дела позволят нам во втором разделе вывести соотношения неопределенности Гейзенберга как следствие статистической интерпретации корпускулярно-волнового дуализма. Далее, в разделе III мы покажем, что эти соотношения, сколь бы они ни казались странными на первый взгляд, вполне согласуются с опытом, если учесть, что измерительные приборы также являются квантовыми объектами, подчиняющимися тем же соотношениям, и что поэтому возмущение, вводимое в состояние измеряемого объекта вмешательством измерительного прибора, не может быть сделано ни сколь угодно малым, ни полностью контролируемым.

Говоря точно, на микроскопическом уровне нельзя строго разделить измеряемый объект и измерительный прибор. В то же время, когда в обычных условиях говорят о некоторой процедуре измерения, то всегда неявно предполагают возможность провести четкое различие между объектом измерения и всеми теми приспособлениями, которые служат для производства измерения. На микроскопическом уровне вмешательство измерительного аппарата вносит неконтролируемое возмущение, конечная величина которого непосредственно связана с существованием атомизма действия. Наличие неконтролируемого возмущения ставит предел возможности различать субъект и объект и ведет к пересмотру классических концепций, касающихся описания явлений. Этот вопрос рассматривается в разделе IV этой главы.

Раздел I. СТАТИСТИЧЕСКАЯ ИНТЕРПРЕТАЦИЯ ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ В ВОЛНОВОЙ МЕХАНИКЕ

§ 2. Вероятности результатов измерения координаты и импульса частицы

Разберем вначале случай квантовой системы, состоящей из одной частицы. Пусть $\Psi(\boldsymbol{r}, t)$ есть ее волновая функция. Она удовлетворяет уравнению Шредингера и полностью определяется в любой момент времени, если известно значение $\Psi(\boldsymbol{r}, t_0)$ в начальный момент t_0. Сейчас мы анализируем ситуацию в некоторый данный момент времени t, и обозначим через $\Psi(\boldsymbol{r})$ волновую функцию частицы в этот момент.

Динамическое состояние классической частицы определяется в каждый момент заданием ее положения $\boldsymbol{r}(x, y, z)$ и импульса $\boldsymbol{p}(p_x, p_y, p_z)$. Но поскольку волновая функция имеет некоторую пространственную протяженность, мы не можем приписывать квантовой частице точное положение в пространстве. Можно говорить лишь о вероятности найти частицу в некоторой области пространства, когда *производится измерение ее положения*. Обозначим символом $P(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r}$ вероятность найти частицу в элементе объема $(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}+d\boldsymbol{r})$, тогда вероятность найти ее в объеме V мы получим интегрированием «плотности вероятности» $P(\boldsymbol{r})$ по этому объему: $P(V)=\int\limits_V P(\boldsymbol{r})\,d\boldsymbol{r}$. Подобно этому мы, вообще говоря, не можем приписать квантовой частице точно заданный импульс. Конечно, если сопоставляемая частице волна является плоской волной $e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}}$, то она, по закону соответствия де Бройля, действительно представляет частицу с импульсом $\boldsymbol{p}=\hbar\boldsymbol{k}$. Однако в общем случае волна Ψ представляет собой суперпозицию многих плоских волн с различными волновыми векторами $\boldsymbol{k}$. Поэтому можно определить только вероятность того, что измеряемый импульс окажется в некоторой области пространства импульсов. Обозначим символом $\Pi(\boldsymbol{p})\,d\boldsymbol{p}$ вероятность найти импульс частицы в интервале $(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{p}+d\boldsymbol{p})$, тогда вероятность $\Pi(D)$ найти импульс в некоторой конечной области D импульсного пространства получится интегрированием: $\Pi(D)=\int\limits_D \Pi(\boldsymbol{p})\,d\boldsymbol{p}$. Плотности вероятности $P(\boldsymbol{r})$ и $\Pi(\boldsymbol{p})$ являются величинами существенно положительными и должны удовлетворять очевидным условиям

$$\int P(\boldsymbol{r})\,d\boldsymbol{r}=1, \quad \int \Pi(\boldsymbol{p})\,d\boldsymbol{p}=1, \tag{1}$$

где интегрирование распространяется на все конфигурационное и импульсное пространства, соответственно.

Распределения вероятности $P(\boldsymbol{r})$, $\Pi(\boldsymbol{p})$ должны быть полностью заданы, если известна волновая функция $\Psi(\boldsymbol{r})$. Определим $P(\boldsymbol{r})$ равенством

$$P(\boldsymbol{r})=\Psi^*(\boldsymbol{r})\,\Psi(\boldsymbol{r})=|\Psi(\boldsymbol{r})|^2. \tag{2}$$

Эта формула вполне согласуется с высказанной ранее идеей о том, что вероятность нахождения частицы в точке должна быть тем больше, чем больше интенсивность волны в этой точке.

