ЛЕКЦИЯ 2

ПОСТУЛАТИ НА КВАНТОВАТА МЕХАНИКА. СЪСТОЯНИЯ С ОПРЕДЕЛЕНИ СТОЙНОСТИ НА ФИЗИЧНИТЕ ВЕЛИЧИНИ. СЪОТНОШЕНИЕ ЗА НЕОПРЕДЕЛЕНОСТ

1. Постулати на квантовата механика

В класическата механика състоянието на система с s степени на свобода в произволен момент време t е напълно определено от стойностите на $2s$ динамични променливи – s на брой обобщени координати и s на брой обобщени скорости (или обобщени импулси).

В квантовата механика описанието на състоянията на физичните системи, които се делят на смесени и чисти, има вероятностен характер. Чистите състояния могат да се разглеждат като частен случай на смесените [1]. Ние ще се ограничим с разглеждането само на чисти състояния (смесените състояния се разглеждат в курса по статистическа физика и термодинамика). Всички свойства на едно чисто състояние може да се опишат с ***вълнова функция*** $\Psi(\xi, t)$, която е комплексна функция на s обобщени координати $\xi = \{\xi_i\}_{i=1}^{s}$ и времето t , което се разглежда като параметър. Величината $\left|\Psi(\xi, t)\right|^2$ представлява плътността на вероятността в момент t системата да се намира в безкрайно малка околност на точката с обобщени координати ξ .

Пълната вероятност е прието да се нормира на единица (вж. Лекция 1)

$$\|\Psi\|^2 \equiv \int |\Psi(\xi, t)|^2 \, d\xi = 1 , \tag{2,1}$$

където интегрирането е по цялата дефиниционна област на функцията $\Psi(\xi, t)$. Следователно, вълновата функция трябва да бъде квадратично интегруема.

Множеството от всички квадратично интегруеми комплексни функции на s реални променливи се явява ***линейно хилбертово пространство*** L_2 . Това пространство е безкрайномерно, т.е. в него има безбройно много линейно независими вектори .

Положението, че само квадратично интегруемите функции описват реални състояния на физичните системи, се явява най-важното изходно положение на квантовата механика. Тук трябва да отбележим, че в апарата на квантовата механика не рядко се използват и такива състояния, които не се описват с квадратично интегруеми функции и тяхната връзка с реалните състояния трябва да се изяснява специално във всеки случай.

В квантовата механика се постулират следните положения:

Постулат 1: ***На всяко състояние на системата се съпоставя вълнова функция*** $\Psi(\xi, t)$ ***, която е елемент (вектор) на*** L_2 ***, т.е.*** $\Psi(\xi, t) \equiv |\psi\rangle \in L_2$.

Скаларно произведение в L_2 се определя така:

$$\langle \Psi_i | \Psi_k \rangle \equiv \int \Psi_i^*(\xi, t)\, \Psi_k(\xi, t)\, d\xi \ , \qquad (2,2)$$

където Ψ_i и Ψ_k са произволни елементи на L_2 , а звездичката означава комплексно спрягане.

Свойства на скаларното произведение в L_2 :

$$\langle \Psi_i | \Psi_k \rangle = \langle \Psi_k | \Psi_i \rangle^* \ , \qquad (2,3а)$$

$$\langle \Psi_i | \Psi_k \rangle \geq 0 \ , \qquad (2,3б)$$

$$\langle \lambda \Psi_i | \Psi_k \rangle = \lambda^* \langle \Psi_i | \Psi_k \rangle \ , \quad \lambda \in \mathrm{C} \qquad (2,3в)$$

$$\langle \Psi_i | \lambda \Psi_k \rangle = \lambda \langle \Psi_i | \Psi_k \rangle \ , \quad \lambda \in \mathrm{C} \qquad (2,3г)$$

$$\langle \Psi_i + \Psi_k | \Psi \rangle = \langle \Psi_i | \Psi \rangle + \langle \Psi_k | \Psi \rangle \ , \qquad (2,3д)$$

$$\langle \Psi | \Psi_i + \Psi_k \rangle = \langle \Psi | \Psi_i \rangle + \langle \Psi | \Psi_k \rangle \ . \qquad (2,3е)$$

Свойството (2,3б) позволява да се въведе в L_2 норма с помощта на съотношението

$$\| \Psi \| = +\sqrt{\langle \Psi | \Psi \rangle} \ . \qquad (2,4)$$

Важно свойство на пространството L_2 се явява съществуването в него на ***пълен ортонормиран набор от вектори*** $\{\varphi_i\}_{i=1}^{\infty}$. Ортонормираността на този набор означава, че

$$\langle \varphi_i | \varphi_k \rangle = \delta_{ik} \ , \quad i, k = 1, 2, \dots \ , \qquad (2,5)$$

където δ_{ik} е символ на Кронекер, а пълнотата – че няма вектор от L_2 , различен от нула и ортогонален на всички вектори от набора.

