

Лекция 9. Уравнение Шредингера. Операторы физических величин

1 Уравнение Шредингера

Уравнение Шредингера в квантовой механике постулируется точно так же, как в классической механике постулируются уравнения Ньютона. Его нельзя вывести из каких-либо других уравнений, аксиом или постулатов. Тем не менее, можно привести некоторые соображения о том, как это уравнение было открыто.

Рассмотрим волновую функцию свободной частицы – волну де Бройля:

$$\Psi = \tilde{A} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\mathbf{r} - Et)} . \quad (1)$$

Возьмем производную по времени:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \left(\tilde{A} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\mathbf{r} - Et)} \right) = -\frac{i}{\hbar} E \Psi . \quad (2)$$

Согласно четвертому постулату значение полной энергии – собственное значение оператора полной энергии $\hat{H}$:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi . \quad (3)$$

Из (2) и (3) получаем уравнение:

$$\hat{H}\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} . \quad (4)$$

Найдем оператор полной энергии $\hat{H}$. Классическая полная энергия E есть сумма кинетической T и потенциальной U :

$$E = T + U . \quad (5)$$

Тогда

$$E\Psi = T\Psi + U\Psi . \quad (6)$$

Согласно четвертому постулату значение кинетической и потенциальной энергии – собственные значения соответствующих операторов?

$$\hat{T}\Psi = T\Psi , \quad \hat{U}\Psi = U\Psi . \quad (7)$$

Следовательно, получаем выражение для оператора полной энергии, аналогичное классическому:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U} , \quad (8)$$

где $\hat{T}$ – оператор кинетической энергии, $\hat{U}$ – оператор потенциальной энергии. Для свободной частицы потенциальная энергия равна нулю $\hat{U} = 0$.

Возьмем производную от волновой функции по координате x :

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\tilde{A} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\mathbf{r} - Et)} \right) = \frac{i}{\hbar} p_x \Psi . \quad (9)$$

тогда, аналогично полной энергии, оператор проекции импульса на ось x запишется как

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}. \quad (10)$$

Взяв градиент от волновой функции, получим оператор вектора импульса:

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla. \quad (11)$$

По аналогии с классической механикой:

$$\hat{T} = \hat{p}^2 / 2m. \quad (12)$$

Произведение операторов есть последовательное действие их на функцию, тогда:

$$\hat{p}^2 = \hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{p}} = -\hbar^2 \nabla^2 = -\hbar^2 \Delta. \quad (13)$$

Подставив в (4) выражения (8), (12) и (13), получаем:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \hat{U} \right) \Psi, \quad (14)$$

то есть уравнение Шредингера.

2 Операторы физических величин

Операторы можно складывать и умножать на число и друг на друга. Если для любой функции u выполняются соотношения:

$$\hat{S}u = \hat{A}u + \hat{B}u, \quad \hat{F}u = k\hat{A}u, \quad \hat{P}u = \hat{A}(\hat{B}u), \quad (15)$$

тогда оператор $\hat{S}$ – есть *сумма операторов* $\hat{A}$ и $\hat{B}$:

$$\hat{S} = \hat{A} + \hat{B}, \quad (16)$$

оператор $\hat{F}$ – есть *произведение оператора* $\hat{A}$ *на число* k :

$$\hat{F} = k\hat{A}, \quad (17)$$

а оператор $\hat{P}$ – есть *произведение операторов* $\hat{A}$ и $\hat{B}$:

$$\hat{P} = \hat{A}\hat{B}. \quad (18)$$

Сумма операторов и умножение оператора на число ведут себя аналогично сумме и произведению обычных чисел – выполняются свойства коммутативности, дистрибутивности и т.д. Произведение операторов, напротив, в общем случае не коммутативно, то есть существуют операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$, для которых:

$$\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}. \quad (19)$$

Операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ называются *коммутирующими*, если их произведение не зависит от порядка сомножителей:

$$\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}. \quad (20)$$

Если для операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$ выполняется равенство:

$$\hat{A}\hat{B} = -\hat{B}\hat{A}, \quad (21)$$

то такие операторы называют *антикоммутирующими*.