Выполнение равенства (1) требует, чтобы волновая функция подчинялась так называемому *условию нормировки*

$$N\equiv\int|\Psi(\boldsymbol{r})|^2\,d\boldsymbol{r}=1. \tag{3}$$

Это предполагает, что функция $\Psi(\boldsymbol{r})$ является квадратично интегрируемой, причем ее норма остается постоянной во времени. Мы покажем в дальнейшем, что это условие согласованности статистической интерпретации действительно выполняется.

Чтобы определить $\Pi(\boldsymbol{p})$, рассмотрим операцию измерения импульса частицы, сопоставляемой волне Ψ. Эта проблема аналогична спектральному анализу световой волны, причем аналогия становится особенно ясной, если измерение импульса производится с помощью некоторого дифракционного устройства; однако все рассуждения имеют общий характер и не зависят от конкретного устройства измерительного аппарата. Введем преобразование Фурье волновой функции согласно соотношениям [1])

$$\Phi(\boldsymbol{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \Psi(\boldsymbol{r})\, e^{-i\frac{\boldsymbol{p}\boldsymbol{r}}{\hbar}}\, d\boldsymbol{r}, \tag{4}$$

$$\Psi(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \Phi(\boldsymbol{p})\, e^{i\frac{\boldsymbol{p}\boldsymbol{r}}{\hbar}}\, d\boldsymbol{p}. \tag{5}$$

Следуя уравнению (5) функцию $\Psi(\boldsymbol{r})$ можно рассматривать как линейную суперпозицию элементарных волн $e^{\frac{i\boldsymbol{p}\boldsymbol{r}}{\hbar}}$ с точно определенным импульсом $\boldsymbol{p}$, причем каждая элементарная волна входит с коэффициентом $(2\pi\hbar)^{-3/2}\Phi(\boldsymbol{p})$. Если бы эта суперпозиция содержала только один член $e^{i\frac{\boldsymbol{p}_0\boldsymbol{r}}{\hbar}}$, то результат измерения был бы равен $\boldsymbol{p}_0$. Если $\Phi(\boldsymbol{p})$ отлична от нуля только в малой области, окружающей $\boldsymbol{p}_0$, как в случае волновых пакетов, изучавшихся в гл. II, то значение импульса почти наверняка находится вблизи $\boldsymbol{p}_0$. В общем случае можно сказать, что вероятность $\Pi(\boldsymbol{p})\,d\boldsymbol{p}$ найти значение импульса в элементе объема $(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{p}+d\boldsymbol{p})$ тем больше, чем больше $|\Phi(\boldsymbol{p})|$. Таким образом, мы можем положить

$$\Pi(\boldsymbol{p}) = \Phi^*(\boldsymbol{p})\,\Phi(\boldsymbol{p}) = |\Phi(\boldsymbol{p})|^2. \tag{6}$$

Поскольку скалярное произведение инвариантно относительно преобразования Фурье (теорема IV, см. Дополнение А § 16; в дальнейшем будем обозначать, например, § А. 16, § Б. 9 и т. д.):

$$\int |\Phi(\boldsymbol{p})|^2\, d\boldsymbol{p} = \int |\Psi(\boldsymbol{r})|^2\, d\boldsymbol{r},$$

условие нормировки (1) автоматически удовлетворяется, если функция $\Psi(\boldsymbol{r})$ нормирована на единицу.

Преобразование Фурье устанавливает взаимооднозначное соответствие между функциями $\Psi(\boldsymbol{r})$ и $\Phi(\boldsymbol{p})$. Задания функции $\Phi(\boldsymbol{p})$, подобно заданию функции $\Psi(\boldsymbol{r})$, достаточно для определения динамического состояния частицы. Поэтому $\Phi(\boldsymbol{p})$ назы-

---

[1]) Если интегралы в правых частях равенств (4) и (5) не сходятся в обычном смысле, то понятие сходимости должно быть модифицировано согласно предписаниям теоремы I Дополнения А (§ 16) при учете того обстоятельства, что функция $\Psi(\boldsymbol{r})$ всегда должна быть квадратично интегрируемой. Последующие результаты не зависят от определения сходимости.

вают *волновой функцией в импульсном пространстве*, что оправдывается еще и тем, что Ψ и Φ играют в определениях (2) и (6) вполне аналогичную роль. Иногда говорят, что функции Ψ и Φ являются эквивалентными *представлениями* одного динамического состояния.

