представляет собой ограниченный неотрицательный самосопряженный оператор со следом 1, и $\mathrm{Tr}(AP) = m_\alpha(P)$ для всех проекторов P.

Итак, мы доказали, что состояния можно поставить во взаимно однозначное соответствие с неотрицательными самосопряженными ядерными операторами со следом 1 таким образом, что для соответствующих друг другу наблюдаемой α и оператора A будет выполняться равенство $m_\alpha(P) = \mathrm{Tr}(PA)$ для всех проекторов P.

Заметим, что среднее значение ограниченной наблюдаемой, определяемой самосопряженным оператором B, в смешанном состоянии $\gamma_1\alpha_{\varphi_1} + \gamma_2\alpha_{\varphi_2} + \ldots$ равно

$$\gamma_1(B\varphi_1|\varphi_1) + \ldots = \gamma_1\mathrm{Tr}(BP_{\varphi_1}) + \ldots = \mathrm{Tr}(B(\gamma_1 P_{\varphi_1} + \ldots)) = \mathrm{Tr}(BA),$$

где A — оператор, определяющий состояние.

Интересно, что, описывая состояния операторами, мы получили точное взаимно однозначное соответствие в отличие от того, что мы имели при представлении чистых состояний единичными векторами. Это объясняется тем, что при $|c| = 1$ операторы P_φ и $P_{c\varphi}$ совпадают; неоднозначность возникла из-за того, что мы пытались описывать проекторы на одномерные подпространства некоторыми векторами в этих подпространствах.

Смешанные состояния и операторы, описывающие их, были введены в квантовую механику фон Нейманом. Они играют центральную роль в статистической квантовой механике. Матрица оператора, определяющего смешанное состояние (относительно некоторого подходящего базиса), известна физикам как матрица плотности фон Неймана.

2.3 Квантовая динамика и уравнение Шредингера

До этого момента мы занимались квантовой статикой — взаимоотношениями между состояниями и наблюдаемыми в некоторый фиксированный момент времени. В этом разделе мы будем рассматривать квантовую динамику — законы, по которым состояния меняются с течением времени. Несмотря на „недетерминированный“ характер квантовой механики, проявляющийся в том, что в ней возможны только статистические утверждения об ожидаемых результатах измерения наблюдаемых, оказывается, что связь состояний в различные моменты времени строго детерминирована; другими словами, состояние в момент времени $t_2 > t_1$ однозначно определяется отрезком времени $t_2 - t_1$ и состоянием в момент времени t_1. Точно так же как в классической механике, мы получаем здесь однопараметрическую полугруппу $t \to V_t$ преобразований $\mathcal{S}$ в $\mathcal{S}$, такую, что если состояние системы при $t = t_1$ было α, то при $t = t_2$ оно будет $V_{t_2-t_1}(\alpha)$.

Пусть $\alpha_1, \alpha_2, \ldots$ — состояния, а $\gamma_1, \gamma_2, \ldots$ — положительные числа, сумма которых равна 1. Предположим, что при $t = 0$ мы находимся в состоянии α_j с вероятностью γ_j; тогда при $t = t_0$ мы с вероятностью γ_j находимся в состоянии $V_{t_0}(\alpha_j)$. Таким образом, если при $t = 0$ мы находимся в состоянии $\gamma_1\alpha_1 + \gamma_2\alpha_1 + \ldots$, то при $t = t_0$ мы находимся в состоянии $\gamma_1 V_{t_0}\alpha_1 + \gamma_2 V_{t_0}\alpha_2 + \ldots$. Другими словами, каждое V сохраняет выпуклую комбинацию состояний. Эти физические соображения в совокупности с естественным предположением, что для каждой фиксированной тройки A, α, E из $\mathcal{A} \times \mathcal{S} \times \mathcal{B}$ вероятность $p(A, \alpha, E)$ должна мало меняться за короткий промежуток времени, приводят к следующему дополнению нашей системы аксиом.