Коммутатор $[\hat{A}, \hat{B}]$ двух операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$ определяется следующим выражением:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}. \quad (22)$$

Приведем повторно вид основных операторов квантовой механики:

1) Оператор координаты x :

$$\hat{x}\Psi = x \cdot \Psi, \quad (23)$$

который является *оператором умножения* на число x . Соответственно оператор радиус-вектора:

$$\hat{\mathbf{r}}\Psi = \mathbf{r} \cdot \Psi. \quad (24)$$

2) Оператор проекции импульса

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}. \quad (25)$$

3) Оператор вектора импульса:

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla. \quad (26)$$

4) Оператор квадрата импульса:

$$\hat{p}^2 = \hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{p}} = -\hbar^2 \Delta. \quad (27)$$

Операторы физических величин обладают *двумя основными свойствами*.

1) *Линейность*. Это свойство следует из второго постулата – принципа суперпозиции.

Рассмотрим состояние Ψ , которое является суперпозицией двух состояний Ψ_1 и Ψ_2 :

$$\Psi = C_1 \Psi_1 + C_2 \Psi_2, \quad (28)$$

где C_1, C_2 – комплексные постоянные. Пусть функции Ψ_1 и Ψ_2 являются собственными для оператора $\hat{F}$ физической величины f :

$$\hat{F}\Psi_1 = f_1 \Psi_1, \quad \hat{F}\Psi_2 = f_2 \Psi_2 \quad (29)$$

где f_1 и f_2 – разные собственные значения физической величины f , соответствующие Ψ_1 и Ψ_2 .

Если функции соответствуют разным собственным значениям, то они *ортогональны*:

$$\int \Psi_1^* \Psi_2 dV = 0. \quad (30)$$

Предположим также, что они нормированы на 1:

$$\int |\Psi_1|^2 dV = 1, \quad \int |\Psi_2|^2 dV = 1. \quad (31)$$

При измерении f в состоянии Ψ с вероятностью P_1 получится величина f_1 , и с вероятностью P_2 получится величина f_2 , где вероятности даются выражениями:

$$P_1 = \frac{|C_1|^2}{|C_1|^2 + |C_2|^2}, \quad P_2 = \frac{|C_2|^2}{|C_1|^2 + |C_2|^2}. \quad (32)$$

Тогда среднее значение физической величины:

$$\langle f \rangle = P_1 f_1 + P_2 f_2 = \frac{|C_1|^2 f_1 + |C_2|^2 f_2}{|C_1|^2 + |C_2|^2}. \quad (33)$$

С другой стороны, согласно пятому постулату:

$$\langle f \rangle = \frac{\int \Psi^* \hat{F} \Psi dV}{\int \Psi^* \Psi dV} = \frac{\int (C_1^* \Psi_1^* + C_2^* \Psi_2^*) \hat{F} (C_1 \Psi_1 + C_2 \Psi_2) dV}{\int (C_1^* \Psi_1^* + C_2^* \Psi_2^*) (C_1 \Psi_1 + C_2 \Psi_2) dV}. \quad (34)$$

Интеграл в знаменателе с учетом нормировки и ортогональности функций запишется как

$$\int (C_1^* \Psi_1^* + C_2^* \Psi_2^*) (C_1 \Psi_1 + C_2 \Psi_2) dV = |C_1|^2 \int |\Psi_1|^2 dV + |C_2|^2 \int |\Psi_2|^2 dV = |C_1|^2 + |C_2|^2. \quad (35)$$

Выражения (33) и (34) описывают одно и то же среднее значение физической величины, следовательно, должно выполняться равенство (с учетом равенства знаменателей (35))

$$\int (C_1^* \Psi_1^* + C_2^* \Psi_2^*) \hat{F} (C_1 \Psi_1 + C_2 \Psi_2) dV = |C_1|^2 f_1 + |C_2|^2 f_2. \quad (36)$$

Последнее выполнимо только если оператор $\hat{F}$ обладает следующим свойством:

$$\hat{F}(C_1 \Psi_1 + C_2 \Psi_2) = C_1 \hat{F} \Psi_1 + C_2 \hat{F} \Psi_2. \quad (37)$$

Такие операторы называют *линейными*. Все операторы физических величин линейны.

