

Атомная физика

Лекция 12

М.Ю. Рябиков

канд. физ.-мат. наук, в.н.с. ИПФ РАН

ННГУ им. Н.И. Лобачевского, ВШОПФ

2025

Волновая функция и операторы квантовой механики

Эксперименты по дифракции частиц → движение частиц происходит не по траекториям, а подчиняется вероятностным законам.

Возможность физическим величинам одновременно иметь определенные значения зачастую ограничивается соотношениями неопределенностей.

Отличия от классической физики.

Классическая физика: силы, действующие на частицу + начальные условия → 2-й закон Ньютона → расчет траектории частицы → полная информация о движении частицы.



Состояние частицы в данный момент времени полностью определяется её координатами $\mathbf{r}(t)$ и скоростью $\mathbf{v}(t)$.

Квантовая физика: координата и скорость вдоль этой координаты не могут одновременно иметь определенные значения (соотношения неопределенности Гейзенberга). Необходимо сформулировать понятие *состояния частицы в рамках квантовой теории*.

Неклассическая теория должна:

- давать распределение вероятностей местонахождения частиц, находящихся в произвольных внешних силовых полях;
- позволять вычислять возможные значения физических величин (импульса, энергии, момента импульса и др.) и вероятности их получения в результате измерения в данном состоянии системы;
- давать спектры энергий и других физических величин, наблюдаваемых в экспериментах;
- объяснять стабильность атомов, линейчатый характер спектров их излучения; позволить получить соотношения неопределенностей как следствия базовых принципов теории;
- включать законы классической физики как предельный или частный случай.

Такая теория – *квантовая механика (КМ)*.

М. Планк, А. Эйнштейн, Н. Бор, Л. Де Бройль, М. Борн, В. Гейзенберг – основы квантовой физики на концептуальном уровне.

В. Гейзенберг, Э. Шредингер, В. Паули, П. Дирак, М. фон Нейман и др. – КМ и её математический аппарат.

Волновая функция и шредингеровская формулировка КМ

$v \ll c \rightarrow$ нерелятивистская КМ.

В КМ состояние частиц (или системы частиц) описывается, в общем случае, комплексной функцией координат и времени $\Psi(\mathbf{r}, t)$ – **волновой функцией** (ВФ) (= амплитуда вероятности). Волна де Броиля свободной частицы – частный случай ВФ. В общем случае ВФ описывает поведение микрочастиц в силовых полях.

Физический смысл ВФ связан с вероятностью W местонахождения частицы.

Финитное движение:

$$dW = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 dV \quad (12.1)$$

(вероятность нахождения частицы в объеме dV в окрестности точки с координатой \mathbf{r} в момент времени t). → Квадрат модуля ВФ есть плотность вероятностного распределения частицы в пространстве в данный момент t . →

Условие нормировки ВФ:

$$\int_V |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 dV = 1. \quad (12.2)$$

Случай ненормированных ВФ. Пример: ВФ состояний, соответствующих инфинитному движению. → Вычисление **относительных** вероятностей.

Знание ВФ \rightarrow предсказание результатов измерений не только координат, но и других физических величин. Выражения для вероятностей даются **билинейными** формами по Ψ и Ψ^* \rightarrow ВФ определена с точностью до фазового множителя $\exp(i\alpha)$.

Принцип суперпозиции:

Если система может находиться в нескольких состояниях, описываемых ВФ-ямы $\Psi_1(\mathbf{r}, t)$, $\Psi_2(\mathbf{r}, t)$, ..., $\Psi_k(\mathbf{r}, t)$, ..., то она может находиться и в состоянии с ВФ

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = c_1 \Psi_1(\mathbf{r}, t) + c_2 \Psi_2(\mathbf{r}, t) + \dots + c_k \Psi_k(\mathbf{r}, t) + \dots \quad (12.3)$$

(c_1, c_2, \dots, c_k – постоянные коэффициенты; их смысл – ниже).