Аксиома 9. *Задана некоторая однопараметрическая полугруппа $t \to V_t$ преобразований $\mathcal{S}$ в $\mathcal{S}$ такая, что для каждой последовательности элементов $\alpha_1, \alpha_2, \ldots$ из $\mathcal{S}$, каждой последовательности $\gamma_1, \gamma_2, \ldots$ неотрицательных чисел с суммой 1 и для всех $t \geqslant 0$ справедливо равенство*

$$V_t(\gamma_1\alpha_1 + \gamma_2\alpha_2 + \ldots) = \gamma_1 V_t(\alpha_1) + \gamma_2 V_t(\alpha_2) + \ldots$$

и для каждой тройки $(A, \alpha, E) \in \mathcal{A} \times \mathcal{S} \times \mathcal{B}$ вероятность $p(A, V_t(\alpha), E)$ является непрерывной функцией t.

Так же как в классической механике, мы будем говорить, что наша система обратима, если каждое преобразование V_t имеет обратное преобразование V_t^{-1}. Полагая $V_{-t} = V_t^{-1}$, мы превратим $t \to V_t$ в однопараметрическую группу. Мы будем рассматривать только обратимые системы.

Как мы показали в конце предыдущего раздела, $\mathcal{S}$ можно отождествить со множеством всех самосопряженных операторов со следом 1 и с неотрицательным спектром. Таким образом, каждое V_t является отображением операторов на операторы. Пусть U — произвольный унитарный оператор в $\mathcal{H}$. Ясно, что $A \to UAU^{-1}$ — отображение $\mathcal{S}$ на $\mathcal{S}$, сохраняющее выпуклые комбинации. То же самое верно, если U — антиунитарный оператор, т. е. антилинейное ($U(\lambda\varphi) = \bar{\lambda}U(\varphi)$) и сохраняющее скалярное произведение отображение из $\mathcal{H}$ на $\mathcal{H}$. С другой стороны, используя результаты Кадисона [7]), можно показать, что каждое взаимно однозначное отображение $\mathcal{S}$ на $\mathcal{S}$, сохраняющее выпуклые комбинации, имеет вид $A \to UAU^{-1}$, где U — унитарный или антиунитарный оператор. Далее, если U_1 и U_2 определяют одно и то же преобразование $\mathcal{S}$ в $\mathcal{S}$, то оператор $U_1^{-1}U_2$ коммутирует со всеми операторами A из $\mathcal{S}$ и поэтому, как нетрудно показать, равен тождественному оператору, умноженному на константу. Таким образом, $U_1 = cU_2$, где $|c| = 1$, поскольку U_1 и U_2 унитарны (или антиунитарны). Для каждого t выберем U_t так, чтобы $V_t(A) = U_tAU_t^{-1}$, тогда

$$V_{t_1+t_2}(A) = U_{t_1+t_2}\, A\, U_{t_1+t_2}^{-1} = V_{t_1}V_{t_2}(A) = U_{t_1}U_{t_2}\, A\, U_{t_2}^{-1}U_{t_1}^{-1},$$

следовательно, $U_{t_1+t_2} = c(t_1,t_2)\, U_{t_1}U_{t_2}$, где $|c(t_1,t_2)| = 1$, в частности, $U_{2t} = c(t,t)\, U_t^2$, откуда $U_t = c(t/2,t/2)\, U_{t/2}^2$. Поскольку квадрат антиунитарного оператора представляет собой унитарный оператор, U_t является унитарным оператором при всех t.

Если мы применим U_t к чистому состоянию P_φ, где φ — некоторый единичный вектор, то

$$(U_t\, P_\varphi\, U_t^{-1})(U_t(\varphi)) = U_t\varphi,$$

т. е.

$$U_t\, P_\varphi\, U_t^{-1} = P_{U_t\varphi}.$$

Таким образом, чистое состояние, определяемое единичным вектором φ, за время t переходит в чистое состояние, определяемое вектором $U_t(\varphi)$. Далее,

$$p(A,\alpha_\varphi,E) = \alpha_\varphi(P_E^A) = (P_E^A\varphi|\varphi);$$
$$p(A,U_t(\alpha_\varphi),E) = (P_E^A\, U_t(\varphi)|U_t(\varphi));$$

следовательно, $(P\, U_t(\varphi)|U_t(\varphi))$ для каждого проектора P непрерывно по t при всех φ, поэтому $(P_\psi\, U_t(\varphi)|U_t(\varphi))$ для всех φ и ψ непрерывно по t согласно аксиоме 4. С другой стороны,

$$(P_\psi\, U_t(\varphi)|U_t(\varphi)) = (U_t(\varphi)|\psi)(\psi|U_t(\varphi)) = |(U_t(\varphi)|\psi)|^2\,;$$

следовательно, $|(U_t(\varphi)|\psi)|^2$ непрерывно по t при всех φ и ψ.