2) *Самосопряженность (эрмитовость)*. Каждому линейному оператору $\hat{F}$ можно сопоставить другой линейный оператор $\hat{F}^+$, сопряженный ему, который удовлетворяет условию:

$$\int \psi^* \hat{F} \phi dV = \int (\hat{F}^+ \psi)^* \phi dV. \quad (38)$$

Если оператор, сопряженный данному, совпадает с ним самим, то есть выполняется условие $\hat{F} = \hat{F}^+$, тогда такой оператор называют *самосопряженным* или *эрмитовым*. Следовательно, самосопряженный оператор должен удовлетворять следующему условию:

$$\int \psi^* \hat{F} \phi dV = \int (\hat{F} \psi)^* \phi dV. \quad (39)$$

Рассмотрим среднее значение физической величины f , которая описывается эрмитовым оператором $\hat{F}$ в состоянии, которое описывается нормированной на 1 волновой функцией Ψ :

$$\int |\Psi|^2 dV = 1. \quad (40)$$

Согласно пятому постулату, среднее значение физической величины f определяется выражением:

$$\langle f \rangle = \int \Psi^* \hat{F} \Psi dV. \quad (41)$$

Проведем операцию комплексного сопряжения над (41):

$$\langle f \rangle^* = \int \Psi \hat{F}^* \Psi^* dV. \quad (42)$$

Так как оператор $\hat{F}$ эрмитов, следовательно, выполняется условие (39). Подставив в (39) $\psi = \phi = \Psi$, получим

$$\int \Psi \hat{F}^* \Psi^* dV = \int \Psi^* \hat{F} \Psi dV. \quad (43)$$

Сравнивая (41) и (42) с (43) получаем следующее условие:

$$\langle f \rangle = \langle f \rangle^*. \quad (44)$$

которое есть условие вещественности. Таким образом, среднее значение физической величины, которая описывается самосопряженным оператором, является вещественным числом. Так как при

измерениях физических величин наблюдаются только вещественные значения, то все операторы физических величин должны быть самосопряженными.

3 Теорема Эренфеста

В квантовой механике каждой физической величине соответствует свой оператор. Возникает вопрос: как найти оператор для какой-либо физической величины? Ответ на этот вопрос дает *теорема Эренфеста*.

Теорема Эренфеста. Если для некоторых физических величины выполняется классическое соотношение или формула, то в квантовой теории эта же формула справедлива для операторов этих физических величин.

В классической механике координаты и импульсы системы (в том числе обобщенные) называются динамическими переменными, и все остальные физические величины являются функциями динамических переменных. Операторы для координаты и проекции импульса получены ранее, следовательно, можно получить оператор любой физической величины, подставив в его выражение, вместо координат и импульсов, соответствующие операторы. Оператор, получившийся в результате, должен быть линейным и эрмитовым.

В таблице 1 приведены классические формулы для некоторых физических величин и их квантовые аналоги.

Таблица 1

Физическая величина	Классическая формула	Квантовая формула
Радиус-вектор	$\mathbf{r} = \mathbf{e}_x x + \mathbf{e}_y y + \mathbf{e}_z z$	$\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{e}_x \hat{x} + \mathbf{e}_y \hat{y} + \mathbf{e}_z \hat{z}$
Вектор импульса	$\mathbf{p} = \mathbf{e}_x p_x + \mathbf{e}_y p_y + \mathbf{e}_z p_z$	$\hat{\mathbf{p}} = \mathbf{e}_x \hat{p}_x + \mathbf{e}_y \hat{p}_y + \mathbf{e}_z \hat{p}_z = -i\hbar \nabla$
Кинетическая энергия	$T = \frac{p^2}{2m}$	$\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$
Механический (орбитальный) момент	$\mathbf{L} = [\mathbf{r} \mathbf{p}] = \begin{vmatrix} \mathbf{e}_x & \mathbf{e}_y & \mathbf{e}_z \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix}$	$\hat{\mathbf{L}} = -i\hbar \begin{vmatrix} \mathbf{e}_x & \mathbf{e}_y & \mathbf{e}_z \\ x & y & z \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \end{vmatrix}$
Проекция механического (орбитального) момента	$L_x = yp_z - zp_y$ $L_z = xp_y - yp_x$	$\hat{L}_x = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right)$ $\hat{L}_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$
- в сферической системе координат	$L_\varphi = p_\varphi$	$\hat{L}_\varphi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$