Следует четко представлять себе физический смысл введенных нами величин $P(\boldsymbol{r})$ и $\Pi(\boldsymbol{p})$. Частица, сопоставляемая волне, вообще говоря, не обладает ни определенным положением, ни определенным импульсом; если производить измерение той или иной динамической переменной в отдельной системе, представляемой волновой функцией Ψ, то никаких предсказаний результата сделать нельзя. Вероятностные предсказания, о которых шла речь выше, относятся к ансамблю из очень большого числа $\mathcal{N}$ эквивалентных систем, не зависимых друг от друга, каждая из которых представляется одной и той же волновой функцией Ψ. Если производить в каждой из этих систем измерение пространственного положения, то величина $P(\boldsymbol{r})$ дает вероятность распределения $\mathcal{N}$ результатов измерения в предельном случае, когда число $\mathcal{N}$ членов статистического ансамбля стремится к бесконечности. Если измеряется импульс, то величина $\Pi(\boldsymbol{p})$ при тех же условиях дает распределение результатов измерения импульса.

Чтобы определить $P(\boldsymbol{r})$ и $\Pi(\boldsymbol{p})$, исходя из волновой функции, мы основывались на соображениях правдоподобности и внутренней логики определения. Но совершенно не очевидно, что выражения (2) и (6) являются единственными, которые можно получить путем подобных рассуждений. Распределения вероятности $P(\boldsymbol{r})$ и $\Pi(\boldsymbol{p})$ могут быть в принципе непосредственно сопоставлены с опытными данными. Выражения (2) и (6) получат окончательное подтверждение, если результат такого сопоставления окажется удовлетворительным.

§ 3. Сохранение нормы во времени

Чтобы определения вероятностей, данные выше, были справедливы, необходимо, чтобы норма N волновой функции оставалась постоянной во времени. Но функции Ψ и Ψ^* удовлетворяют соответственно уравнению Шредингера (II. 33) и комплексно сопряженному уравнению, т. е.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = H\Psi, \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi^* = -(H\Psi)^*.$$

Следовательно,

$$\frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 = \Psi^* \left(\frac{\partial}{\partial t} \Psi\right) + \left(\frac{\partial}{\partial t} \Psi^*\right) \Psi = \frac{1}{i\hbar} [\Psi^* (H\Psi) - (H\Psi)^* \Psi]. \quad (7)$$

Интегрируя обе стороны равенства по всему конфигурационному пространству, получаем

$$\frac{dN}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \int [\Psi^* (H\Psi) - (H\Psi)^* \Psi] \, d\boldsymbol{r}.$$

Норма будет оставаться постоянной во времени, если

$$\int \Psi^* (H\Psi) \, d\boldsymbol{r} = \int (H\Psi)^* \Psi \, d\boldsymbol{r}. \tag{8}$$

Это равенство должно выполняться каким бы ни было динамическое состояние частицы, т. е. для всякой функции Ψ, квадратично интегрируемой в пространстве конфигураций.

В математике операторы, удовлетворяющие соотношению (8) для всякой функции Ψ из функционального пространства, где определен оператор, называются *эрмитовыми* операторами. Основные свойства эрмитовых операторов будут изучены в гл. V.

Проверим, что гамильтониан Шредингера действительно обладает свойством эрмитовости. Ограничимся здесь случаем частицы, находящейся в области действия скалярного потенциала (случай заряженной частицы в электромагнитном поле является предметом задачи 1). Имеем

$$H \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\boldsymbol{r}).$$

Поскольку $V(\boldsymbol{r})$ есть величина действительная, уравнение (8) в данном случае принимает вид

$$\int [\Psi^* (\Delta\Psi) - (\Delta\Psi)^* \Psi] \, d\boldsymbol{r} = 0.$$

Если бы интегрирование распространялось на некоторый конечный объем, ограниченный поверхностью S, то по известной теореме Грина объемный интеграл был бы равен интегралу по поверхности

$$\int_S \left(\Psi^* \frac{d\Psi}{dn} - \frac{d\Psi^*}{dn} \Psi \right) dS,$$

где символом d/dn обозначена внешняя нормальная производная. В нашем случае интегрирование распространяется на все конфигурационное пространство, т. е. все элементы поверхности S удаляются в бесконечность. В то же время, поскольку Ψ представляет динамическое состояние физической системы, она есть функция квадратично интегрируемая, следовательно, поверхностный интеграл стремится к нулю.

Таким образом, если условие нормировки (3) выполняется в начальный момент времени, оно выполняется и во все последующие моменты времени. Ввиду того, что уравнение Шредингера есть однородное уравнение, его решения определены только с точностью до произвольного постоянного комплексного множителя. Условие нормировки в начальный момент времени фиксирует абсолютное значение этого множителя; фаза комплексного постоянного множителя остается произвольной.

