§ 23. Коммутация операторов

Одним из важнейших вопросов, возникающих в квантовой механике, является вопрос о возможности одновременного измерения значений физических величин, относящихся к данной квантовомеханической системе.

Для того чтобы две величины F и R могли бы иметь определенные значения в некотором состоянии, описываемом волновой функцией $\psi_n(x)$, эта волновая функция, очевидно, должна быть собственной функцией операторов $\hat{F}$ и $\hat{R}$, т. е. должны одновременно удовлетворяться два уравнения:

$$\begin{aligned} \hat{F}\psi_n(x) &= F\psi_n(x), \\ \hat{R}\psi_n(x) &= R\psi_n(x). \end{aligned} \tag{23,1}$$

Подействуем на первое уравнение оператором $\hat{R}$, а на второе — оператором $\hat{F}$:

$$\begin{aligned} \hat{R}\hat{F}\psi_n &= \hat{R}F\psi_n = FR\psi_n, \\ \hat{F}\hat{R}\psi_n &= \hat{F}R\psi_n = RF\psi_n. \end{aligned}$$

Правые части этих уравнений равны, следовательно, равны и левые части, т. е.

$$\hat{R}\hat{F}\psi_n = \hat{F}\hat{R}\psi_n$$

или

$$(\hat{R}\hat{F} - \hat{F}\hat{R})\psi_n = 0. \tag{23,2}$$

Если общие собственные функции ψ_n образуют полную систему функций, то произвольную волновую функцию ψ можно разложить по этой системе функций. Действуя на функцию коммутатором $\hat{R}\hat{F} - \hat{F}\hat{R}$, мы получим, очевидно,

$$(\hat{R}\hat{F} - \hat{F}\hat{R})\psi = \sum c_n(\hat{R}\hat{F} - \hat{F}\hat{R})\psi_n = 0. \tag{23,3}$$

Символически последнее равенство можно записать в виде

$$\hat{R}\hat{F} - \hat{F}\hat{R} = 0. \tag{23,4}$$

Мы доказали таким образом, что если две квантовомеханические величины могут одновременно иметь определенные значения, то операторы, отвечающие им, должны коммутировать. Конечно, если эти величины имеют одновременно определенные значения только в некоторых особых состояниях (так что общие собственные функции ψ_n не образуют полной системы функций), то соответствующие операторы не коммутируют (см., например, § 30).

Можно доказать и обратную теорему: если два оператора $\hat{F}$ и $\hat{R}$ коммутируют между собой, то они будут иметь общие собственные функции. Для доказательства подействуем на уравнение для собственных функций оператора $\hat{F}$ оператором $\hat{R}$. Воспользуемся при этом тем, что операторы $\hat{F}$ и $\hat{R}$ коммутируют между собой. Тогда получим:

$$\hat{F}(\hat{R}\psi) = F(\hat{R}\psi).$$

Мы видим, что функция $\psi' = \hat{R}\psi$ также является собственной функцией оператора $\hat{F}$, принадлежащей собственному значению F. Если вырождение отсутствует, то функция ψ' описывает то же состояние, что и функция ψ, и, следовательно, может отличаться от ψ лишь на постоянный множитель R, т. е.

$$\hat{R}\psi = R\psi.$$

Мы доказали таким образом, что функция ψ будет одновременно собственной функцией операторов $\hat{F}$ и $\hat{R}$. Доказательство легко обобщается и на тот случай, когда имеется вырождение. При этом, однако, не любая собственная функция оператора $\hat{F}$ или $\hat{R}$ будет одновременно собственной функцией обоих операторов. Тем не менее для коммутирующих операторов всегда можно построить полную систему общих собственных функций.

Резюмируя сказанное, мы можем утверждать: если двум квантовомеханическим величинам отвечают коммутирующие операторы, то эти величины будут одновременно иметь определенные значения; если же операторы не коммутируют, то эти величины, вообще говоря, одновременно не могут иметь определенных значений, за исключением лишь особых случаев (см. § 30).

