выражение $|c_f|^2=|\langle f\,|\,\psi\rangle|^2$ представляет собой плотность вероятности, т. е. вероятность $dw_{f,\,f+df}$ обнаружить величину f в интервале $(f,\ f+df)$ равна:

$$dw_{f,\,f+df}=|c_f|^2\,df. \qquad (16)$$

Условие (15) формально противоречит постулату I, т. к. вектор состояния $|f\rangle$, принадлежащий непрерывному спектру, имеет бесконечную норму. Это связано с тем, что «монохроматич.» состояние $|f\rangle$, выделенное из непрерывного спектра, является матем. идеализацией. Подобной идеализацией является, напр., монохроматич. плоская эл.-магн. волна, к-рая должна была бы заполнять всё пространство и иметь поэтому бесконечную энергию. В действительности, любая физ. величина, принимающая непрерывные значения, может быть определена лишь с нек-рой точностью — в нек-ром интервале Δf, зависящем от точности прибора. Вектор состояния, отвечающий такому определению, представляет собой *волновой пакет*, составленный из монохроматич. состояний f в интервале Δf и имеющий конечную норму. Т. о., для физ. векторов состояния противоречия с постулатом I нет. Учитывая, однако, матем. преимущества использования монохроматич. состояний для описания непрерывного спектра, производится форм. расширение допустимого постулатом I класса векторов состояний путём включения в него нек-рых собств. векторов с бесконечной нормой (при условии, что из них может быть составлен волновой пакет с конечной нормой).

Постулат, определяющий зависимость вектора состояния от времени, будет сформулирован ниже [см. (29)].

Представления вектора состояния. Состояние системы определяется заданием нек-рой совокупности физ. величин, характеризующих систему,— т. н. полного набора. Число физ. величин, составляющих полный набор, равно числу степеней свободы системы (включая возможные внутр. степени свободы). Естественно, что физ. величины, входящие в полный набор, должны быть одновременно измеримыми, способными принимать одновременно определ. значения. Это свидетельствует о том, что соответствующие данным величинам операторы должны иметь общие собств. векторы. Необходимым и достаточным условием этого является коммутативность (переставимость) соответствующих операторов. Т. о., для физ. величин $F,\ G,\ \ldots,\ H$, составляющих полный набор, должны выполняться условия коммутации:

$$\hat F\hat G=\hat G\hat F,\ \ \ldots,\ \hat F\hat H=\hat H\hat F,\ \ \ldots,\ \hat G\hat H=\hat H\hat G,\ \ldots \qquad (17)$$

Общий собств. вектор этих величин удобно обозначать индексами их собств. значений: $|F_i,\ G_k,\ \ldots,\ H_l\rangle$. Любой вектор состояния системы $|\psi\rangle$ может быть представлен в виде:

$$|\psi\rangle=\sum_\xi a(\xi)\,|\,\xi\rangle;\quad a(\xi)=\langle\xi\,|\,\psi\rangle, \qquad (18)$$

где ξ — совокупность собств. значений величин, входящих в выбранный полный набор, а совокупность координат $a(\xi)$ вектора состояний — волновая ф-ция системы в представлении, использующем в качестве базиса собств. векторы этого полного набора. Задание волновой ф-ции в к.-л. представлении полностью определяет вектор состояния системы и, в частности, её волновую ф-цию в любом др. представлении. Если η — совокупность собств. значений величин, составляющих др. полный набор (отличный от ξ), то волновая ф-ция $b(\eta)$ в этом представлении

$$|\psi\rangle=\sum_\eta b(\eta)\,|\,\eta\rangle,\quad b(\eta)=\langle\eta\,|\,\psi\rangle, \qquad (19)$$

выражается через волновую ф-цию $a(\xi)$, и, наоборот, $a(\xi)$ может быть выражена через $b(\eta)$:

$$b(\eta)=\sum_\xi\langle\eta\,|\,\xi\rangle\,a(\xi),\quad a(\xi)=\sum_\eta\langle\xi\,|\,\eta\rangle\,b(\eta). \qquad (20)$$