§ 4. Понятие потока

Свойство сохранения нормы легко интерпретировать, если ввести понятие потока. Правая часть уравнения (7) всегда может быть выражена в виде дивергенции некоторого вектора — вектора плотности потока вероятности или просто *вектора потока*. Ограничимся здесь случаем частицы, движущейся в поле скалярного потенциала (см. задачу 1). Определим поток $\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r}, t)$ в точке $\boldsymbol{r}$ в момент времени t выражением

$$\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r}, t) = \mathrm{Re}\left[\Psi^* \frac{\hbar}{im} \nabla\Psi\right]. \tag{9}$$

Нетрудно проверить, что

$$\operatorname{div}\boldsymbol{J} = \frac{i}{\hbar}\left[\Psi^*(H\Psi) - (H\Psi)^*\Psi\right]. \tag{10}$$

Это позволяет переписать уравнение (7) в форме

$$\frac{\partial}{\partial t}P + \operatorname{div}\boldsymbol{J} = 0. \tag{11}$$

Уравнение типа (11) часто встречается в гидродинамике. Это есть уравнение сохранения для жидкости с плотностью P и потоком $\boldsymbol{J}$ в среде без поглощения, без источников и стоков. Мы приходим, таким образом, к аналогии между движением квантовой частицы и классической жидкости[2]. Масса жидкости, содержащаяся в заданном объеме $\mathscr{V}$, равна интегралу от плотности по этому объему. Из уравнения (11) вытекает тот общеизвестный факт, что производная по времени от массы жидкости, заключенной в $\mathscr{V}$, равна

$$-\int_{\mathscr{V}} \operatorname{div}\boldsymbol{J}\, d\boldsymbol{r} = -\int_{S} \boldsymbol{J}\, d\boldsymbol{S},$$

т. е. потоку вектора $\boldsymbol{J}$ через замкнутую поверхность S, ограничивающую объем. Полная масса жидкости во всем пространстве остается постоянной (сохранение нормы), так как поток через поверхность S стремится к нулю, когда объем $\mathscr{V}$ включает все пространство.

---

[2]) Конечно эта аналогия не может быть распространена слишком далеко. Все, что можно получить на основе этой аналогии, сводится к закону сохранения, выражаемому уравнением (11) (см. гл. VI).

В определении $\boldsymbol{J}$ сохраняется некоторая степень произвола: уравнение (11) остается справедливым, если к вектору $\boldsymbol{J}$ прибавить любой вектор с равной нулю дивергенцией. Однако определение (9) имеет преимущество простоты. Кроме того, оно может быть получено по принципу соответствия из классического определения потока. Действительно, согласно принципу соответствия, оператор $(\hbar/im)\nabla$ представляет величину $\boldsymbol{p}/m$, т. е. скорость частицы; величина $\boldsymbol{J}$ соответствует произведению скорости на плотность, т. е. потоку. В частности, если Ψ есть плоская волна $A\exp[(i/\hbar)(\boldsymbol{pr}-Et)]$, то $\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r},t)=|A|^2(\boldsymbol{p}/m)$ действительно равно произведению плотности вероятности на скорость.

Свойство, выражаемое уравнением (11), есть нечто более глубокое, чем просто свойство сохранения нормы. Если функция Ψ является стационарным решением уравнения Шредингера

$$\Psi(\boldsymbol{r},\ t)=\psi(\boldsymbol{r})\,e^{-i\frac{E}{\hbar}t},$$

то свойство сохранения нормы либо тривиально, либо не имеет смысла. Оно тривиально в случае связанного состояния, оно не имеет смысла в случае состояния несвязанного, ибо во втором случае функция ψ не является квадратично интегрируемой. Однако в обоих случаях уравнение (11) остается справедливым и, ввиду того, что плотность $|\psi|^2$ не зависит от времени, принимает форму

$$\operatorname{div}\boldsymbol{J}=0. \tag{12}$$

Это свойство собственной функции ψ особенно важно, так как оно не зависит от конкретной формы потенциала $V(\boldsymbol{r})$, входящего в гамильтониан Шредингера[3]).

§ 5. Средние значения функций от r и от p

Убедившись в согласованности определений плотностей вероятности P и Π, применим их теперь к вычислению средних значений функций от $\boldsymbol{r}$ и от $\boldsymbol{p}$.