Физический смысл ВФ \rightarrow общие свойства ВФ:

- непрерывность;
- непрерывность производной по координате;
- ограниченность;
- однозначность.

Операторы

Рассмотрим некоторую физическую величину f , характеризующую состояние квантовой системы. Значения $\{f_n\} = f_1, f_2, \dots, f_k, \dots$, которые может принимать величина f , называются в КМ **собственными значениями**, а об их совокупности говорят как о **спектре** собственных значений данной величины.

Классическая механика: величины f пробегают непрерывный ряд значений.

Квантовая механика:

- (1) величины f могут пробегать непрерывный ряд (например, координаты) → **непрерывный спектр** собственных значений;
- (2) величины f могут образовывать дискретный набор (например – энергия, момент импульса) → **дискретный спектр**.

Остановимся пока на случае дискретного спектра.

Обозначим собственные значения величины f как f_n . ВФ-и Ψ_n называют **собственными функциями** данной физической величины f . Функции Ψ_n предполагаются нормированными:

$$\int |\Psi_n|^2 dq = 1. \quad (12.4)$$

Пусть система находится в некотором произвольном состоянии с ВФ, равной Ψ . Измерение над ней даст для величины f одно из собственных значений f_n , следующее измерение – в общем случае другое из этих собственных значений и т.д. Принцип суперпозиции → Ψ должна быть линейной комбинацией тех их собственных функций Ψ_n , которые соответствуют значениям f_n , могущим быть с ненулевой вероятностью обнаруженными в измерениях над системой в рассматриваемом состоянии.



$$\Psi = \sum_n a_n \Psi_n \quad (12.5)$$

(a_n – некоторые постоянные коэффициенты).



Всякая ВФ может быть разложена по собственным функциям любой физической величины. Набор таких функций называют *полной системой функций*.

Разложение (12.5) → возможность определения вероятности обнаружения у системы в состоянии Ψ того или иного значения f_n величины f .

Чему равна эта вероятность?

- Вероятности должны определяться билинейными по Ψ и Ψ^* выражениями → они должны быть билинейными и по a_n и a_n^* ;
- вероятности должны быть положительными;
- вероятность значения f_n должна обращаться в единицу для состояния с $\Psi = \Psi_n$ и в нуль, если в разложении ВФ (12.5) отсутствует слагаемое с Ψ_n .

Все эти условия выполняются только если искомая вероятность выражается как $|a_n|^2$.

Сумма вероятностей всех возможных значений f_n должна быть равна единице →

$$\sum_n |a_n|^2 = 1. \quad (12.6)$$

Коэффициенты a_n разложения функции Ψ по собственным функциям Ψ_n вычисляются как (см., напр., Ландау, Лифшиц, т.3, §3)

$$a_n = \int \Psi \Psi_n^* dq. \quad (12.7)$$

Выражение (12.7), по существу представляющее собой интеграл перекрытия между функциями Ψ и Ψ_n^* , даёт представление о том, с каким весом в интересующем нас состоянии представлено состояние с номером n .

Операторы.

Введем понятие о *среднем значении* \bar{f} величины f в данном состоянии.

Из обычного определения средних значений $\rightarrow \bar{f}$ есть сумма

$$\bar{f} = \sum_n f_n |a_n|^2. \quad (12.8)$$

Запишем \bar{f} в виде выражения, которое будет содержать не коэффициенты разложения функции Ψ , а саму эту функцию.

Введем некоторый математический объект, который мы назовём *оператором*.

Обозначим его как \hat{f} и определим следующим образом. Пусть $(\hat{f}\Psi)$ обозначает результат воздействия оператора \hat{f} на функцию Ψ . Определим \hat{f} так, чтобы интеграл от произведения $(\hat{f}\Psi)$ на комплексно сопряженную функцию Ψ^* был равен среднему значению \bar{f} :

$$\bar{f} = \int \Psi^* (\hat{f}\Psi) dq. \quad (12.9)$$

\hat{f} – линейный оператор (см., Ландау, Лифшиц, т.3):

$$\hat{f}(\Psi_1 + \Psi_2) = \hat{f}\Psi_1 + \hat{f}\Psi_2; \quad (12.10)$$

$$\hat{f}(c\Psi) = c\hat{f}\Psi. \quad (12.11)$$

Уравнение на собственные значения и собственные функции.