Физическая величина	Классическая формула	Квантовая формула
Потенциальная энергия для одноэлектронного атома (заряд ядра $+eZ$, заряд электрона $(-e)$, в СГС)	$U = -\frac{Ze^2}{r}$	$\hat{U} = -\frac{Ze^2}{r}, \text{ т.к. } \hat{r} = r$
Полная энергия для одноэлектронного атома	$E = T + U$	$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{Ze^2}{r}$

4 Точное измерение физических величин

Точным измерением физической величины называют многократное измерение физической величины и получение во всех случаях одинакового значения. Найдем математический критерий точного измерения. Если при измерении физической величины f получается набор значений $\{f_n\}$, тогда среднее значение величины (матожидание):

$$\langle f \rangle = \frac{\sum_{n=1}^N f_n}{N}, \quad (45)$$

где N – число измерений. Рассмотрим отклонение значения f_n от среднего:

$$\delta f_n = f_n - \langle f \rangle. \quad (46)$$

Отклонение само по себе не может служить критерием точности измерения, так как его среднее равно нулю:

$$\langle \delta f \rangle = \langle f - \langle f \rangle \rangle = \langle f \rangle - \langle f \rangle = 0. \quad (47)$$

Величиной, которая характеризует отклонение случайной величины от среднего значения, является *дисперсия* или среднее квадратичное отклонение:

$$\sigma_f^2 = \langle (\delta f)^2 \rangle = \langle (f - \langle f \rangle)^2 \rangle. \quad (48)$$

Тогда критерием точного измерения будет равенство нулю дисперсии:

$$\sigma_f^2 = 0. \quad (49)$$

При этом $f = \langle f \rangle$.

В квантовой механике величине отклонения от среднего $\delta f = (f - \langle f \rangle)$ соответствует оператор отклонения $\delta \hat{f} = (\hat{F} - \langle f \rangle)$, а среднее значение вычисляется согласно пятому постулату. Рассмотрим среднее значение квадрата оператор отклонения, то есть дисперсию физической величины f в квантовом случае:

$$\sigma_f^2 = \langle (\delta f)^2 \rangle = \int \Psi^* (\delta \hat{f})^2 \Psi dV = \int \Psi^* (\hat{F} - \langle f \rangle)^2 \Psi dV, \quad (50)$$

где Ψ – волновая функция состояния, в котором вычисляется значение оператора. Без ограничения общности можно считать Ψ нормированной на 1. Так как оператор $\hat{F}$ эрмитов, то выражение (50) можно преобразовать следующим образом:

$$\begin{aligned}\sigma_f^2 &= \int \Psi^* (\hat{F} - \langle f \rangle)^2 \Psi dV = \int \Psi^* (\hat{F} - \langle f \rangle) (\hat{F} - \langle f \rangle) \Psi dV = \\ &= \int \Psi^* (\hat{F} - \langle f \rangle)^* (\hat{F} - \langle f \rangle) \Psi dV = \int |(\hat{F} - \langle f \rangle) \Psi|^2 dV.\end{aligned}\quad (51)$$

Дисперсия может быть равна нулю, только если равен нулю следующий интеграл:

$$\sigma_f^2 = \int |(\hat{F} - \langle f \rangle) \Psi|^2 dV = 0. \quad (52)$$

Так как под интегралом стоит число больше или равное нулю во всем объеме, тогда чтобы интеграл равнялся нулю, необходимо, чтобы подынтегральное выражение само равнялось нулю:

$$|(\hat{F} - \langle f \rangle) \Psi|^2 = 0. \quad (53)$$

Откуда следует:

$$(\hat{F} - \langle f \rangle) \Psi = 0. \quad (54)$$

При точном измерении (если $\sigma_f^2 = 0$) измеренное значение физической величины равно среднему значению $f = \langle f \rangle$. Тогда

$$\hat{F} \Psi = f \Psi. \quad (55)$$

Совокупность $\{f_n\}$ точно измеренных значений физической величины f называется ее *спектром*. Спектр физической величины находится из решения задачи на *собственные значения и собственные функции* оператора (55). Спектр физической величины – это совокупность собственных значений оператора этой величины. Собственные функции оператора физической величины – это волновые функции состояний квантовой системы, в которых эта величина может быть измерена точно.