Поясним это одним конкретным примером. Оператор координаты $\hat{x}$ и оператор соответствующей проекции импульса $\hat{p}_x$ могут быть выбраны как пример некоммутирующих операторов. Отвечающие им величины x и p_x, как мы знаем, одновременно (т. е. в одном и том же состоянии) не имеют определенных значений. Наоборот, операторы координаты и проекции импульса на разные оси, например $\hat{x}$ и $\hat{p}_y$, коммутируют между собой. Соответствующие величины x и p_y одновременно измеримы. Одновременно могут иметь определенные значения проекции импульса на разные оси (p_x, p_y, p_z) или координаты (x, y, z).

Мы можем теперь уточнить понятие «заданное состояние системы» в квантовой механике. Состояние системы задано, если задана волновая функция, описывающая эту систему. Однако, мы ни при каких условиях не можем непосредственно измерить саму волновую функцию. Физический смысл имеет лишь квадрат модуля ее, трактуемый, как соответствующая вероятность. Выход из этого кажущегося противоречия заключается в следующем: когда мы говорим, что задано состояние системы, то это означает, что задано значение определенной совокупности квантовомеханических величин. Эта совокупность величин, задание которой полностью определяет состояние системы, называется полным набором квантовомеханических величин. В классической физике, чтобы задать состояние системы в какой-то момент времени, нам требовалось задать значения всех обобщенных импульсов и обобщенных координат в этот момент времени. Всего, если классическая система имеет n степеней свободы, требовалось задать значения $2n$ переменных величин. Для микросистемы, т. е. системы, описываемой квантовой механикой, полный набор, очевидно, не может включать в себя и импульсы и координаты частиц, так как эти величины одновременно не имеют определенных значений. Для того чтобы задать состояние системы в квантовой механике, достаточно задать только координаты частицы или только ее импульсы или вообще любую совокупность независимых величин, одновременно измеримых и число которых равно числу степеней свободы системы. Тогда волновая функция, описывающая данное состояние системы, будет собственной функцией операторов величин, входящих в полный набор, отвечающей заданным собственным значениям.

Например, если система обладает тремя степенями свободы, то в качестве величин, образующих полный набор, могут быть выбраны проекции импульса p_x, p_y, p_z. Соответствующая волновая функция имеет вид (2,12).

О состояниях, характеризуемых заданием в данный момент времени некоторого полного набора величин, говорят как о состояниях, описанных полным образом, или «чистых» состояниях. Этим состояниям однозначно сопоставляется соответствующая волновая функция. В данный момент времени эта волновая функция выбирается как собственная функция операторов всех величин, входящих в полный набор. Заметим, что некоторое «чистое» состояние мы получим и в том случае, если волновая функция, отвечающая этому состоянию, представлена в виде некоторой суперпозиции собственных функций, например в виде суперпозиции плоских волн (3,3). Информацию о развитии процесса во времени мы получаем, решая уравнение Шредингера (6,8) с данным начальным условием и определяя, таким образом, волновую функцию в последующие моменты времени.

Следует заметить, что помимо «чистых» состояний иногда приходится иметь дело с так называемыми «смешанными» состояниями (см. § 89). В этих состояниях волновая функция системы не определена. Можно говорить лишь о вероятности P_n реализации того или иного «чистого» состояния φ_n (неполное описание).