Воспользовавшись формулой (12.7) для a_n :

$$(12.7) \rightarrow a_n^* = \int \Psi^* \Psi_n dq, \quad (12.7a)$$

мы можем переписать определение среднего значения (12.8) в виде

$$\bar{f} = \sum_n f_n a_n a_n^* = \int \Psi^* \left(\sum_n a_n f_n \Psi_n \right) dq. \quad (12.8a)$$

Сравниваем с (12.9) → результат воздействия оператора \hat{f} на функцию Ψ имеет вид

$$(\hat{f}\Psi) = \sum_n a_n f_n \Psi_n. \quad (12.12)$$

Действие оператора \hat{f} на какую-либо функцию $\psi(q) \rightarrow$ вообще говоря, другая функция $\varphi(q)$:

$$\hat{f}\psi(q) = \varphi(q).$$

Из (12.12) видно, что если функцией Ψ является одна из собственных функций Ψ_n , то в результате воздействия на нее оператора \hat{f} эта функция просто умножается на соответствующее собственное значение f_n :

$$\hat{f}\Psi_n = f_n \Psi_n. \quad (12.13)$$

↓

Собственные функции данной физической величины являются решениями уравнения

$$\hat{f}\Psi = f\Psi, \quad (12.14)$$

где f – постоянная, а собственные значения – это те значения постоянной f , при которых (12.14) имеет решения, удовлетворяющие требуемым условиям. Вид операторов различных физических величин может быть определен из тех или иных физических соображений → возникает возможность находить собственные функции и собственные значения посредством решения уравнений (12.14).

Совокупность $f_n \rightarrow$ *спектр* собственных значений оператора \hat{f} . Этот спектр может быть *непрерывным* или *дискретным*.

О системах, обладающих и непрерывным, и дискретным спектром.

Если данному f_n соответствует s линейно независимых функций $\Psi_{n1}, \Psi_{n2}, \dots, \Psi_{ns}$, то f_n – s -кратно *вырожденное* собственное значение.

Примеры операторов физических величин.

1. Оператор координаты x (= умножение на x):

$$\hat{x}\Psi(x) = x\Psi(x). \quad (12.15)$$

Действительно, $\int \Psi^* x \Psi dx = \int x |\Psi|^2 dx = \bar{x}.$

2. Оператор, возвещенный в степень:

$$\hat{f}^2\Psi_n = \hat{f}(\hat{f}\Psi_n) = \hat{f}(f_n\Psi_n) = f_n(\hat{f}\Psi_n) = f_n^2\Psi_n. \quad (12.16)$$

3. Произвольная функция от оператора – определяется через ряд Тейлора, где степени оператора определяются аналогично (2.16):

$$\hat{f}^p\Psi_n = (f_n)^p \Psi_n. \quad (12.17)$$

4. Оператор любой функции координат (= умножение на эту ф-ю).
Пример – оператор потенциальной энергии:

$$\hat{U}(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}). \quad (12.18)$$

5. Оператор проекции импульса p_x – дифференциальный оператор:

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}. \quad (12.19)$$

Аналогично для других проекций →

Оператор вектора импульса выражается через оператор ∇ :

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla. \quad (12.20)$$

Такой вид оператора импульса есть следствие однородности пространства (Ландау, Лифшиц, т. 3, §15).

Пример. Найдем спектр собственных значений и собственные функции для проекции p_x .