Не изменяя V_t, мы можем заменить U_t на $a(t)\, U_t$, где $|a(t)| = 1$. Можно показать, что эта замена может быть произведена таким образом, что $(U_t(\varphi)|\psi)$ будет непрерывно по t и при этом $c(t_1,t_2) = 1$. (Мы опускаем достаточно длинное детальное доказательство.) Другими словами, мы можем найти *непрерывную однопараметрическую унитарную группу* $t \to U_t$ такую, что $V_t(A) = U_t\, A\, U_t^{-1}$ при всех t и A. Если a — произвольное действительное число, то $t \to e^{-iat}U_t$ определяет ту же самую группу V, но это единственная неоднозначность; группа U_t определяется с точностью до e^{-iat}. Мы будем называть $t \to U_t$ *динамической группой нашей системы*. Ее существование можно рассматривать как основной постулат общей квантовой динамики.

[7]) K a d i s o n, *Annals of Math.*, 54 (1951), 325.

Применяя теорему Стона к унитарной группе $t \to U_t$, мы можем записать эту группу в виде $t \to e^{-iHt}$, где H — некоторый самосопряженный оператор, и $-iH$ — инфинитезимальная образующая группы $t \to U_t$. Самосопряженный оператор H, который полностью определяет динамику нашей системы, будет называться *динамическим оператором*. Он играет такую же роль в квантовой механике, как функция Гамильтона — в классической. Так же как и эта функция, он определяется с точностью до аддитивной постоянной. Конечно, оператор H однозначно определяется группой U_t, но замена U_t на $e^{-iat}U_t$ эквивалентна прибавлению к H тождественного оператора, умноженного на a.

Поскольку H — самосопряженный оператор, ему соответствует некоторая наблюдаемая, и эта наблюдаемая, конечно, является одной из наиболее важных. Как мы увидим, она с точностью до постоянного множителя равна величине, являющейся аналогом полной энергии в квантовой механике.

Пусть φ_0 — некоторый единичный вектор из области определения H. Тогда в момент времени t состояние, которое в момент времени 0 определялось вектором φ_0, будет определяться вектором $U_t(\varphi_0) = e^{-itH}\varphi_0$. Положим $\varphi_t = e^{-itH}\varphi_0$, тогда φ_t как функция t удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$\frac{d\varphi_t}{dt} = -iH(\varphi_t).$$

Это абстрактная форма известного уравнения Шредингера. Оно играет такую же роль в квантовой механике, какую уравнение Гамильтона–Якоби играет в классической механике. Это — дифференциальное уравнение первого порядка (в бесконечномерном пространстве), решения которого являются траекториями чистых состояний. Ниже мы переведем его в конкретную форму, причем φ будут комплексными функциями $3n$ переменных, а H — некоторым дифференциальным оператором. Уравнение Шредингера превратится тем самым в уравнение с частными производными первого порядка по времени.

Пусть φ — собственный вектор оператора H, тогда $H(\varphi) = \lambda\varphi$ и $e^{-itH}(\varphi) = e^{-it\lambda}\varphi$. Поэтому $e^{-itH}(\varphi)$ и φ при всех t определяют то же самое состояние. Другими словами, состояние, определяемое φ, является стационарным в том смысле, что оно не меняется со временем. Обратно, если $e^{-itH}(\varphi) = \rho(t)\varphi$, т. е. если φ определяет стационарное чистое состояние, то $\rho(t) = e^{-it\lambda}$ и, следовательно, $H(\varphi) = \lambda\,\varphi$. Стационарные чистые состояния — это те и только те состояния, которые определяются собственными векторами динамического оператора H.

Конечно, H может не иметь собственных векторов. Рассмотрим противоположный случай, когда H имеет чисто точечный спектр. Пусть $\varphi_1, \varphi_2, \ldots$ — полная система собственных векторов, и $H(\varphi_i) = \lambda_i\varphi_i$. Если ψ представляет некоторое чистое состояние, и $\psi = c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2 + \ldots$, то

$$U_t(\psi) = c_1e^{-i\lambda_1 t}\varphi_1 + c_2e^{-i\lambda_2 t}\varphi_2 + \ldots.$$

Таким способом мы можем получить решение уравнения Шредингера в явном виде.

