

# Атомная физика

## Лекция 12

**М.Ю. Рябикин**

*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 Гейзенберга). 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, наблюдаемых 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 Бройля 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  $t$ ).  $\rightarrow$  Квадрат модуля ВФ есть плотность вероятностного распределения частицы в пространстве в данный момент  $t$ .  $\rightarrow$

**Условие нормировки** ВФ:

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

Случай ненормированных ВФ. Пример: ВФ состояний, соответствующих инфинитному движению.  $\rightarrow$  Вычисление **относительных** вероятностей.

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

***Принцип суперпозиции:***

Если система может находиться в нескольких состояниях, описываемых ВФ-ями  $\Psi_1(\mathbf{r}, t)$ ,  $\Psi_2(\mathbf{r}, t)$ , ...,  $\Psi_k(\mathbf{r}, t)$ , ..., 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)  $\rightarrow$  **непрерывный спектр** собственных значений;
- (2) величины  $f$  могут образовывать дискретный набор (например – энергия, момент импульса)  $\rightarrow$  **дискретный спектр**.

Остановимся пока на случае дискретного спектра.

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

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

Пусть система находится в некотором произвольном состоянии с ВФ, равной  $\Psi$ . 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  $\rightarrow \Psi$  должна быть линейной комбинацией тех их собственных функций  $\Psi_n$ , 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)  $\rightarrow$  возможность определения вероятности обнаружения у системы в состоянии  $\Psi$  того или иного значения  $f_n$  величины  $f$ .

Чему равна эта вероятность?

- Вероятности должны определяться билинейными по  $\Psi$  и  $\Psi^*$  выражениями  $\rightarrow$  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  $\Psi_n$ .

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

Сумма вероятностей всех возможных значений  $f_n$  должна быть равна единице  $\rightarrow$

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

Коэффициенты  $a_n$  разложения функции  $\Psi$  по собственным функциям  $\Psi_n$  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  $\Psi$  и  $\Psi_n^*$ , 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  $\Psi$ , 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  $\Psi$ . Определим  $\hat{f}$  так, чтобы интеграл от произведения  $(\hat{f}\Psi)$  на комплексно сопряженную функцию  $\Psi^*$  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)  $\rightarrow$  результат воздействия оператора  $\hat{f}$  на функцию  $\Psi$  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  $\Psi$  является одна из собственных функций  $\Psi_n$ , 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  $\rightarrow$  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, возведенный 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  $\rightarrow$

Оператор вектора импульса выражается через оператор  $\nabla$  :

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

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  $p_x$  → спектр собственных значений оператора  $\hat{p}_x$  – непрерывный → 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  $\Delta$  – 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:

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

Переходим от классического выражения к операторам, используя (12.18) и (12.23)  $\rightarrow$

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

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  $\Delta_1$  и  $\Delta_2$  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  $\rightarrow$  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  $\Psi^*$  в подынтегральном выражении левой части (12.27) комплексно сопряжен множителю  $\Psi$  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  $\Psi^*$  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

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

( $\Phi$  и  $\Psi$  – две различных функции).

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

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

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

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

(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

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

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

Сравнивая эти два выражения, получаем

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

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  $\Psi_n$  и  $\Psi_m$  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  $\Psi_n$  и  $\Psi_m$  – 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  $\rightarrow$

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

$\downarrow$

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

Умножим обе стороны первого из этих равенств слева на  $\Psi_m^*$ , а второго – на  $\Psi_n$  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  $\hat{f} = \hat{f}^*$  (эрмитовость), в левой части получим ноль  $\rightarrow$

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

$f_n \neq f_m \rightarrow$  получаем искомое свойство ортогональности функций  $\Psi_n$  и  $\Psi_m$ .

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

В состоянии, характеризуемом собственной функцией  $\Psi_n$ , 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:

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

Действительно,

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

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) –  $\delta$ -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  $\Psi$  последовательно действуют сначала оператор  $\hat{g}$ , затем оператор  $\hat{f}$  (очередность действия – справа налево):

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

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

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

Вычтем (12.36) из (12.35)  $\rightarrow$  в правой части получим ноль, т.е. результат воздействия оператора  $\hat{f} \hat{g} - \hat{g} \hat{f}$  на функцию  $\Psi_n$  оказывается равным нулю. Но, поскольку любая волновая функция  $\Psi$  может быть представлена в виде комбинации функций  $\Psi_n$ , то результат воздействия оператора  $\hat{f} \hat{g} - \hat{g} \hat{f}$  на любую функцию  $\Psi$  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, возведенный 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  $\hat{f}$ , возведенным 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  $\hat{f}^{\sim}$ , пишем

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

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

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

Мы получили интеграл, в котором по сравнению с первоначальным интегралом функции  $\Psi$  и  $\Phi$  поменялись местами  $\rightarrow$  оператор  $\hat{g}^{\sim} \hat{f}^{\sim}$  есть оператор, транспонированный по отношению к  $\hat{f} \hat{g}$ .

Таким образом, мы можем написать

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

– 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.