Зная распределение $P(\boldsymbol{r})$ результатов измерения положения в некоторый момент времени, можно определить среднее значение (математическое ожидание) для некоторой функции $F(\boldsymbol{r})= F(x,y,z)$ координат частицы. Физический смысл этого среднего значения совпадает с тем, который мы формулировали при определении $P(\boldsymbol{r})$: это среднее значение измерений $F(\boldsymbol{r})$, осуществленных на очень большом числе $\mathcal{N}$ эквивалентных систем,

---

[3]) Это свойство играет в трехмерных задачах роль свойства сохранения вронскиана $W(y^*,y)$ в задачах одномерных (см. III, § 11, в дальнейшем § III, 11).

независимых друг от друга и представляемых одной и той же волновой функцией Ψ.

Примем для этой величины обозначение $\langle F(\boldsymbol{r})\rangle$. Очевидно, что

$$\langle F(\boldsymbol{r})\rangle = \int P(\boldsymbol{r})\, F(\boldsymbol{r})\, d\boldsymbol{r}.$$

Аналогично для среднего значения некоторой функции импульса $G(\boldsymbol{p}) = G(p_x, p_y, p_z)$ получим

$$\langle G(\boldsymbol{p})\rangle = \int \Pi(\boldsymbol{p})\, G(\boldsymbol{p})\, d\boldsymbol{p}.$$

Используя определения плотностей вероятности, принятые в § 2, получим выражения (при условии, что интегралы сходятся)

$$\langle F(\boldsymbol{r})\rangle = \int \Psi^*(\boldsymbol{r})\, F(\boldsymbol{r})\, \Psi(\boldsymbol{r})\, d\boldsymbol{r}, \tag{13}$$

$$\langle G(\boldsymbol{p})\rangle = \int \Phi^*(\boldsymbol{p})\, G(\boldsymbol{p})\, \Phi(\boldsymbol{p})\, d\boldsymbol{p}. \tag{14}$$

Так, среднее значение координаты частицы есть

$$\langle x\rangle = \int \Psi^*(\boldsymbol{r})\, x\Psi(\boldsymbol{r})\, d\boldsymbol{r}, \tag{15}$$

а среднее значение составляющей p_x импульса есть

$$\langle p_x\rangle = \int \Phi^*(\boldsymbol{p})\, p_x\Phi(\boldsymbol{p})\, d\boldsymbol{p}. \tag{16}$$

Запишем выражение (16) в другой форме, применяя свойства преобразования Фурье, изложенные в Дополнении А. Если функция $p_x\Phi(\boldsymbol{p})$ квадратично интегрируема, что мы предположим выполняющимся всегда, ее образ Фурье есть $(\hbar/i)\,\partial\Psi(\boldsymbol{r})/\partial x$ (теорема III § А.16). Применяя к функциям Φ и $p_x\Phi$ свойство инвариантности скалярного произведения (теорема IV § А.16), получаем

$$\langle p_x\rangle = \int \Psi^*(\boldsymbol{r}) \left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right) \Psi(\boldsymbol{r})\, d\boldsymbol{r}. \tag{17}$$

Мы видим формальную аналогию между правыми частями уравнений (16) и (17): переход от первого ко второму осуществляется заменой интегрирования по $\boldsymbol{p}$ интегрированием по $\boldsymbol{r}$, подстановкой вместо $\Phi(\boldsymbol{p})$ ее обратного Фурье-образа $\Psi(\boldsymbol{r})$, а вместо $\Phi^*(\boldsymbol{p})$ — комплексно сопряженной величины и, наконец, заменой величины p_x оператором $(\hbar/i)\,\partial/\partial x$, причем $\partial/\partial x$ обозначает операцию взятия частной производной по x, применяемую к функции, стоящей справа от символа оператора.

Аналогично можно перейти от уравнения (15) к выражению

$$\langle x\rangle=\int \Phi^*(p)\left(i\hbar\,\frac{\partial}{\partial p_x}\right)\Phi(p)\,dp. \qquad (18)$$

Эти результаты могут быть обобщены на функции более сложной формы. Так, из того факта, что $p_x^2\Phi(p)$ (по предположению квадратично интегрируемая) есть образ Фурье функции

$$\left(\frac{\hbar}{i}\,\frac{\partial}{\partial x}\right)^2\Psi(r)=-\hbar^2\,\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}$$

(повторное применение теоремы III § A.16), выводим

$$\langle p_x^2\rangle=\int \Phi^* p_x^2\Phi\,dp=-\hbar^2\int \Psi^*\,\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}\,dr. \qquad (19)$$

Вообще, если $G(p)$ есть полином или функция, представляемая абсолютно сходящимся рядом по степеням p_x, p_y, p_z, имеем

$$\langle G(p)\rangle=\int \Psi^*(r)\,G\left(\frac{\hbar}{i}\nabla_r\right)\Psi(r)\,dr \qquad (20)$$