В квантовой механике мы будем называть наблюдаемую A' *интегралом*, если ее вероятностное распределение не меняется со временем, т. е. если $p(A', \alpha_{U_t(\varphi)}, E)$ не зависит от t при всех φ и E. Это означает, что

$$(P_E^A\, U_t(\varphi)|U_t\varphi) = (U_t^{-1}P_E^A\, U_t(\varphi)|\varphi)$$

не зависит от t и, следовательно,

$$(U_t^{-1}P_E^A\, U_t(\varphi)|\varphi) = (P_E^A(\varphi)|\varphi)$$

при всех t, E и φ. Таким образом, оператор U_t коммутирует с P_E^A при всех t и E. Но по общей теореме теории операторов U_t коммутирует со всеми P_E^A при всех t тогда и

только тогда, когда коммутируют A и H. Таким образом, интегралы — это в точности те наблюдаемые, для которых соответствующие операторы коммутируют с H.

Поскольку H коммутирует сам с собой, соответствующая наблюдаемая является интегралом, играющим весьма важную роль в квантовой механике. Мы увидим далее, что этот интеграл только постоянным множителем отличается от аналога интеграла энергии в квантовой механике. Таким образом, стационарные состояния любой системы в квантовой механике — это в точности те состояния, в которых энергия имеет определенное значение с вероятностью единица.

Для заданной наблюдаемой, которая не является интегралом, можно вычислить ход изменения ее среднего значения со временем. Пусть A — самосопряженный оператор, соответствующий этой наблюдаемой, а φ — единичный вектор из области определения A. Тогда, если при $t = 0$ система находилась в состоянии, определяемом φ, то в момент времени t наша наблюдаемая будет иметь среднее значение

$$(A\,U_t(\varphi)|U_t(\varphi)) = (U_t^{-1}\,A\,U_t(\varphi)|\varphi).$$

Формальные вычисления, которые имеют смысл при некоторых ограничениях на φ, приводят к значению $(i(HA - AH)\varphi|\varphi)$ для производной этого выражения по t при $t = 0$. Если A и H ограничены, то это вычисление всегда имеет смысл, и мы видим, что существует единственная наблюдаемая, а именно наблюдаемая, соответствующая оператору $i(HA - AH)$, которая обладает тем свойством, что в каждом состоянии ее среднее значение равно производной по времени среднего значения наблюдаемой, соответствующей оператору A, в этом состоянии. Естественно назвать эту наблюдаемую производной по времени от данной наблюдаемой.

Если A и H неограниченны, то возникают трудности, связанные с тем, что A и H могут не иметь областей определения, расположенных нужным образом. Если, однако, дело обстоит благополучно, т. е. если существует *единственный* самосопряженный оператор, совпадающий с $i(HA - AH)$ на тех векторах, где последний определен, то мы будем говорить, что наблюдаемая, соответствующая A, дифференцируема по времени, и считать ее производной наблюдаемую, соответствующую единственному самосопряженному расширению оператора $i(HA - AH)$.

Понятие производной от наблюдаемой по времени будет более прозрачным, если мы несколько изменим нашу точку зрения. Пусть A — самосопряженный оператор, φ — единичный вектор, и W — унитарное преобразование. Тогда вероятностное распределение $E \to (P_E^A\,W(\varphi)|W(\varphi))$ наблюдаемой, соответствующей оператору A, в состоянии, определяемом вектором $W(\varphi)$, совпадает с вероятностным распределением $(W^{-1}P_E^A\,W(\varphi)|\varphi)$ наблюдаемой, соответствующей оператору $W^{-1}A\,W$, в состоянии, определяемом φ. Другими словами, если мы будем считать состояния фиксированными, а наблюдаемые — меняющимися по закону $A \to U_t^{-1}A\,U_t$, то и для изменения вероятностей со временем мы получим тот же самый результат, что и ранее. Для того чтобы представить себе разницу между этими двумя точками зрения, физик может сравнить модель Шредингера (меняющиеся состояния) и модель Гейзенберга (меняющиеся наблюдаемые). В модели Гейзенберга понятие производной некоторой наблюдаемой по времени является непосредственным и очевидным.