Всеки пълен ортонормиран набор от вектори $\{\varphi_i\}_{i=1}^{\infty}$ в L_2 образува ***ортонормиран базис*** в това пространство, т.е. произволен вектор $\Psi \in L_2$ може еднозначно да се представи във вида

$$\Psi = \sum_{k=1}^{\infty} a_k \varphi_k \ , \qquad (2,6)$$

където коефициентите

$$a_k = \langle \varphi_k | \Psi \rangle \ . \qquad (2,7)$$

играят ролята на координати на Ψ спрямо този базис.

Лесно може да се получи равенството

$$\int |\Psi(\xi)|^2 \, d\xi = \sum_{k=1}^{\infty} |a_k|^2 \, . \tag{2,8}$$

Сега ще покажем, че (2,8) е еквивалентно на равенството

$$\sum_{k=1}^{\infty} \varphi_k^*(\xi) \varphi_k(\xi') = \delta(\xi - \xi') \ , \tag{2,9}$$

където $\delta(\xi - \xi')$ е делта-функцията на Дирак (вж. Приложение 1).

Нека (2,9) е изпълнено. Тогава имаме

$$\sum_{k=1}^{\infty} |a_k|^2 = \sum_{k=1}^{\infty} |\langle \varphi_k | \Psi \rangle|^2 = \int \Psi(\xi) \Psi^*(\xi') \left(\sum_{k=1}^{\infty} \varphi_k^*(\xi) \varphi_k(\xi') \right) d\xi \, d\xi' =$$
$$= \int \Psi(\xi) \Psi^*(\xi') \delta(\xi - \xi') \, d\xi \, d\xi' = \int |\Psi(\xi)|^2 \, d\xi \, ,$$

т.е. от (2,9) следва (2,8).

Нека сега е изпълнено (2,8). Тогава имаме

$$\sum_{k=1}^{\infty} |a_k|^2 = \int \Psi(\xi) \Psi^*(\xi') \left(\sum_{k=1}^{\infty} \varphi_k^*(\xi) \varphi_k(\xi') \right) d\xi \, d\xi' = \int |\Psi(\xi)|^2 \, d\xi \ .$$

От последното равенство следва, че

$$\int \Psi^*(\xi') \left(\sum_{k=1}^{\infty} \varphi_k^*(\xi) \varphi_k(\xi') \right) d\xi' = \Psi^*(\xi) \ ,$$

т.е.

$$\sum_{k=1}^{\infty} \varphi_k^*(\xi) \varphi_k(\xi') = \delta(\xi - \xi') \ .$$

Условието (2,9), което е еквивалентно на (2,8), се явява необходимо и достатъчно за пълнота на ортонормирания базис $\{\varphi_k\}_{k=1}^{\infty}$ в L_2 .

Постулат 2: ***На всяка физична величина F се съпоставя линеен ермитов оператор $\hat{F}$, действащ в пространството L_2 (или в пространство, включващо L_2). Явният вид на операторите на основните физични величини се постулира. На физичната величина G , която се явява функция на друга физична величина F , се съпоставя оператора***

$$\hat{G} = \frac{1}{2} \left(G(\hat{F}) + \left(G(\hat{F}) \right)^+ \right) \ , \tag{2,10}$$

където знакът "кръст" означава ермитово спрягане.

Оператор – правило по което на една функция се съпоставя друга функция : $\Psi' = \hat{F} \, \Psi$.

Операторът $\hat{F}$ се нарича ***линеен***, ако

$$\hat{F}\left(\sum_{i=1}^{k} a_i \Psi_i\right) = \sum_{i=1}^{k} a_i \hat{F}\Psi_i \ , \qquad (2,11)$$

където $\{\Psi_i\}_{i=1}^{k}$ са произволни вектори от дефиниционната област $D_{\hat{F}}$ на оператора $\hat{F}$, а $\{a_i\}_{i=1}^{k}$ – произволни комплексни числа.