при условии выполнения требований сходимости, которые легко формулировать. При выполнении тех же условий для среднего значения $F(r)$ находим

$$\langle F(r)\rangle=\int \Phi^*(p)\,F(i\hbar\nabla_p)\,\Phi(p)\,dp. \qquad (21)$$

Получив достаточно результатов, чтобы начать общее обсуждение проблемы, которое является предметом этой главы, мы не будем более углублять здесь вопросы статистической интерпретации функции Ψ. Ведь помимо статистики измерений положения и импульса и результатов, касающихся средних значений величин типа $F(r)$ и $G(p)$, задание Ψ должно определить статистику измерения любой измеримой физической величины. Эти вопросы будут рассматриваться в гл. V. Здесь мы ограничимся некоторыми предварительными замечаниями.

Величины $\langle x\rangle$ и $\langle p_x\rangle$ действительны; это следует из их определения. Поэтому правые части уравнений (15) и (17) также действительны. Иными словами, операторы x и $(\hbar/i)(\partial/\partial x)$ являются *эрмитовыми* операторами (это следует из самого определения эрмитовости в уравнении (8)). Аналогично две другие составляющие вектора r и две другие составляющие векторного оператора $-i\hbar\nabla$ являются эрмитовыми операторами, а также и операторы вида $F(r)$, $G(-i\hbar\nabla)$, если F и G как функции своих аргументов действительны.

Рассмотрим выражения для средних значений, полученных с помощью функции Ψ (уравнения (13), (20), (15) и (17)). Все они имеют одну форму. Величине, среднее значение которой мы вычисляем, соответствует некоторый линейный оператор (эрмитов) A, и искомое среднее дается выражением вида

$$\int \Psi^* A \Psi \, d\boldsymbol{r}, \tag{22}$$

в котором, согласно общему правилу, оператор действует на функцию, стоящую справа от него. Этот оператор получается с помощью простого правила соответствия: если речь идет о функции $F(\boldsymbol{r})$ координат частицы, то соответствующим оператором является сама функция; если же мы имеем функцию $G(\boldsymbol{p})$, то оператор получается из этой функции подстановкой в G вместо составляющих $\boldsymbol{p}$ соответствующих составляющих векторного оператора $-i\hbar\nabla$. Мы вновь встречаем здесь правило соответствия (II. 17) между импульсом $\boldsymbol{p}$ и оператором $-i\hbar\nabla$, которое нам помогло установить уравнение Шредингера.

Каждое из средних значений может быть вычислено с помощью Ψ или с помощью Φ: выражения (21), (14), (18), (16), построенные с помощью функции Φ, соответственно эквивалентны выражениям (13), (20), (15), (17), в которые входит функция Ψ. Между первым и вторым рядом формул имеется и формальная аналогия. Во втором случае величине, среднее значение которой вычисляется, также соответствует линейный (эрмитов) оператор B, действующий в данном случае на функции от $\boldsymbol{p}$, и искомое среднее дается выражением типа

$$\int \Phi^* B \Phi \, d\boldsymbol{p}. \tag{23}$$

Оператор B получается на основе правила соответствия, сходного с тем, которое служит для нахождения A: если речь идет о функции $G(\boldsymbol{p})$, то оператором является сама функция, если же мы имеем функцию $F(\boldsymbol{r})$, то оператор получается подстановкой в F вместо $\boldsymbol{r}$ оператора $i\hbar\nabla_p$ $(\nabla_p \equiv (\partial/\partial p_x, \partial/\partial p_y, \partial/\partial p_z)$.

Как волновые функции Φ и Ψ являются эквивалентными *представлениями* одного и того же динамического состояния частицы, так и операторы B и A являются эквивалентными представлениями одной и той же физической величины, причем вычисление рассмотренных здесь средних значений может производиться формально тождественно в том или другом из этих представлений. Это наводит на мысль, что квантовая теория может быть формулирована самым общим образом независимо от конкретного представления. Такая общая формулировка будет дана в гл. VII и VIII.

§ 6. Системы многих частиц

Определения и результаты предшествующего рассмотрения без труда могут быть распространены на случай квантовых систем, состоящих из многих частиц.

