрерывный.

В связи с этим заметим, что к уравнению (30.22) мы пришли на основе уравнения (30.21). Наш вывод последнего предполагал выполнение условия нормировки (30.20), т. е. обращения функции Ψ в нуль на бесконечности. Собственные функции (30.26) этому условию не удовлетворяют. Да и в случае оператора энергии при $\mathscr{E} > 0$ собственные значения образуют непрерывный спектр, и нормировка (30.20) не может быть выполнена. В этих случаях наше доказательство формулы (30.22) не проходит. Однако сама формула (30.22) остается верной. Можно так обобщить нормировку (30.20), чтобы распространить доказательство и на такие случаи. Но для этого надо пользоваться *обобщенными функциями*. На этом формальном вопросе мы останавливаться не будем. В физике в принципе достаточно ограничиться волновыми функциями, обращающимися в нуль на бесконечности, для которых нормировка (30.20) всегда выполняется.

7. Остановимся в заключение еще на одном вопросе, специфическом только для квантовой, но не классической механики. Пусть $\hat{A}$ и $\hat{B}$ — два квантовомеханических оператора, каждому из которых соответствует свой спектр собственных значений. Всегда ли существует состояние Ψ, в котором оба оператора имеют определенные собственные значения A и B? Иными словами, существует ли состояние Ψ, в котором обе величины A и B измеримы одновременно? Для ответа на этот вопрос допустим, что Ψ_n является собственной функцией как оператора $\hat{A}$, так и оператора $\hat{B}$, т. е.

$$\hat{A}\Psi_n = A_n\Psi_n, \quad \hat{B}\Psi_n = B_n\Psi_n,$$

где A_n и B_n — числа, представляющие собой собственные значения операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$ в одном и том же состоянии Ψ_n. Умножим первое равенство слева на оператор $\hat{B}$. Получим

$$\hat{B}\hat{A}\Psi_n = \hat{B}A_n\Psi_n = A_n\hat{B}\Psi_n = A_nB_n\Psi_n.$$

Аналогично

$$\hat{A}\hat{B}\Psi_n = B_n A_n \Psi_n.$$

Отсюда $(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\Psi_n = 0$. На этом основании нельзя еще заключить, что $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$, так как Ψ_n — не произвольная функция, а лишь одна из общих собственных функций операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$ [1]).

Допустим, однако, что каждая собственная функция оператора $\hat{A}$ является также собственной функцией оператора $\hat{B}$ и наоборот. Существует математическая теорема, которую мы доказывать не будем, что произвольная волновая функция Ψ может быть разложена по собственным функциям оператора $\hat{A}$ (или, что то же самое, оператора $\hat{B}$), т. е.

$$\Psi = \sum c_n \Psi_n$$

(предполагается, что спектр дискретный, что несущественно). Из этой формулы и из соотношения $(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\Psi_n = 0$ следует

$$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\Psi = 0.$$

Теперь уже ввиду произвольности Ψ можно заключить, что

$$\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}, \tag{30.27}$$

т. е. операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ коммутативны. Действительно, единственный оператор, обращающий в нуль произвольную функцию, есть оператор умножения на нуль.

Итак, *если все собственные функции операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$ совпадают, то эти операторы коммутируют.* Справедлива и обратная теорема: *если операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ коммутируют, то совпадают и их собственные функции.* Эту теорему мы также примем без доказательства.

Приведенной теореме можно придать и другую формулировку. *Две величины A и B измеримы одновременно, вообще говоря, тогда и только тогда, когда соответствующие им операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ коммутируют.* Это правило может нарушаться только в отдельных исключительных случаях (см. § 31, пункты 1 и 4).

Например, координаты x и y можно измерить одновременно, так как операторы $\hat{x}$ и $\hat{y}$ коммутируют. Напротив, координата x и соответствующий ей импульс p_x одновременно измерены быть не могут, поскольку операторы $\hat{x}$ и $\hat{p}_x$ не коммутируют, как это видно из формулы (30.1). Именно этого требует принцип неопределенностей Гейзенберга. Координата x и импульс p_y, соответствующий другой координате y, измеримы одновременно,

[1]) Например, из равенства $\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^3}{\partial x^3}\right) x = 0$ не следует, что $\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^3}{\partial x^3} = 0$.

ибо операторы $\hat{x}$ и $\hat{p}_y = -i\hbar\,\partial/\partial y$ коммутируют, поскольку при дифференцировании по y координата x ведет себя как постоянная.

§ 31. Момент импульса частицы

1. Момент импульса частицы $\boldsymbol{l}$ относительно начала координат O в классической механике определяется векторным произведением $[\boldsymbol{rp}]$. Такое определение в квантовой механике не имеет смысла, поскольку не существует состояния, в котором бы оба вектора $\boldsymbol{r}$ и $\boldsymbol{p}$ имели определенные значения. В квантовой механике векторному произведению $[\boldsymbol{rp}]$ соответствует оператор

$$\hat{\boldsymbol{l}} = [\hat{\boldsymbol{r}}\hat{\boldsymbol{p}}] \tag{31.1}$$

Раскрывая это векторное произведение и соблюдая при этом порядок расположения операторов координат и проекций вектора импульса, найдем операторы проекций момента импульса на координатные оси X, Y, Z:

$$\begin{aligned}
\hat{l}_x &= (\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y) = i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial z}\right),\\
\hat{l}_y &= (\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z) = i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial x}\right),\\
\hat{l}_z &= (\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x) = i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y}\right).
\end{aligned} \tag{31.2}$$

Через эти проекции сам оператор вектора момента импульса выражается формулой

$$\hat{\boldsymbol{l}} = \boldsymbol{i}\hat{l}_x + \boldsymbol{j}\hat{l}_y + \boldsymbol{k}\hat{l}_z. \tag{31.3}$$

Смысл этого векторного оператора выяснится, если написать результат действия его на произвольную функцию ψ. Это есть

$$\hat{\boldsymbol{l}}\psi = \boldsymbol{i}(\hat{l}_x\psi) + \boldsymbol{j}(\hat{l}_y\psi) + \boldsymbol{k}(\hat{l}_z\psi), \tag{31.4}$$

т. е. вектор с составляющими $\hat{l}_x\psi$, $\hat{l}_y\psi$ и $\hat{l}_z\psi$. Таким образом, произвольной волновой функции ψ соответствует вектор, определяемый выражением (31.4). Возникает, однако, вопрос, существует ли такая функция ψ, для которой все три проекции вектора (31.4) имеют определенные значения, т. е. одновременно выполняются все три равенства:

$$\hat{l}_x\psi = l_x\psi, \quad \hat{l}_y\psi = l_y\psi, \quad \hat{l}_z\psi = l_z\psi. \tag{31.5}$$

Для ответа на этот вопрос надо найти правила коммутации операторов $\hat{l}_x$, $\hat{l}_y$, $\hat{l}_z$. Перемножая операторы $\hat{l}_x$ и $\hat{l}_y$ и сохраняя