Как отмечалось, для непрерывного спектра собств. значений символы суммы в этих ф-лах означают интегрирование.) Если в качестве измеряемых величин взять координаты частиц, то волновая ф-ция системы будет задана в т. н. *конфигурационном представлении*. В частности, для одной частицы волновая ф-ция $\psi(\boldsymbol r)$ представляет собой коэф. разложения вектора состояния $|\psi\rangle$ по собств. векторам $|\boldsymbol r\rangle$ операторов координаты $\boldsymbol r=(\hat x,\ \hat y,\ \hat z)$, $\psi(\boldsymbol r)=\langle\boldsymbol r|\psi\rangle$. В этом случае $|\psi(\boldsymbol r)|^2$ определяет вероятность dw обнаружить частицу в бесконечно малом объёме dV вокруг точки $\boldsymbol r$: $dw=|\psi(\boldsymbol r)|^2\,dV$.

В ряде задач оказывается полезным *импульсное представление*, в к-ром в качестве полного набора используются операторы проекций импульса частицы $\hat p_x$, $\hat p_y$, $\hat p_z$.

Эволюция системы во времени

Полнота описания системы, согласно постулату I, подразумевает, что задание вектора состояния в к.-л. момент времени t_0, $|\psi(t_0)\rangle$, позволяет найти вектор состояния $|\psi(t)\rangle$ в любой последующий момент времени t. Т. о., имеется соответствие $|\psi(t_0)\rangle\to|\psi(t)\rangle$, т. е. должен существовать оператор $\hat U(t,\ t_0)$ (оператор эволюции) такой, что

$$|\psi(t)\rangle=\hat U(t,\ t_0)\,|\,\psi(t_0)\rangle. \qquad (21)$$

Сохранение нормы вектора состояния (сохранение полной вероятности) требует, чтобы $\hat U$ был унитарным оператором: $\hat U^+\hat U=1$ (где $\hat U^+$ эрмитово сопряжён $\hat U$). Рассматривая эволюцию за бесконечно малое время dt, можно представить оператор $\hat U(t+dt,\ t)$ [с точностью до dt^2] в виде

$$\hat U(t+dt,\ t)=1+\hat A\,dt+0\,(dt^2) \qquad (22)$$

(использовано, что $\hat U(t,\ t)=1$). Условие унитарности приводит в этом случае к условию $\hat A^+=-\hat A$, к-рое будет выполняться, если $\hat A=\pm i\hat K$, где $\hat K$ — нек-рый эрмитов оператор. Полагая $\hat A=-i\hat K$ и используя разложение $|\psi(t+dt)\rangle\approx|\psi(t)\rangle+dt\,\frac{\partial}{\partial t}\,|\psi(t)\rangle$, можно получить ур-ние:

$$i\,\frac{\partial}{\partial t}\,|\,\psi\rangle=\hat K\,|\,\psi\rangle, \qquad (23)$$

к-рому в соответствии с постулатом I должен подчиняться вектор состояния системы. Для того чтобы установить, какой физ. величине соответствует $\hat K$, необходим дополнительный физический принцип — принцип соответствия.

Принцип соответствия и временно́е уравнение Шрёдингера

Естественно потребовать, чтобы в пределе, когда де-бройлевская длина волны частицы значительно меньше размеров, характерных для данной задачи (в частности, для макроскопических тел), законы К. м. переходили бы в законы движения классической механики, отвечающие движению частиц (тел) по классическим траекториям, а действия квантовомеханических операторов на векторы состояния сводились бы к умножению их на соответствующие классические величины. Эти требования составляют содержание принципа соответствия в К. м. Аналогичный предельный переход при дл. волны $\lambda\to0$ от законов волновой оптики к законам геом. оптики хорошо известен. С др. стороны, существует тесная аналогия между классич. механикой и геом. оптикой. Лучи света в геом. оптике можно сопоставить с траекториями частиц; при этом закон распространения лучей между двумя точками определяется *Ферма принципом*, аналогичным *наименьшего действия принципу* для движения частиц. Предельному переходу от волновой оптики к геометриче-