Пусть в самом общем случае $\Psi(q_1, \ldots, q_R; t)$ есть волновая функция квантовой системы в R-мерном пространстве, причем динамическими переменными системы являются R координат $q_1, \ldots, q_R$ и R канонически сопряженных импульсов $p_1, \ldots, p_R$. Предположим, что мы имеет дело с декартовыми координатами, и обозначим с помощью $d\tau = dq_1 \ldots dq_R$ и $d\omega = dp_1 \ldots dp_R$ элементы объемов в q- и p-пространствах соответственно. Волновая функция в p-пространстве есть

$$\Phi(p_1, \ldots, p_R; t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{R/2}} \int \Psi(q_1, \ldots, q_R; t)\, e^{-\frac{i}{\hbar}\sum_i p_i q_i}\, d\tau;$$

$|\Psi|^2 d\tau$ есть вероятность найти координаты q в области $(\tau, \tau + d\tau)$; $|\Phi|^2 d\omega$ есть вероятность найти импульсы p в области $(\omega, \omega + d\omega)$. Исходя из этого, можно повторить все рассуждения предшествующих параграфов.

Рассмотрим в качестве примера систему из двух частиц. Пусть $\boldsymbol{r}_1(x_1, y_1, z_1)$, $\boldsymbol{r}_2(x_2, y_2, z_2)$ суть векторы положения, а $\boldsymbol{p}_1(p_{x_1}, p_{y_1}, p_{z_1})$, $\boldsymbol{p}_2(p_{x_2}, p_{y_2}, p_{z_2})$ — векторы импульсов частиц соответственно. Величина $P(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)\, d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2$ есть вероятность найти частицу *1* в элементе объема $(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_1 + d\boldsymbol{r}_1)$ и частицу *2* — в элементе объема $(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_2 + d\boldsymbol{r}_2)$. Величина $\Pi(\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2)\, d\boldsymbol{p}_1\, d\boldsymbol{p}_2$ есть вероятность найти импульс частицы *1* в интервале $(\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_1 + d\boldsymbol{p}_1)$ и импульс частицы *2* — в интервале $(\boldsymbol{p}_2, \boldsymbol{p}_2 + d\boldsymbol{p}_2)$. Можно ввести также плотность вероятности присутствия частицы *1* в точке $\boldsymbol{r}_1$, $P_1(\boldsymbol{r}_1)$, если положение второй частицы не фиксировано; эта величина есть статистическое распределение, получаемое при измерении положения частицы *1* без учета положения частицы *2*. Очевидно, что

$$P_1(\boldsymbol{r}_1) = \int P(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)\, d\boldsymbol{r}_2.$$

Сходным образом можно ввести плотности вероятности $P_2(\boldsymbol{r}_2)$, $\Pi_1(\boldsymbol{p}_1)$, $\Pi_2(\boldsymbol{p}_2)$. Все эти статистические распределения являются существенно положительными величинами, удовлетворяющими условиям нормировки

$$\iint P(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)\, d\boldsymbol{r}_1\, d\boldsymbol{r}_2 = 1, \ \ldots, \quad \int \Pi_2(\boldsymbol{p}_2)\, d\boldsymbol{p}_2 = 1$$

(символ $\iint d\boldsymbol{r}_1\, d\boldsymbol{r}_2$ означает шестикратный интеграл, распространенный на все конфигурационное пространство, символ $\int d\boldsymbol{p}_2$ — тройной интеграл, распространенный на импульсное пространство частицы *2* и т. д.).

Динамическое состояние системы из двух частиц в данный момент времени определяется волновой функцией $\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$, взятой в тот же момент времени. С помощью преобразования Фурье мы получаем волновую функцию в импульсном пространстве:

$$\Phi(\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \iint e^{-i(\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{r}_1 + \boldsymbol{p}_2\boldsymbol{r}_2)/\hbar} \Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)\, d\boldsymbol{r}_1\, d\boldsymbol{r}_2,$$

$$\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \iint e^{i(\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{r}_1 + \boldsymbol{p}_2\boldsymbol{r}_2)/\hbar} \Phi(\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2)\, d\boldsymbol{p}_1\, d\boldsymbol{p}_2.$$

Обобщениями определений (2) и (6) очевидно являются следующие соотношения:

$$P(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = |\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)|^2, \quad \Pi(\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2) = |\Phi(\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2)|^2, \tag{24}$$

причем условия нормировки вероятностей приводят к условию нормировки волновых функций

$$\iint |\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)|^2\, d\boldsymbol{r}_1\, d\boldsymbol{r}_2 = \iint |\Phi(\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2)|^2\, d\boldsymbol{p}_1\, d\boldsymbol{p}_2 = 1.$$

Это условие нормировки действительно может быть реализовано *в каждый момент времени*, если гамильтониан, входящий в уравнение Шредингера, является эрмитовым оператором. Легко проверить, что дело обстоит именно так. Волновые функции Ψ и Φ, таким образом, определяются с точностью до произвольного постоянного фазового множителя.