Операторът $\hat{F}^{-1}$ се нарича ***обратен*** на $\hat{F}$, ако

$$\hat{F}\hat{F}^{-1} = \hat{F}^{-1}\hat{F} = \hat{I} \ , \qquad (2,12)$$

където $\hat{I}$ е ***единичният оператор*** : $\hat{I}\Psi = \Psi$.

Операторът $\hat{F}^{+}$ се нарича ***ермитово спрегнат*** на $\hat{F}$, ако двата оператора имат една и съща дефиниционна област и е изпълнено

$$\left\langle \hat{F}\Psi_1 \middle| \Psi_2 \right\rangle = \left\langle \Psi_1 \middle| \hat{F}^{+}\Psi_2 \right\rangle \ . \qquad (2,13)$$

В означенията

$$\left\langle \Psi_1 \middle| \hat{A} \middle| \Psi_2 \right\rangle \equiv \left\langle \Psi_1 \middle| \hat{A}\Psi_2 \right\rangle \ , \qquad (2,14)$$

(2,13) се записва във вида

$$\left\langle \Psi_1 \middle| \hat{F}^{+} \middle| \Psi_2 \right\rangle = \left\langle \Psi_2 \middle| \hat{F} \middle| \Psi_1 \right\rangle^{*}. \qquad (2,15)$$

Операторът $\hat{F}$ се нарича ***ермитов***, ако $\hat{F}^{+} = \hat{F}$, т.е. ермитовият оператор удовлетворява съотношението

$$\left\langle \Psi_1 \middle| \hat{F} \middle| \Psi_2 \right\rangle = \left\langle \Psi_2 \middle| \hat{F} \middle| \Psi_1 \right\rangle^{*} \ , \qquad (2,16)$$

където Ψ_1 и Ψ_2 са произволни вектори от дефиниционната област на $\hat{F}$.

Казваме, че два оператора $\hat{A}$ и $\hat{B}$ са ***равни***

$$\hat{A} = \hat{B} \ , \qquad (2,17)$$

ако съвпадат техните дефиниционни области и за всеки елемент Ψ от тях имаме

$$\hat{A}\Psi = \hat{B}\Psi . \qquad (2,18)$$

За произволни оператори $\hat{A}$ и $\hat{B}$

$$\left(\hat{A}\hat{B}\right)^{+} = \hat{B}^{+}\hat{A}^{+} , \qquad (2,19)$$

откъдето следва по-общото съотношение

$$\left(\hat{A}\hat{B}\hat{C}\ldots\hat{F}\right)^{+} = \hat{F}^{+}\ldots\hat{C}^{+}\hat{B}^{+}\hat{A}^{+}. \qquad (2,20)$$

Линейният оператор $\hat{F}$ се нарича ***унитарен***, ако

$$\hat{F}\hat{F}^{+} = \hat{F}^{+}\hat{F} = \hat{I} \ . \qquad 2,21)$$

Следователно, унитарният оператор удовлетворява съотношението

$$\hat{F}^{+} = \hat{F}^{-1}. \qquad 2,22)$$

Операторът $\hat{A}\hat{B}$ се нарича ***произведение на операторите*** $\hat{A}$ и $\hat{B}$. Неговата дефиниционна област се явява съвокупност от всички тези $\Psi \in \mathsf{D}_{\hat{B}}$, за които $\hat{B}\Psi \in \mathsf{D}_{\hat{A}}$:

$$\hat{A}\hat{B}\Psi \equiv \hat{A}(\hat{B}\Psi). \qquad (2,23)$$

В общия случай

$$\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A} \ . \qquad (2,24)$$

и, освен това, операторите $\hat{A}\hat{B}$ и $\hat{B}\hat{A}$ могат да имат различни дефиниционни области.

Операторът
$$\left[\hat{A},\ \hat{B}\right] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \qquad (2,25)$$

се нарича ***комутатор*** на $\hat{A}$ и $\hat{B}$, ако дефиниционните области на операторите $\hat{A}\hat{B}$ и $\hat{B}\hat{A}$ съвпадат. Ако $\left[\hat{A},\ \hat{B}\right] = 0$, се казва, че операторите $\hat{A}$ и $\hat{B}$ комутират.