Решим уравнение (12.14) с использованием (12.19):

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x} = p_x \Psi. \quad (12.21)$$

Решение:

$$\Psi(x) = A \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_x x\right), \quad (12.22)$$

где A – константа. (12.22) описывает состояние частицы с определенной проекцией импульса p_x . Подставим (12.22) в уравнение (12.21) → уравнение (12.21) удовлетворяется при \forall вещественном значении $p_x \rightarrow$ спектр собственных значений оператора \hat{P}_x – непрерывный \rightarrow свободная частица может двигаться вдоль оси x с \forall значением p_x .

6. Оператор нерелятивистской кинетической энергии: заменяем в классическом выражении для кинетической энергии $T = \frac{p^2}{2m}$ импульс \mathbf{p} на оператор $\hat{\mathbf{p}}$.

Оператор p^2 получаем возведением в квадрат оператора (12.20) →

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta, \quad (12.23)$$

где Δ – оператор Лапласа (лапласиан):

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \quad (12.24)$$

7. Оператор энергии (гамильтониан) для частицы, движущейся во внешнем поле, заданном потенциальной энергией $U(\mathbf{r})$. Классическая функция Гамильтона:

$$H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U(\mathbf{r}).$$

Переходим от классического выражения к операторам, используя (12.18) и (12.23) →

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\mathbf{r}). \quad (12.25)$$

8. Гамильтониан системы двух заряженных частиц с массами m_1, m_2 и зарядами q_1, q_2 :

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \Delta_2 + \frac{q_1 q_2}{r_{12}} \quad (12.26)$$

(r_{12} – расстояние между частицами); в Δ_1 и Δ_2 дифференцирование проводится по координатам 1-й и 2-й частиц соответственно:

$$\Delta_\alpha = \frac{\partial^2}{\partial x_\alpha^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_\alpha^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_\alpha^2} \quad (\alpha=1,2).$$

Последнее слагаемое в (12.26) – оператор потенциальной энергии взаимодействия двух заряженных частиц.

Свойства операторов физических величин.

Вещественность собственных значений физических величин и их средних → ограничения на свойства операторов.

1) Эрмитовость.

Понятие комплексно сопряженного оператора.

Приравняем среднее значение \bar{f} физической величины f его комплексно сопряженной величине \bar{f}^* .

$$\bar{f} = \int \Psi^* (\hat{f} \Psi) dq, \quad \bar{f}^* = \int \Psi (\hat{f}^* \Psi^*) dq.$$

$$\bar{f} = \bar{f}^* \rightarrow$$

$$\int \Psi^* (\hat{f} \Psi) dq = \int \Psi (\hat{f}^* \Psi^*) dq. \quad (12.27)$$

Множитель Ψ^* в подынтегральном выражении левой части (12.27) комплексно сопряжен множителю Ψ в правой части, а множитель $(\hat{f} \Psi)$ в левой части – множителю $(\hat{f}^* \Psi^*)$ в правой части.

Определение **комплексно сопряженного оператора**: если $\hat{f} \Psi = \varphi$, то комплексно сопряженный оператор – такой, что его действие на Ψ^* даёт функцию $\varphi^* : \hat{f}^* \Psi^* = \varphi^*$.

Равенство (12.27) справедливо не для всех линейных операторов – это некоторое дополнительное ограничение. Сформулируем это ограничение через понятие транспонированного оператора.

Для любого линейного оператора существует *транспонированный оператор*, такой что

$$\int \Phi(\hat{f}\Psi) dq = \int \Psi(\tilde{\hat{f}}\Phi) dq . \quad (12.28)$$

(Φ и Ψ – две различных функции).

Пусть $\Phi \equiv \Psi^* \rightarrow$

$$\int \Psi^*(\hat{f}\Psi) dq = \int \Psi(\tilde{\hat{f}}\Psi^*) dq . \quad (12.29)$$

Сравним (12.27) с (12.29) \rightarrow получим, что для операторов физических величин выполняется равенство

$$\tilde{\hat{f}} = \hat{f}^* \quad (12.30)$$

(транспонированный оператор равен комплексно сопряженному оператору).

Операторы, обладающие таким свойством, называются *эрмитовыми*.