Все результаты, полученные для однопараметрической группы $t \to V_t$, можно, конечно, применить к любой другой однопараметрической группе „автоморфизмов“ $\mathcal{S}$. Каждая такая группа $t \to W_t$ имеет вид

$$W_t:\ A \to U_t^W\,A\,(U_t^W)^{-1},$$

где $t \to U_t^W$ — непрерывная однопараметрическая группа унитарных преобразований, определяемая по W однозначно с точностью до умножения на комплексную функцию

вида e^{-iat}. Согласно теореме Стона, U_t^W однозначно определяется своей инфинитезимальной образующей $-iA^W$. Таким образом, если мы отождествим две наблюдаемые, отличающиеся на константу, мы получим взаимно однозначное соответствие между наблюдаемыми, с одной стороны, и непрерывными однопараметрическими группами автоморфизмов $\mathcal{S}$ — с другой.

Это вполне аналогично соответствию, которое имеется в классической механике между некоторыми дифференцируемыми наблюдаемыми, с одной стороны, и однопараметрическими группами контактных преобразований — с другой. В этом случае точно так же две наблюдаемые, отличающиеся на константу, приводили к одной и той же группе контактных преобразований. Мы можем определить производные наблюдаемых относительно U_t^W так же, как относительно U_t, и получить для оператора, соответствующего производной, формулу $i(AB - BA)$, в которой B — оператор, соответствующий дифференцируемой наблюдаемой, $-iA$ — инфинитезимальная образующая группы U_t^W. Таким образом, выражение $i(AB - BA)$ играет в квантовой механике ту же роль, что и скобки Пуассона в классической механике. В частности, наблюдаемая, соответствующая оператору A, является интегралом в том и только в том случае, когда оператор H инвариантен относительно группы автоморфизмов, определяемой оператором A.

2.4 Каноническое „квантование“ классических систем

До сих пор наблюдаемые были введены совершенно абстрактно. Теперь мы постараемся сопоставить их с наблюдаемыми классической механики и найти в квантовой механике аналоги или уточнения чисто классических понятий.

Предположим, что наша классическая система относится к тем, которые мы рассмотрели в разд. 1.2, т. е. состоит из n точек, имеющих координаты $q_1, \ldots, q_{3n}$ в некоторой прямоугольной системе координат. Анализ, который привел к необходимости отказаться от приписывания точных значений одновременно q_j и $\dot{q}_j$, неприменим к задаче одновременного измерения q_i и q_j. Поэтому мы предположим, что для каждого j в гильбертовом пространстве квантового аналога нашей классической системы имеется самосопряженный оператор Q_j и что эти операторы коммутируют друг с другом. Заметим, что это предположение согласуется с аналогией между коммутаторами и скобками Пуассона, поскольку скобка Пуассона любых двух координат (на самом деле даже любых двух функций, зависящих только от координат) тождественно равна нулю.

Ясно, что любое изменение системы координат, используемой для того, чтобы задать положение наших точек в пространстве с помощью чисел, вызовет соответствующее изменение наблюдаемых. Например, если сдвинуть начало координат на две единицы в сторону убывания x, то Q_j, заменится на $Q_j + 2I$ для $j = 1, 4, 7, \ldots$, где I — тождественный оператор. С другой стороны, такой сдвиг или любое другое борелевское взаимно однозначное отображение пространства на себя, сохраняющее расстояния, переведет вопрос в вопрос и сохранит упорядоченность и операцию $Q \to 1-Q$ в $\mathcal{Q}$. Но, как известно, любой автоморфизм структуры с ортогональным дополнением всех замкнутых подпространств гильбертова пространства порождается некоторым унитарным преобразованием, которое определено однозначно с точностью до постоянного множителя: $P \to UPU^{-1}$, где P — проектор на соответствующее подпространство. Отсюда следует, в частности, что для любого переноса в пространстве $(x, y, z) \to (x - a, y - b, t - c)$ существует унитарное преобразование $U_{a,b,c}$, такое, что $U_{a,b,c} Q_j U_{a,b,c}^{-1}$ равно $Q_j + aI$, $Q_j + bI$ или $Q_j + cI$ в зависимости от того, является ли q_j, координатой по оси x, y или z.

На самом деле мы можем, если захотим, использовать различные системы координат для наблюдения над различными частицами и изменять их независимо друг от друга. Таким образом, для любого переноса $q_j \to q_j - a_j$ в пространстве $\mathcal{M}$ всех наборов из $3n$