В квантовата механика се постулира, че ***операторът на радиус-вектора*** $\mathsf{r} = (x, y, z)$ (пространствената координата) се явява оператор на умножение с r , т.е.

$$\hat{\mathsf{r}} \equiv \mathsf{r} \ , \qquad (2,26)$$

а ***операторът на импулса*** на частицата $\vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$ е

$$\hat{\vec{p}} \equiv -i\hbar\nabla \ , \qquad (2,27)$$

където $\nabla = \left(\dfrac{\partial}{\partial x}, \dfrac{\partial}{\partial y}, \dfrac{\partial}{\partial z}\right)$.

В качеството на оператор на физичната величина $f(\mathsf{r}, \vec{p})$ се приема, съгласно (2,10), операторът

$$\hat{f} = \frac{1}{2}\Big(f(\mathsf{r}, \hat{\vec{p}}) + (f(\mathsf{r}, \hat{\vec{p}}))^{+}\Big). \qquad (2,28)$$

Тогава ***операторът на кинетичната енергия*** на частица с маса m е

$$\hat{T} = \frac{\hat{\vec{p}}^{2}}{2m} = -\frac{\hbar^{2}}{2m}\nabla^{2} = -\frac{\hbar^{2}}{2m}\Delta \ , \qquad (2,29)$$

където $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$, а ***операторът на потенциалната енергия*** на частицата е

$$\hat{U} = U(\mathrm{r}, t) \ . \qquad (2,30)$$

За оператора на пълната енергия на частица в потенциално поле $U(\mathrm{r}, t)$ получаваме

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\mathrm{r}, t) \ . \qquad (2,31)$$

От казаното по-горе следва, че на ***момента на импулса на частицата*** $\vec{L} \equiv \mathrm{r} \times \vec{p} = (L_x, L_y, L_z)$ трябва да се съпостави оператор с компоненти:

$$\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y} \right) , \qquad (2,32а)$$

$$\hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z} \right) , \qquad (2,32б)$$

$$\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x} \right) . \qquad (2,32в)$$

Въведените оператори са ермитови в L_2 .

Постулат 3: ***Физичната величина*** F ***във всяко квантовомеханично състояние може да приема само стойности, които принадлежат на спектъра на съответния й оператор*** $\hat{F}$ **.**

Числото F се нарича ***собствена стойност*** на оператора $\hat{F}$, ако в дефиниционната му област $\mathrm{D}_{\hat{F}}$ съществува функция (вектор) $\Psi \neq 0$, принадлежаща на L_2 , за която е изпълнено равенството

$$\hat{F}\Psi = F\Psi \ . \qquad (2,33)$$

Функцията Ψ се нарича ***собствена функция*** (собствен вектор) на оператора $\hat{F}$, съответстваща на собствена стойност F. Известно е [7], че съвокупността от всички собствени стойности на ермитов оператор в L_2 образува ***дискретен спектър***. Множеството от всички собствени функции на ермитовия оператор $\hat{F}$ ще означим с $\{\varphi_n\}$, а множеството от собствените му стойности – с $\{F_n\}$:

$$\hat{F}\varphi_n(\xi) = F_n\varphi_n(\xi) \ . \qquad (2,34)$$

Ако уравнението (2,33) се удовлетворява от ограничена функция $\Psi_f(\xi) \notin L_2$,

$$\hat{F}\,\Psi_f(\xi) = f\,\Psi_f(\xi)\ , \tag{2,35}$$

то числото f принадлежи на ***непрекъснатия спектър*** на оператора $\hat{F}$. Съответстващата собствена функция Ψ_f се нарича функция на непрекъснатия спектър. Множеството от всички функции на непрекъснатия спектър на оператора $\hat{F}$ ще означим с $\{\Psi_f\}$, а множеството от точки на непрекъснатия спектър – с $\{f\}$. Важно е да отбележим, че операторът на импулса (2,27) е оператор с непрекъснат спектър.

Съвокупността от дискретния и непрекъснатия спектър се нарича ***пълен спектър*** на $\hat{F}$. Доказва се [8], че пълният спектър $\{F_n\}\bigcup\{f\}$ на ермитов оператор е реален.