2) Самосопряженность.

Формально можно рассматривать не только вещественные, но и, в общем случае, комплексные физические величины (с комплексными собственными значениями). Пусть f – такая величина. Тогда есть величина f^* , у которой собственные значения комплексно сопряжены собственным значениям величины f . Оператор,

соответствующий величине f^* , обозначим \hat{f}^+ . Его называют **сопряженным** оператору \hat{f} . Это не то же самое, что комплексно сопряженный оператор.

Действительно, по определению

$$\overline{f^*} = \int \Psi^* \hat{f}^+ \Psi dq.$$

С другой стороны, $(\bar{f})^* = \left[\int \Psi^* \hat{f} \Psi \right]^* dq = \int \Psi \hat{f}^* \Psi^* dq$ (применяем транспонирование)
 $= \int \Psi^* \tilde{\hat{f}}^* \Psi dq.$

Сравнивая эти два выражения, получаем

$$\hat{f}^+ = \tilde{\hat{f}}^*, \quad (12.31)$$

т.е. $\hat{f}^+ \neq \hat{f}^*$ (сопряженный оператор не равен комплексно сопряженному, а равен транспонированному от него).

Но для вещественных физических величин справедливо равенство $\tilde{\hat{f}} = \hat{f}^*$
(эрмитовость) \rightarrow делаем комплексное сопряжение $\rightarrow \tilde{\hat{f}}^* = (\hat{f}^*)^* = \hat{f}$.

Но поскольку, согласно определению сопряженного оператора, $\tilde{\hat{f}}^* = \hat{f}^+$,
приходим к равенству

$$\hat{f} = \hat{f}^+. \quad (12.32)$$



Для вещественной физической величины её оператор совпадает со своим
сопряженным оператором (т.е., как говорят, является *самосопряженным*
оператором).

И вообще, эрмитовы операторы часто так и называют самосопряженными.

3) Ортогональность собственных функций эрмитовых операторов, соответствующих различным собственным значениям.

Под взаимной ортогональностью функций Ψ_n и Ψ_m понимается факт обращения в ноль интегралов от произведений $\Psi_m \Psi_n^*$ с $m \neq n$.

Пусть f_n и f_m – два различных собственных значения вещественной величины f , а Ψ_n и Ψ_m – соответствующие им собственные функции:

$$\hat{f} \Psi_n = f_n \Psi_n, \quad \hat{f} \Psi_m = f_m \Psi_m.$$

Запишем второе из этих равенств в комплексно сопряженном виде \rightarrow

$$\hat{f}^* \Psi_m^* = f_m^* \Psi_m^* = f_m \Psi_m^* \text{ (собственные значения физических величин вещественны).}$$

\downarrow

$$\hat{f} \Psi_n = f_n \Psi_n, \quad \hat{f}^* \Psi_m^* = f_m \Psi_m^*.$$

Умножим обе стороны первого из этих равенств слева на Ψ_m^* , а второго – на Ψ_n и вычтем из первого полученного равенства второе \rightarrow

$$\Psi_m^* \hat{f} \Psi_n - \Psi_n \hat{f}^* \Psi_m^* = (f_n - f_m) \Psi_n \Psi_m^*.$$

Проинтегрируем по dq . К первому слагаемому в левой части применим транспонирование. Поскольку $\tilde{\hat{f}} = \hat{f}^*$ (эрмитовость), в левой части получим ноль →

$$(f_n - f_m) \int \Psi_n \Psi_m^* dq = 0. \quad (12.33)$$

$f_n \neq f_m \rightarrow$ получаем искомое свойство ортогональности функций Ψ_n и Ψ_m .