Собственные функции эрмитового оператора – вещественны. Действительно, рассмотрим уравнение, комплексно сопряженное уравнению (55):

$$\hat{F}^* \Psi^* = f^* \Psi^*. \quad (56)$$

Домножим (55) на Ψ^* , а (56) на Ψ и проинтегрируем по всему объему:

$$\begin{aligned}\int \Psi^* \hat{F} \Psi dV &= \int \Psi^* f \Psi dV = f \int \Psi^* \Psi dV, \\ \int (\hat{F}^* \Psi^*) \Psi dV &= \int f^* \Psi^* \Psi dV = f^* \int \Psi^* \Psi dV.\end{aligned}\quad (57)$$

Для самосопряженного оператора выполняется (43), следовательно, левые части (57) равны друг другу. Приравнявая правые части (57) получаем условие вещественности для f :

$$f = f^*. \quad (58)$$

Собственные функции эрмитового оператора, относящиеся к разным собственным числам, ортогональны друг другу:

$$\int \Psi_n^* \Psi_m dV = 0, \quad n \neq m; \quad (59)$$

где функции Ψ_n и Ψ_m соответствуют собственным значениям $f_n \neq f_m$. Действительно, запишем условие самосопряженности (39) для $\psi = \Psi_n$ и $\varphi = \Psi_m$:

$$\int \Psi_n^* \hat{F} \Psi_m dV = \int (\hat{F} \Psi_n^*) \Psi_m dV. \quad (60)$$

Учтем, что Ψ_n и Ψ_m – собственные функции $\hat{F}$ и $\hat{F} \Psi_j = f_j \Psi_j$, $j = n, m$:

$$f_m \int \Psi_n^* \Psi_m dV = f_n^* \int \Psi_n^* \Psi_m dV. \quad (61)$$

Собственные значения f_j – вещественные, следовательно

$$(f_m - f_n) \int \Psi_n^* \Psi_m dV = 0. \quad (62)$$

Так как $f_n \neq f_m$, тогда равен нулю интеграл $\int \Psi_n^* \Psi_m dV = 0$.

Собственные функции определяются с точностью до множителя, следовательно, их можно нормировать. Условие ортогональности обобщается в условие *ортонормированности* системы функций:

$$\int \Psi_n^* \Psi_m dV = \delta_{nm} = \begin{cases} 1, & n = m, \\ 0, & n \neq m; \end{cases} \quad (63)$$

где δ_{nm} – символ Кронекера.

Системы собственных функций для большинства операторов, которые рассматриваются в квантовой механике, обладают свойством *полноты*. Если имеем ортонормированную систему собственных функций $\{\Psi_n\}$ некоторого оператора физической величины, тогда любая волновая функция Ψ выражается в виде суперпозиции функций $\{\Psi_n\}$:

$$\Psi = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \Psi_n. \quad (64)$$

Домножим (63) на Ψ_m^* , проинтегрируем по всему объему, учтем условие ортонормированности (64) и получим выражение для коэффициентов разложения C_m :

$$\int \Psi_m^* \Psi dV = \int \Psi_m^* \sum_{n=1}^{\infty} C_n \Psi_n dV = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \int \Psi_m^* \Psi_n dV = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \delta_{nm} = C_m. \quad (65)$$

5 Одновременное измерение двух физических величин. Принцип неопределенности Гейзенберга

Рассмотрим две физические величины a и b с соответствующими операторами $\hat{A}$ и $\hat{B}$. Пусть эти величины *одновременно измеримы*, следовательно, существует такая волновая функция Ψ , которая является собственной как для оператора $\hat{A}$, так и для оператора $\hat{B}$:

$$\hat{A}\Psi = a\Psi, \quad \hat{B}\Psi = b\Psi. \quad (66)$$

Поддействуем произведениями операторов $\hat{A}\hat{B}$ и $\hat{B}\hat{A}$ на Ψ с учетом (66):

$$\hat{A}\hat{B}\Psi = \hat{A}(b\Psi) = b\hat{A}\Psi = ba\Psi, \quad (67)$$

$$\hat{B}\hat{A}\Psi = \hat{B}(a\Psi) = a\hat{B}\Psi = ab\Psi. \quad (68)$$

Вычтем (68) из (67):

$$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\Psi = (ab - ba)\Psi = 0. \quad (69)$$