Ще докажем реалността на дискретния спектър на ермитов оператор. Нека φ_n е собствена функция на ермитовия оператор $\hat{F}$, съответстваща на собствена стойност F_n :

$$\hat{F}\varphi_n = F_n\varphi_n\ , \quad \varphi_n \neq 0\ .$$

От тук получаваме

$$F_n = \frac{\left\langle \varphi_n \middle| \hat{F}\varphi_n \right\rangle}{\left\langle \varphi_n \middle| \varphi_n \right\rangle},$$

$$F_n^* = \frac{\left\langle \varphi_n \middle| \hat{F}\varphi_n \right\rangle^*}{\left\langle \varphi_n \middle| \varphi_n \right\rangle^*} = \frac{\left\langle \varphi_n \middle| \hat{F}^+\varphi_n \right\rangle}{\left\langle \varphi_n \middle| \varphi_n \right\rangle} = \frac{\left\langle \varphi_n \middle| \hat{F}\varphi_n \right\rangle}{\left\langle \varphi_n \middle| \varphi_n \right\rangle} = F_n\ ,$$

като използвахме равенството (2,16) за ермитов оператор.

Реалността на спектъра на всяка физична величина се намира в съответствие с изискването за реалност на резултата от всяко нейно измерване.

Може да се окаже, че на различни собствени функции $\varphi_{n_1}, \varphi_{n_2}, \dots, \varphi_{n_s}$ съответства една и съща собствена стойност F_n . Такава собствена стойност се нарича ***изродена*** , а броят на съответстващите ѝ линейно независими собствени функции – ***кратност на израждане*** на тази собствена стойност (в случая, F_n е s -кратно изродена).

Ще покажем, че собствените функции, съответстващи на различни собствени стойности на всеки ермитов оператор, са взаимно ортогонални. Имаме

$$\hat{F}\varphi_n = F_n\varphi_n\ , \quad \hat{F}\varphi_m = F_m\varphi_m\ , \quad F_n \neq F_m.$$

Умножаваме двете страни на първото равенство скаларно с $\varphi_m^* \equiv \langle\varphi_m|$, а на второто – с $\varphi_n^* \equiv \langle\varphi_n|$ и изваждаме от първото комплексно спрегнатото на второто.

Като използваме ермитовостта на оператора $\hat{F}$ и реалността на неговите собствени стойности, получаваме

$$0 = (F_n - F_m)\langle \varphi_m | \varphi_n \rangle \ .$$

Тъй като по условие $F_n \neq F_m$, от тук следва, че $\langle \varphi_m | \varphi_n \rangle = 0$.

Така, собствените функции на оператор с дискретен спектър образуват ортонормиран базис :

$$\langle \varphi_m | \varphi_n \rangle = \int \varphi_m^*(\xi) \varphi_n(\xi)\, d\xi = \delta_{mn} \ . \qquad (2,36)$$

Показва се [9], че функциите на непрекъснатия спектър удовлетворяват условието

$$\int \Psi_f^*(\xi) \Psi_{f'}(\xi)\, d\xi = \delta(f - f') \ , \qquad (2,37)$$

което е аналогично на (2,36). Освен това, всяка собствена функция Ψ_f е ортогонална на всяка собствена функция φ_n :

$$\langle \varphi_n | \Psi_f \rangle = 0 \ . \qquad (2,38)$$

Собствените функции $\{\varphi_n\}$ и $\{\Psi_f\}$ на оператор на физична величина удовлетворяват равенството

$$\sum_{\{F_n\}} \varphi_n^*(\xi) \varphi_n(\xi') + \int df \ \Psi_f^*(\xi) \Psi_f(\xi') = \delta(\xi - \xi') \ , \qquad (2,39)$$

което е аналогично на условието (2,9) за пълнота на базиса в L_2 . Равенството (2,39) се явява критерий за пълнота на набора $\{\varphi_n\}$ и $\{\Psi_f\}$ в L_2 . Всяка функция $\Psi \in L_2$ може еднозначно да бъде представена във вида

$$\Psi(\xi) = \sum_{\{F_n\}} a_n \varphi_n(\xi) + \int_{\{f\}} a_f \Psi_f(\xi)\, df \ , \qquad (2,40)$$

където сумирането се извършва по всички точки на дискретния спектър, а интегрирането – по всички точки на непрекъснатия спектър, при което, поради условията за ортонормираност (2,36) и (2,37),

$$a_n = \langle \varphi_n | \Psi \rangle , \quad a_f = \langle \Psi_f | \Psi \rangle \ . \qquad (2,41)$$

Трябва да отбележим, че a_n и a_f удовлетворяват условието за нормировка

$$\sum_n |a_n|^2 + \int |a_f|^2 df = 1 \ . \qquad (2,42)$$

Във формули (2,39) и (2,40) се подразбира, че на всяка стойност F_n или f могат да съответстват няколко линейно независими функции. Съответните допълнителни индекси на сумиране и интегриране са изпуснати, за да не усложняват записа на формулите.