Из указанных определений можно получить и другие распределения, введенные выше. Так, например,

$$P_1(\boldsymbol{r}_1) = \int |\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)|^2\, d\boldsymbol{r}_2.$$

Аналогичным путем вводятся определения средних значений функций $F(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ и $G(\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2)$ координат или импульсов двух частиц. Так, например,

$$\langle x_1 \rangle = \iint \Psi^* x_1 \Psi\, d\boldsymbol{r}_1\, d\boldsymbol{r}_2 = -\frac{\hbar}{i} \iint \Phi^* \frac{\partial \Phi}{\partial p_{x_1}}\, d\boldsymbol{p}_1\, d\boldsymbol{p}_2,$$

$$\langle p_{x_2} \rangle = \iint \Phi^* p_{x_2} \Phi\, d\boldsymbol{p}_1\, d\boldsymbol{p}_2 = \frac{\hbar}{i} \iint \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x_2}\, d\boldsymbol{r}_1\, d\boldsymbol{r}_2.$$

Все замечания, сделанные в конце § 5 сохраняют свою силу.

Когда волновая функция $\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ представима в виде произведения двух функций (факторизуется)

$$\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \Psi_1(\boldsymbol{r}_1)\, \Psi_2(\boldsymbol{r}_2)$$

(при этом $\Psi_1(\boldsymbol{r}_1)$ и $\Psi_2(\boldsymbol{r}_2)$ предполагаются нормированными на единицу), то и волновая функция в пространстве импульсов и распределения P и Π также оказываются факторизованными:

$$P(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = P_1(\boldsymbol{r}_1)\, P_2(\boldsymbol{r}_2), \quad \Pi(\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2) = \Pi_1(\boldsymbol{p}_1)\, \Pi_2(\boldsymbol{p}_2).$$

Это следует непосредственно из самого определения этих величин. Мы видим, что в этом случае не существует никаких корреляций между статистическими распределениями результатов измерений, проведенных для каждой из этих частиц. Статистические предсказания о результатах измерения величин, относящихся, например, к частице 1, будут такими, как если бы она находилась в динамическом состоянии, определяемом волновой функцией $\Psi_1(\boldsymbol{r}_1)$. Нетрудно проверить, что $P_1(\boldsymbol{r}_1)=|\Psi_1(\boldsymbol{r}_1)|^2$ и $\Pi_1(\boldsymbol{p}_1)=|\Phi_1(\boldsymbol{p}_1)|^2$, где $\Phi_1(\boldsymbol{p}_1)$ есть волновая функция в пространстве импульсов, соответствующая Ψ_1. Во всех вычислениях, касающихся измерений, проведенных с этой частицей (средние значения, флуктуации и т. д.), можно просто игнорировать существование второй частицы и рассматривать только одну частицу с волновой функцией $\Psi_1(\boldsymbol{r}_1)$.

Если две частицы не взаимодействуют между собой или по той или иной причине мы можем пренебречь этим взаимодействием, то свойство факторизации волновой функции сохраняется с течением времени. Действительно, гамильтониан системы в этом случае может быть записан в виде суммы двух членов: $H = H_1 + H_2$, из которых первый — H_1 действует только на функции переменной $\boldsymbol{r}_1$, а второй — H_2 — на функции переменной $\boldsymbol{r}_2$. Предположим, что в начальный момент времени

$$\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2; t_0)=\Psi_1(\boldsymbol{r}_1, t_0)\,\Psi_2(\boldsymbol{r}_2, t_0)$$

и пусть $\Psi_1(\boldsymbol{r}_1, t)$ и $\Psi_2(\boldsymbol{r}_2, t)$ являются решениями уравнений Шредингера

$$\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-H_1\right]\Psi_1=0, \quad \left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-H_2\right]\Psi_2=0$$

с начальными условиями $\Psi_1(\boldsymbol{r}_1, t_0)$ и $\Psi_2(\boldsymbol{r}_2, t_0)$ соответственно. Факторизованная волновая функция

$$\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2; t)=\Psi_1(\boldsymbol{r}_1, t)\,\Psi_2(\boldsymbol{r}_2, t)$$

удовлетворяет уравнению Шредингера системы, так как

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi=i\hbar\left(\frac{\partial\Psi_1}{\partial t}\Psi_2+\Psi_1\frac{\partial\Psi_2}{\partial t}\right)=(H_1\Psi_1)\Psi_2+\Psi_1(H_2\Psi_2)=$$
$$=H_1\Psi_1\Psi_2+H_2\Psi_1\Psi_2=(H_1+H_2)\Psi_1\Psi_2=H\Psi.$$

Движения каждой из частиц, как этого и следовало ожидать, остаются совершенно независимыми, так что никаких корреляций между статистическими распределениями измерений, проведенных над каждой из них, ни в какой момент времени не возникает.