Следовательно, коммутатор операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$ равен нулю:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0. \quad (70)$$

С другой стороны, рассмотрим два коммутирующих оператора $\hat{A}$ и $\hat{B}$. Пусть Ψ – собственная функция оператора $\hat{B}$:

$$\hat{B}\Psi = b\Psi. \quad (71)$$

Так как операторы коммутируют, то справедливо следующее равенство:

$$\hat{B}\hat{A}\Psi = \hat{A}\hat{B}\Psi = b\hat{A}\Psi. \quad (72)$$

То есть функция $\hat{A}\Psi$ является собственной для оператора $\hat{B}$ с собственным числом b . Но такой функцией является и Ψ , следовательно, $\hat{A}\Psi$ и Ψ отличаются на некоторый множитель:

$$\hat{A}\Psi = a\Psi. \quad (73)$$

Это равенство показывает, что операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ имеют общую собственную функцию и соответствующие физические величины одновременно измеримы.

Из вышеизложенного следует, что *необходимым и достаточным условием точного измерения* двух физических величин в одном состоянии квантовой системы является *коммутативность соответствующих операторов* физических величин:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0. \quad (74)$$

Если операторы коммутируют, то величины измеримы точно в одном состоянии, и наоборот.

Рассмотрим некоммутирующие операторы физических величин $\hat{A}$ и $\hat{B}$. Коммутатор двух линейных эрмитовых операторов сам является линейным и эрмитовым оператором:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}, \quad (75)$$

где $\hat{C}$ – линейный и эрмитовый оператор, то есть является оператором некоторой физической величины. Можно показать, что если операторы двух величин a и b некоммутируют, и величина c соответствует оператору $\hat{C}$ из (75), тогда справедливо неравенство:

$$\langle \delta a^2 \rangle \langle \delta b^2 \rangle \geq \frac{\langle c^2 \rangle}{4}, \quad (76)$$

где $\langle \delta a^2 \rangle$, $\langle \delta b^2 \rangle$ – средние квадратичные отклонения (дисперсии) физических величин a и b .

Обозначим Δf – неопределенность физической величины f :

$$\Delta f = \sqrt{\sigma_f^2}, \quad (77)$$

то есть квадратный корень из дисперсии. Тогда соотношение (76) можно представить в следующем виде:

$$\Delta a \cdot \Delta b \geq \frac{\langle |c| \rangle}{2}. \quad (78)$$

Таким образом, величины a и b неизмеримы точно в одном состоянии и их неопределенности связаны выражением (78). Это выражение получило название – *соотношение неопределенности Гейзенберга* в общем виде. Для конкретных физических величин и их операторов можно написать соотношение неопределенности этих величин.

Рассмотрим координату x и соответствующую компоненту вектора импульса p_x . Подействуем коммутатором операторов этих величин на некую произвольную волновую функцию Ψ :

$$[\hat{x}, \hat{p}_x]\Psi = [x, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}]\Psi = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} x \right) \Psi = -i\hbar \left(x \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi - x \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) = i\hbar \Psi. \quad (79)$$

Следовательно, коммутатор $[\hat{x}, \hat{p}_x]$ является оператором умножения на число:

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar. \quad (80)$$

Тогда соотношение неопределенности для координаты и соответствующей ей компоненте импульса:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (81)$$

Аналогичные соотношения справедливы и для двух других координат и соответствующих компонент импульса:

$$\Delta y \cdot \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \Delta z \cdot \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (82)$$

Отметим, что коммутатор $[\hat{x}, \hat{p}_y] = 0$, следовательно, координату x и компоненту импульса p_y можно измерить точно одновременно.

В таблице 2 приведены соотношения неопределенности для некоторых других операторов.

Таблица 2

Оператор 1	Оператор 2	Соотношение неопределенности
$\hat{t} = t$	$\hat{H} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$	$\Delta t \cdot \Delta E \geq \frac{\hbar}{2}$
$\hat{\varphi} = \varphi$	$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$	$\Delta \varphi \cdot \Delta L_z \geq \frac{\hbar}{2}$
$\hat{r} = r$	$\hat{p}_r = -i\hbar \frac{\partial}{\partial r}$	$\Delta r \cdot \Delta p_r \geq \frac{\hbar}{2}$