Всяка стойност на физичната величина F е представена в състоянието $\Psi(\xi, t)$ с някаква вероятност, която изобщо се изменя с времето. Нека $\rho(F_n)$ е вероятността за това, в състояние $\Psi(\xi, t)$ в момент t физичната величина F да има стойност F_n , а $\rho(f)$ е плътността на вероятността за f от непрекъснатата част на спектъра.Очевидно е изпълнено

$$\sum_n \rho(F_n) + \int \rho(f)\, df = 1 \ . \tag{2,43}$$

Средната стойност на величината F в състояние $\Psi(\xi, t)$ е

$$\langle F \rangle \equiv \bar{F} = \sum_n F_n \rho(F_n) + \int f\, \rho(f)\, df \ , \tag{2,44}$$

а дисперсията –

$$\langle D_F \rangle \equiv \sum_n (F_n - \bar{F})^2 \rho(F_n) + \int (f - \bar{f})^2\, \rho(f)\, df \ . \tag{2,45}$$

Постулат 4 : ***Средната стойност на физичната величина*** F ***в състояние*** $\Psi(\xi, t)$ ***се дава с формулата***

$$\langle F \rangle = \frac{\langle \Psi | \hat{F} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \cdot \tag{2,46}$$

Ако вълновата функция е нормирана на единица, то

$$\langle F \rangle = \langle \Psi | \hat{F} | \Psi \rangle \ . \tag{2,47}$$

Виждаме, че зависимостта на $\langle F \rangle$ от t се определя от зависимостта от t на вълновата функция и оператора $\hat{F}$.

Лесно се доказва, че $\langle F \rangle$ е реална величина, като се използва ермитовостта на оператора $\hat{F}$ (2,16) :

$$\langle F \rangle^* = \langle \Psi | \hat{F} | \Psi \rangle^* = \langle \Psi | \hat{F} | \Psi \rangle = \langle F \rangle \ .$$

За да разберем физичния смисъл на коефициентите $\{a_n\}$ и $\{a_f\}$ в (2,40), ще пресметнем средната стойност на величината F в състоянието $\Psi(\xi)$, определено от (2,40) :

$$\langle F \rangle = \langle \Psi | \hat{F} | \Psi \rangle = \left\langle \sum_{\{F_n\}} a_n \varphi_n + \int_{\{f\}} a_f \Psi_f\, df \,\middle|\, \hat{F} \,\middle|\, \sum_m a_m \varphi_m + \int_{\{g\}} a_g \Psi_g\, dg \right\rangle =$$

$$= \sum_{\{F_n\}} \sum_{\{F_m\}} a_n^* a_m \langle \varphi_n | \hat{F} | \varphi_m \rangle + \int_{\{f\}} \int_{\{g\}} a_f^* a_g \langle \Psi_f | \hat{F} | \Psi_g \rangle = \sum_{\{F_n\}} | a_n |^2 F_n + \int_{\{f\}} | a_f |^2 f \, df .$$

Следователно

$$\langle F \rangle = \sum_{\{F_n\}} | a_n |^2 F_n + \int_{\{f\}} | a_f |^2 f \, df . \tag{2,48}$$

За получаване на (2,48) е използвано, че скаларните произведения на функции от дискретната част на спектъра с функциите на непрекъснатия спектър на $\hat{F}$ са нули, (2,38). Сравнявайки (2,44) с (2,48), получаваме физичния смисъл на коефициентите: $\rho(F_n) = | a_n |^2$ е вероятността в резултат на измерване на физичната величина F в състояние $\Psi(\xi)$ да бъде получена стойност F_n . Ако F_n е изродена собствена стойност на $\hat{F}$ с кратност на израждане N, то в сумата (2,48) ще има N събираеми с една и съща стойност F_n . Тогава вероятността в резултат на измерване да бъде получена стойност F_n ще бъде $\rho(F_n) = \sum_{k=1}^{N} | a_{nk} |^2$. Аналогично, от (2,48) следва, че плътността на вероятността, да се получи в резултат на измерване стойност, лежаща в околност на точката f от непрекъснатия спектър, е $\rho(f) = | a_f |^2$, а при N-кратно израждане $- \rho(f) = \sum_{k=1}^{N} | a_{fk} |^2$.