Если нас интересует вероятность измерения F_m-го значения величины F, то в «чистом» состоянии $\psi(x)$ эта вероятность определяется квадратом модуля $|c_m|^2$ соответствующей амплитуды разложения функции ψ по собственным функциям $\psi_k(x)$ оператора $\hat{F}$

$$\psi(x) = \sum_k c_k \psi_k(x),$$

$$W(F_m) = |c_m|^2 = \left| \int \psi(x) \psi_m^*(x) \, dV \right|^2. \tag{23,5}$$

Если система находится в «смешанном» состоянии, то для получения искомой вероятности мы должны разложить по функциям $\psi_k(x)$ волновые функции $\varphi_n(x)$

$$\varphi_n(x) = \sum_k c_{kn} \psi_k(x),$$

где

$$c_{kn} = \int \varphi_n(x) \psi_k^*(x) \, dV. \tag{23,6}$$

Вероятность измерения в состоянии φ_n F_m-го значения величины F дается квадратом модуля амплитуды разложения c_{mn}. В свою очередь состояние $\varphi_n(x)$ реализуется с вероятностью P_n. Таким образом, окончательно, по теореме умножения вероятностей, получаем:

$$W'(F_m) = \sum_n P_n |c_{mn}|^2. \tag{23,7}$$

Для того чтобы сравнить полученные результаты, представим волновую функцию ψ в виде суперпозиции функций $\varphi_n(x)$

$$\psi(x) = \sum_n b_n \varphi_n(x).$$

Тогда, как легко видеть из (23,5) и (23,6),

$$c_m = \sum b_n c_{mn}. \tag{23,8}$$

Подставляя это значение в выражение (23,5), получаем

$$W(F_m) = \left| \sum_n b_n c_{mn} \right|^2 = \sum_n |b_n|^2 |c_{mn}|^2 + \frac{1}{2} \sum_{n \neq k} \sum b_n b_k c_{mn} c_{mk}, \tag{23,9}$$

причем

$$\sum_n |b_n|^2 = \sum_n P_n = 1.$$

Мы видим, что полученное выражение отличается от результата, даваемого формулой (23,7), наличием двойной суммы, которая выражает своеобразную интерференцию между состояниями. В случае «смешанных» состояний такая интерференция отсутствует.

Все приведенные рассуждения непосредственно обобщаются и на случай сплошного спектра.

§ 24. Неравенства Гейзенберга

Мы выяснили в предыдущем параграфе условия, при которых возможно одновременное измерение двух физических величин. Предположим теперь, что две физические величины F и R одновременно не имеют определенных значений. Тогда операторы, отвечающие этим величинам $\hat{F}$ и $\hat{R}$, не коммутируют между собой. Предположим, что имеет место соотношение

$$\hat{F}\hat{R} - \hat{R}\hat{F} = i\hat{B}, \tag{24,1}$$

где $\hat{B}$, как это следует из (17,4), некоторый эрмитов оператор.

Представляет интерес определить в общем виде, каково минимально возможное значение произведения флуктуаций данных величин. За меру, характеризующую отклонения отдельных результатов измерения величин F и R от их средних значений, выберем среднеквадратичные отклонения (дисперсии) $\overline{\Delta F^2}$ и $\overline{\Delta R^2}$, где

$$\Delta F = F - \overline{F}, \quad \Delta R = R - \overline{R}.$$

Для среднеквадратичных отклонений соответственно имеем

$$\begin{aligned} \overline{\Delta F^2} &= \overline{(F - \overline{F})^2} = \overline{F^2} - \overline{F}^2. \\ \overline{\Delta R^2} &= \overline{(R - \overline{R})^2} = \overline{R^2} - \overline{R}^2. \end{aligned} \tag{24,2}$$

Не ограничивая общности, мы можем положить $\overline{F} = 0$ и $\overline{R} = 0$ (иными словами, понимать под F и R отклонение этих величин от их среднего значения).

Рассмотрим интеграл

$$J(\alpha) = \int |(\alpha\hat{F} - i\hat{R})\psi|^2 \, dV. \tag{24,3}$$

Здесь ψ — волновая функция, интегрирование производится по всей области изменения независимых переменных, а α — произвольный вещественный параметр. Интеграл (24,3) является не отрицательным $J(\alpha) \geqslant 0$. Перепишем его в виде

$$J(\alpha) = \int (\alpha\hat{F} - i\hat{R})\psi \cdot (\alpha\hat{F}^* + i\hat{R}^*)\psi^* \, dV.$$