Собственной функции Ψ_n может соответствовать не одна физическая величина f , а целая система одновременно измеримых физических величин f, g, \dots

В состоянии, характеризуемом собственной функцией Ψ_n , все эти величины будут иметь определенные значения f_n, g_n, \dots и являться совместными решениями системы уравнений

$$\hat{f}\Psi = f\Psi, \quad \hat{g}\Psi = g\Psi, \quad \dots$$

Сложение и умножение операторов

I. Сумма

Пусть \hat{f} и \hat{g} – операторы, отвечающие физическим величинам f и g . Тогда сумме $f + g$ отвечает оператор $\hat{f} + \hat{g}$.

(Пример: f – кинетическая энергия, g – потенциальная энергия, $f + g$ – полная энергия).

Тогда сумме $f + g$ отвечает оператор Гамильтона $\hat{f} + \hat{g}$).

Смысл сложения различных физических величин в КМ существенно различен в зависимости от того, **измеримы** эти величины одновременно или **нет**. Рассмотрим отдельно эти случаи.

1. f и g одновременно измеримы.

Операторы \hat{f} и \hat{g} имеют совместные собственные функции, которые являются и собственными функциями оператора $\hat{f} + \hat{g}$. Собственные значения оператора $\hat{f} + \hat{g}$ равны $f_n + g_n$.

2. f и g не могут иметь одновременно определенных значений.

Смысл суммы $f + g$ более ограничен.

С одной стороны, среднее значение величины $f + g$ в произвольном состоянии по-прежнему равно сумме средних значений каждого из слагаемых в отдельности:

$$\overline{\bar{f} + \bar{g}} = \bar{f} + \bar{g}. \quad (12.34)$$

Действительно,

$$\overline{\bar{f} + \bar{g}} = \int \Psi^* (\hat{f} + \hat{g}) \Psi dq = \int \Psi^* \hat{f} \Psi dq + \int \Psi^* \hat{g} \Psi dq = \bar{f} + \bar{g}.$$

С другой стороны, теперь собственные значения и собственные функции оператора $\hat{f} + \hat{g}$, вообще говоря, не будут иметь никакого отношения к собственным значениям и собственным функциям величин f и g .

Пример: энергия как сумма кинетической и потенциальной энергий.

Кинетическая энергия является функцией от компонент импульса, а потенциальная энергия – от координат. Импульс и соответствующая ему координата одновременно неизмеримы (см. соотношения неопределенностей). Собственными функциями компонент импульса (и кинетической энергии) являются плоские волны, а собственными функциями координат (и потенциальной энергии) – δ -функции. Собственная функция суммарной энергии не совпадает ни с теми, ни с другими из этих функций, а суммарная энергия не равна сумме кинетической и потенциальной энергий. В частности, в то время как оба слагаемых в полной энергии по отдельности пробегают непрерывный ряд значений, полная энергия в случае финитного движения квантуется.

Очевидно, что если операторы \hat{f} и \hat{g} – эрмитовы, то и оператор $\hat{f} + \hat{g}$ будет эрмитовым, так что его собственные значения вещественны и представляют собой собственные значения определенной таким образом новой величины $f + g$. В этом снова можно убедиться на примере оператора энергии как суммы операторов кинетической и потенциальной энергий.

II. Произведение

1. f и g одновременно измеримы.

Можно ввести произведение величин f и g как величину, собственные значения которой равны произведениям собственных значений величин f и g . Такой величине соответствует оператор $\hat{f}\hat{g}$, в котором на функцию Ψ последовательно действуют сначала оператор \hat{g} , затем оператор \hat{f} (очередность действия – справа налево):

$$\hat{f}\hat{g}\Psi_n = \hat{f}(\hat{g}\Psi_n) = \hat{f}g_n\Psi_n = g_n\hat{f}\Psi_n = g_nf_n\Psi_n. \quad (12.35)$$

Возьмем теперь вместо оператора $\hat{f}\hat{g}$ оператор $\hat{g}\hat{f}$, отличающийся от первого порядком множителей. →

$$\hat{g}\hat{f}\Psi_n = \hat{g}(\hat{f}\Psi_n) = \hat{g}f_n\Psi_n = f_n\hat{g}\Psi_n = f_ng_n\Psi_n. \quad (12.36)$$

Вычтем (12.36) из (12.35) → в правой части получим ноль, т.е. результат воздействия оператора $\hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f}$ на функцию Ψ_n оказывается равным нулю. Но, поскольку любая волновая функция Ψ может быть представлена в виде комбинации функций Ψ_n , то результат воздействия оператора $\hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f}$ на любую функцию Ψ также окажется равным нулю. Этот факт может быть записан в виде символического равенства

$$\hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f} = 0. \quad (12.37)$$

О таких двух операторах \hat{f} и \hat{g} говорят как о **коммутирующих** друг с другом.