От (2,46) се вижда, че средната стойност не се променя при умножаване на вектора на състоянието Ψ с произволно комплексно число с модул единица, т.е. с $e^{i\delta}$ ($\delta -$ реално число).

Така вълновата функция, описваща състоянието, напълно характеризира резултатите от измерването на различни физични величини, т.е. дава пълно описание на състоянието. Вероятностния характер на това описание отразява същността на физичните закони, на които се подчиняват квантовомеханичните системи.

2. Състояния с определени стойности на физичните величини

По-горе беше показано как се намира разпределението на физичната величина F в произволно състояние Ψ.

Първо, поставя се въпросът, дали съществуват състояния, в които резултатът от измерване на величините може да бъде предсказан с достоверност. Очевидно, това са само състоянията Ψ , за които дисперсията на величината F е равна на нула.

Съгласно Постулат 2, на величината $(F - \langle F \rangle)^2$ трябва да се съпостави оператора

$$\hat{D}_F = \left(\hat{F} - \langle F \rangle \right)^2 . \tag{2,49}$$

Средната стойност на тази величина в състояние Ψ (дисперсията $\langle D_F \rangle$ на F), съгласно Постулат 4, е

$$\langle D_F \rangle = \langle \Psi | \left(\hat{F} - \langle F \rangle\right)^2 | \Psi \rangle \ . \qquad (2,50)$$

В търсеното състояние Ψ

$$\langle D_F \rangle = \left\| \left(\hat{F} - \langle F \rangle\right)\Psi \right\|^2 = 0 \ ,$$

откъдето получаваме $\left(\hat{F} - \langle F \rangle\right)\Psi = 0$, т.е. търсените състояния се описват от собствените функции на оператора $\hat{F}$. В тези състояния средната стойност е равна на една от собствените стойности : $\langle F \rangle = F_n$.

Второ, поставя се въпросът, дали съществуват състояния, в които няколко физични величини имат определени стойности. Отговор на този въпрос дава следната теорема : Два ермитови оператора $\hat{A}$ и $\hat{B}$ с дискретни спектри имат в L_2 общ пълен набор собствени функции тогава и само тогава, когато тяхният комутатор е равен на нула ($[\hat{A}, \hat{B}] = 0$). Доказателството на тази теорема може да се види в [8].

Трето, интересно е какво може да се каже за състояния, в които повече от две физични величини имат определени стойности и колко са тези величини. Очевидно, те са толкова, колкото са взаимно комутиращите оператори на физични величини. Обаче не всички тези величини ще бъдат независими – може да се окаже, че някои от тях са функции на други. Ще наричаме наборът ***независими*** физични величини за дадена система ***пълен***, ако операторите на всички тези величини комутират помежду си и този набор не може да бъде разширен (попълнен). Съответстващият набор ермитови оператори също се нарича ***пълен***.

3. Съотношение за неопределеност

Сега ще разгледаме случая, когато два оператора на физични величини не комутират, т.е.

$$[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0 \ . \qquad (2,51)$$

От цитираната по-горе теорема следва, че във всяко състояние поне една от величините A и B има различна от нула дисперсия. В квантовата механика голямо значение имат съотношенията, строго ограничаващи отдолу произведението на дисперсиите на физични величини, на които съответстват некомутиращи оператори.

Лесно се установява, че операторите на координатата и спрегнатият ѝ импулс не комутират:

$$[\hat{x},\, \hat{p}_x] = i\hbar\,, \quad [\hat{y},\, \hat{p}_y] = i\hbar\,, \quad [\hat{z},\, \hat{p}_z] = i\hbar\,. \tag{2,52}$$

Операторите на проекциите на момента на импулса също не комутират:

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\,\hat{L}_z\,, \quad [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\,\hat{L}_x\,, \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\,\hat{L}_y\,. \tag{2,53}$$

Ще покажем, че дисперсиите $\langle D_A \rangle$ и $\langle D_B \rangle$ на две физични величини, чиито оператори не комутират и удовлетворяват комутационното съотношение

$$[\hat{A},\, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = i\hat{C}\,, \tag{2,54}$$

където $\hat{C}$ е ермитов оператор, са свързани с определено неравенство, наречено ***съотношение за неопределеност***.

В произволно състояние Ψ физичните величини A и B , на които съответстват операторите $\hat{A}$ и $\hat{B}$, имат средни стойности, съгласно Постулат 4:

$$\langle A \rangle = \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle\,, \qquad \langle B \rangle = \langle \Psi | \hat{B} | \Psi \rangle\ . \tag{2,55}$$

Въвеждаме операторите

$$\Delta\hat{A} = \hat{A} - \langle A \rangle\,, \qquad \Delta\hat{B} = \hat{B} - \langle B \rangle\ . \tag{2,56}$$

Непосредствено се установява, че $\Delta\hat{A}$ и $\Delta\hat{B}$ удовлетворяват съотношението

$$[\Delta\hat{A},\, \Delta\hat{B}] = i\,\hat{C}\ . \tag{2,57}$$

За да определим връзката между

$$\langle D_A \rangle \equiv \langle (\Delta A)^2 \rangle \qquad \text{и} \qquad \langle D_B \rangle \equiv \langle (\Delta B)^2 \rangle\ , \tag{2,58}$$

разглеждаме

$$I(\eta) = \left\| (\eta\,\Delta\hat{A} - i\,\Delta\hat{B})\Psi \right\|^2 \geq 0\ , \tag{2,59}$$

където η е реален параметър. Като използваме (2,4) и свойствата (2,3в) и (2,3г) на скаларното произведение, както и обстоятелството, че операторите $\Delta\hat{A}$ и $\Delta\hat{B}$ са ермитови, получаваме

$$\begin{aligned} I(\eta) &= \left\langle (\eta\,\Delta\hat{A} - i\,\Delta\hat{B})\Psi \,\middle|\, (\eta\,\Delta\hat{A} - i\,\Delta\hat{B})\Psi \right\rangle = \\ &= \eta^2 \langle \Psi | (\Delta\hat{A})^2 | \Psi \rangle - i\eta \langle \Psi | \Delta\hat{A}\,\Delta\hat{B} | \Psi \rangle + i\eta \langle \Psi | \Delta\hat{B}\,\Delta\hat{A} | \Psi \rangle + \langle \Psi | (\Delta\hat{B})^2 | \Psi \rangle. \end{aligned} \tag{2,60}$$

Като вземем предвид (2,58) и (2,57), преобразуваме (2,60) във вида

$$I(\eta) = \langle D_A \rangle \eta^2 + \langle C \rangle \eta + \langle D_B \rangle \geq 0\ . \tag{2,61}$$

От условието за неотрицателност на функцията $I(\eta)$, при произволни реални стойности на η , получаваме ***съотношението за неопределеност***

$$\langle D_A \rangle \langle D_B \rangle \geq \frac{\langle C \rangle^2}{4} \cdot \qquad (2,62)$$

Операторите на координатата и спрегнатият й импулс не комутират (2,52) и удовлетворяват съотношението (2,54) при $\hat{A} = \hat{x}$, $\hat{B} = \hat{p}_x$ и $\hat{C} = \hbar$. Следователно

$$\langle D_x \rangle \langle D_{p_x} \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4} , \qquad (2,63)$$

което е известно като ***съотношение за неопределеност на Хайзенберг*** (1927 г.). Аналогични са съотношенията между дисперсиите на останалите координати и съответните им компоненти на импулса. От (2,63) се вижда, че колкото по-точно е локализирана частицата (по-точно е определена нейната координата), толкова по-голяма е минималната неопределеност на съответната компонента на импулса й.

Операторите на проекциите на момента на импулса също не комутират (2,53) и удовлетворяват съотношението (2,54) при $\hat{A} = \hat{L}_x$, $\hat{B} = \hat{L}_y$, $\hat{C} = \hbar \hat{L}_z$. Следователно

$$\langle D_{L_x} \rangle \langle D_{L_y} \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4} \langle L_z \rangle^2 . \qquad (2,64)$$

Аналогични са съотношенията между дисперсиите на останалите проекции на момента на импулса.

Съотношението за неопределеност се явява математичен израз на това, че частиците притежават както корпускулярни, така и вълнови свойства. В квантовата механика микрочастиците се разглеждат като принципно нови обекти, движението на които не се подчинява на класическите закони за движение на материална точка (с определени във всеки момент време координати и импулс).

Илюстрации на съотношението за неопределеност могат да се видят в [2,3,9].