Важный вывод: **если две величины f и g могут одновременно иметь определённые значения, то их операторы коммутативны друг с другом.**

Может быть доказана и обратная теорема: если операторы \hat{f} и \hat{g} коммутативны, то у них все собственные функции можно выбрать общими, что физически означает одновременную измеримость соответствующих физических величин.

Частный случай произведения операторов: оператор, возвещенный в некоторую степень. Поскольку оператор \hat{f} всегда коммутирует сам с собой, собственные значения оператора \hat{f}^p (степень p – целое число) равны собственным значениям оператора \hat{f} , возвещенным в ту же степень. Вообще, можно определить любую функцию оператора $\varphi(\hat{f})$ как оператор, собственные значения которого равны такой же функции собственных значений оператора \hat{f} .

В частности, можно ввести оператор \hat{f}^{-1} , который называется **обратным** оператору \hat{f} . Очевидно, что в результате последовательного воздействия операторов \hat{f} и \hat{f}^{-1} на произвольную функцию эта функция останется неизменной, т.е. $\hat{f}\hat{f}^{-1} = \hat{f}^{-1}\hat{f} = 1$.

2. Величины f и g не измеримы одновременно.

В этом случае понятие их произведения уже не имеет такого прямого смысла, как в случае (1). В частности, оператор $\hat{f} \hat{g}$ в этом случае не будет эрмитовым, а поэтому не может соответствовать вещественной физической величине. Докажем это.

Пользуясь определением транспонированного оператора \hat{f} , пишем

$$\int \Psi \hat{f} \hat{g} \Phi dq = \int \Psi \hat{f}(\hat{g} \Phi) dq = \int (\hat{g} \Phi) \left(\tilde{\hat{f}} \Psi \right) dq .$$

Здесь оператор \hat{f} действует только на функцию Ψ , а оператор \hat{g} – на функцию Φ , так что под интегралом стоит произведение двух функций $\hat{g} \Phi$ и $\tilde{\hat{f}} \Psi$. Переставим их местами и ещё раз используем транспонирование →

$$\int \Psi \hat{f} \hat{g} \Phi dq = \int \left(\tilde{\hat{f}} \Psi \right) (\hat{g} \Phi) dq = \int \Phi \tilde{\hat{g}} \tilde{\hat{f}} \Psi dq .$$

Мы получили интеграл, в котором по сравнению с первоначальным интегралом функции Ψ и Φ поменялись местами → оператор $\tilde{\hat{g}} \tilde{\hat{f}}$ есть оператор, транспонированный по отношению к $\hat{f} \hat{g}$.

Таким образом, мы можем написать

$$\hat{f} \hat{g} = \hat{\tilde{g}} \hat{\tilde{f}} \quad (12.38)$$

– оператор, транспонированный по отношению к произведению $\hat{f} \hat{g}$, есть произведение транспонированных множителей, написанных в обратном порядке. Взяв комплексно сопряженное от обеих сторон (12.38), найдем, что

$$(\hat{f} \hat{g})^+ = \hat{g}^+ \hat{f}^+. \quad (12.39)$$

Если каждый из операторов \hat{f} и \hat{g} эрмитов, то $(\hat{f} \hat{g})^+ = \hat{g} \hat{f}$. → Оператор $\hat{f} \hat{g}$ будет эрмитов, только если множители \hat{f} и \hat{g} коммутативны.